



ESTUDO SOBRE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS: Benzeno

Camille D. P. BENEDITO¹; Juan P. ALVES²; Kathryn N. G. DE PAULA³

RESUMO

O presente trabalho objetiva apresentar as propriedades termodinâmicas do benzeno bem como os métodos e equações de estado utilizados para os cálculos. O benzeno é conhecido pelo seu formato de ciclohexatrieno e por ser um importante composto aromático. Primeiramente, buscou-se apresentar um contexto da importância do conhecimento das propriedades termodinâmicas, bem como a do citado composto na indústria química. Após a dita contextualização foram apresentadas as equações obtidas através de livros de termodinâmica e físico-química, que foram utilizadas nos cálculos de cada propriedade.

Palavras-chave:

Equações de estado; Ciclohexatrieno; Indústria química.

1. INTRODUÇÃO

O benzeno, um hidrocarboneto amplamente utilizado na indústria como matéria-prima para diversos produtos em vários setores, exigindo assim, um conhecimento aprofundado de suas propriedades termodinâmicas, sendo fundamental para que se evite erros no planejamento e na manutenção de sistemas industriais complexos.

O objetivo deste trabalho é apresentar cálculos e correlações utilizados na obtenção de tabelas termodinâmicas e diagramas TS (temperatura-entropia) e PH (pressão-entalpia) para o benzeno saturado, com o intuito de verificar sua precisão, bem como os resultados obtidos; para comprovar a eficácia dos métodos propostos foram feitas comparações entre os resultados obtidos e encontrados na literatura, como pode ser visto mais adiante.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Foi escolhido o software Excel® devido a possibilidade de se criar macros para inserção das equações escolhidas, após esta escolha iniciou-se o processo de verificação de dados existentes.

2.1 Pressão de saturação

Primeiramente para o cálculo da pressão de saturação, foi utilizada a equação 1 (GREEN & PERRY, 2018)

$$\ln P = C1 + \frac{C2}{T} + C3 * \ln(T) + C4 * T^{C5} \quad (1)$$

2.2 Volumes específicos

¹Aluna, IFSULDEMINAS - Campus Pouso Alegre. E-mail: camille.benedito@alunos.ifsuldeminas.edu.br;

²Aluno, IFSULDEMINAS - Campus Pouso Alegre. E-mail: juan.alves@alunos.ifsuldeminas.edu.br;

³Aluna, IFSULDEMINAS - Campus Pouso Alegre. E-mail: kathryn.paula@alunos.ifsuldeminas.edu.br.

O próximo passo é o volume específico. Para o estado de vapor saturado utilizada a equação de estado de Peng-Robinson-Saffari-Zahedi (equação 2), que trás uma nova equação para α (T_r), (equação 6). Aplicando-se 3 e 4, após realizado o cálculo foi encontrado o valor de Z que foi aplicado a equação 5, do gás ideal, isolando o volume, e para o estado de líquido saturado foram utilizados os parâmetros e a fórmula de Daubert (MOVAGHARNEJAD & SAFFAR, 2018), (equação 7):

$$Z = 1 + \beta - q\beta * \frac{(Z-\beta)}{(Z+\epsilon*\beta)*(Z+\sigma*\beta)} \quad (2)$$

$$\beta = \Omega * \left(\frac{Pr}{Tr}\right) \quad (3)$$

$$q = \frac{\Psi*\alpha*(Tr)}{\Omega*Tr} \quad (4)$$

$$V = \frac{P}{R*T} \quad (5)$$

$$\alpha(T) = \exp[k_1 T_r + k_2 \ln T_r + k_3 (1 - T_r^{1/2})] \quad (6)$$

$$\rho = \frac{A}{B^{1+(1-\tau)}} \quad (7)$$

Tabela 1 : Parâmetros alfa

A	B	C	D	Tmi	Tma
80,3682	0,266457	561,65	0,28797	273	561

Fonte: Dortmund Data Bank.

Tabela 2 : Parâmetros Daubert

$k_1 = 0,013145w + 0,03091$
$k_2 = 0,482173w - 0,006487$
$k_3 = 3,586161w + 0,721306$

Fonte: Iranian Journal of Chemical Engineering.

2.3 Entalpia

Em seguida para entalpia, iniciou-se o cálculo através da equação 8 da entropia de evaporação obtida por GREEN & PERRY (2018).

$$\Delta H^{ev} = C1 \cdot (1 - Tr)^{(C2+C3*Tr+C4*Tr^2)} \quad (8)$$

Já para a entalpia do gás saturado foi necessário levar em conta o comportamento de gás real, como mostrado na equação 9. Com ambas calculadas, considerou-se que a entalpia do líquido saturado é dada pela equação 10.

$$H^v = H_{p3} + R \int_{T_{p3}}^{T_i} \frac{Cp}{R} dT + Hr \quad (9)$$

$$H^l = H^v - \Delta H^{ev} \quad (10)$$

2.4 Energia Interna

Com as entalpias calculadas, a energia interna do líquido saturado e vapor saturado pôde facilmente ser calculada através da equação 11. Já a energia interna de evaporação foi obtida através da diferença entre cada estado (equação 12):

$$U = H - PV \quad (11)$$

$$\Delta U^{ev} = U^v - U^l \quad (12)$$

2.5 Entropia

Por fim, para o estado de vapor saturado, a entropia foi calculada através da equação 13 que considera o comportamento de gás real.

$$S^v = S_{p3} + R \int_{T_{p3}}^{T_i} \frac{C_p}{R} \frac{dT}{T} - R \cdot \ln \frac{P_i}{P_{p3}} + S_r \quad (13)$$

Para entropia de evaporação foi utilizada a equação 14 (SMITH et al, 2007). Com ambos dados obtidos, foi necessário subtraí-los para obter a entropia do líquido saturado (equação 15).

$$\Delta S^{ev} = \frac{\Delta H^{ev}}{T} \quad (14)$$

$$S^l = S^v - \Delta S^{ev} \quad (15)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para comparação dos resultados obtidos foram utilizados dados de volume específico do Perry's handbook:

Tabela 3 : Tabela de erros (volume específico)

Dados calculados			Dados do PERRY'S Handbook		Erro (%)
Temperatura (K)	Volume líquido saturado (cm^3/g)	Temperatura (K)	Volume (dm^3/mol)	Volume (cm^3/g)	
300,00	1,147056874	300,00	0,089523	1,1461	0,08
350,00	1,221500611	350,00	0,095456	1,2220	-0,04
400,00	1,316059603	400,00	0,102790	1,3159	0,01
450,00	1,444900407	450,00	0,112800	1,4441	0,06
451,58	1,449824095	451,58	0,113190	1,4491	0,05

Fonte : Elaborado pelos autores.

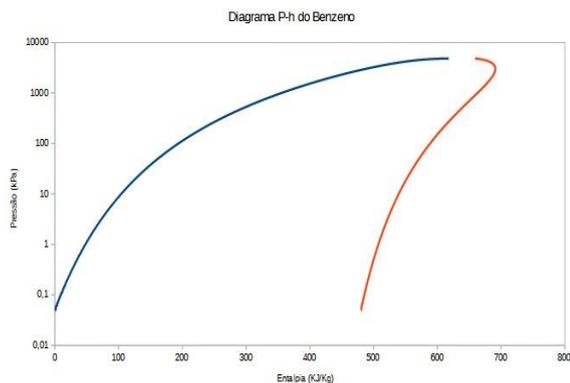
Para comparação dos demais resultados foram utilizados diagramas (TS e PH) de elaboração própria em relação ao elaborado através do software EES, Figuras 1, 2 e 3. Como pode ser constatado os resultados foram satisfatórios apresentando erros abaixo de 0,1% para os valores tabelados e geometria similar entre os diagramas.

4. CONCLUSÃO

Os modelos matemáticos e as abordagens apresentadas são de grande aplicabilidade, já que, as equações exibiram baixas porcentagens de erro (inferiores a 0,1%), além de que, quando comparado com outros trabalhos da literatura, como citados anteriormente, observa-se semelhança

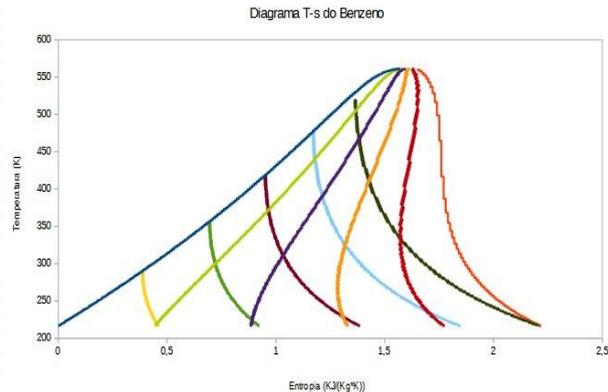
entre os resultados dos cálculos.

Figura 1: Diagrama PH



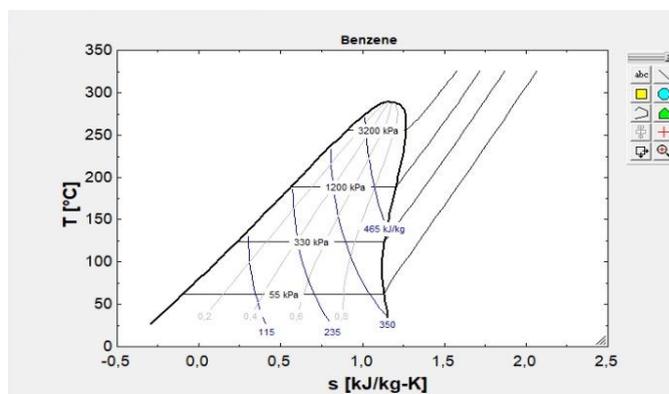
Fonte: Elaborado pelos autores.

Figura 2: Diagrama TS



Fonte: Elaborado pelos autores.

Figura 3 : Diagrama do software



Fonte: EES Software.

REFERÊNCIAS

DORTMUND DATA BANK. **Saturated Liquid Density**. [s.d.]. Disponível em: <http://ddbonline.ddbst.de/DIPPR105DensityCalculation/DIPPR105CalculationCGI.exe?component=Benzeno>. Acesso em: 10 de Agosto de 2023.

GREEN, Don W.; PERRY, Robert H. **Perry 's Chemical Engineers' Handbook**. New York : Mc Graw Hill, 2008.

MOVAGHARNEJAD K.; SAFFAR F. Predicting the Coefficients of the Daubert and Danner Correlation using a neural Network model. **Iranian Journal of Chemical Engineering**, vol. 15, No. 2, (Spring 2018), IACHÉ.

POLING, B. E. ; PRAUSNITZ, J. M. ; O'CONNELL, J. P. **The properties of gases and liquids**. 5ª Edição. Mc Graw Hill, 2001.

SAFFARI, Hamid; ZAHEDI, Alireza. A new alpha-function for the Peng-Robinson equation of state: application to natural gas. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, 21(10), 1155-1161,(2013).

SMITH, J.M.; NESS, H. C. Van; ABBOTT, M.M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. Rio de Janeiro: LTC, 2007.