



## Modelagem termodinâmica do equilíbrio líquido-vapor em pressões elevadas de misturas binárias com dióxido de carbono

Paulo Henrique Konat Gandolfi, Eduardo Cassel (orientador)

Laboratório de Operações Unitárias, Faculdade de Engenharia, PUCRS.

### Resumo

Recentes estudos sobre a extração supercrítica de extratos voláteis da espécie *Illicium verum* (anis-estrelado) mostram que aproximadamente 86% dos seus óleos essenciais são compostos por uma substância majoritária, o anetol, que é utilizado na indústria de cosméticos devido às suas propriedades antioxidantes. Logo, o projeto e o dimensionamento do processo de extração requerem conhecimento sobre a solubilidade de soluto em solvente no estado supercrítico, tanto através de dados experimentais, como em relação ao uso de modelos termodinâmicos capazes de representar e prever o equilíbrio de fases de misturas a altas pressões. A determinação dos dados de equilíbrio líquido-vapor da mistura óleo essencial de anis e CO<sub>2</sub> foi realizada em uma célula de volume variável. O modelo termodinâmico escolhido para representar a solubilidade do extrato em CO<sub>2</sub> foi a Equação Peng-Robinson com as seguintes regras de mistura: van der Waals 1, van der Waals 2 e Mathias-Klotz-Prausnitz. O objetivo do trabalho foi estimar os parâmetros binários das regras de mistura a partir dos dados experimentais de equilíbrio de fases. Os experimentos foram realizados na temperatura de 308,15K e na seguinte faixa de pressão: 1,0 e 6,0 MPa. A etapa de cálculo consistiu em programar computacionalmente o modelo termodinâmico, utilizando o software de programação Matlab R2012b. De posse deste, foram estimados os parâmetros de interação binária e, posteriormente, utilizados os mesmos na previsão da solubilidade do extrato volátil de anis estrelado em CO<sub>2</sub>. Os resultados obtidos permitiram afirmar que a Equação de Peng-Robinson, para as 03 regras de mistura utilizadas, predizem adequadamente os dados experimentais.

**Palavras-chave:** equilíbrio de fases; CO<sub>2</sub>, EOS Peng-Robinson, anetol.