

DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE HILDEBRAND DE HIDROCARBONETOS VIA SIMULAÇÃO MOLECULAR

Pedro F. G. Silvino, Luis H. S. Silva, Diana C. S. Azevedo, Sebastião M. P. de Lucena

Bolsista MsC. PRH-ANP 31, pedro@gpsa.ufc.br, Grupo de Pesquisas em Separação por Adsorção,
Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará

R E S U M O

MOTIVAÇÃO: O parâmetro de solubilidade, δ_H , proposto por Hildebrand, fornece uma predição da solubilidade de compostos não-eletrólitos em um determinado solvente. A determinação de δ_H para compostos mais complexos, tais como polímeros naturais ou sintéticos e outros compostos de elevado peso molecular, não pode ser realizada por medição direta do calor de vaporização, uma vez que estas possuem baixíssimas pressões de vapor e podem sofrer decomposição química em temperaturas elevadas. A determinação do coeficiente de Hildebrand foi feita através de simulação molecular, com técnicas de dinâmica molecular e células periódicas de simulação carregadas com moléculas do material que se quer medir o coeficiente para a temperatura de ensaio.

OBJETIVO: O objetivo do presente trabalho é aplicar a metodologia para determinação do δ_H de quatro compostos: tolueno, n-heptano, benzeno e 1-metilnaftaleno, comparando os resultados com dados experimentais. Aplicou-se a metodologia a três compostos poliaromáticos: naftaleno, fenantreno e antraceno (Fig. 1), que são sólidos a temperatura, com objetivo de obter um método alternativo para medida do coeficiente de Hildebrand.

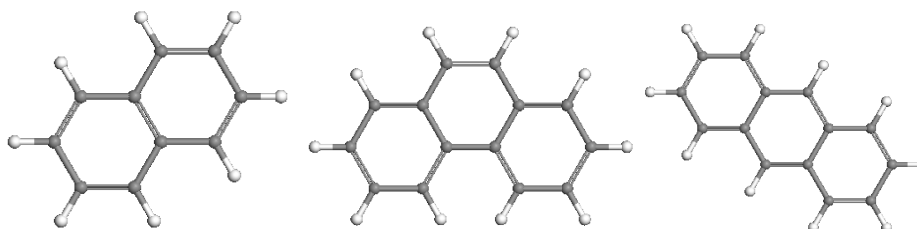


Figura 1 - Estruturas do naftaleno, fenantreno e antraceno, respectivamente.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO: Utilizações práticas para o parâmetro de solubilidade abrangem a previsão do comportamento miscível de diferentes óleos na formação de blends para fins específicos, estudo da formação de micelas e de nanocompostos, técnicas de predição de propriedades de transporte de compostos poliméricos e estudos para a prevenção da precipitação asfáltica.

RESULTADOS OBTIDOS: A tabela (Tab. 1) a seguir apresenta os resultados obtidos para o benzeno, tolueno, heptano e a-metilnaftaleno:

Tabela 1 - Parâmetros de solubilidade obtidos para os solventes

Solvente	Número de Moléculas	Tamanho da célula (Å)	δ_H (MPa ^{1/2})	
			Experimental	Simulado
Benzeno	70	21,82	18,8	18,88
Tolueno	70	23,16	18,2	18,34
Heptano	50	21,92	15,2	15,25
1-Metilnaftaleno	50	25,33	20,3	20,43

A seguir os resultados para os poliaromáticos: naftaleno, fenantreno e antraceno (Tab. 2).

Tabela 2 - Propriedades dos poliaromáticos a 298,15K

Composto	Experimentais		Simulação
	Densidade (g/cm ³)	δ_H (MPa ^{1/2})	δ_H (MPa ^{1/2})
Naftaleno	0,979	19,40	19,88
Fenantreno	1,063	19,77	20,90
Antraceno	1,240	20,14	21,86