



Modelagem e Simulação de um Reator Catalítico para Destoxificação de Armas Químicas Organofosforadas

Alex Victorino Formento, Gizelle Inacio Almerindo, Marcel Rossetti da Silva

Engenharia Química - Tecnologia Química

Desde a Primeira Guerra Mundial tem-se registro do uso de armas químicas organofosforadas. A alta letalidade e a estabilidade destes compostos são alguns dos motivos pelos quais sua utilização persista até os dias de hoje, mesmo que de forma ilegal. Recentemente tem-se estudado a aplicação de catalisadores heterogêneos para a destoxificação destas armas químicas, uma vez que existem estoques com grandes quantidades destes compostos e há diversos acordos internacionais para a destruição dos mesmos. Em sua maioria, estes estudos abordam o processo apenas em escala laboratorial, abordando o desenvolvimento e otimização dos catalisadores empregados e, para que seja possível sua aplicação em maiores escalas, faz-se necessária a modelagem e simulação dos estudos catalíticos para determinar os melhores parâmetros de operação e projeto. Com base nisso, o objetivo do trabalho foi simular o processo de destoxificação do paraoxon metílico utilizando o software Matlab®, onde foram elaborados modelos matemáticos para a fase líquida e para a fase sólida. A fase líquida era constituída de uma mistura contendo o paraoxon metílico diluído com propanol, enquanto a fase sólida era constituída por partículas de óxido de magnésio (catalisador), neste cenário o paraoxon metílico, na presença de um catalisador de óxido de magnésio, passa por uma reação de propanólise, formando o dimetil n-propil fosfato (composto este relacionado a família dos retardantes de chamas, transformando então o pesticida em um produto útil e com valor comercial) e 4-nitrofenol. Para a simulação do processo foi utilizada a discretização pelo método de diferenças finitas, devido sua maior facilidade de implementação computacional. Na simulação da reação, foram considerados os fenômenos de advecção, transferência de massa entre a fase líquida e sólida e a reação química. Por tratar-se de uma catálise, a reação ocorria apenas no modelo para fase sólida. Para a fase sólida, foram consideradas partículas maciças, onde a reação catalítica ocorria apenas na superfície do material e foram avaliados os efeitos considerando a variação no tamanho das partículas do catalisador. Neste modelo a conversão obtida foi de 99,33% ao utilizar a vazão de 10 mL/min, o diâmetro de partícula de 0,1435 mm e o tempo para atingir o regime estacionário foi de 80 minutos.

Palavras-chave: Organofosforados; Catálise heterogênea; Modelagem e simulação

Apoio: UNIVALI