

T860

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA CÁLCULO DE EQUILÍBRIO QUÍMICO ATRAVÉS DA MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA LIVRE DE GIBBS

Michel Angelis Miqulin (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Maria Alvina Krähenbühl (Orientadora), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

Dado o sistema multicomponente formado pelos ácidos acrílico, láctico, acético, propanóico e água deseja-se verificar sob via termodinâmica as condições de alimentação dos componentes e de pressão e temperatura do sistema que poderiam maximizar a produção do ácido acrílico. Para que o sistema alcance o estado de equilíbrio termodinâmico todas as reações espontâneas do sistema devem ocorrer na direção na qual há um aumento na entropia total do universo. Quando a composição do sistema alcança um ponto onde a entropia total para o sistema e para as redondezas é máxima essas composições permanecem constantes já que o movimento em qualquer direção na composição envolve uma diminuição de entropia e, desta maneira, não pode ocorrer espontaneamente sem violar a Segunda lei da termodinâmica. Assim esse estado final no qual cessam todas as reações espontâneas do sistema é o estado de equilíbrio termodinâmico. É neste estado que se deseja verificar se é possível uma maximização da fração molar do ácido acrílico no sistema. Desenvolveu-se um software para calcular o equilíbrio termodinâmico do sistema e verificar as condições que minimizam a energia livre de Gibbs total do meio reacional.

Minimização - Energia livre de Gibbs - Software