

INTENSIFICAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DE MONONITROBENZENO

O mononitrobenzeno (MNB) é um intermediário químico base, cuja produção mundial atingiu aproximadamente 3.8 milhões toneladas em 2023. É utilizado como precursor para o fabrico de outros compostos orgânicos com aplicação em sectores como a construção, indústria automóvel e farmacêutica.

O MNB é produzido através de um processo de nitração adiabática que tem como matérias-primas o ácido nítrico e o benzeno, e como catalisador o ácido sulfúrico, formando uma mistura heterogénea de fases líquidas, onde a fase orgânica fica dispersa na fase aquosa. Nestes reatores, é recirculado um grande volume de catalisador. O ácido sulfúrico facilita a dissociação do ácido nítrico a ião nitrónio, espécie que conduz a conhecida reação de nitração, e tem a capacidade de absorver o calor da reação exotérmica, permitindo assim controlar a temperatura, parâmetro crítico para a formação de subprodutos - nitrofenóis (NF's) e dinitrobenzeno (DNB). Os reatores industriais utilizados são bem conhecidos do estado da arte. Normalmente são do tipo tanque agitado ou do tipo tubular, podendo incorporar diferentes elementos de mistura líquido-líquido, que podem ser organizados em várias configurações. As condições operatórias, temperatura reacional e concentração de catalisador, bem como, o tipo de reator utilizado e configuração associada, são então críticos para a seletividade da reação.

Apesar de este ser um processo maduro, a procura de novas soluções tecnológicas que permitam minimizar os subprodutos formados e intensificar a produtividade da reação de nitração continua a ser um objetivo. Alguns exemplos destas alternativas são os microreatores, que permitem aumentar a área interfacial entre a fase aquosa e a fase orgânica. Pretende-se com este doutoramento explorar outros formatos para intensificação de mistura líquido-líquido (mesoreatores, combinação de elementos de mistura...), bem como estudar os diferentes modos de fluxo (ascendente/descendente/horizontal) da mistura bifásica. O principal objetivo é avaliar quais as condições reacionais mais favoráveis para a produção de MNB. Os estudos serão realizados numa instalação piloto localizada no Laboratório de Desenvolvimento da Bondalti, estando prevista por parte do doutorando uma adaptação da unidade piloto existente que permita dar resposta às necessidades deste projeto. Na segunda parte, pretende-se modelar o reator que apresente os melhores resultados experimentais e utilizar ferramentas de análise de dados para otimização das condições reacionais.

Palavras-chave: Intensificação, otimização, mistura líquido-líquido, nitração, benzeno, mononitrobenzeno