

# SIMULAÇÃO E MODELAGEM TERMODINÂMICA DE ACETATO DE 2-HIDROXIELILAMÔNIO (2-HEAA) NA ABSORÇÃO QUÍMICA DE CO<sub>2</sub>

D. T. DOS SANTOS<sup>1</sup> e L. A. F. ROMERO<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Química

E-mail para contato: follegatti@usp.br

**RESUMO** – *A captura, transporte e armazenamento geológico de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) tem sido um grande desafio na indústria química. Estes processos são amplamente utilizados com o objetivo de minimizar impactos ambientais e novos solventes, como o caso de líquidos iônicos, estão sendo investigados. Neste contexto, o estudo da absorção química de CO<sub>2</sub> tem se tornado cada vez mais significativo no ambiente acadêmico para desenvolvimento de processos mais eficientes. Neste trabalho apresenta-se a simulação e modelagem termodinâmica do acetato de 2-hidroxietilamônio (2-HEAA), um sal de amônio (líquido iônico), em uma coluna de absorção visando à extração de CO<sub>2</sub>. O comportamento da mistura gás-líquido foi predito pelo modelo COSMO-SAC (COnductor-like Screening Model for Real Solvente Activity Coefficient) e as simulações do processo foram realizadas utilizando o simulador comercial Aspen Plus®. Os resultados em termos qualitativos e quantitativos da utilização do 2-HEAA na absorção de CO<sub>2</sub> mostrou ser melhor do que [Bmin]/[TF2N] reportado na literatura.*

## 1. INTRODUÇÃO

Atualmente grande parte das indústrias utilizam combustíveis fósseis como fonte de geração de energia, estima-se que aproximadamente 70% de toda energia gerada no mundo é proveniente de combustíveis fósseis (Dowell *et al.* 2017). Os processos de captura de CO<sub>2</sub> têm se desenvolvido ao longo dos anos, muitas tecnologias foram desenvolvidas para minimizar as emissões atmosféricas de poluentes nocivos. Dentre elas, destacam-se a utilização de solventes orgânicos como monoetanolamina (MEA) ou dietanolamina (DEA), entretanto estes solventes apresentam alguns fatores negativos durante o processo, como alto consumo energético para regeneração e propriedades corrosivas que podem acarretar sérios danos em tubulações e equipamentos (Hospital-Benito *et al.* 2020). Diante destas dificuldades, líquidos iônicos tornaram-se uma alternativa nestes processos. A possibilidade de ajustes em suas propriedades físico-químicas, como viscosidade, densidade e solubilidade e a redução na geração de resíduos orgânicos viabilizam este solvente para o processo de captura de CO<sub>2</sub> (Wasserscheid e Welton, 2002). Líquidos iônicos são sais orgânicos que possuem baixo ponto de fusão e têm atraído pesquisadores devido às suas propriedades únicas, como ampla faixa de líquido com pressão de vapor desprezível em condições ambientais e são estáveis em altas temperaturas. A aplicação de um modelo termodinâmico requer parâmetros de interação binária a partir de dados empíricos, por exemplo, os modelos de contribuição de grupo

como UNIFAC ou modelos de coeficiente de atividade como o NRTL (*Non-random two-liquid model*), portanto sua aplicabilidade em líquidos iônicos se torna inviável (Mullins *et al.* 2006). Neste contexto, a utilização da química quântica e solvatação das moléculas em um condutor, que não utiliza dados experimentais para determinar propriedades físico-químicas, o modelo COSMO-SAC (Lin e Sandler, 2002) foi aplicado nesta simulação do processo de captura de CO<sub>2</sub>.

## 2. DETALHES COMPUTACIONAIS

### 2.1 Modelo utilizado

O modelo COSMO-SAC foi aplicado para simular o processo de captura de CO<sub>2</sub> e analisar a viabilidade da utilização de líquidos iônicos em uma coluna de absorção. Abaixo é descrito as principais equações do modelo COSMO-SAC e o equacionamento completo podem ser encontrados na literatura (Lin e Sandler, 2002)

$$\ln\gamma_i = \frac{A_i}{a_{eff}} \sum_{\sigma_m} p_i(\sigma_m) [\ln\Gamma_s(\sigma_m) - \ln\Gamma_i(\sigma_m)] + \ln\gamma_i^{SG} \quad (1)$$

$$\ln\Gamma_s(\sigma_m) = -\ln \left\{ \sum_{\sigma_n} P_s(\sigma_n) \Gamma_s(\sigma_n) \exp \left[ \frac{-\Delta W(\sigma_m \sigma_n)}{kT} \right] \right\} \quad (2)$$

$$\ln\Gamma_i(\sigma_m) = -\ln \left\{ \sum_{\sigma_n} P_i(\sigma_n) \Gamma_i(\sigma_n) \exp \left[ \frac{-\Delta W(\sigma_m \sigma_n)}{kT} \right] \right\} \quad (3)$$

### 2.2. Descritivo do processo

Foi realizado um estudo comparativo entre os líquidos iônicos 1-butil-3-metilimidazolio(trifluorometsulfonil)2imina ([Bmin][TF2N]), publicado recentemente por Hospital-Benito *et al.* (2020), e acetato de 2-hidroxietilamônio (2-HEAA). A premissa de absorção de 90% de CO<sub>2</sub> do gás de alimentação (corrente Gás de processo) foi adotada inicialmente, assim como as seguintes condições: temperatura ambiente: 25°C (298,15 K), pressão ambiente: 1,01325 bar e vazão de alimentação de gás: 100 kmol/h. O processo baseia-se em uma coluna de absorção em um sistema de lavagem contra corrente, onde o líquido iônico é alimentado no topo (corrente Líquido iônico) e o gás de processo é alimentado no fundo da coluna. Após o processo de lavagem, o líquido iônico é aquecido e em seguida sofre uma expansão para a retirada de impurezas, por final é enviado novamente para a coluna através de uma bomba centrífuga. A figura 1 demonstra o sistema de absorção de CO<sub>2</sub> em sistema fechado realizado no *Software Aspen Plus V8.8*. A alimentação do gás de processo possui diversos componentes, portanto a vazão foi adotada em 100 kmol/h, a tabela 1 mostra as composições do gás de alimentação na coluna.

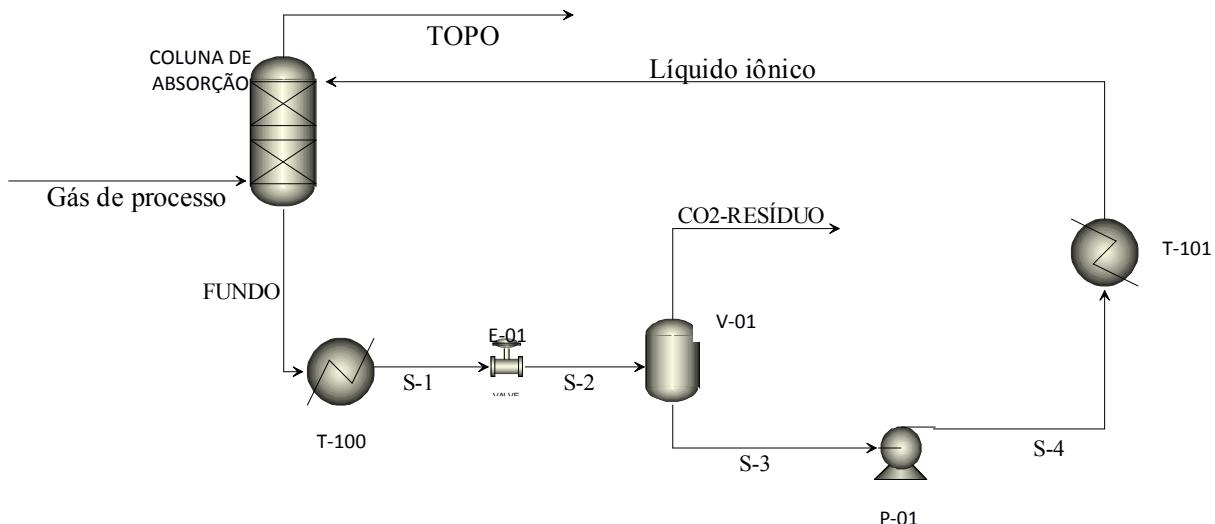


Figura 1 - Sistema de absorção química de CO<sub>2</sub>.

Tabela 1 – Composição do gás de alimentação.

Componente	% molar
N <sub>2</sub> (nitrogênio)	0,781
CH <sub>4</sub> (metano)	73,409
CO <sub>2</sub> (dióxido de carbono)	2,808
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (etano)	12,569
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (propano)	10,433

A alimentação de CO<sub>2</sub> na coluna possui uma vazão molar de 2,808 kmol/h, portanto para recuperar 90% de CO<sub>2</sub> é necessária uma vazão molar de 0,2808 kmol/h na corrente TOPO. Para uma melhor visualização dos resultados as concentrações de CO<sub>2</sub> foram transformadas em base mássica de acordo com as equações abaixo.

$$\dot{m} = \dot{n} \cdot M = 12,35 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad (1)$$

Onde  $\dot{m}$  = vazão mássica (kg/h),  $\dot{n}$  = vazão molar (kmol/h) e M = massa molecular do CO<sub>2</sub> (44 kg/kmol).

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1. Análise da concentração de CO<sub>2</sub> no topo da coluna de absorção

Após realizadas as simulações, foi observado que o líquido iônico 2-HEAA obteve um melhor desempenho em relação ao líquido iônico [Bmin][TF2N] no processo de absorção de CO<sub>2</sub> na coluna. A figura 2 demonstra estes resultados na corrente de TOPO. A estrutura da molécula de líquido iônico 2-HEAA possui o cátion no átomo de nitrogênio e o ânion no átomo de oxigênio, diferentemente da molécula de [Bmin][TF2N], que possui o ânion e o cátion em átomos de

nitrogênio. Esta diferença nas estruturas moleculares resultou em um melhor rendimento para o 2-HEAA, desta forma apresentando uma melhor absorção de CO<sub>2</sub> para as condições adotadas.

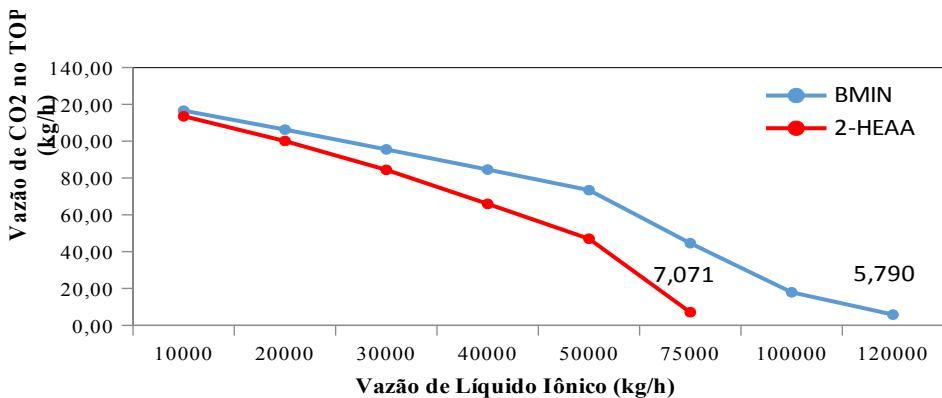


Figura 2- Absorção de CO<sub>2</sub> na coluna.

## 4. CONCLUSÃO

As simulações realizadas demonstraram que o líquido iônico 2-HEAA apresentou um melhor rendimento no processo de captura de CO<sub>2</sub> em comparação com o líquido iônico [Bmin][TF2N]. Para obter a vazão ideal de 12,35 kg/h de CO<sub>2</sub> na corrente TOPO, o líquido iônico [Bmin][TF2N] apresentou uma vazão 52% maior em relação ao líquido iônico 2-HEAA.

## 5. REFERÊNCIAS

Dowell N. M., Fennell P. S., Shah N., Maitland G. C., *The role of CO<sub>2</sub> capture and utilization in mitigating climate change*, Nature Climate Change, 2017.

Hospital-Benito D., Lemus J., Moya C., Santiago R., Palomar J., *Process analysis overview of ionic liquids on CO<sub>2</sub> chemical capture*, Chemical Engineering Journal 390, 2020.

Lin S.-T., Sandler S. I., *A Priori Phase Equilibrium Prediction from a Segment Contribution Solvation Model*, Ind. Eng. Chem. Res. 41, 899-913, 2002.

Mullins E., Liu Y. A., Ghaderi A., Fast S. D., *Sigma Profile Database for Predicting Solid Solubility in Pure and Mixed Solvent Mixtures for Organic Pharmacological Compounds with COSMO-Based Thermodynamic Methods*, Ind. Eng. Chem. Res. 47, 1707-1725, 2008.

Wasserscheid P., Welton T., *Ionic liquids in Synthesis*, Wiley-VCH: Weinheim, 2002.

## AGRADECIMENTOS

Agradecemos o apoio do RCGI, à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP - 2014/50279-4 e 2019/22085-4) e à Shell Brasil.