



## IV WORKSHOP DE TECNOLOGIAS LIMPAS (WTL – 2021)

### Ajuste de modelos de transporte de CO<sub>2</sub> e de N<sub>2</sub> em membranas de carvão ativado disperso em poliuretano/polietersulfona

ALMEIDA, IGOR LOPES DE<sup>1</sup> e FIGUEIREDO, KÁTIA CECÍLIA DE SOUZA<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Universidade Federal de Minas Gerais

E-mail para contato do autor apresentador: igorlopesalmeida@gmail.com

A utilização de membranas para a separação de gases, como o CO<sub>2</sub> e o N<sub>2</sub>, representa uma promissora alternativa ao tratamento de gases de combustão, visto que a operação pode ser menos onerosa e, assim, mais eficiente que a maioria dos processos utilizados hoje na indústria (BORGES; HABERT; NOBREGA, 2006).

Esse estudo consistiu no ajuste de modelos matemáticos para o transporte de CO<sub>2</sub> e de N<sub>2</sub> em membranas anisotrópicas de dupla camada de poliuretano/polietersulfona (PU/PES), sendo que a fase sólida dispersa na membrana foi composta por carvão ativado. Os dados de permeabilidade – para diferentes valores de pressão dos gases (1 a 8 bar) e de concentração para o carvão ativado –, apresentados na tese de Jiménez (2021), foram estudados com base em modelos previamente propostos para o comportamento desses gases na permeação desse tipo de membrana.

O modelo de Maxwell foi inicialmente investigado, considerando que a fase dispersa era impermeável. A aproximação obtida com esse modelo não foi satisfatória, o que revela que a amostra não apresenta uma fase homogeneamente dispersa.

Um segundo modelo aplicado, que apresentou uma aproximação matemática satisfatória dos dados, foi o modelo de fração de volume livre. A equação 1 descreve esse modelo, sendo R a constante universal dos gases, T a temperatura da permeação, A<sub>f</sub> um parâmetro associado ao tamanho e à forma do permeante, D<sub>T</sub> o coeficiente de difusão termodinâmico, B um parâmetro associado ao volume mínimo local que garante o deslocamento do permeante e V<sub>f</sub> o volume livre no polímero.

Em polímeros vítreos, a baixa mobilidade das cadeias causa um impacto do volume livre sobre a difusão (MULDER, 1996), sendo que esse volume livre está representado na forma de decaimento exponencial do coeficiente de difusão (D<sub>T</sub>) com o aumento da pressão – o aumento da pressão impacta no volume livre fracional – (Equação 1). Considerando esse impacto do volume livre, o coeficiente de sorção, para efeitos de cálculo, pode ser aproximado como uma constante e, assim, a permeabilidade (P) – considerando S o coeficiente de sorção, na membrana, do permeante e D o de difusão, P = S . D – pode ser, também, considerada um decaimento exponencial do volume livre.

$$D_T = RTA_f \exp\left(-\frac{B}{V_f}\right) \quad (1)$$

Com a realização do ajuste para os dados de permeação de CO<sub>2</sub> e de N<sub>2</sub> pela pressão, foi montada a Tabela 1, que aponta o bom ajuste realizado pelo modelo de fração de volume livre. Considerando a equação 1, o esperado era a aproximação de y<sub>0</sub> próximo 0, sendo que y = permeabilidade, em Barrer, A = SRTA<sub>f</sub>, B = x e t = V<sub>f</sub>. Os valores de B e t do modelo foram relacionados com a pressão de operação e o teor de carga, considerando que ambos afetam o volume livre. O comportamento vítreo da membrana se reforça, principalmente para o N<sub>2</sub>, no sucesso do ajuste para esse modelo. O desvio de y<sub>0</sub> obtido para o CO<sub>2</sub> indicou que provavelmente existe uma interação específica das membranas com este permeante.

Tabela 1 – Ajustes de decaimento exponencial da permeabilidade em função da pressão ( $y = y_0 + A \exp(-x/t)$ ) para membranas com 0 (M0), 1 (AC1), 2 (AC2) e 5% m/m de carvão ativado (AC5).

Gás	Tipo de membrana	A	t	y <sub>0</sub>	R <sup>2</sup>	Qui <sup>2</sup>
CO <sub>2</sub>	M0	10,41	2,650	12,49	0,999928	0,001800
	AC1	12,73	2,518	12,33	0,999966	0,001249
	AC2	18,80	1,830	11,70	0,999910	0,006094
	AC5	11,20	3,230	8,10	0,999838	0,004891
N <sub>2</sub>	M0	0,1254	3,960	0,20	0,999352	0,000002
	AC1	0,1580	3,210	0,19	0,999361	0,000004
	AC2	0,2090	2,020	0,18	0,999910	0,000001
	AC5	0,1400	4,040	0,12	0,995209	0,000023

**PALAVRAS-CHAVE:** Modelagem; Membranas de matriz mista; Transporte de gases.

## REFERÊNCIAS

BORGES, C. P.; HABERT, A. C.; NOBREGA, R. *Processos de Separação por Membranas*. Rio de Janeiro: E-papers Serviços Editoriais Ltda, 2006.

JIMÉNEZ, C. D. G. *POLYURETHANE/POLYETHERSULFONE DUAL-LAYER ANISOTROPIC MEMBRANES FOR CO<sub>2</sub> REMOVAL FROM FLUE GAS*. Dissertação (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2021.

MULDER, M. *Basic Principles of Membrane Technology*. Enschede: Kluwer Academic Publishers, 1996.