



## Desenvolvimento de uma equação de estado incluindo efeitos de associação para álcoois

*Thômas Augusto Stempkowski Menegazzo, Adolfo Puime Pires*

Álcoois são compostos orgânicos usados em diversos processos industriais, seja como combustível, solvente orgânico, componente em fluidos hidráulicos, ou para a síntese de compostos orgânicos. Para a otimização dos processos industriais envolvendo álcoois, é essencial calcular precisamente suas propriedades termodinâmicas. Uma característica importante desta classe de produtos orgânicos é a formação de pontes de hidrogênio entre suas moléculas, a auto-associação. Este comportamento não é modelado adequadamente pelas equações de estado cúbicas comumente utilizadas em cálculos de equilíbrio líquido-vapor. Neste trabalho utilizamos a ideia de dividir o fator de compressibilidade em uma parte física e uma química, e comparamos os resultados desta nova equação e os da equação de estado de Peng-Robinson com dados experimentais para álcoois de metanol até decanol. Os resultados encontrados com a equação proposta são superiores aos obtidos com a equação de estado cúbica clássica.

Palavras-chave:

Equações de estado, Álcoois, Otimização de parâmetros.

Instituição de fomento: CNPq