

# Correlação de dados de equilíbrio líquido-vapor de aminas em misturas com água e hidrocarbonetos com o modelo F-SAC

Nicholas C. Oliveira e Rafael de P. Soares

Laboratório Virtual de Predição de Propriedades, Departamento de Engenharia Química, UFRGS  
[ncamatti; rafael]@enq.ufrgs.br



## INTRODUÇÃO

O modelo de coeficiente de atividade F-SAC<sup>1</sup>, o qual é fundamentado no método de contribuição de grupos (MCG), foi parametrizado a partir de dados de equilíbrio líquido-vapor (ELV) para aminas primárias, secundárias e aromáticas. Os MCG consideram que

uma molécula é constituída por um conjunto de grupos funcionais, dessa forma grupos para aminas foram propostos. As misturas consideradas contêm água e hidrocarbonetos, de forma a replicar aplicações de captura de CO<sub>2</sub><sup>2</sup> e prevenção de corrosão ácida<sup>3</sup>.

## METODOLOGIA

Grupos Funcionais (Wu e Sandler <sup>4</sup> ):	CH <sub>n</sub> NH <sub>2</sub> , CH <sub>n</sub> NHCH <sub>m</sub> , CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> NHCH <sub>3</sub> , ACNH <sub>2</sub>
Parâmetros estimados:	(Q <sub>k</sub> <sup>+</sup> , Q <sub>k</sub> <sup>-</sup> , σ <sub>k</sub> <sup>+</sup> ), Q <sub>k</sub> , E <sub>m,n</sub> <sup>HB</sup>
Algoritmo de minimização:	Nelder e Mead <sup>5</sup>
Estimativa inicial:	COSMO <sup>6</sup>

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Obteve-se resultado superior à resposta do modelo UNIFAC (Do)<sup>7</sup> ao mesmo conjunto de dados. O modelo F-SAC foi capaz de descrever o ELV de alcanolaminas, componentes até então problemáticos para o UNIFAC (Do) por conterem múltiplos grupos funcionais diferentes na mesma molécula. Predições de entalpia de excesso confirmam que o modelo F-SAC correlaciona corretamente a influência da temperatura sobre o equilíbrio de fases.

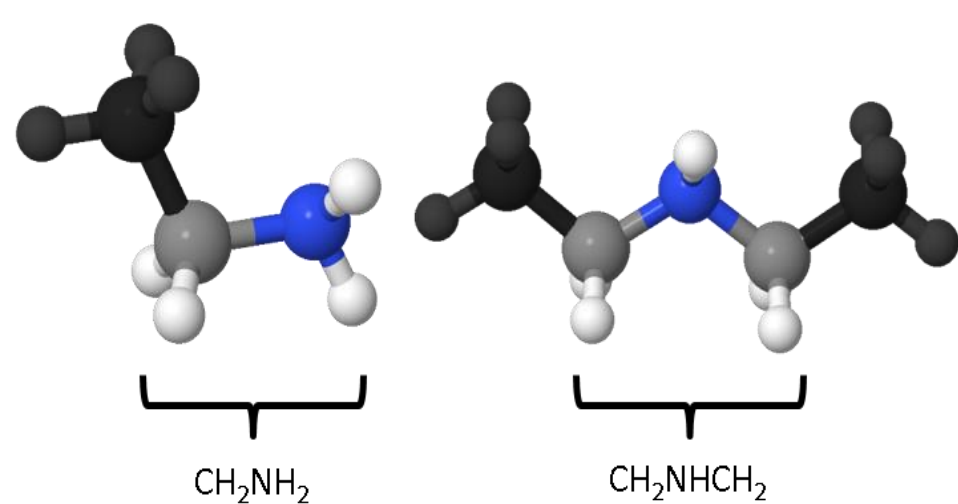


Figura 1. Grupos funcionais de aminas primárias e secundárias.

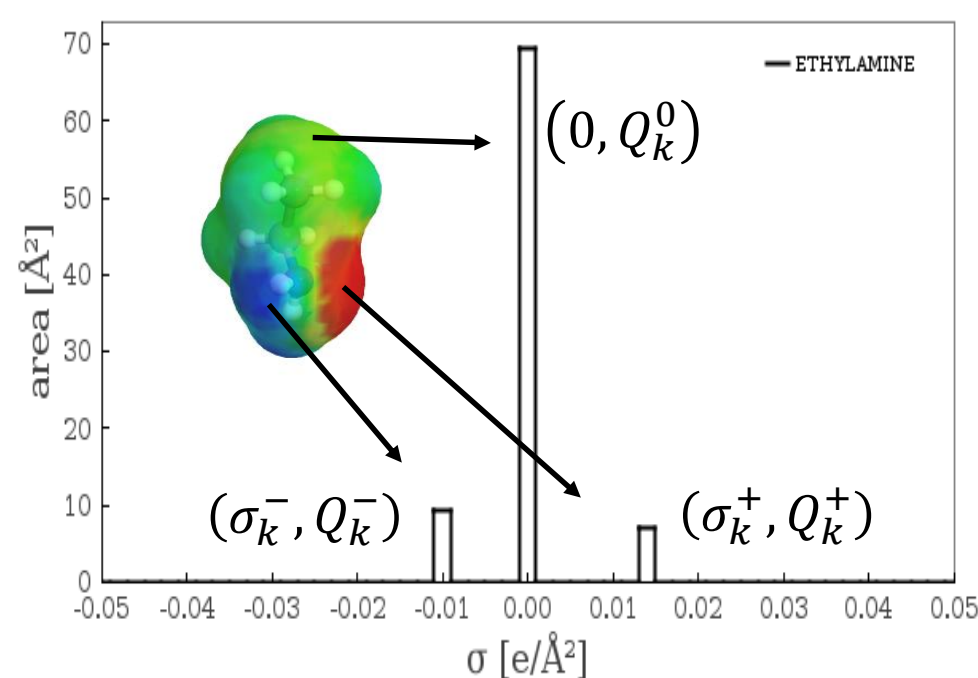


Figura 2. Parâmetros eletrostáticos e superfície COSMO da etil amina.

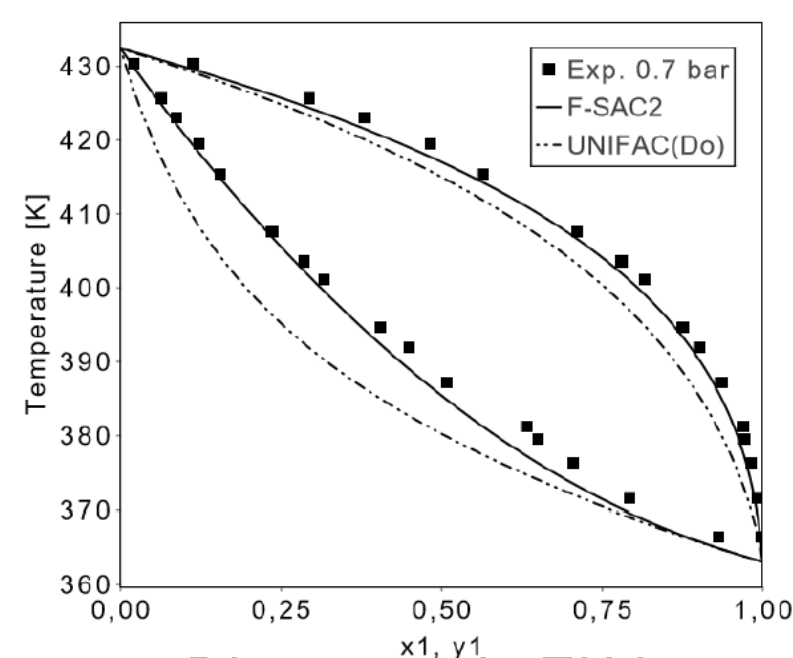


Figura 3. Diagrama de ELV para a mistura monoetanolamina/água.

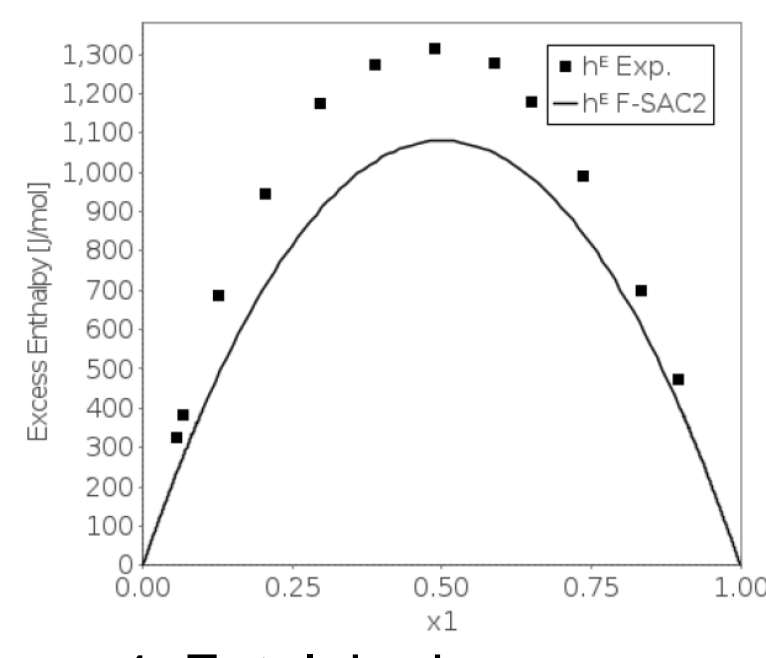


Figura 4. Entalpia de excesso para a mistura n-propil amina/n-hexano a 303 K.

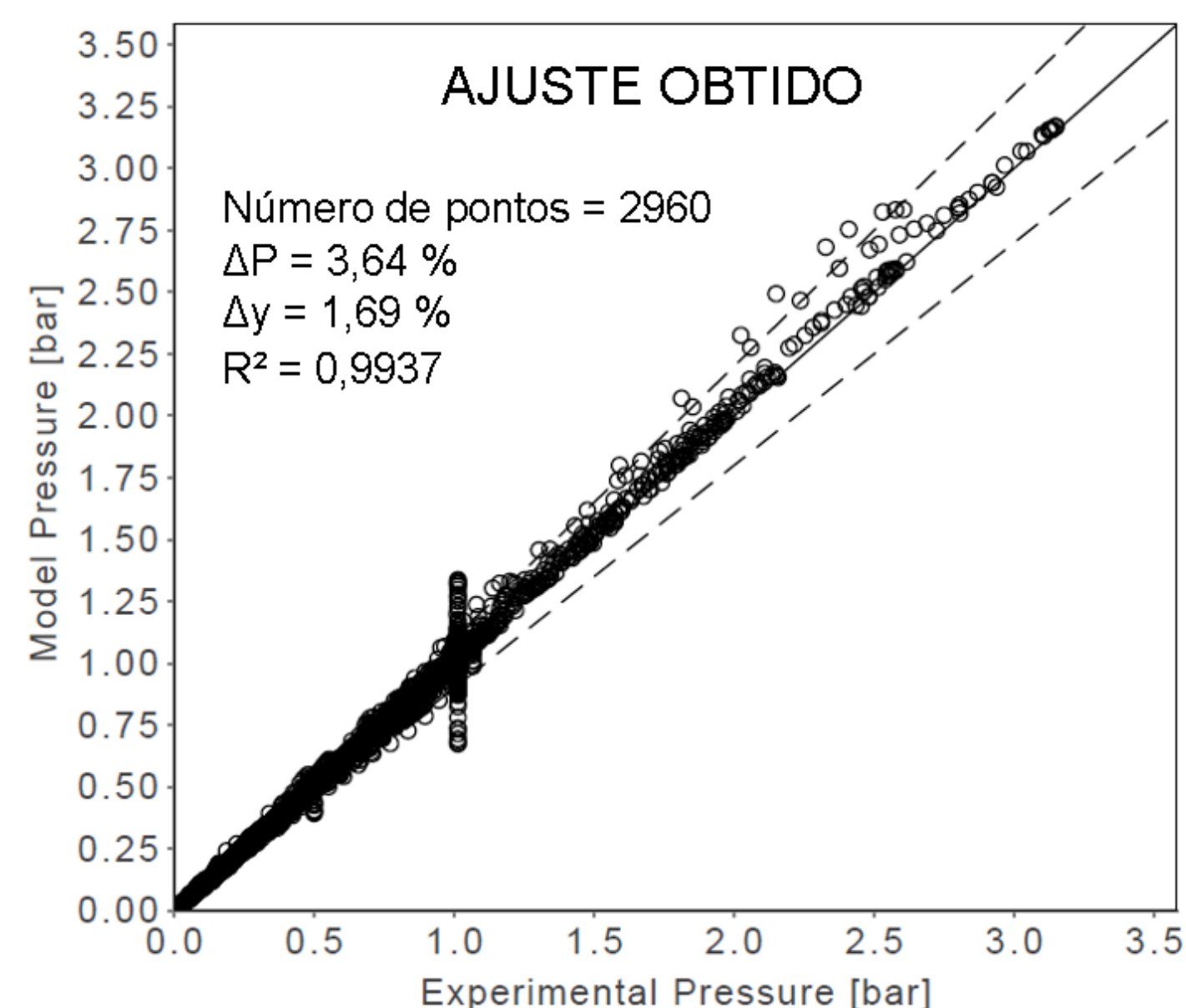


Figura 5. Diagrama experimental vs. modelo para o modelo F-SAC.

## CONCLUSÕES

Nesse trabalho o modelo F-SAC foi parametrizado de forma a correlacionar o ELV de aminas em água e hidrocarbonetos. Os resultados obtidos confirmam o potencial de modelos baseados na teoria COSMO de apresentar resultados semelhantes ao modelo UNIFAC (Do), mesmo sem parâmetros binários.

## REFERÊNCIAS

- [1] Soares, R.D.P.; Gerber, R.P., *Ind. & Eng. Chemistry Res.*, **2013**, 52(32), p.11159-11171.
- [2] You, J.K.; Park, H.; Yang, S.H.; Hong, W.H.; Shin, W.; Kang, J.K.; Yi, K.B.; Kim, J.N. *J. Phys. Chem. B*, **2008**, 112(14), p.4323-4328.
- [3] Valenzuela, D.P.; Dewan, A.K. *Fluid Phase Equilib.*, **1999**, 158, p.829-834.
- [4] Wu, H.S.; Sandler, S.I. *Ind. & Eng. Chemistry Res.*, **1991**, 30(5), p.881-889.
- [5] Nelder, J.A.; Mead, R. *The Computer J.*, **1965**, 7(4), p.308-313.
- [6] Ferrarini, F.; Flôres, G.B.; Muniz, A.R.; Soares, R.D.P. *AIChE J.*, **2018**, 64, p.3443-3455.
- [7] Weidlich, U.; Gmehling, J. *Ind. & Eng. Chemistry Res.*, **1987**, 26(7), p.1372-1381.