**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS**

**UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE TECNOLOGIA**

**CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

NOME COMPLETO DO DISCENTE

**TÍTULO DO TRABALHO**

Maceió

20XX

NOME COMPLETO DO DISCENTE

**TÍTULO DO TRABALHO**

Plano de Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador/a: Prof. Dr. Nome completo do/a orientador/a.

Coorientador/a: Prof. Msc. Nome completo do/a coorientador/a

Maceió

2017

RESUMO

**LISTA DE SÍMBOLOS (OPCIONAL)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Fração molar do componente  |  |
|  | Coeficiente de atividade do componente  |  |
|  | Parâmetro de energia o componente em relação a  |  |
|  | Parâmetro ajustável de em relação a  |  |
|  | Parâmetro empírico  |  |
|  | Constante universal dos gases  |  |
|  | Temperatura do sistema  |  |
|  | Parâmetros da substância pura  |  |
|  | Número de coordenação |  |
|  | Volume molecular relativo da espécie  |  |
|  | Área molecular relativa da espécie  |  |
|  | Área molecular relativa das moléculas de água e álcoois |  |
|  | Parâmetro de energia de em relação a  |  |
|  | Número de subgrupos do tipo na molécula da espécie  |  |
|  | Parâmetros do grupo molecular |  |
|  | Coeficiente de atividade de grupo do grupo na mistura |  |
|  | Coeficiente de atividade de grupo do grupo na substância pura nas mesmas condições |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

**SUMÁRIO**

[**1 INTRODUÇÃO 4**](#_Toc440536278)

[**2 OBJETIVOS 6**](#_Toc440536279)

[**2.1 Gerais 6**](#_Toc440536280)

[**2.2 Específicos 6**](#_Toc440536281)

[**3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 7**](#_Toc440536282)

[**3.1 Modelo NRTL 7**](#_Toc440536283)

[**3.2 Modelo UNIQUAC 8**](#_Toc440536284)

[**3.3 Modelo UNIFAC 9**](#_Toc440536288)

[**4 METODOLOGIA 11**](#_Toc440536289)

[**5 CRONOGRAMA DE ATIVIDADES 11**](#_Toc440536290)

[**6 RESULTADOS ESPERADOS 12**](#_Toc440536291)

**REFERÊNCIAS .....................................................................................................................13**

# INTRODUÇÃO

.

# OBJETIVOS

## Geral

## Específicos

# REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Várias espécies químicas quando misturadas em certa faixa de composição podem formar duas fases líquidas ao invés de uma. Tal fenômeno ocorre em função da estabilidade do estado bifásico ser maior do que a do estado monofásico; portanto, se as fases estão em equilíbrio termodinâmico, diz-se que o sistema está no equilíbrio líquido-líquido (ELL), o qual é de extrema importância em operações industriais (SMITH *et al.*, 2007).

Limitando o equilíbrio líquido-líquido à existência de somente duas fases líquidas, com um determinado número de componentes e coexistindo em pressões acima da curva dos pontos de bolha (sem a presença de fase vapor), tem-se que é possível a determinação da composição e da fração das espécies em cada uma das duas fases formadas para uma dada temperatura, pressão e composição global especificadas através do cálculo flash isotérmico líquido-líquido, o qual consiste em resolver simultaneamente as equações do ELL e de balanço material da mistura (ASSAEL *et al.*, 1996).

Entretanto, para a obtenção dessas composições de equilíbrio de uma dada mistura de espécies químicas, faz-se necessário a escolha e utilização de modelos termodinâmicos de coeficientes de atividade que buscam descrever o comportamento do equilíbrio de fases através do cálculo do coeficiente de atividade, tais como o NRTL, UNIQUAC e UNIFAC.

## Modelo NRTL

O modelo NRTL foi desenvolvido por Renon e Prausnitz (1969) em uma tentativa de superar as inadequações do modelo proposto pelas equações de Wilson em descrever o ELL, tornando-se, assim, um dos modelos mais utilizados para descrever (ASSAEL *et al.*, 1996).

Este modelo é aplicado em sistemas de miscibilidade parcial ou total e se baseia na energia livre de Gibbs em excesso e no conceito de composição local, o qual assevera que a composição macroscópica, no interior de uma solução líquida, não corresponde à composição microscópica, isto é, as moléculas dos dois componentes não se distribuem uniformemente na mistura líquida (SENA, 2014).

Em uma mistura multicomponente com compostos, a equação do NRTL para o coeficiente de atividade é dada pela Equação (1).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Em que e são representados, respectivamente, pelas Equações (2) e (3).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

No modelo NRTL existem três parâmetros considerados independentes da temperatura por interação binária: e que são referentes a energia; e o o qual é um parâmetro puramente empírico.

## Modelo UNIQUAC

As equações do modelo UNIQUAC possuem como base considerações semi-teóricas de problemas de misturas que seguem o conceito de composição local, reconhecendo, também, que a não idealidade das misturas líquidas possui contribuições não somente de interações específicas, mas também de diferenças existentes no tamanho e forma das moléculas (ASSAEL *et al.*, 1996).

 Segundo Smith *et al.* (2007), a equação UNIQUAC para o coeficiente de atividade para cada componente é formada por duas partes, sendo uma combinatória e outra residual. O termo combinatorial leva em conta o tamanho e a forma das moléculas, utilizando dados apenas dos componentes puros para seu cálculo; já a parte residual depende das forças intermoleculares e, no seu cálculo, existem parâmetros binários para cada par de moléculas.

Dessa forma, em uma mistura multicomponente com compostos, o coeficiente de atividade de uma espécie é dado pela Equação (4).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Os termos e são dados pelas Equações (5) e (6), respectivamente.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

E os parâmetros presentes nas expressões de coeficientes de atividade combinatorial e residual estão evidenciados nas Equações de (7) a (11), exceto a quantidade que possui valor fixo de 10.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

As quantidades , e são parâmetros das substâncias puras, já é determinado pelo volume da molécula e junto com são obtidos pela área da molécula. Na inexistência dos compostos água e álcool tem-se que .

## Modelo UNIFAC

O modelo UNIFAC é baseado nas equações UNIQUAC com todas as substâncias puras e parâmetros binários determinados de maneira empírica pelos métodos de grupo de contribuição (ASSAEL *et al.*, 1996).

No método UNIFAC, o termo combinatorial do coeficiente de atividade leva em conta não somente as diferenças nos tamanhos da molécula de acordo com o volume dos grupos, mas também as diferenças nas formas moleculares presentes nas áreas superficiais do grupo (LIU, 1981).

Portanto, de maneira análoga, em uma mistura multicomponente com compostos a equação para determinação do coeficiente de atividade é dada pela Equação (4).

O termo combinatorial da Equação (4) é utilizado diretamente do presente no modelo UNIQUAC, dado pela Equação (5), e considera a forma e tamanho das moléculas da mistura. Então, e são dados pelas Equações (12) e (13).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

Já a parte a parte residual do modelo UNIFAC considera as interações energéticas entre os grupos (Equação (14)).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

Os parâmetros necessários para a utilização do modelo UNIFAC são os volumes dos grupos, áreas superficiais do grupos e parâmetros de interações entre os mesmos (LIU, 1981).

# METODOLOGIA

# CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

A seguir, encontra-se o cronograma de atividades dimensionado para cinco meses, os quais serão destinados para a realização das atividades propostas na metodologia deste trabalho.

Tabela 1: Cronograma de atividades.

|  |  |
| --- | --- |
| **ATIVIDADE** | **MÊSES** |
| **FEV** | **MAR** | **ABRI** | **MAI** | **JUN** |
| **Atividade 1** | **X** | **X** | **X** | **X** | **X** |
| **Atividade 2** | **X** | **X** | **X** | **X** |  |
| **Atividade 3** | **X** | **X** | **X** |  |  |
| **Atividade 4** | **X** | **X** | **X** |  |  |
| **Atividade 5** |  | **X** | **X** |  |  |
| **Atividade 6** |  |  |  | **X** | **X** |
| **Atividade 7** |  |  |  | **X** | **X** |
| **Atividade 8** |  |  |  | **X** | **X** |

#

# RESULTADOS ESPERADOS

Ao fim deste trabalho, espera-se que os valores obtidos, através da utilização dos modelos de coeficiente de atividade NRTL, UNIQUAC e UNIFAC, para as composições de equilíbrio termodinâmico dos compostos presentes na mistura ternária bifásica, aproximem-se ao máximo dos valores experimentais presentes na literatura, validando, assim, o modelo desenvolvido.

Além disso, conjectura-se que o modelo criado possibilite a identificação do melhor modelo de coeficiente de atividade para uma determinada mistura utilizada, permitindo, então, uma análise crítica da razão de um dado modelo se adequar melhor a um determinado grupo de compostos.

**REFERÊNCIAS**

ASSAEL, M. J.; TRUSLER, J. P. M.; TSOLAKIS, T. F. **Thermophysical properties of fluids: an introduction to their prediction.** 1ª ed., Imperial College Press. Londres, 1996.

HACKBART, L. M. **Equilíbrio líquido-líquido de sistemas contendo fenol-água-solvente: obtenção e modelagem termodinâmica.** Dissertação de mestrado em engenharia de processos químicos e térmicos, Universidade Federal do Paraná. Paraná, 2007.

KIM, H. **Evaluation of UNIFAC group interaction parameters using properties based on quantum mechanical calculations.** Master of Science in Chemical Engineering, New Jersey Institute of Technology. Newark, 2005.

LIU, C. K. **Group-contribution methods in estimating liquid-liquid distribution coefficients.** Master of Science in Chemical Engineering, Texas Tech University. Texas, 1981.

ROMERO, L. A. F. **Equilíbrio líquido-líquido na produção de biodiesel etílico.** Tese de Doutorado em Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2011.

SENA, S. R. C. **Equilíbrio líquido-líquido para o sistema biodiesel de óleo de semente de melão (*Cucumis melo l.*) + metanol + glicerina.** Dissertação de Mestrado em Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, 2014.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 7ª ed., LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora. Rio de Janeiro, 2007.