

## ESTUDO EXPERIMENTAL, MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLUBILIDADE DE COMPOSTOS DE INTERESSE PARA A TRANSFORMAÇÃO DA BIOMASSA

Fernanda Sebem Donatti<sup>1</sup>, Dionatan Felipe Hackenhaar Coleti<sup>1</sup>, Layze Vitoria Barbosa<sup>2</sup>, João Victor Thomas Feyh<sup>2</sup>, Alessandro Cazonatto Galvão<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PROBIC/UDESC

<sup>2</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PIVIC/UDESC

<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Engenharia de Alimento e Engenharia Química – Udesc Oeste – [Alessandro.galvao@udesc.br](mailto:Alessandro.galvao@udesc.br)

A cristalização é um procedimento recorrente na indústria química, farmacêutica e alimentícia. É visto na fabricação de sulfato de sódio e de amônia para fertilizantes, na produção de ácido acetilsalicílico, e também nas produções de sorvete, sal de cozinha e açúcar. Caracteriza-se pela formação de cristais sólidos a partir de uma mistura líquida, isto é, uma tecnologia de separação. Os cristais formam-se somente em uma solução supersaturada, quando a concentração de soluto presente na mistura é máxima, associado ao repouso da mistura a fim de atingir o equilíbrio da fase. Existem diversas técnicas de atingir um novo estado de equilíbrio químico, dentre as mais indicadas está a adição de um antissolvente.

O modelo Pitzer é um dos métodos de predição da solubilidade de sistemas contendo um ou mais sais em apenas um único solvente, geralmente água. Para ampliar sua capacidade, o modelo Pitzer foi modificado para prever propriedades termodinâmicas de soluções eletrolíticas em sistemas com multicomponentes, levando em conta a existência de interações de curto e longo prazo.

O objetivo desse trabalho é aplicar o modelo de Pitzer modificado para descrever o equilíbrio de *KCl*, *NaCl*, *NH<sub>4</sub>Cl* em misturas com água e metanol, comparando resultados obtidos no experimento com os dados calculados.

As soluções foram preparadas usando metanol e água duplamente destilada sem qualquer purificação adicional. O experimento foi conduzido em células de vidro encamisadas acopladas a um banho termostático Tecnal (modelo Te-2005 precisão de  $\pm 1K$ ) para garantir a condição isotérmica. Os compostos sólidos e líquidos foram adicionados dentro da célula de equilíbrio. As misturas foram agitadas ao longo de 3 horas para homogeneização a mistura. Após isso as misturas foram repousadas por 5 horas, garantindo o equilíbrio da fase. Com três amostras retiradas da fase líquida, em uma balança analítica Ohaus (modelo PA214CP) com precisão de  $\pm 0,1$  mg, para a determinação da solubilidade pelo método gravimétrico, escritas em fração molar. Os ensaios foram conduzidos com a pressão atmosférica e as temperaturas de 15 °C, 25 °C, 35 °C, 45 °C e 55 °C.

Inicialmente, as solubilidades foram expressadas por fração molar do cloreto de sódio, cloreto de potássio e cloreto de amônia em água, em um ensaio de sólido-líquido. Os valores de solubilidade mostram o desvio entre 0,10% e 0,31% em *NaCl*, entre 0,12% e 1,31% em *KCl* e entre 0,19% e 1,74% em *NH<sub>4</sub>Cl*. Além disso as solubilidades de cloreto de sódio, cloreto de potássio e cloreto de amônia em metanol, obteve-se desvios de 1,7% da solubilidade de *NaCl* e 3,1% da solubilidade em *KCl*.

Em geral, a solubilidade do *KCl*, *NaCl*, *NH<sub>4</sub>Cl* em solução formada por água e metanol apresentou um comportamento diretamente proporcional com a temperatura, isto é, aumentou a medida em que a temperatura fora incrementada.

E em metanol, com o aumento de temperatura a solubilidade em *KCl* e *NH<sub>4</sub>Cl* aumentou, e a solubilidade de *NaCl* diminui nessa mesma situação. O comportamento da solubilidade de *NaCl* é explicado em consequência do efeito de associação. A mistura de *NH<sub>4</sub>Cl* apresenta a maior solubilidade e *KCl* a menor solubilidade.

Na adição de álcool na água mudou a constante dielétrica da mistura para um valor inferior ao da água pura, e conseqüentemente, a solubilidade do eletrólito diminuiu.

O efeito de antissolvente tem um comportamento na redução da solubilidade do sal, com essa associação foi disposto diferentes porcentagens para quantidade de sal precipitado. Isto é, o sal já foi saturado em um meio com um único solvente, a água. Ao adicionar uma quantidade de solvente, tem uma nova condição de equilíbrio pois o sal está em menor quantidade e será saturado novamente. As diferentes porcentagens de antissolvente foram aplicadas em 55°C assim se observou que *KCl* com a maior precipitação em relação as porcentagens de antissolvente em comparação os outros sais estudados.

Os estudos das cinco temperaturas possibilitaram observar que o *NaCl* obteve uma fração molar em metanol, praticamente a mesma em todas as temperaturas (Tabela 1), por outro lado *KCl* e *NH<sub>4</sub>Cl*, tiveram seu maior rendimento alcançado em 55 °C. Pois a solubilidade de sistema aumenta com a temperatura e, portanto, em maiores temperaturas a quantidade dissolvida de sal é maior.

Neste trabalho apresentou dados de solubilidade dos eletrólitos *KCl*, *NaCl*, *NH<sub>4</sub>Cl* foram determinados neste trabalho em soluções com a adição de um antissolvente, estudado a faixa das temperaturas de 15°C a 55°C em um intervalo entre cada de 10°C. A relação da mudança da constante dielétrica devido a adição de um antissolvente. As misturas estudadas apresentaram que *NH<sub>4</sub>Cl* apresenta a maior solubilidade e *KCl* a menor solubilidade. O modelo modificado de Pitzer aplicado permitiu a quantificação de antissolvente no fenômeno de cristalização, com previsto que *KCl* apresenta a maior produção de dados de solubilidade.

**Tabela 1.** Porcentagem de antissolvente (w%) que precipita a máxima quantidade de produção P em diferentes temperaturas (T) em K.

T	w <sub>1</sub> %	P/g·kg <sup>-1</sup>	w <sub>1</sub> %	P/g·kg <sup>-1</sup>	w <sub>1</sub> %	P/g·kg <sup>-1</sup>
	NaCl		KCl		NH <sub>4</sub> Cl	
288.15	79.9	165.2	71.3	181.7	92.4	141.5
298.15	79.5	164.0	73.3	191.8	94.5	160.7
308.15	79.6	163.7	75.7	202.1	94.2	172.1
318.15	80.0	164.2	78.1	210.5	93.9	180.5
328.15	80.8	166.0	80.4	220.1	98.4	193.1

Palavras chaves: Solubilidade. Cristalização. Eletrólitos.