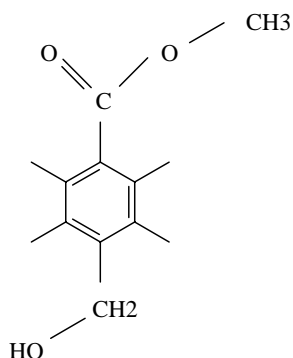


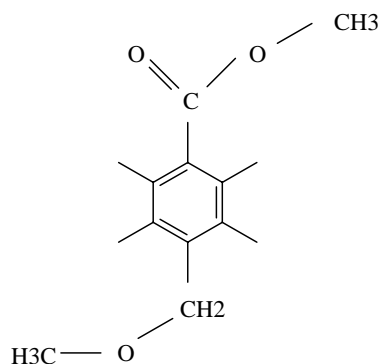
PREVISÃO DE PROPRIEDADES USANDO O SIMULADOR ASPEN

1. Para o composto hidroximetilbenzoato de metilo ($C_9H_{10}O_3(-)$), preveja a temperatura de ebulição e as propriedades críticas, utilizando o método de Joback. Analise o relatório obtido.



Grupo funcional Joback (n°)	N° de ocorrências	Grupo funcional UNIFAC (n°)	N° de ocorrências
100	1	1105	4
101	1	1100	2
113	4	3300	1
127	1	1015	1
114	2	1010	1
119	1	1200	1

2. Para o composto metoximetilbenzoato de metilo ($C_{10}H_{12}O_3$), preveja a temperatura de ebulição e as propriedades críticas, utilizando o método de Joback. Analise o relatório obtido.



Grupo funcional Joback (n°)	N° de ocorrências	Grupo funcional UNIFAC (n°)	N° de ocorrências
100	2	1105	4
101	1	1100	2
113	4	3300	1
127	1	1015	1
114	2	1010	1
121	1	1615	1

3. Obtenha a curva de equilíbrio do sistema: hidroximetilbenzoato de metilo / metoximetilbenzoato de metilo.
4. Introduza os grupos funcionais UNIFAC para os dois componentes, obtenha a curva de equilíbrio do sistema e compare os resultados com os obtidos em 3.

NOTA

Faz-se notar que, quando existe no banco de dados do Aspen um composto com a mesma fórmula molecular que o composto em estudo, o Aspen assume, por defeito, as propriedades desse composto. Assim, é necessário indicar a fórmula molecular seguida do sinal (-).

