

Cecília Y. C. S. Kimura, Natália D.D. Carareto, Mariana C. Costa, Antonio J.A. Meirelles*

*tomze@fea.unicamp.br

Departamento de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas, SP, Brazil.

Palavras-chaves: Ponto de fulgor, ésteres etílicos, etanol, equilíbrio vapor-líquido.

INTRODUÇÃO

O ponto de fulgor é uma medida importante para avaliar os riscos de explosão de líquidos, e sua temperatura de ignição, combustão e armazenamento. Neste trabalho objetivou-se medir o ponto de fulgor de uma lista de ésteres etílicos, que são componentes majoritários dos biodiesel provenientes de óleos vegetais, e também de misturas binárias destes ésteres com etanol.

MÉTODOS

O ponto de fulgor das amostras foi obtido, em triplicata, no analisador de ponto de fulgor automático Pensky Martens, modelo FP93 5G2 (ISL, França). O equipamento foi operado segundo as normas ASTM D93 A.

Os modelos termodinâmicos Van Laar, Margules três-sufixos, NRTL e UNIFAC foram utilizados para ajustar os dados experimentais obtidos. As pressões de vapor para os ésteres foram calculadas através do modelo preditivo por contribuição de grupos elaborado por CERIANI e MEIRELLES, 2004.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A relação entre a composição da fase vapor e o limite de flamabilidade de cada um dos compostos, LFL_1 e LFL_2 , pode ser descrita pela regra de Le Chatelier (1891):

$$1 = \sum \frac{y_i}{LFL_i} = \frac{y_1}{LFL_1} + \frac{y_2}{LFL_2} \quad \longrightarrow \quad LFL_i = \frac{P_{i,fp}^{sat}}{P}$$

Os pontos de fulgor dos sistemas de ésteres etílicos e etanol foram medidos para diferentes composições dos sistemas e os resultados encontram-se representados nas Figuras 1 e 2, para os sistemas caproato de etila e palmitato de etila, respectivamente. Os demais sistemas apresentaram resultados semelhantes. A Tabela 1 apresenta os desvios entre os dados experimentais e os modelos termodinâmicos. O grande desvio observado pelo modelo termodinâmico UNIFAC se deve ao fato deste ser um modelo preditivo e não baseado em parâmetros experimentais como nos demais modelos. O que sugere que este não seja um bom modelo para os sistemas estudados.

Tabela 1 – Desvios absolutos entre os resultados experimental e preditivos

Sistema Modelo	Desvio Absoluto (K)			
	Van Laar	Margules 3-sufixos	NRTL	UNIFAC
EtOH + Caproato de etila	0,3	0,2	0,3	13,3
EtOH + Laurato de etila	0,6	2	2	26,43
EtOH + Miristato de etila	0,5	0,6	0,5	26,71
EtOH + Palmitato de etila	3	3	4	38,73
EtOH + Oleato de etila	0,4	0,8	2	32,27

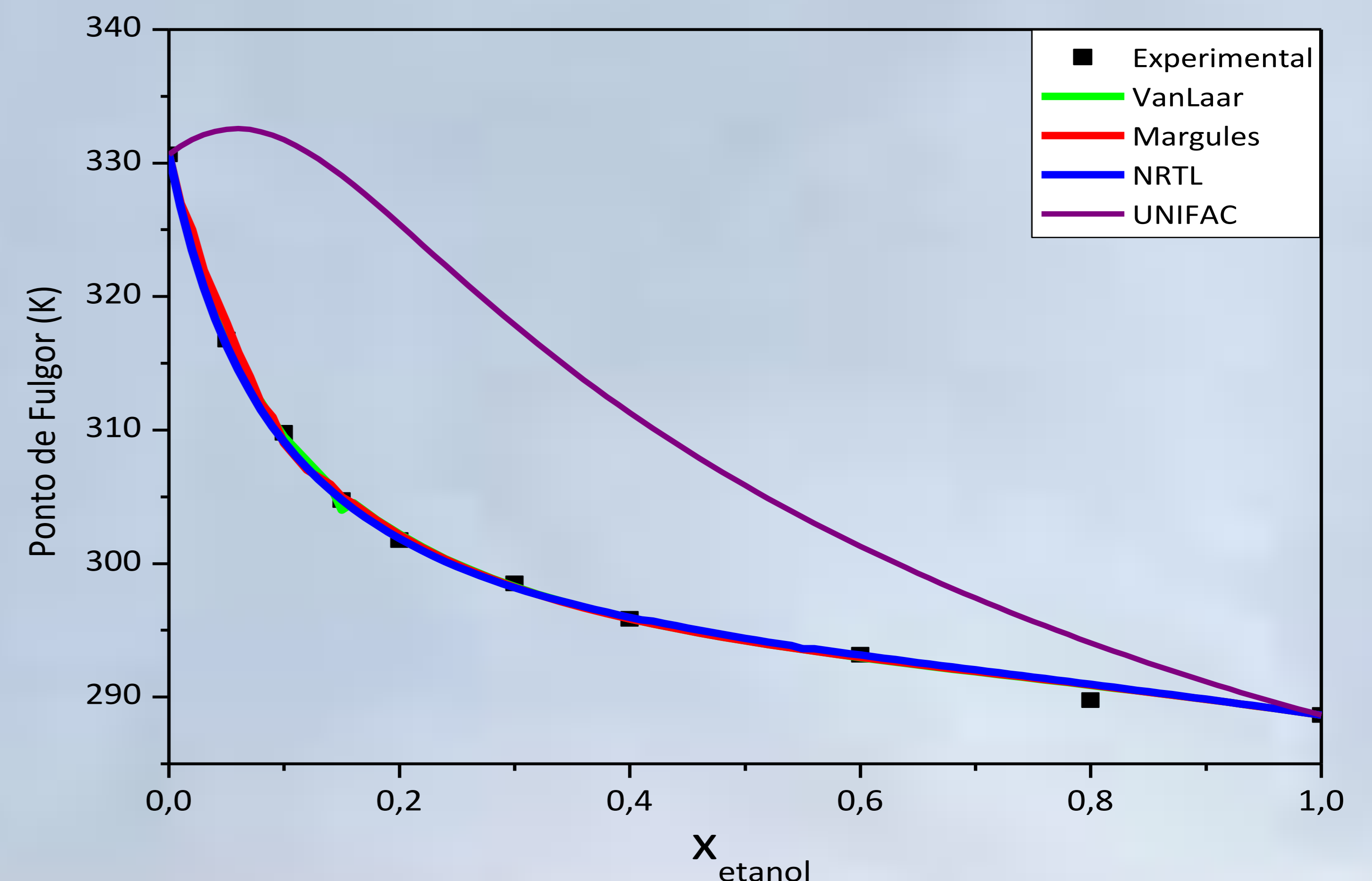


Figura 1 – Comparação das curvas experimental e modelagem termodinâmica de PF para o sistema etanol (1) + caproato de etila (2).

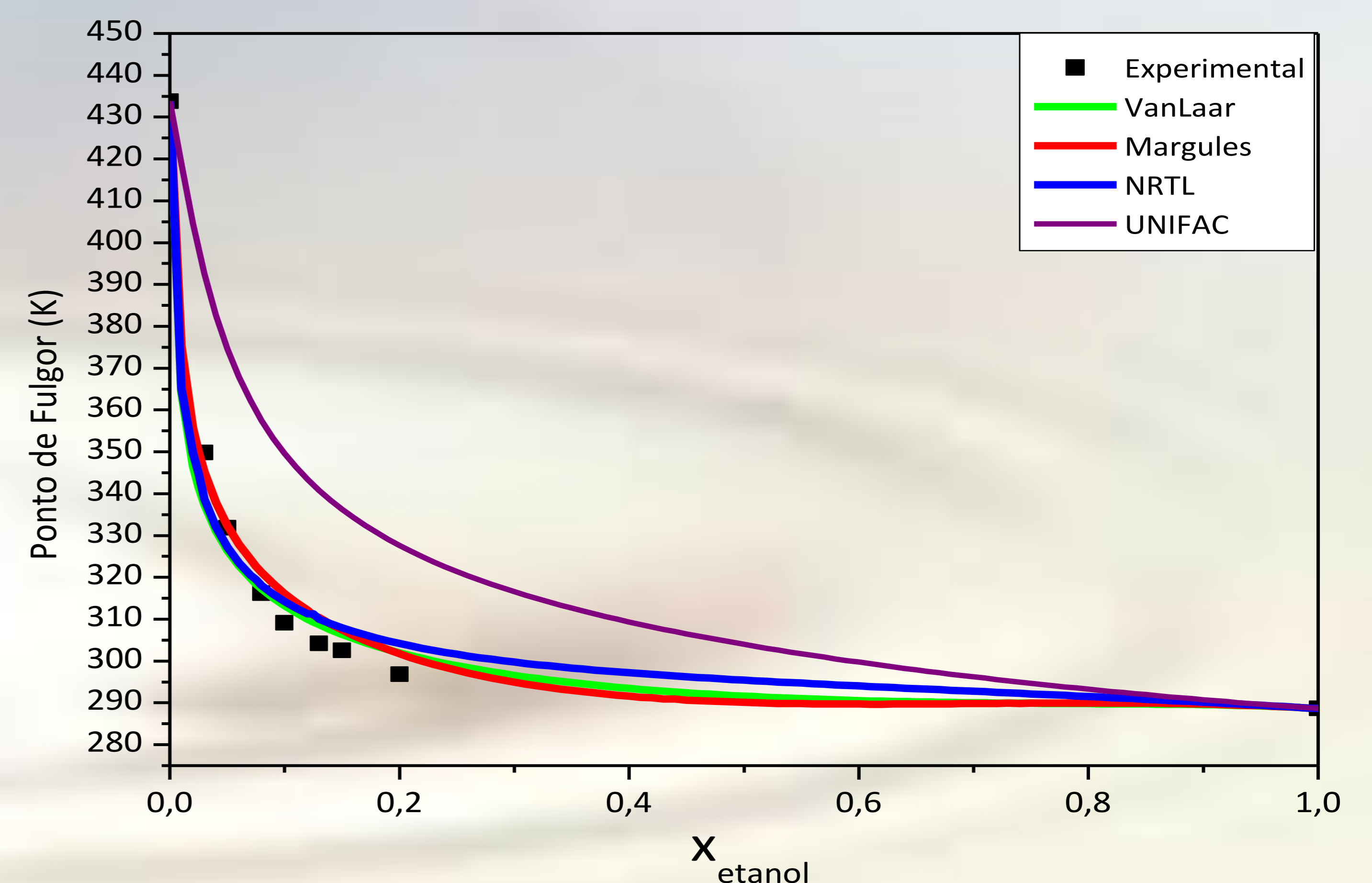


Figura 2 – Comparação das curvas experimental e modelagem termodinâmica de PF para o sistema etanol (1) + palmitato de etila (2).

CONCLUSÕES

O ajuste dos dados experimentais aos modelos termodinâmicos foram muito bons, enquanto o modelo preditivo UNIFAC não se mostrou muito coerente com os resultados experimentais.

Referências:

NIST (National Institute of Standards and Technology). Website: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
R. CERIANI and A.J.A. Meirelles. Predicting vapor-liquid equilibria of fatty systems. Fluid Phase Equilibria 215 (2004) 227-236.