

OTIMIZAÇÃO DE MATERIAIS CARBONOSOS PARA SEPARAÇÃO DE GASES ÁCIDOS DO BIOGÁS.

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Diony do Nascimento Gomes, Daniel Vasconcelos Gonçalves, Sebastiao Mardonio Pereira de Lucena

Encontros Universitários da UFC 2019

O sulfeto de hidrogênio (H₂S) é um gás ácido extremamente tóxico. A exposição a concentrações em torno de 300 ppm por 30 minutos é suficiente para levar uma pessoa a um estado de inconsciência. O limite aceitável de H₂S é de apenas 10 ppm. Ele ocorre naturalmente durante a produção de biogás (até 2000 ppm), a qual tem sido incentivada, particularmente com desenvolvimento de novos projetos ligados a rejeitos de esgoto domésticos e aterros sanitários. Para retirada de H₂S abaixo de 10 ppm (polimento) utiliza-se a adsorção em carbono ativado à temperatura ambiente, com considerável economia de energia. Devido à toxicidade do H₂S, experimentos laboratoriais são complicados e laboriosos, o que se agrava com a estrutura amorfa dos carbonos ativados de difícil caracterização. Objetivando otimizar o projeto de carbonos ativados e diminuir o esforço laboratorial de seleção de materiais, simulamos a adsorção de H₂S em materiais carbonosos através do método de Monte Carlo no ensemble grande canônico. Aplicamos os códigos comerciais Accelrys e RASPA. Empregamos dois modelos de carbono ativado, homogêneo e heterogêneo. Avaliou-se a adsorção de H₂S em tamanhos de poros distintos (7 Å, 8.9 Å e 18.5 Å), nos modelos utilizados. Por meio das isotermas de adsorção, mostrou-se que, em ambos os modelos, a quantidade adsorvida de H₂S diminui com o aumento do tamanho dos poros. Com base nas condições de temperatura (293 K) e pressão aplicadas, a adsorção de H₂S nos carbonos ativados é praticamente restrita aos menores microporos. Descobriu-se que não apenas microporos na faixa de 10 Å são importantes no processo de adsorção de H₂S, também identificamos grande relevância dos menores microporos (abaixo de 4 Å) na imobilização primária do H₂S presentes tanto em correntes do gás natural como do biogás.

Palavras-chave: ADSORÇÃO. BIOGÁS. SIMULAÇÃO MOLECULAR. CARVÃO ATIVADO.