



PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE H₂O e CO₂ (PUROS E MISTURAS): COMPARAÇÃO ENTRE DADOS EXPERIMENTAIS E ESTIMATIVAS OBTIDAS POR EQUAÇÕES ANALÍTICAS E SIMULAÇÃO MOLECULAR

Caio Vinícius Zecchin Cipro, Dr. Márcio L. L. Paredes (Co-Orientador) e Profa. Dra. Maria Ângela A. Meireles (Orientadora), Faculdade de Engenharia de Alimentos - FEA, UNICAMP

Propriedades termodinâmicas do dióxido de carbono, da água e de suas misturas são utilizadas no dimensionamento de equipamentos e na análise de viabilidade de processos que envolvam essas substâncias (extração supercrítica, por exemplo). Tendo em vista a importância desses dados, foi realizada uma revisão sobre diversas propriedades termodinâmicas das substâncias puras (densidade, entalpia, entropia, capacidade calorífica, segundo coeficiente do virial, coeficiente Joule-Thomson) e da mistura (envelope de fases), comparando dados experimentais com as estimativas obtidas com modelos termodinâmicos (equações analíticas) e Simulação Molecular. São utilizados modelos empíricos, o modelo de Peng-Robinson (e modificações posteriores) e modelos baseados nos potenciais de interação de Lennard-Jones e Poço-Quadrado. Os dados de simulação utilizados nessa comparação foram obtidos por Dinâmica Molecular e pelo método de Monte Carlo, sendo utilizados diferentes propostas para o cálculo das interações intermoleculares. Através do estudo realizado pode-se avaliar o desempenho dos modelos termodinâmicos estudados, indicando-se quais modelos podem prever, com a desejada acurácia, propriedades termodinâmicas do sistema (e em que faixa de temperatura, pressão e composição).

Água - Dióxido de Carbono - Misturas