

Predição do volume parcial molar de soluções líquidas binárias a partir do volume molar em excesso utilizando o modelo Prigogine-Flory-Patterson

Alessandro Cazonatto Galvão¹, Andreia Machado da Luz², Leticia Gema Franzosi³

Palavras-chave: volume parcial molar, Prigogine-Flory-Patterson, volume em excesso

O estudo de grandezas termodinâmicas de soluções líquidas binárias fornecem informações importantes sobre a interação molecular dos componentes envolvidos na solução. Estes estudos são cruciais no desenvolvimento de teorias de soluções e no teste de modelos matemáticos. Atenção especial é dada ao volume parcial molar, pois esta grandeza informa a real contribuição de cada componente no volume total de uma solução. Na realização do trabalho foi desenvolvida uma modelagem matemática em *software* MatLab, a partir de dados de volume molar em excesso existentes na literatura, para a predição do volume parcial molar de soluções formadas por tolueno + *n*-alcanos a 298,15 K. Os dados de volume molar em excesso foram correlacionados pela equação de Redlich-Kister e com os parâmetros gerados foi determinado valores para o volume parcial molar. O modelo Prigogine-Flory-Patterson (PFP) foi utilizado para correlacionar os dados de volume molar em excesso gerando um único parâmetro ajustável. As equações do modelo PFP foram submetidas a um procedimento de derivação parcial para fornecer o equacionamento do modelo para volume parcial molar. Com o parâmetro obtido pelo modelo PFP para volume molar em excesso foram calculados os valores de volume parcial molar e os resultados foram comparados com os resultados gerados pela equação de Redlich-Kister. Foi observado que com o procedimento aplicado, o modelo PFP foi capaz de gerar bons resultados de volume parcial molar para todas as soluções líquidas binárias avaliadas.

¹Orientador, Professor do Departamento de Engenharia de Alimentos do CEO - UDESC - alessandro.galvao@udesc.br

²Acadêmica do Curso de Engenharia de Alimentos, bolsista de iniciação científica PROIP/UDESC

³Acadêmica do Curso de Engenharia de Alimentos do CEO – UDESC