

AVALIAÇÃO DA FRAÇÃO MOLAR DE SACARÍDEOS SOLUBILIZADOS EM SOLUÇÃO ATRAVÉS DOS MODELOS MARGULES, NRTL, VAN LAAR E WILSON

Dionatan Felipe Hackenhaar Coleti¹, Fernanda Sebem Donatti², João Victor Thomas Feyh⁴, Alessandro Cazonatto Galvão⁴

¹ Acadêmico do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PIVIC/UDESC

² Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PROBIC/UDESC

³ Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PROBIC/UDESC

⁴ Orientador, Dep. Eng. Alimentos e Eng. Química – Udesc Oeste – alessandro.galvao@udesc.br

Palavras-chaves: Modelagem, Sacarídeos, Solubilidade

Os açúcares são geralmente sólidos cristalinos, incolores e possuem sabor adocicado. São extraídos da cana de açúcar, milho, entre outras fontes. O processo demanda de alto investimento nas unidades industriais, é um produto com pouco valor agregado devido a sua grande oferta. O açúcar apresenta um grande potencial de exploração em termos de produção de produtos químicos por meio da conversão das moléculas de carbono e associação com outros compostos orgânicos.

Sabe-se que grande parte das reações químicas ocorrem em fase líquida, sendo assim, o estudo do equilíbrio sólido líquido possui grande valor científico para diversas áreas industriais, sendo no desenvolvimento de rotas químicas e bioplataformas. Outra demonstração é que o comportamento das fases envolvendo sólido e líquido é a base para o processo de separação e para o desenvolvimento de novos produtos.

Este estudo tem por objetivo a avaliação dos modelos Margules, Wilson, Van Laar e NRTL em correlacionar os dados de solubilidade para Frutose, Xilose, Sacarose e Glicose em diferentes solventes puros, bem como água, etanol, metanol, etileno glicol em diferentes temperaturas. A metodologia utilizada na realização desse estudo foi uma pesquisa na literatura para encontrar dados de solubilidade expressa em fração molar.

Analizando a Tabela 1, temos os resultados encontrados a partir de cada modelo estudado, cada modelo possui uma forma de calcular o coeficiente de atividade, assim diferindo os valores encontrados. O modelo NRTL teve a variável alfa fixada em 0,2, sendo assim os resultados obtidos através do modelo foram melhores para xilose em solução com etileno glicol cujo desvio é igual a 0,3084%. O modelo Wilson apresentou melhor correlação para Glicose-Etanol, Sacarose-Metanol e Frutose-Etanol com um desvio de 0,2659%, 0,0695% e 0,0641%, respectivamente. Já o modelo de Margules apresentou menores desvios para Glicose, Xilose, Sacarose e Frutose em água, cujo valores são 0,3366%, 0,0630%, 0,0065% e 0,1836%, respectivamente. O modelo de Van Laar correlacionou bem os dados, no entanto os outros modelos obtiveram desvios menores.

Avaliando os modelos para todo o conjunto de dados estudados, o modelo que apresentou melhor desempenho foi Margules tanto na solução aquosa quanto nos álcoois, seguido de Wilson, Van Laar e por fim NRTL. Também pode-se observar que Margules aproxima melhor os dados em solução aquosa dos valores experimentais, resultando assim em desvios mais baixos. Já Wilson aproximou melhor a maior parte das soluções que continham álcool na composição, ficando evidente nos desvios mais baixos. O modelo NRTL apresentou uma correlação bem

variável entre as frações molares experimental e calculada, essa variação pode ser devido o mesmo apresentar uma terceira variável para o cálculo do coeficiente de atividade.

Tabela 1: Resultado expressos em fração molar (X_i) experimental com sua respectiva temperatura e a comparação aos resultados de fração molar obtidos através dos modelos.

T (k)	Xi	Modelos				T (k)	Xi	Modelos			
		Margul es	Wilson	NRTL	Van Laar			Margul es	Wilson	NRTL	Van Laar
Frutose - Etanol						Xilose - Água					
273,15	0,0018	0,0018	0,0018	0,0018	0,0018	293,15	0,1199	0,1199	0,1244	0,1177	0,1228
278,15	0,0020	0,0020	0,0020	0,0022	0,0021	298,15	0,1299	0,1298	0,1345	0,1294	0,1336
283,15	0,0028	0,0028	0,0028	0,0026	0,0026	303,15	0,1408	0,1407	0,1452	0,1423	0,1449
288,15	0,0031	0,0031	0,0031	0,0031	0,0031	308,15	0,1542	0,1541	0,1559	0,1552	0,1568
293,15	0,0037	0,0037	0,0037	0,0038	0,0037	313,15	0,1733	0,1733	0,1652	0,1662	0,1692
298,15	0,0044	0,0044	0,0044	0,0045	0,0045	318,15	0,1866	0,1867	0,1783	0,1829	0,1821
313,15	0,0079	0,0080	0,0079	0,0075	0,0078	323,15	0,1969	0,1971	0,1934	0,2037	0,1956
333,15	0,0175	0,0147	0,0175	0,0144	0,0175	298,15	0,1426	0,1426	0,1289	0,1218	0,1336
Glucose - Etanol						308,15	0,1512	0,1510	0,1571	0,1572	0,1568
313,15	0,0013	0,0013	0,0013	0,0015	0,0013	318,15	0,1763	0,1763	0,1822	0,1898	0,1821
333,15	0,0027	0,0027	0,0027	0,0024	0,0027	328,15	0,2081	0,2084	0,2091	0,2263	0,2097
273,15	0,0005	0,0005	0,0005	0,0006	0,0005	338,15	0,2484	0,2488	0,2382	0,2665	0,2394
283,15	0,0008	0,0008	0,0008	0,0008	0,0008	348,15	0,2987	0,2979	0,2699	0,3111	0,2712
293,15	0,0013	0,0013	0,0013	0,0010	0,0013	298,15	0,1426	0,1426	0,1289	0,1218	0,1336
308,15	0,0011	0,0011	0,0011	0,0014	0,0011	308,15	0,1512	0,1510	0,1571	0,1572	0,1568
Xilose - Etileno Glicol						318,15	0,1763	0,1763	0,1822	0,1898	0,1821
293,15	0,0365	0,0367	0,0366	0,0365	0,0396	328,15	0,2081	0,2084	0,2091	0,2263	0,2097
298,15	0,0498	0,0495	0,0497	0,0501	0,0484	338,15	0,2484	0,2488	0,2382	0,2666	0,2394
303,15	0,0618	0,0616	0,0620	0,0619	0,0588	348,15	0,2987	0,2979	0,2699	0,3111	0,2712
308,15	0,0745	0,0750	0,0742	0,0742	0,0710	273,15	0,0975	0,0976	0,0837	0,0743	0,0851
313,15	0,0869	0,0873	0,0869	0,0865	0,0852	283,15	0,1033	0,1036	0,1051	0,0964	0,1029
318,15	0,0994	0,0988	0,1005	0,0995	0,1016	293,15	0,1202	0,1202	0,1243	0,1175	0,1228
323,15	0,1154	0,1154	0,1145	0,1158	0,1205	303,15	0,1353	0,1351	0,1477	0,1459	0,1449
Sacarose - Água						313,15	0,1523	0,1521	0,1738	0,1804	0,1692
298,15	0,0984	0,0984	0,1010	0,1001	0,0991	323,15	0,1750	0,1750	0,2013	0,2194	0,1956
313,15	0,1103	0,1102	0,1168	0,1109	0,1091	333,15	0,2155	0,2162	0,2269	0,2543	0,2242
333,15	0,1325	0,1325	0,1301	0,1327	0,1329	Sacarose - Metanol					
303,15	0,1087	0,1087	0,0834	0,1016	0,1077	298,15	0,0006	0,0006	0,0006	0,0006	0,0006
313,15	0,1128	0,1128	0,1077	0,1103	0,1115	313,15	0,0009	0,0009	0,0009	0,0010	0,0010
298,15	0,0965	0,0966	0,1094	0,1006	0,0977	333,15	0,0017	0,0017	0,0017	0,0017	0,0017
313,15	0,1098	0,1098	0,1185	0,1110	0,1087	303,15	0,0008	0,0008	0,0008	0,0008	0,0007
333,15	0,1313	0,1313	0,1331	0,1330	0,1315	313,15	0,0010	0,0010	0,0010	0,0010	0,0010
Frutose - Água						Glucose - Água					
313,15	0,1709	0,1710	0,1232	0,1396	0,1444	298,15	0,2870	0,2882	0,2797	0,2864	0,2778
333,15	0,2314	0,2306	0,1969	0,2274	0,2301	313,15	0,3505	0,3506	0,3572	0,3429	0,3622
308,15	0,1221	0,1219	0,1405	0,1294	0,1273	333,15	0,5504	0,5503	0,4003	0,4804	0,4971
283,15	0,0635	0,0638	0,0565	0,0625	0,0634	298,15	0,2844	0,2833	0,2841	0,2881	0,2778
293,15	0,0839	0,0833	0,0889	0,0850	0,0850	303,15	0,3072	0,3071	0,3062	0,2966	0,3044
303,15	0,1028	0,1025	0,1296	0,1141	0,1117	313,15	0,3476	0,3458	0,3616	0,3444	0,3622
313,15	0,1319	0,1322	0,1640	0,1485	0,1444	323,15	0,3926	0,3949	0,4208	0,4291	0,4264
323,15	0,1700	0,1713	0,1900	0,1881	0,1836	333,15	0,4628	0,4840	0,4667	0,5379	0,4971
333,15	0,2225	0,2227	0,2060	0,2305	0,2301	298,15	0,2832	0,2809	0,2863	0,2889	0,2778
313,15	0,1702	0,1703	0,1237	0,1397	0,1444	313,15	0,3483	0,3470	0,3605	0,3440	0,3622
333,15	0,2295	0,2290	0,1987	0,2281	0,2301	333,15	0,5390	0,5465	0,4067	0,4874	0,4971