

Cofinanciado por:



UNIÃO EUROPEIA  
Fundo Europeu  
de Desenvolvimento Regional



**Designação do projeto** | TIP\_MOFs .: Isomerização total de parafinas em processos TIP com estruturas Organo-Metálicas (MOFs)

**Código do projeto** | POCI-01-0145-FEDER-016517

**Região de intervenção** | Norte

**Entidade beneficiária** | Instituto Politécnico de Bragança (IPB)

**Data de aprovação** | 2016-04-08

**Data de início** | 01-07-2016

**Data de conclusão** | 31-03-2020

**Custo total elegível** | 189.384,00 Euros

**Apoio financeiro** | 160.976,40 Euros (FEDER); 28.407,60 Euros (OE)

#### **Objetivos:**

Este projecto tem por objectivo desenvolver novos adsorventes organo-metálicos denominados MOFs e um processo de separação por adsorção para a separação de isómeros do hexano com vista no aumento do índice de octano da gasolina.

O processo convencional de isomerização total (TIP) para o aumento do índice de octano da gasolina (Research Octane Number – RON), especialmente correntes contendo pentanos e hexanos foi um dos primeiros processos e com grande sucesso na aplicação de adsorventes na indústria petroquímica. O processo consiste em isomerizar parafinas lineares (com baixo RON) seguido de um ciclo adsorção-dessorção usando zéolito 5A que separa as parafinas lineares não convertidas das ramificadas. O sucesso deve-se em parte à capacidade do zéolito 5A de separar completamente as parafinas lineares das ramificadas. No entanto, ainda existe na corrente final do processo TIP uma grande quantidade de isómeros do hexano mono-ramificados com baixo RON.

A descoberta de MOFs abre uma janela para novos desafios no fenómeno da separação por adsorção e a sua aplicação industrial. A maior parte dos estudos estão centrados no seu potencial uso relativo ao armazenamento de gás (H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>), na captura de CO<sub>2</sub> e na separação de xilenos. Outro desafio importante será a separação de isómeros do hexano mono e bi-ramificados para melhoramento da qualidade da gasolina. Actualmente, o zéolito 5A separa completamente as parafinas lineares e ramificadas. No entanto, um grande progresso seria a descoberta de um MOF que adicionalmente separasse as parafinas mono e bi-ramificadas. Os primeiros estudos realizados numa cooperação conjunta LSRE com o Instituto Lavoisier de Versailles mostraram que MOFs como o MIL-100 e o UIO-66 são bons candidatos para este tipo de separação. Durante o último ano a continuação dos estudos no MOF UIO-66, ZIF-8 and MIL-53(Fe) mostraram que é possível aumentar a eficiência da separação. Ao mesmo tempo um grupo do IFP que concorre directamente com o LSRE neste campo publicou um trabalho onde se mostra que o MOF ZIF-8 é um potencial adsorvente para separar os isómeros mono e bi ramificados. No entanto, um longo caminho a percorrer é necessário para aumentar a selectividade e compreender a origem da separação por forma que os resultados obtidos no MOF MIL-53(Fe) sejam obtidos em condições próximas dos actuais processos TIP em termos de temperatura e pressão. Espera-se que este projecto contribua para um aumento da eficiência doas actuais processos TIP com recurso a MOFs.

**Atividades:**

Os passos a desenvolver para o novo processo de separação de isómeros do hexano mono e bi-ramificados usando MOFs são os seguintes:

- 1) Síntese, funcionalização e caracterização de novos MOFs no LSRE;
- 2) Estudos "Screening" no LSRE com misturas de isómeros do hexano nos MOFs sintetizados para avaliação da sua performance;
- 3) Síntese em larga escala dos melhores MOFs (20-50 g);
- 4) Determinação experimental da cinética, constantes de equilíbrio, selectividade e capacidades dos MOFs sintetizados em larga escala;
- 5) Desenvolvimento de um processo cíclico de adsorção (Adsorção com Modulação de Pressão – PSA ou Leito Móvel Simulado – SMB) no LSRE a partir de simulação e experiências;
- 6) Avaliação económica do novo processo e comparação com anteriores TIP usando ASPEN.

**Resultados esperados:**

Criar uma nova tecnologia para o aumento do índice de octano em processos TIP usando MOFs.  
Desenvolvimento de uma patente intencional.