

## Análise termodinâmica de reações para a conversão de dióxido de carbono em olefinas

**Autores:** Pedro Henrique Martins Mereguete\* Newton Libanio Ferreira; Antonio Esio Bresciani; Rita Maria de Brito Alves

*Departamento de Engenharia Química, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo*

**Autor Correspondente:** \*pedromereguete@usp.br

### Resumo

Este trabalho descreve a análise termodinâmica em fase gasosa para a conversão química de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2$  em olefinas leves, por meio do emprego da minimização da energia de Gibbs para as rotas de produção mediadas por CO e por metanol. Avaliaram-se os efeitos de variáveis-chave do processo, como pressão, temperatura e razão molar de alimentação  $\text{H}_2:\text{CO}_2$ , sobre a conversão do  $\text{CO}_2$  e a seletividade dos produtos. O simulador comercial de processos *Aspen Plus V10* foi utilizado.

Estudos preliminares indicam favorecimento termodinâmico acentuado de compostos saturados no meio, como o metano, o que impede a observação do comportamento das olefinas. Para permitir a obtenção de conclusões quanto à formação dos compostos de interesse, aplicaram-se as hipóteses de que os compostos saturados sobressalentes teriam seletividade limitada com base em dados experimentais. Obtiveram-se como principais resultados das análises:

- A produção de olefinas leves é favorecida em temperaturas intermediárias, próximas à região de conversão mínima de  $\text{CO}_2$ . Baixas temperaturas favorecem a formação de olefinas mais pesadas, enquanto altas temperaturas favorecem a formação de CO;
- Aumentar a pressão pode suavizar o ponto de conversão mínima (um vale suave), indicando sua potencial vantagem para o processo. A conversão de  $\text{CO}_2$  é fortemente afetada pela relação molar  $\text{H}_2:\text{CO}_2$ , o que implica que uma maior entrada de hidrogênio pode aumentar os rendimentos da reação;
- As análises das rotas de produção mediadas por CO e por metanol apresentam comportamentos similares quanto à conversão do  $\text{CO}_2$  e seletividade aos produtos da reação. Possivelmente, o catalisador escolhido será o determinante para o favorecimento de uma rota em relação à outra;
- Considerando esses parâmetros-chave, um intervalo apropriado de condições de operação para estudos futuros pode ser determinado. Objetivando otimização para seletividade a olefinas leves, a análise sugere uma condição ótima a 385 °C, 14 bar e uma razão molar de alimentação de 4:1.

Este estudo providencia um direcionamento para futuras investigações (experimentais e computacionais) da cinética de conversão de olefinas a partir do  $\text{CO}_2$  e está sujeita a limitações devido às hipóteses de restrição de formação de compostos saturados e da reação apenas em fase gasosa.

### Palavras-chave

Análise termodinâmica, conversão de  $\text{CO}_2$ , olefinas.

### Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.