

Simulação da produção de cloreto de vinilideno

Ricardo Zottis (IC); Cicero Escobar(IC); Adriane Ril(IC); Antenor Ferreira Moraes(PQ)

Introdução

O Brasil é favorecido pela grande produção de bioetanol proveniente da cana-de-açúcar, matéria-prima de origem renovável que possibilita a comercialização de créditos de carbono, visto que a cana-de-açúcar, ao se desenvolver, retira CO₂ da atmosfera. Isso é ambientalmente relevante além de tornar o produto menos dependente de material de origem fóssil.

Observa-se uma tendência do mercado nacional ao ressurgimento da alcoolquímica uma vez que algumas indústrias estão explorando o segmento de resinas termoplásticas obtidas de fontes renováveis.

Neste contexto está inserida a rota etílica para a produção do monômero VDC (cloreto de vinilideno – C₂H₂Cl₂), composto organoclorado sintético bastante suscetível tanto a homo quanto a heteropolimerização. Em virtude dessa característica o VDC é utilizado na fabricação de fibras sintéticas, resinas poliméricas, tintas, desengordurantes, adesivos, filmes plásticos, fotográficos e de raio-X.

Destaca-se na indústria de plásticos o PVDC (policloreto de vinilideno), copolímero composto de pelo menos 85 % em massa de VDC e o restante de cloreto de vinila (MVC). Este polímero é termoestável e apresenta menor permeabilidade a uma ampla variedade de gases e líquidos do que outros materiais poliméricos [1]. Esta peculiaridade faz com que este material seja amplamente empregado em embalagens principalmente em alimentos e fármacos.

Objetivo

Avaliar o potencial econômico do processo de produção de VDC a partir do bioetanol.

Metodologia

Desenvolveu-se o balanço de massa global para o processo de produção de VDC seguindo a metodologia de hierarquia de decisões para projeto conceitual de processos químicos [2]. Este foi executado através de simulação utilizando o Software Microsoft Excel. Para a determinação do potencial econômico (PE) deste processo fizeram-se as cotações das matérias-primas e do produto de interesse em licitações nacionais, revista internacional especializada e contatos com fornecedores e compradores dos produtos.

Resultados e Discussão

Foram pesquisadas as reações químicas e condições operacionais envolvidas no processo. Apesar de não existir uma rota direta de obtenção do VDC a partir de etanol relatada na literatura há a possibilidade de agrupar processos já existentes. A primeira

etapa consiste na desidratação do etanol para obtenção do eteno, seguido da cloração direta do alceno, para posterior dehidrocloração do 1,1,2-tricloroetano (TCA) formando o VDC, como pode ser observado na Figura 1. Nesta também estão evidenciadas as equações de 1 a 6, as quais foram consideradas na análise do balanço global.

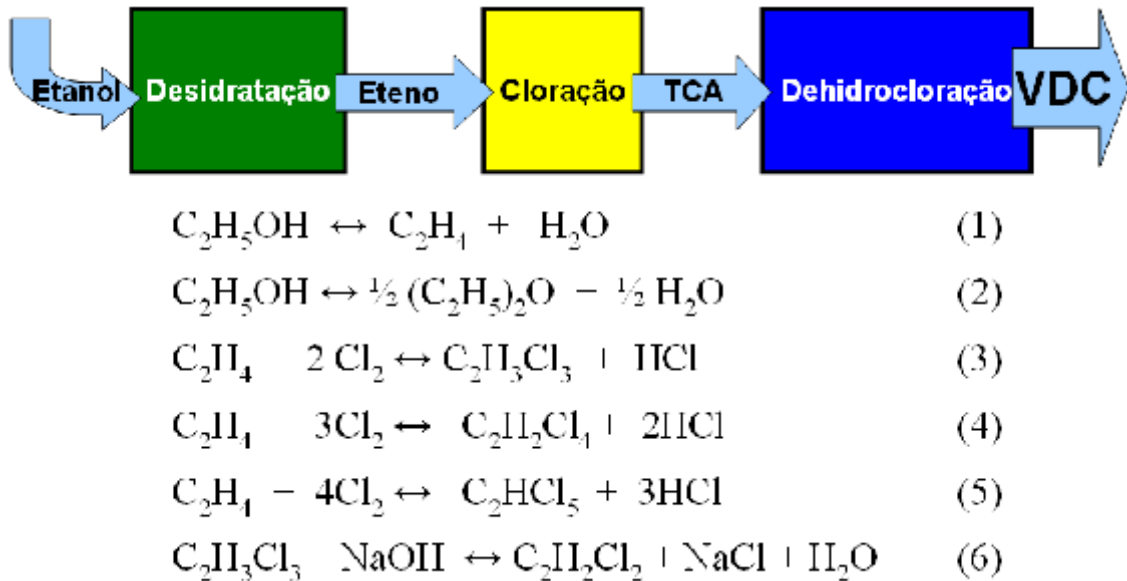


Figura 1: Síntese do processo e reações químicas envolvidas.

Fez-se análise dos graus de liberdade do processo global, totalizando 14 informações a serem adicionadas para a resolução do balanço material. Através do estudo de patentes definiram-se as conversões para cada reação do processo, razões de alimentação Cl_2 /eteno e NaOH /TCA e pureza das matérias-primas.

Equacionou-se o balanço de massa com o qual se montou uma planilha interativa no software Microsoft Excel para efetuar sua resolução, como pode ser observado no Quadro 1. A simulação do processo foi feita para uma produção anual de $5,07 \times 10^7$ mol de VDC, o que corresponde aproximadamente a 4.918 toneladas.

Quadro 1: Resolução do balanço de massa.

| CORRENTE | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
|--|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| SUBSTÂNCIA | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) | (mol) |
| $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ | 5,81E+07 | 5,81E+03 | - | - | - | - | - | - | - |
| H_2O | 1,19E+07 | 6,99E+07 | - | - | - | - | 1,25E+10 | 1,25E+10 | - |
| C_2H_4 | - | - | 5,80E+07 | - | 2,12E+06 | - | - | - | - |
| $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$ | - | 6,68E+04 | - | - | - | - | - | - | - |
| Cl_2 | - | - | - | 1,27E+08 | 9,79E+06 | - | - | - | - |
| $\text{ClCH}_2\text{-CH}_2\text{Cl}$ (EDC) | - | - | - | - | 8,69E+04 | - | - | - | - |
| $\text{Cl}_2\text{CH-CHCl}_2$ | - | - | - | - | 3,27E+06 | - | - | - | - |
| $\text{Cl}_3\text{C-CHCl}_2$ | - | - | - | - | 1,42E+06 | - | - | - | - |
| HCl | - | - | - | - | 6,19E+07 | - | - | - | - |
| $\text{Cl}_2\text{CH-CH}_2\text{Cl}$ (TCA) | - | - | - | - | - | 5,11E+07 | - | 3,57E+05 | - |
| NaOH | - | - | - | - | - | - | 5,11E+07 | 3,57E+05 | - |
| NaCl | - | - | - | - | - | - | - | 5,07E+07 | - |
| $\text{Cl}_2\text{C=CH}_2$ (VDC) | - | - | - | - | - | - | - | - | 5,07E+07 |

Analisou-se a influência da variação do rendimento do TCA (X^R_{TCA}), variável de projeto, sobre o rendimento global do processo de produção do VDC. Constatou-se uma relação linear entre elas e rendimentos bastante próximos.

Relacionou-se o rendimento global do processo com o PE observando-se um comportamento logarítmico crescente entre eles. Constata-se que este processo apresenta um potencial econômico positivo a partir de 34,6% de rendimento global do processo. Com um máximo rendimento global do processo de 87,3%, determinou-se um potencial econômico anual na ordem de R\$ 9,14 milhões.

Conclusão

Através da integração de processos já existentes determinou-se a síntese do processo para a produção do monômero cloreto de vinilideno a partir do etanol. A simulação do processo em Microsoft Excel facilitou tanto a resolução do balanço de massa como a análise da influência do rendimento global do processo sobre o PE. Concluiu-se que o potencial está na ordem de R\$ 9,14 milhões anualmente para um máximo rendimento global do processo de 87,3%.

Bibliografia

[1] Kirk-Othmer, 1997. Encyclopedia of Chemical Engineering.

[2] DOUGLAS, J.M., 1988. Conceptual Design of Chemical Processes.