

Correlação empírica para a determinação da massa molar, ponto de ebulição e densidade de n-alcenos provenientes de depósitos parafínicos.

Johana Inês Rodriguez Ruiz ¹ (PG), Maria Cecília Azevedo Esperidião ^{1*}(PQ). mcecilia@ufba.br.

Universidade Federal da Bahia¹, Campus de Ondina, Instituto de Química. Departamento de Físico-Química. Sala 502.

Palavras Chave: depósitos parafínicos, cromatografia gasosa, correlação.

Introdução

Os problemas relacionados à cristalização e deposição de frações orgânicas pesadas durante a produção, transporte e armazenagem do petróleo podem causar grandes perdas à indústria do petróleo¹. Os depósitos típicos consistem em parafinas normais, ramificadas e cíclicas. A deposição está associada ao equilíbrio de fases e é função das características intrínsecas do petróleo e das variações de temperatura e de pressão durante a produção. Algumas correlações empíricas e semi-empíricas visando a determinação da massa molar (MM) e do ponto de ebulição (PE) já foram feitas para n-alcenos³. Neste trabalho foi desenvolvida uma correlação empírica para a determinação de MM e PE a partir do tempo de retenção cromatográfico (T_R) dos compostos e aplicada a amostras de depósitos parafínicos provenientes do Recôncavo Baiano.

Resultados e Discussão

Foi utilizado um cromatógrafo Shimadzu GC-A17 com detector de ionização em chama (FID) e coluna Ultra Alloy DX-30. O injetor e o detector foram mantidos à temperatura constante de 350 e 420°C, respectivamente. Estas condições foram utilizadas para o padrão e para a amostra de depósito parafínico. Foram utilizados padrões de n-parafinas no intervalo de C₇-C₄₄. Valores de MM, PE e densidade (?) de algumas n-parafinas são dadas na Tabela 1. Na Figura 1, pode-se comparar a quantidade de hidrocarbonetos presentes no petróleo, variando entre C₁₄ e C₄₃ e no depósito parafínico, variando entre C₁₄ e C₅₃.

Tabela 1. Propriedades físico-químicas de alguns n-alcenos.

N-alcenos	Massa molar (g/mol)	Ponto de Ebulição (°C)	Densidade (g/mL)
C ₇ H ₁₆	100,21	98,4	0,724
C ₁₉ H ₄₀	268,52	329,9	0,784
C ₂₂ H ₄₆	310,37	368,6	0,792
C ₂₈ H ₅₈	394,76	431,6	0,804

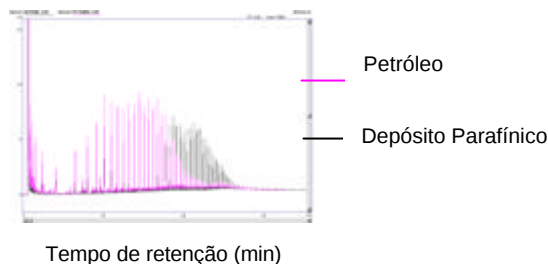


Figura 1. Cromatogramas do petróleo e do depósito

Na Tabela 2 mostra-se um resumo das correlações empíricas e os respectivos coeficientes de correlação. Os resultados obtidos com essas correlações foram comparados com os dados experimentais do depósito parafínico.

Tabela 2. Correlações empíricas para o cálculo de ponto de ebulição, massa molar e densidade, 20°C.

EQUAÇÃO	R ²
$MM = 551,59 + 130,21T_R - 5,86PE$	0,9987
$MM = -3150 + 54,9T_R + 15318r - 150314r^2$	0,9999
$PE = 82,6348 + 22,27T_R - 0,113T_R^2$	0,9999

Tabela 3. Valores obtidos a partir das correlações empíricas para o depósito parafínico.

N-alceno	Massa molar (g/mol)	Ponto de Ebulição (°C) calculado
C ₇ H ₁₆	100,27	98,5
C ₁₉ H ₄₀	265,79	328,9
C ₂₂ H ₄₆	312,35	368,9
C ₂₈ H ₅₈	395,94	433,1

Agradecimentos

Os autores agradecem a FINEP, CNPq, CTPETRO pelo apoio financeiro. J.I.R.R agradece à CAPES pela bolsa concedida.

¹ Boukadi A.; Philp,R.B.; Thanh N.X. Applied Geochemistry **2005** 20,1974.

² Chickos J.S.; Hanshaw W. J. Chem. Eng. Data **2004**, 49, 77.