

# Análise de carbamatos por RMN de $^1\text{H}$ provenientes da absorção de $\text{CO}_2$ por alcanolaminas

Denise T. Tavares\* (PG)<sup>1</sup>, Rosamaria W. C. Li (PQ)<sup>2,3</sup>, Jonas Gruber (PQ)<sup>2</sup>, Oscar V. Bustillos (PQ)<sup>1</sup>

\*denise.tavares@usp.br

<sup>1</sup> Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – Universidade de São Paulo

<sup>2</sup> Instituto de Química – Universidade de São Paulo

<sup>3</sup> Centro Universitário Estácio Uniradial, Campus Vila dos Remédios, São Paulo

Palavras Chave: absorção, captura de  $\text{CO}_2$ , aminas, RMN, infravermelho, carbamato

## Introdução

Visando minimizar as taxas de emissão de  $\text{CO}_2$ , tecnologias para sua captura vêm sendo desenvolvidas e aprimoradas. Baseiam-se na absorção do gás por reação química com soluções aquosas de alcanolaminas, dentre outras. As aminas mais comumente empregadas são a monoetanolamina (MEA) e a dietanolamina (DEA). Como produto da reação tem-se o carbamato e a amina “residual”, uma vez que o equilíbrio é atingido, de acordo com a reação (1).



MEA:  $\text{R}_1 = \text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$  e  $\text{R}_2 = \text{H}$

DEA:  $\text{R}_1$  e  $\text{R}_2 = \text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$

O presente trabalho tem como objetivo quantificar por RMN o carbamato formado e a amina residual de soluções aquosas de MEA e DEA após a reação com o  $\text{CO}_2$ . Dentre as diversas técnicas testadas para a quantificação desses compostos, concluiu-se que a RMN de  $^1\text{H}$  é a mais adequada, pois não requer nenhum tratamento prévio na amostra, sendo os carbamatos compostos instáveis e que hidrolisam facilmente, além de não ser necessária a obtenção de uma curva de calibração. O teor de cada componente presente é determinado considerando as áreas dos sinais, que são diretamente proporcionais ao número de núcleos que contribuem para a sua geração.

## Resultados e Discussão

As soluções aquosas de MEA e DEA com concentração de 30% (m/m) reagiram com  $\text{CO}_2$  99% por borbulhamento do gás com diferentes tempos de reação. Os espectros de RMN de  $^1\text{H}$  foram obtidos sem o uso de referência interna, acumulando 128 scans em um espectrômetro Gemini Varian de 200 MHz.

Na Figura 1 estão apresentados apenas os espectros das soluções de MEA, como ilustração, antes e após a reação em diferentes tempos. Verifica-se que, para a MEA inicial, antes da reação, aparecem dois tripletos e, com o aumento dos tempos de reação é observado o aparecimento de outros dois tripletos centrais atribuídos à formação

de carbamato, cuja intensidade tende a aumentar quanto maior o tempo de reação.

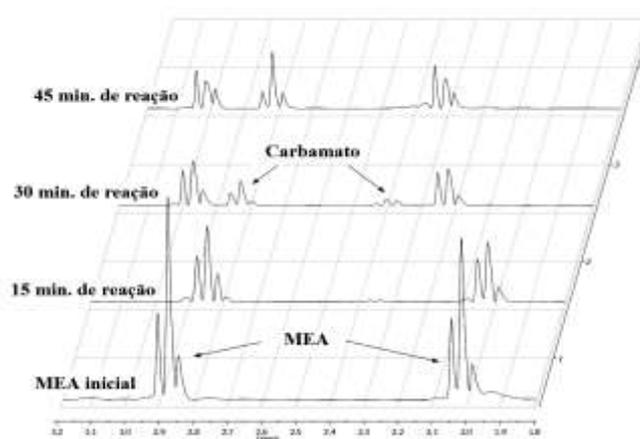


Figura 1. Espectros de RMN de  $^1\text{H}$  para a solução de MEA antes e após reação com  $\text{CO}_2$ .

Simultaneamente, verifica-se o consumo da amina com a conseqüente diminuição da intensidade de seus picos, compatíveis com os resultados apresentados na literatura<sup>1</sup>. O mesmo comportamento foi observado para a solução de DEA. A quantificação dos compostos foi realizada pela integração dos sinais e suas proporções, relacionando-os com a concentração inicial de amina. Houve a formação de 42% de carbamato de MEA com 45 minutos de reação e 20% de carbamato de DEA, nas mesmas condições.

## Conclusões

Carbamatos são compostos que apresentam instabilidade e hidrolisam facilmente, dificultando sua determinação tanto qualitativa quanto quantitativa. A RMN de  $^1\text{H}$  é uma técnica muito apropriada para a quantificação desses compostos, principalmente pelo fato de não haver a necessidade de qualquer tipo de manuseio/preparação prévia da amostra após sair do processo de absorção de  $\text{CO}_2$ .

## Agradecimentos

CAPES PROEX e CNPq processo nº 400740/2014-1

<sup>1</sup> Böttinger, W.; Maiwald, M.; Hasse, H. *Fluid Phase Equilibria*. 2008, 263, 131-143.