

VI Jornada
PCI

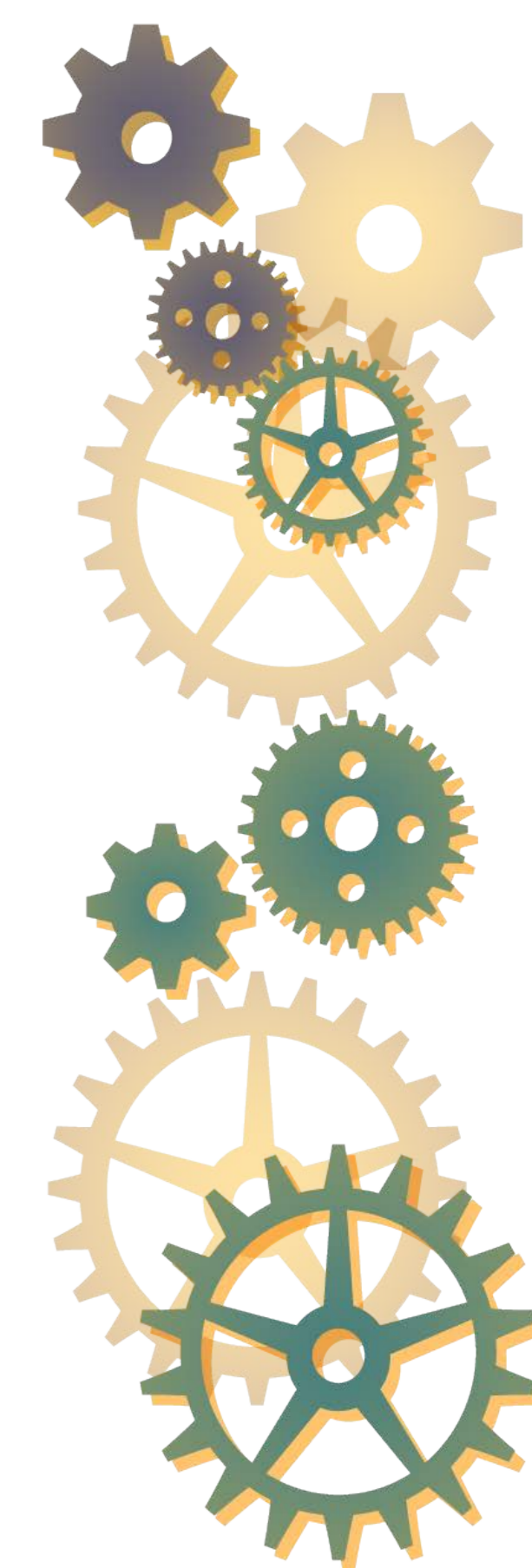
MODELAGEM QUÍMICA DA EXTRAÇÃO POR SOLVENTES MULTICOMPONENTE DE ELEMENTOS DE TERRAS-RARAS LEVES

CHEMICAL MODELING OF MULTICOMPONENT SOLVENT EXTRACTION OF LIGHT RARE EARTHS ELEMENTS

Luciana Amaral Seruff - Bolsista PCI, Engenheira Química

Ysrael Marrero Vera - Supervisor, Eng. Químico, D. Sc.

Coordenação de Processos Metalúrgicos e Ambientais - CETEM



Resumo | O presente trabalho consiste na segunda etapa de um estudo já em andamento no CETEM que tem meta o domínio da modelagem química como ferramenta de engenharia do processo de extração por solvente dos elementos de terras-raras. Esta etapa teve como objetivo a modelagem do processo de extração multicomponente de três ETRs (La, Pr e Nd), tanto em batelada como em regime contínuo, também utilizando o extratante P507. Para isso, desenvolveu-se um algoritmo matemático para a extração em batelada e outro algoritmo para a extração em regime contínuo. Os dados obtidos pelos dois algoritmos foram comparados aos dados experimentais. O modelo se mostrou adequado para a extração em batelada e promissor para a extração em regime contínuo.

Introdução

Recentemente, desenvolvemos, no CETEM, modelos matemáticos do processo de extração por solventes (SX) individual dos ETRs La, Pr e Nd com o extratante P507. Os coeficientes estequiométricos, assim como as constantes de equilíbrio da extração de cada ETR foram determinados neste estudo. A partir destes dados, deu-se início à modelagem da extração por solventes multicomponente dos três ETRs, no qual ocorre a separação de Lantânio do didímio (Praseodímio e Neodímio) (Seruff e Vera 2016). Nesta etapa, foram propostos dois modelos matemáticos, um para a extração por solventes em batelada e o outro para o regime contínuo em contracorrente, os quais foram validados a partir da comparação com resultados experimentais.

Objetivos

Desenvolver um modelo matemático a partir do qual seja possível determinar as concentrações das espécies químicas em equilíbrio do processo de SX da solução contendo os três elementos de terras-raras leves (La, Pr e Nd) em batelada e em regime contínuo, usando como extratante o 2-etil hexil fosfônico éster mono-2-etilhexil (P507).

Metodologia

O modelo proposto para o cálculo das concentrações de cada espécie química ao final de uma extração em batelada inclui as seguintes equações matemáticas: 1) O balanço de massa (BM) do extratante; 2) Os BMs dos três ETRs; 3) O BM do cloro; 4) O balanço de carga na fase aquosa; 5) As expressões das constantes de equilíbrio das reações de complexação entre M^{3+} e Cl^- ; 6) As expressões das constantes de equilíbrio das reações de extração; 7) A equação de Samson (Samson et al., 1999) para o cálculo dos coeficientes de atividade das espécies iônicas em solução. O procedimento de cálculo para o processo em regime contínuo segue o que mostra a Figura 1, com as devidas equações dos balanços de massa e carga correspondentes a cada estágio do processo em regime contínuo. O sistema de equações foi resolvido por meio de cálculo numérico.

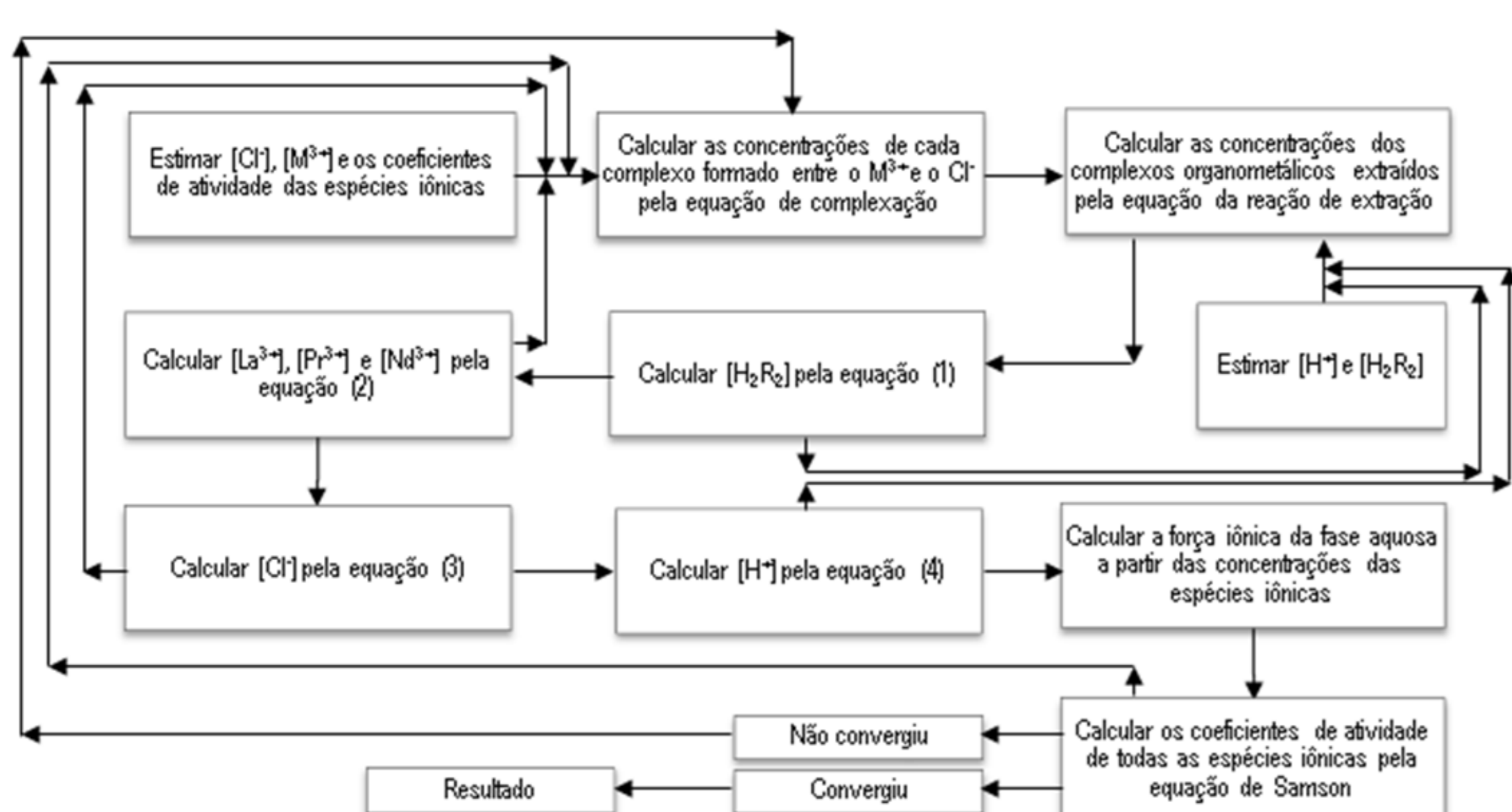


Figura 1: Algoritmo para o cálculo das concentrações no equilíbrio da SX dos ETRs.

Resultados e Discussão

Para comparação dos dados experimentais e modelados do processo em batelada, o coeficiente de distribuição D ($[ETR_{org}]/[ETR_{aq}]$) de cada elemento foi calculado para cada ensaio. Os três elementos foram representados satisfatoriamente pelo modelo matemático proposto. Os valores dos coeficientes angulares do gráfico de D_{exp} vs D_{mod} próximos de 1 indicam a boa concordância entre os dados experimentais e modelados (Figura 2). No regime contínuo os ensaios foram realizados em diferentes condições de concentração da alimentação e o P507 : 1) alimentação 40g/L e P507 35%; 2) alimentação 20g/L e P507 20% e 3) alimentação 13,3 g/L e P507 10%. O ensaio em que houve melhor concordância entre os resultados experimentais e modelados foi com a alimentação 2 x diluída (20 g/Le P507 20% (v/v)) (Figura 3).

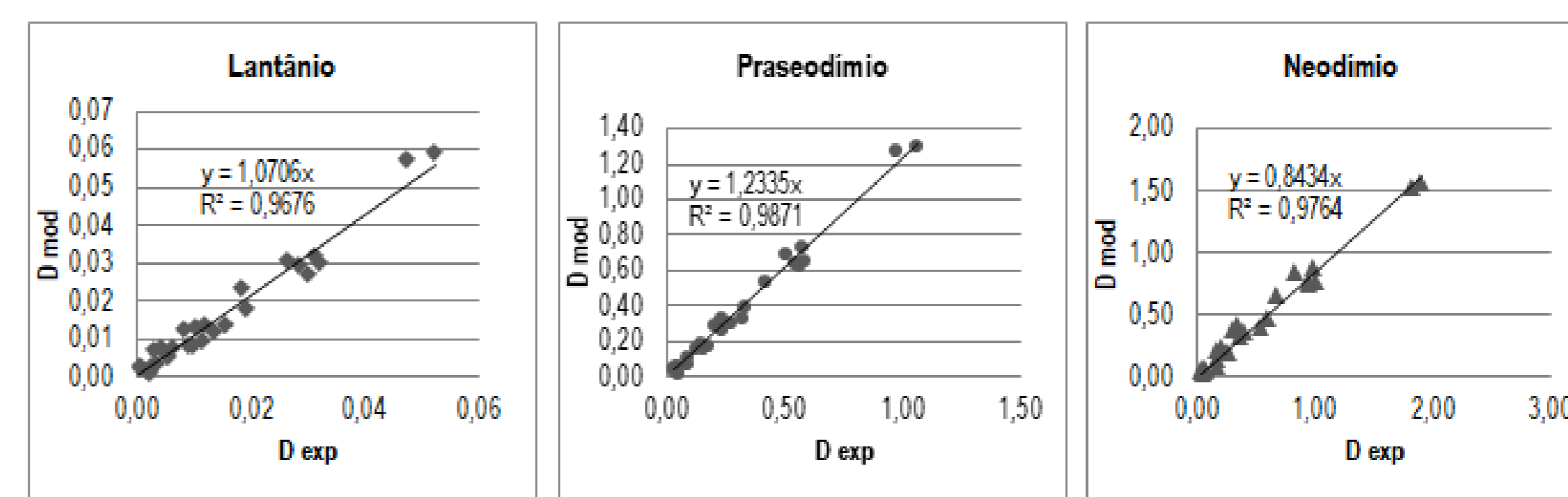


Figura 2: Comparação entre dados experimentais e modelados da SX em batelada.

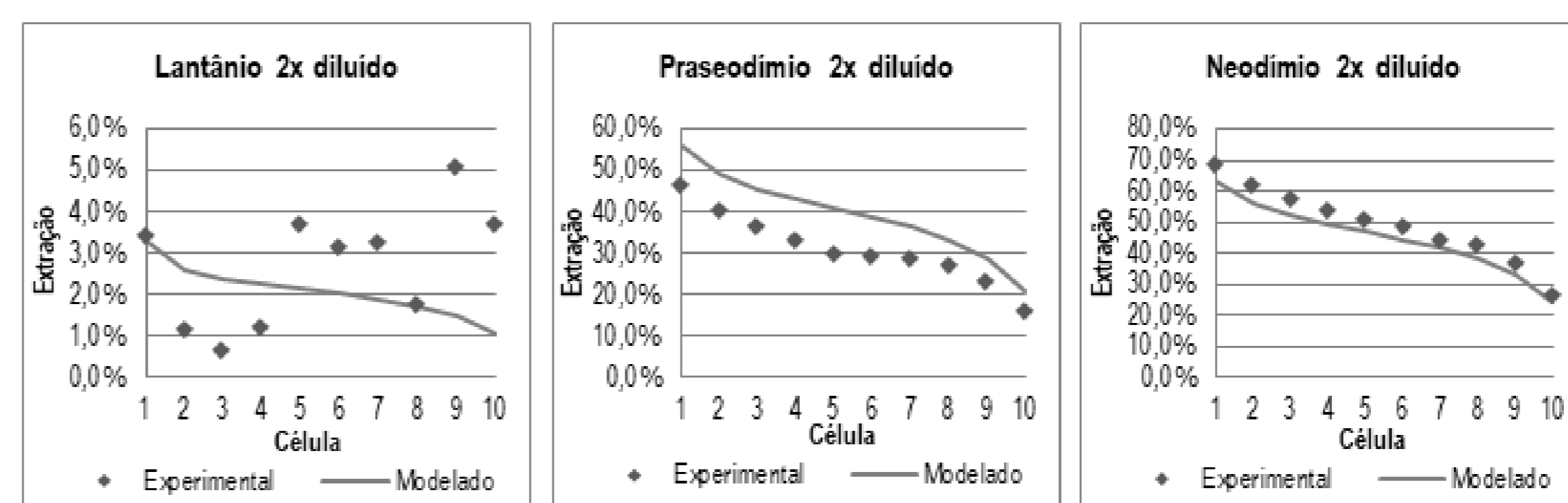


Figura 3: Comparação entre dados experimentais e modelados da SX em regime contínuo operando com alimentação aquosa diluída 2 vezes, pH 2,5 e concentração de P507 igual a 20% v/v.

Conclusão

Os algoritmos matemáticos para descrever os processos de extração por solvente multicomponente de La, Pr e Nd pelo P507, em batelada e em regime contínuo foram desenvolvidos com sucesso. O modelo da extração em batelada multicomponente descreveu satisfatoriamente os dados experimentais. Para a extração em regime em contínuo, o modelo se mostrou satisfatório quando se trabalhou com concentrações do licor e extratante intermediárias. Futuramente, realizaremos aprimoramentos ao modelo para melhorar os resultados nos pontos de trabalho mais extremos.

Referências

- SAMSON, E.; LEMAIRE, G.; MARCHAND, J.; BEAUDOIN, J.J. Modeling chemical activity effects in strong ionic solutions. *Computational Materials Science* v. 15, p. 285–294, 1999.
- SERUFF, L. A., VERA, Y. M. Modelagem termodinâmica da extração por solventes dos elementos de terras-raras leves. In: Jornada Do Programa De Capacitação Interna Do Cetem, 5. Rio de Janeiro. Anais. CETEM/MCTIC, 2016.