

**XXIII ENCONTRO
GALEGO
PORTUGUÉS
DE QUÍMICA**

**Ferrol
2017**

XXIII ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA

15 al 17 de noviembre de 2017

Centro de Innovaciones y Servicios C.I.S.

Ferrol-Galicia (España)



Colegio Oficial de
Químicos de Galicia



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

XXIII ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA.

Noviembre 2017

Coordinador Editorial

Cristina Díaz Barral

Manuel Rodríguez Méndez

Edita

Colegio Oficial de Químicos de Galicia Rúa Urzaiz, 1 – 2º dcha.

36201 Vigo (Pontevedra)

www.colquiga.org

Portada

Imagen: Designed by Freepik.com

Tirada

250 Ejemplares

Imprime

OCERO

Sada

Depósito Legal

VG699-2017

ISBN

978-84-697-7356-7

Este libro de comunicaciones y conferencias, presentadas en el XXIII Encontro Galego-Portugués de Química, Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Catalogación recomendada Libro de resúmenes del XXIII Encontro Galego-Portugués de Química.

Centro de Innovaciones y Servicios (CIS). Ferrol (España) 2017

© Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Derechos reservados. Prohibida la reproducción de este libro por cualquier medio, total o parcialmente, sin permiso expreso del editor.

El coordinador editorial declara que el contenido de los resúmenes científicos es de la entera responsabilidad de los respectivos autores.

INTRODUCCIÓN

Un año más se celebra este congreso que reúne a los profesionales de la química de ambos lados del Miño. Con la misma ilusión de la primera vez, aquel 14 de noviembre de 1985, cuando nos reunimos en Santiago de Compostela algo nerviosos, pero con la convicción, de que era necesario establecer un intercambio de conocimientos, que permitiese potenciar las relaciones interpersonales de los profesionales de la Química. Ahora serán 32 años compartiendo investigación y experiencias.

Esta XXIII edición del ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA ha sido organizada bajo los auspicios del Colegio Oficial de Químicos de Galicia, Asociación de Químicos de Galicia y Sociedade Portuguesa de Química.

COMISIÓN DIRECTIVA

Manuel Rodríguez Méndez (COLQUIGA)
José Luis Francisco Fuentes (COLQUIGA)
José Ramón Bahamonde (COLQUIGA)
José Luís Figueiredo (FEUP)
José Luís Costa Lima (FFUP)
Baltasar Romão de Castro (FCUP)

COMISIÓN CIENTÍFICA

Wolfgang Parak (Marburgo)
José Manuel Andrade Garda (UDC)
Carlos Herrero Latorre (USC)
Ignacio Pérez Juste (UVIGO)
Artur Silva (UA)
Victor Freitas (FCUP)
Joaquim Luis Faria (FEUP)

COMISIÓN ORGANIZADORA

José María Fernández Solís (UDC)
Manuel Rodríguez Méndez (COLQUIGA)
José Manuel Andrade Garda (UDC)
Fernando Barbadillo Jove (UDC)
José Luis Mier Buenhombre (UDC)
Antonio Santiago Penín (NAVANTIA)
Hervilia María Seco Lago (COLQUIGA)
David Ausín Neira (UDC)
M^{ra} Paz Gómez Carracedo (UDC)

La Comisión Organizadora del XXIII Encontro Galego-Portugués de Química, desea manifestar su agradecimiento a las siguientes instituciones:



- CAT14 New insights into the suzuki-miyaura cross-coupling reaction
- CAT15 Glycerin Valorization by Acetylation over Acid Treated Montmorillonite Catalysts
- CAT16 Influence of the type of surface functional groups in solid acid carbon xerogel catalysts for hydrolysis of celobiose
- CAT17 Solketal: a new fuel additive to improve diesel mixtures in combustion engines, through heterogeneous catalysis
- CAT18 Estudio de la química superficial de aerogeles de carbón dopados con nanopartículas de cobalto en la síntesis de quinoxalinas

Educación y Enseñanza de la Química

- EDU01 Cajas misteriosas como herramienta de motivación: una visión constructivista a través de casos de toxicología forense
- EDU02 Práctica virtual de Laboratorio de Química. Separación e identificación de los iones: Cu 2+, Fe 3+ y Ag +
- EDU03 Aplicación del programa Statgraphics al tratamiento de datos de la determinación de cobre en muestras de sílice comercial.

Química Industrial e Ingeniería Química

- IND01 Estudio de la influencia de la temperatura en la tensión superficial de los sistemas ternarios dimetil carbonato + p-xileno + n-alcano
- IND02 Preparative Separation of Nadolol Racemates by Fixed-Bed and SMB Liquid Chromatography using C18 Columns
- IND03 Utilização de biomassa liquefeita na produção eletrolítica de gás de síntese
- IND04 Separação dos Isómeros de Hexano em MOF ZIF-8
- IND05 Optimización de la composición química de espumas florales fenólicas
- IND06 Struggling to find a true biocompatible separation platform based on surfactants and cholinium ionic liquids
- IND07 Regeneration of solvents based on DMEA and DEEA for carbon dioxide separation
- IND08 CO2 separation by chemical solvents based on aminoacids
- IND09 Estudio del comportamiento viscoso de mezclas n-octano + 1-octanol en función de la temperatura
- IND10 Rheology of surface active ionic liquid-octane binary systems
- IND11 Estudio de la difusividad térmica de peloides termales en aplicaciones terapéuticas
- IND12 A water sorption isotherms prediction model for hybrid carrageenans
- IND13 Effect of storage time on chestnut flour doughs mixing properties
- IND14 Contenido total de hidrocarburos insaturados y compuestos oxigenados en gasolinas

Separação dos Isómeros de Hexano em MOF ZIF-8

Adriano Henrique^{1,*}, José A. C. Silva¹, Alírio E. Rodrigues²

¹Instituto Politécnico de Bragança, Apartado 1134, 5301-857, Bragança, Portugal

²Faculdade de Engenharia, Departamento de Engenharia Química, Laboratório de Processos de Separação e Reação, Universidade do Porto, Rua. Dr. Roberto Frias, S/N, 4200-465 Porto, Portugal

*adriano_henrique@ipb.pt

Um importante processo na indústria petroquímica é o aumento do número de octano da gasolina (RON – Research octane number), na separação dos isómeros de parafinas leves C5/C6. Atualmente, a separação de n/iso-parafinas é realizada pelo Processo de Isomerização Total (TIP) em que parafinas lineares com baixo RON são convertidas em seus isómeros ramificados com elevado RON, e então estas são separadas das parafinas não reagidas [1]. Nesse contexto, o objetivo deste trabalho foi estudar a separação dos isómeros de hexano, por adsorção, em MOF (metal organic framework) ZIF-8 (Zeolitic Imidazolate Framework) [2].

Vários estudos de adsorção em ZIF-8 foram realizados utilizando uma mistura equimolar dos isómeros C6: n-hexano (n-HEX), 2-metilpentano, 3-metilpentano (3MP) 2,3-dimetilbutano (23DMB) e 2,2- dimetilbutano (22DMB). As experiências foram realizadas nas temperaturas de 373, 423 e 473 K com pressão total de hidrocarboneto no intervalo de 0.1 - 0.5 bar. A Figura 1 mostra uma típica curva de rutura (breakthrough curve) dos isómeros C6 à pressão total de hidrocarbonetos 0.25 kPa e temperatura de 373 K. Verifica-se que o ZIF-8 é capaz de realizar a separação cinética dos isómeros de hexano de acordo com o grau de ramificação, e a hierarquia de sorção é dada por: nHEX >>> 2MP > 3MP >> 23DMB > 22DMB. Desenvolveu-se também um pacote numérico usando o Método das Linhas (MOL) [3] em código MATLAB para simular as breakthrough curves experimentais. A partir deste trabalho, pode-se concluir que o ZIF-8 pode ser um eficiente separador dos isómeros de hexano, com alto impacto na **otimização dos processos TIP**.

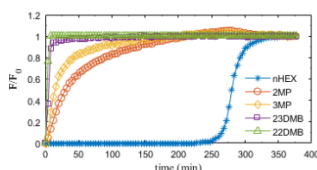


Fig. 1. Breakthrough curve experimental de uma mistura equimolar dos isómeros de hexano: nHEX/2MP/3MP/23DMB/22DMB à 373 K e pressão total de hidrocarboneto de 0.25 bar.

Agradecimentos

Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “AIProcMat@N2020 - Advanced Industrial Processes and Materials for a Sustainable Northern Region of Portugal 2020”, com referência NORTE-01-0145-FEDER-000006, projeto POCI-01-0145-FEDER-016517, intitulado “Upgrading TIP Processes with MOFs” cofinanciado pelo Programa Operacional Regional do Norte (NORTE 2020), através do Portugal 2020 e do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional (FEDER) e do Projeto POCI-01-0145-FEDER-006984 - Laboratório Associado LSRE-LCM - financiado FEDER, através do COMPETE2020 – Programa Operacional Competitividade e Internacionalização (POCI) e por fundos nacionais através da Fundação para a Ciência e a Tecnologia I.P.

Referencias

- [1] P. A. P. Mendes, A. E. Rodrigues, P. Horcajada, C. Serre, J. A. C. Silva, Microporous and Mesoporous Material, 194 (2014) 146.
- [2] K. S. Park, Z. Ni, A. P. Côte, J. Y. Choi, R. Huang, F. J. Uribe-Homom H. K. Chae, M. O’Keeffe, O. M. Yaghi, PNAS, 103 (27) (2006) 10186
- [3] A Compendium of Partial Differential Equation Models. Method of Lines Analysis with Matlab. W. E. Schiesser, G. W. Griffiths, Cambridge, Cambridge University Press, 2011.