

INTRODUÇÃO

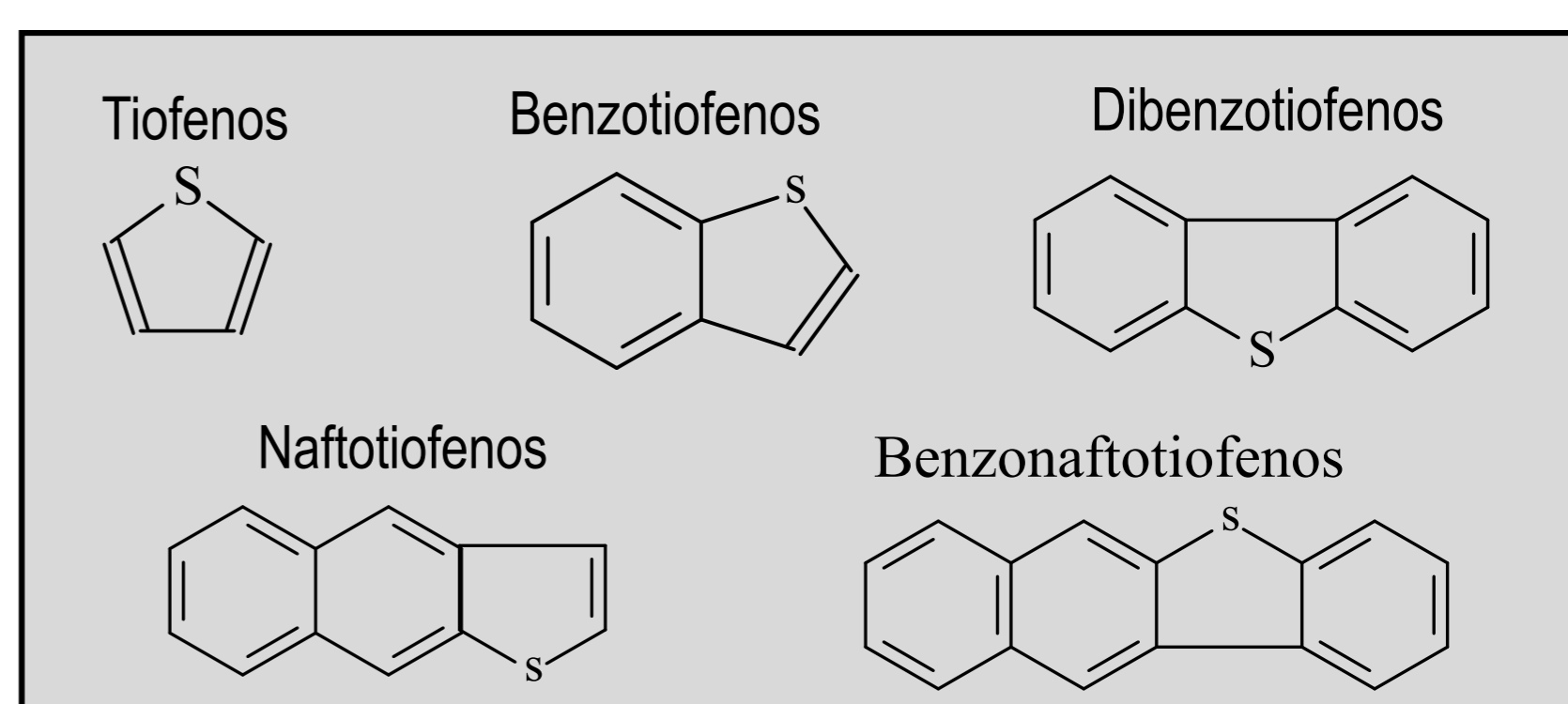
Os compostos orgânicos sulfurados (OSC) compõem uma pequena parte na composição total do carvão mineral. Os OSC são indesejados por causarem danos ambientais e prejuízos nos equipamentos nas indústrias que o utilizam como insumo. As carboníferas retiram apenas o enxofre que se encontra na forma inorgânica, mas o enxofre orgânico permanece. Assim, há a necessidade de identificação destes compostos, a fim de elucidar a presença e natureza dos mesmos para planejamento de aprimoramentos futuros de processos de dessulfurização. Tendo em vista que existem poucos trabalhos empregando técnicas de extração/ processamento de carvão, aliados à análise por cromatografia gasosa com detector de espectrometria de massas (1D-GC/qMS) para investigação destes compostos, o objetivo deste trabalho foi empregar o processo de pirólise juntamente com 1D-GC/qMS para este fim.

PARTE EXPERIMENTAL

PIRÓLISE PARA OBTENÇÃO DO ALCATRÃO



ESTRUTURAS MOLECULARES DAS PRINCIPAIS CLASSES DE OSC ENCONTRADAS NO CARVÃO



CONDIÇÕES EMPREGADAS NO PROCESSO DE PIRÓLISE

- condições fixas:
 - granulometria: 60 mesh;
 - vazão de nitrogênio: 1 mL/min;
 - massa da amostra: 15 g.
- condições variáveis:
 - taxa de aquecimento: 10 e 100 °C/min;
 - temperatura máxima: 700 e 900 °C;
 - tempo de espera após temperatura máxima: 0 e 10 min.

CONDIÇÕES CROMATOGRÁFICAS

- Cromatógrafo gasoso 2010-Plus
 - Temperatura do injetor e detector: 280 °C
 - Coluna: DB5-MS (30 m x 0,25 mm 0.10 µm)
 - Injeção: no modo sem divisão de fluxo
- Temperatura: do forno: 40°C (1min) $\xrightarrow{4^\circ\text{C}/\text{min}}$ 260°C

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Tabela 1. Melhores resultados de rendimento e números de compostos sulfurados

Exp.	Rendimento (%)	Nº OSC	Classes
1	9,85	2	BT, C2-BT
2	8,00	3	BT, C1-BT, C2-BT
3	4,70	0	Não encontrado
4	5,66	3	C2-BT
5	13,00	9	BT, C1-BT, C2-BT, C3-BT, DB
Experimento com Maior Números de Compostos Sulfurados Identificados			
6	11,00	2	C2-BT
7	18,20	0	não encontrado
8	16,8	6	BT, C1-BT, C2-BT

Classes:
 BT – Benzotiofeno;
 C1-BT - Benzotiofeno com uma metila;
 C2-BT - Benzotiofeno com 2 carbonos substituintes;
 C3-BT - Benzotiofeno com 3 carbonos substituintes;
 DB - Dibenzotiofeno

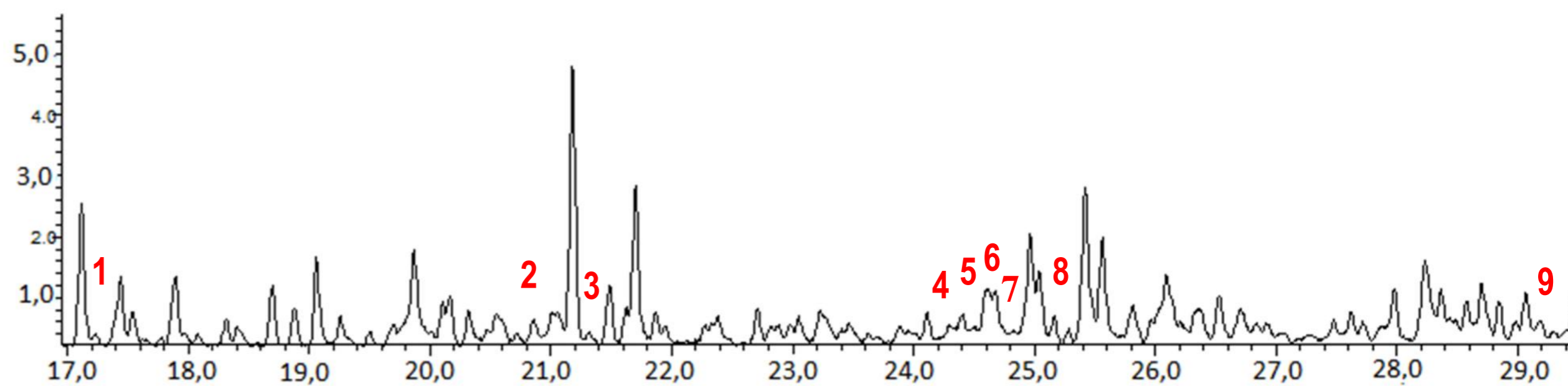


Figura 4. Cromatograma com os nove picos de compostos sulfurados identificados no experimento 5, apresentado na Tabela 1.

Tabela 2. Nome dos compostos correspondentes aos picos cromatográficos do alcatrão obtido no experimento 5 e apresentados na Figura 4.

Picos	Compostos
1	Benzotiofeno
2	metil-benzotiofeno
3	metil-benzotiofeno
4	etil-benzotiofeno
5	dimetil-benzotiofeno
6	etil-metil-benzotiofeno
7	dimetil-benzotiofeno
8	dimetil-benzotiofeno
9	Dibenzotiofeno

CONCLUSÕES

Conclui-se que em ambas as condições descritas para maior rendimento em alcatrão e maior número de compostos sulfurados, experimentos 5 e 7, respectivamente, foram empregados menor tempo de permanência na temperatura final e mesma taxa de aquecimento, diferenciando-se estas condições apenas pela temperatura final. A classe de composto encontrada em maior número foi a dos benzotiofenos ligados a duas metilas (C2-BT).

AGRADECIMENTOS