

## Equilíbrio Líquida-Vapor da Mistura Binária n-Hexano/Etanol: Experimentos e Modelagem Termodinâmica

Julian F. R. V Silveira<sup>1</sup>, Eduardo Cassel<sup>1</sup> (orientador)

<sup>1</sup>*Faculdade de Engenharia, PUCRS*

### Resumo

A modelagem termodinâmica do equilíbrio de fases é um passo importante na avaliação, projeto e otimização de diversas operações unitárias como a destilação. A curva de equilíbrio informa se a separação entre as substâncias é viável e é a base para os métodos de cálculo por estágios de separação como o Método de McCabe-Thiele. Os modelos termodinâmicos que representam o comportamento das fases líquida e vapor em equilíbrio, equações de estado e modelos de coeficiente de atividade, são dependentes de dados experimentais, pois os mesmos são usados na estimação de parâmetros destes modelos. Logo, neste estudo foram obtidos dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor pelo método de circulação no ebuliômetro de Fischer<sup>®</sup>. Prepararam-se soluções dos componentes n-hexano(1) e etanol(2) com frações molares diferentes a fim de se montar a curva de equilíbrio, variando a concentração de  $x(1) = 0,0$  até  $x(1) = 1,0$ . Determinou-se a temperatura de equilíbrio, analisaram-se composições das fases líquida e vapor por cromatografia gasosa acoplada a um detector de ionização de chama e mediu-se a pressão atmosférica com um barômetro. De posse dos dados experimentais, partiu-se para a modelagem matemática, que foi realizada através de um cálculo de fugacidade  $\phi$ - $\gamma$ , usando a Equação de Estado de Peng-Robinson com o termo atrativo de Aznar e regra de mistura van der Waals 1 para representar a fase vapor ( $\phi$ ) e os modelos de coeficiente de atividade NRTL e UNIQUAC para representar a fase líquida ( $\gamma$ ). O ajuste dos parâmetros dos respectivos modelos foi realizado no software MATLAB<sup>®</sup>, um software que permite o desenvolvimento de programas genéricos onde o usuário entra com os dados e uma rotina pré-estabelecida de cálculo. Os modelos selecionados representaram muito bem os dados experimentais.