

## SIMULAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PRODUÇÃO DE DIMETILSUFÓXIDO (DMSO)

Thamires Ohana Araújo de Carvalho Marcelino (1); Marcia Camila da Silva (1); Jéssica Oliveira da Silva (2); José Nilton Silva (4)

(Universidade Federal de Campina Grande, [thamires.carvalho@ufcg.edu.br](mailto:thamires.carvalho@ufcg.edu.br))

### Introdução

O dimetilsufóxido (DMSO) é um composto conhecido principalmente por sua utilização como solvente orgânico. Além da sua ampla aplicação na medicina, devido as propriedades anti-inflamatória de citoprotetora. O DMSO tem fórmula química  $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$  e, quando exposto ao ambiente, diminui rapidamente sua concentração por possuir alta afinidade com hidrogênio. (PICOLI et al., 2015). Dimetilsufóxido pode ser obtido a partir da oxidação do dimetil sulfeto (DMS), cuja fórmula química é  $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ , na presença de dióxido de nitrogênio ( $\text{NO}_2$ ).

O presente estudo tem como objetivo simular uma unidade de produção de dimetilsufóxido (DMSO) proposto por Kirk *et al.* (1998) utilizando o software comercial Aspen Plus® da AspenTech. Nesse processo, o DMS é inicialmente oxidado com uma solução de DMSO e  $\text{NO}_2$  em um reator estequiométrico operando à temperatura entre 40 e 50°C. Posteriormente o excesso de DMS é flasheado à temperatura de 100°C onde é neutralizado e destilado, transformando-se em DMSO bruto como resultado final do processo. A unidade faz usos de diversos equipamentos, tais como reatores, coluna de destilação, trocador de calor, vasos de separação (*flash*) entre outros.

### Metodologia

A simulação da unidade de produção de DimetilSulfóxido (DMSO) foi realizada utilizando o software comercial Aspen Plus® da AspenTech e tem como principal objetivo atingir o máximo grau de pureza de DMSO adequando-se aos padrões de uso comercial. A base para o presente trabalho foi o processo proposto por Kirk *et al.* (1998), além de dados da literatura de sistemas semelhantes. A produção de dimetilsulfóxido (DMSO) é função do tipo de tecnologia utilizada. A unidade foi projetada para o caso de operação contemplando o processamento e formação do DMSO bruto passando por várias etapas de reação assim como separação para sua obtenção final.

A alimentação é feita no reator estequiométrico (R101) por uma corrente equimolar de dimetil sulfeto (DMS) e dióxido de nitrogênio ( $\text{NO}_2$ ) à 200 kmol/h a temperatura de 25°C e pressão de 1 bar. Em R101 ocorre a primeira etapa da reação de obtenção de DMSO, onde DMS reage com  $\text{NO}_2$ , formando DMSO e óxido nítrico (NO). Parte da corrente proveniente do R101 é reinserida no mesmo, sendo antes arrefecida em um trocador de calor, cuja finalidade é criar uma nova fase para facilitar a separação dos compostos no primeiro *flash*. O *flash* 1, que opera a 45°C, tem como função separar DMSO rico em compostos residuais dos demais componentes. A corrente de DMSO segue para a coluna de destilação, nela é inserida uma corrente de nitrogênio – com a finalidade de gás de arraste – a uma temperatura de 100°C e pressão 1 bar, de modo a favorecer a destilação, obtendo como produto final o DMSO bruto com grau de pureza de 99,96%.

Os demais compostos seguem para o reator de Gibbs R102, onde NO é consumido formando  $\text{N}_2$  e  $\text{O}_2$ . Além da corrente de topo proveniente do primeiro *flash* o R102 é alimentado também por uma corrente de reciclo, com razão de Split de 0,5 vinda da base do *flash* 3. Os 0,5 remanescentes realimentam o primeiro reator. A corrente de saída do R102 é *flasheada* e alimenta o segundo reator de Gibbs (R103), onde também é adicionada uma corrente de base composta pela mistura equimolar de  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ , finalizando a terceira etapa de reação. A saída do R103 alimenta o *flash* 3, onde a corrente de topo é enviada para um purificador.

O purificador é responsável por remover dióxido de nitrogênio, antes jogado na atmosfera. Na corrente de purga do purificador sai parte do DMSO e  $\text{N}_2$  e quantidades menores dos demais componentes como  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ , NO,  $\text{N}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}_3$ , subprodutos de processamento. Para que essa separação ocorra em um curto prazo, separando DMSO dos demais dos componentes, uma certa quantidade de DMSO com elevado grau de pureza é injetado no purificador. A corrente de base deste retorna para o sistema como reciclo rica em  $\text{N}_2$  e  $\text{O}_2$ . Como citado anteriormente, parte dele é inserida também no primeiro reator, onde ocorrerá novamente as etapas de reação e separação, de modo que ao final obter-se DMSO bruto nas melhores condições possíveis e sem perdas significativas de produção.

## Conclusões

Os resultados da simulação da unidade de produção de dimetilsulfóxido (DMSO) mostrou desempenho compatível com dados da literatura.

A conversão de DMS em DMSO foi de 99,99% no primeiro reator. Além disso, ao final do processo alcançou-se um grau de pureza de 99,96% do dimetilsulfóxido (DMSO) bruto, atingindo os padrões comerciais.

Percebeu-se um potencial para melhorias no processo, cujo objetivo seria obter maiores fluxos molares, bem como elevar o grau de pureza para fins de comercialização de N<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>, produtos anteriormente vistos como resíduo de processamento.

## Referências

GOHEEN, David W; HEARON, William M; KAMLET, Jonas. (1960). Process for the Oxidation of Organic Sulfides. 2,925,442

FUKUI, Y; ABURAI, K; SAKAMOTO, K. (2002). Process for Producing Dimethyl Sulfoxide. 6,414,193 B1.

KIRK, R; OTHMER, D; KROSCWITZ, J; HOWE-GRANT, M. (1998). Encyclopedia of chemical technology. V. 23, p.112.

SMEDSLUND, T. (1952). Method for the production of dimethyl sulfoxide. 2,581,050

PICOLI, Tony; BARBOSA, Jéssica Sevilha; VARGAS, Gilberto D'Ávila; HÜBNER, Silvia de Oliveira; FISCHER, GEFERSON. TOXICIDADE E EFICIÊNCIA DO DIMETILSULFÓXIDO (DMSO) NO CONGELAMENTO DE CÉLULAS MADIN-DARBY BOVINE KIDNEY (MDBK). Science and Animal Health, v.3 n.2, p. 159-168, 2015

