

UNIVERSIDADE DO ESTADO DO AMAZONAS – UEA
ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA – EST
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

YANI SAIONARA PINHEIRO EVANGELISTA

AVALIAÇÃO DE METODOLOGIAS DE CONTRIBUIÇÃO DE
GRUPO PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS E
PROPRIEDADES CRÍTICAS DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

MANAUS - AM

2021

YANI SAIONARA PINHEIRO EVANGELISTA

AVALIAÇÃO DE METODOLOGIAS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS E PROPRIEDADES CRÍTICAS DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

Monografia apresentada ao Curso de Graduação em Engenharia Química da Escola Superior de Tecnologia da Universidade do Estado do Amazonas, para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. MSc. Welisson de Araújo Silva

MANAUS - AM

2021

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Sistema Integrado de Bibliotecas da Universidade do Estado do Amazonas.

E92a Evangelista, Yani Saionara Pinheiro
 Avaliação de Metodologias de Contribuição de Grupo
 para cálculo de propriedades termofísicas e propriedades
 críticas de compostos orgânicos / Yani Saionara Pinheiro
 Evangelista. Manaus : [s.n], 2021.
 85 f.: color.; 1 cm.

 TCC - Graduação em Engenharia Química -
 Universidade do Estado do Amazonas, Manaus, 2021.
 Inclui bibliografia
 Orientador: Silva, Welisson de Araújo

 1. Métodos. 2. Predição. 3. Propriedades. 4.
 Termodinâmica. I. Silva, Welisson de Araújo (Orient.). II.
 Universidade do Estado do Amazonas. III. Avaliação de
 Metodologias de Contribuição de Grupo para cálculo de
 propriedades termofísicas e propriedades críticas de
 compostos orgânicos

Elaborado por Jeane Macelino Galves - CRB-11/463

YANI SAIONARA PINHEIRO EVANGELISTA

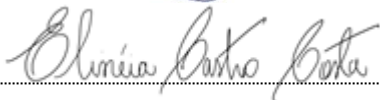
AVALIAÇÃO DE METODOLOGIAS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS E PROPRIEDADES CRÍTICAS DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

Monografia de Conclusão de Curso para obtenção do título de Engenheiro, Habilitação em Engenharia Química – Escola Superior de Tecnologia, Universidade do Estado do Amazonas

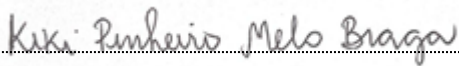
Banca Examinadora:



.....
Prof. MSc. Welisson de Araújo Silva – Orientador



.....
Profa. Dra. Elineia Castro Costa – UEAP



.....
Profa. Dra. Kiki Pinheiro Melo Braga – UEA

Conceito: Aprovado

Manaus, 23 de Julho de 2021.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por me permitir chegar até aqui, sem Ele nada disso seria possível tendo em vistas as grandes mudanças pelas quais passei ao longo desse ano;

Aos meus queridos pais, Maria da Conceição Pinheiro e Manoel Evangelista da Silva, ao meu querido irmão, Yuri Leonam Pinheiro Evangelista e minha sobrinha Luna Emanuely Conceição Evangelista, agradeço pelo apoio incondicional que me deram durante a graduação e em toda minha vida;

Ao meu parceiro de vida, que esteve comigo em nos meus momentos mais altos e mais baixos de felicidade, quem me deu apoio incondicional e muita motivação para jamais desistir dos meus sonhos;

Aos amigos: Daniele Lima e Welton Oliveira que puderam acompanhar minha trajetória acadêmica, além de entenderem as inúmeras renúncias que tive que fazer às nossas diversões;

Ao meu orientador, professor MSc. Welisson de Araújo Silva, a quem se dispôs a me orientar e em todo processo demonstrou seu apoio, incentivos e ensinamentos. Além de toda paciência dispensada durante o desenvolvimento deste trabalho;

Aproveito ainda para agradecer à Universidade do Estado do Amazonas, em nome do corpo docente do curso de Engenharia Química pelos ensinamentos, os quais me permitem sair dessa casa como uma profissional, entendendo seu papel na sociedade;

Agradeço a todos aqueles que aqui não foram citados e deram sua contribuição de forma direta ou indireta para o desenvolvimento deste trabalho e acima de tudo por me incentivarem a NUNCA DESISTIR.

RESUMO

A sociedade atual necessita cada vez mais de materiais mais modernos e alternativos. Entretanto, é comum, a depender da substância ou matéria-prima utilizada não se dispor de dados empíricos que possam nortear o desenvolvimento do projeto desses materiais, havendo a necessidade de se predizer as propriedades termodinâmicas e críticas destas substâncias. Uma solução de engenharia para este problema é o emprego de métodos preditivos. Neste trabalho utilizamos os modelos de contribuição de grupo, que, de modo geral, dividem a estrutura molecular da substância em estudo em grupos funcionais, estimando as o valor das propriedades críticas (temperatura e pressão) e termodinâmicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico) a partir do somatório das contribuições. Desta feita, realizou-se uma seleção de um conjunto de métodos de contribuição de grupos a fim de definir quais destes seria os mais indicados para a estimação de valores de Temperatura de Ebulição (T_b), Temperatura Crítica (T_c) e Pressão Crítica (P_c) e Fator Acêntrico (ω), aplicados a substâncias puras (hidrocarbonetos, ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos e álcoois). A definição destes métodos deu-se por avaliações estatísticas dos resultados obtidos, considerando a menor média de erro relativo percentual (X_{rm}) e desvio padrão (S), ou em caso de dados divergentes (um com valor baixo e outro valor mais alto), a seleção deu-se considerando a faixa de erro (R). A partir destes resultados foi possível a determinação de propriedades termofísicas e críticas dos extratos naturais regionais de Copaíba, Jambu e Tucumã, a partir da Regra de Key, de forma que ao colocar essas informações no diagrama de fases P-T foi possível determinar o estado físico da matéria dos mesmos.

Palavras-chave: métodos, predição, propriedades, termodinâmica.

ABSTRACT

Today's society increasingly needs more modern and alternative materials. However, it is common, depending on the substance or raw material used, not to have empirical data that can guide the development of the project of these materials, with the need to predict the thermodynamic and critical properties of these substances. An engineering solution to this problem is the use of predictive methods. In this work, we use group contribution models, which, in general, divide the molecular structure of the substance under study into functional groups, estimating the value of critical (temperature and pressure) and thermodynamic (boiling temperature and acentric factor) properties. from the sum of contributions. This time, a selection of group contribution methods was performed in order to define which of these would be the most suitable for estimating Boiling Temperature (T_b), Critical Temperature (T_c) and Critical Pressure (P_c) values) and Acentric Factor (ω), applied to pure substances (hydrocarbons, fatty acids, fatty acid esters and alcohols). These methods were defined by statistical evaluations of the results obtained, considering the lowest mean percentage relative error (X_{rm}) and standard deviation (S), or in case of divergent data (one with a low value and another with a higher value), the selection was made considering the error range (R). From these results, it was possible to determine the thermophysical and critical properties of the regional natural extracts of Copaíba, Jambu and Tucumã, using the Key's Rule, so that by placing this information in the PT phase diagram, it was possible to determine the physical state of the matter thereof.

Keywords: methods, prediction, properties, thermodynamics.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Diagrama termodinâmico relacionando P-T de uma substância pura e regiões/fases existentes.	17
Figura 2 – Diagrama termodinâmico relacionando P-V de uma substância pura e regiões/fases existentes.....	18
Figura 3 – Isoterma em $T > T_c$	19
Figura 4 – Isoterma em $T < T_c$	20
Figura 5 – Desenho metodológico para a definição do melhor método de contribuição de grupo para as propriedades: Temperatura de ebulição e propriedades críticas (pressão e temperatura).....	35
Figura 6. Desenho metodológico para a definição do melhor método de contribuição de grupo para as propriedades: Temperatura de ebulição e propriedades críticas (pressão e temperatura) de extratos naturais de interesse desse trabalho.	40
Figura 7 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos saturados.	44
Figura 8 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos insaturados.....	44
Figura 9 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos aromáticos.....	45
Figura 10 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos saturados.....	45
Figura 11 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos insaturados.....	46
Figura 12 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos aromáticos.....	46
Figura 13 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos saturados.	47
Figura 14 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos insaturados.....	47
Figura 15 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos aromáticos.....	48
Figura 16 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de álcoois.....	50

Figura 17 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de ácidos graxos/ carboxílicos.....	51
Figura 18 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de ésteres.	51
Figura 19 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de álcoois.	52
Figura 20 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de ácidos graxos/ carboxílicos.....	52
Figura 21 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de ésteres.....	53
Figura 22 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de álcoois.	53
Figura 23 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de ácidos graxos/ carboxílicos.....	54
Figura 24 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de ésteres.....	54
Figura 25 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos saturados.	56
Figura 26 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos insaturados.....	56
Figura 27 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos aromáticos.....	57
Figura 28 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de álcoois.....	57
Figura 29 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de ácidos graxos/ carboxílicos.....	58
Figura 30 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de ésteres.	58
Figura 31 – Diagrama P-T para o óleo de jambu.	61
Figura 32 – Diagrama P-T para o óleo de tucumã.....	61
Figura 33 – Diagrama P-T para o óleo de copaíba.....	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Métodos a serem usados para estimar as propriedades críticas dos componentes puros neste trabalho.	33
Tabela 2 – Referência dos dados experimentais de propriedades críticas e termofísicas de ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos, álcoois e hidrocarbonetos.	34
Tabela 3 – Referência da composição dos óleos e extratos utilizados neste presente trabalho.	39
Tabela 4 – Métodos selecionados para estimação de temperatura de ebulição (T_b) para hidrocarbonetos.	42
Tabela 5 – Métodos selecionados para estimação de temperatura crítica (T_c) para hidrocarbonetos.	42
Tabela 6 – Métodos selecionados para estimação de pressão crítica (P_c) para hidrocarbonetos.	42
Tabela 7 – Métodos selecionados para estimação de temperatura de ebulição (T_b) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.	48
Tabela 8 – Métodos selecionados para estimação de temperatura crítica (T_c) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.	49
Tabela 9 – Métodos selecionados para estimação de pressão crítica (P_c) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.	49
Tabela 10 – Métodos selecionados para estimação do fator acêntrico (ω) para as funções químicas: hidrocarbonetos, álcoois, ácidos graxos e ésteres.	55
Tabela 11 – Fração mássica dos constituintes dos extratos naturais de interesse desse trabalho.	59
Tabela 12 – Propriedades calculadas para os extratos naturais de interesse desse trabalho.	60

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

#: número respectivo aos grupos alifáticos ou aromáticos presentes

C/ Cp: ponto crítico

dependem da função orgânica

f_i : representa a fugacidade

G^i : energia livre de Gibbs na fase i

H: entalpia

HBP: ligação de hidrogênio

k, ij: subscritos que representam grupos que não contêm carbono e grupos com átomos adjacentes em par

M ou MM: massa molar

n_A : número total de átomos da molécula

N_c : número de carbonos na molécula

N_C : número total de átomos de carbono na molécula

$n_i/ m_j/ o_k$: número de grupos

OH: grupo hidroxila

P: pressão

P_c : pressão crítica

P_{ci1} : valor da pressão crítica para o grupo i do tipo primeira ordem

P_{cj2} : valor da pressão crítica para o grupo j do tipo segunda ordem

P_{ck3} : valor da pressão crítica para o grupo k do tipo terceira ordem

P^i : pressão na fase i

P_r : pressão de vapor reduzida

P^{vap} : pressão de vapor

Rings: número de anéis simples independentes, fundido ou conjugados presentes na molécula

S: entropia

Σ : somatório

sp^3 e sp^2 : número total de não-anéis e átomos sp^3 e sp^2 não emparelhados

T: temperatura

T_b : temperatura de ebulição

T_{bi1} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i do tipo primeira ordem

T_{bj2} : valor da temperatura de ebulição para o grupo j do tipo segunda ordem

T_{bk3} : valor da temperatura de ebulição para o grupo k do tipo terceira ordem

T_c : temperatura crítica

T_{ci1} : valor da temperatura crítica para o grupo i do tipo primeira ordem

T_{cj2} : valor da temperatura crítica para o grupo j do tipo segunda ordem

T_{ck3} : valor da temperatura crítica para o grupo k do tipo terceira ordem

T^i : temperatura na fase i

T_p : ponto triplo

T_r : temperatura reduzida

T_{rb} : temperatura reduzida no ponto de ebulição

V : volume específico

x_i : representa a composição molar do composto i

α : representação da fase a ser calculada

α_b e α_c : fatores de Riedel, avaliados na temperatura normal de ebulição e temperatura crítica, respectivamente

ϵ_i : contribuição do grupo para o fator acêntrico

τ : flexibilizador

ϕ_i : representa o coeficiente da fugacidade

ϕ^α : coeficiente de fugacidade

ω : fator acêntrico

ω_{i1} : contribuição do grupo para o fator acêntrico do tipo primeira ordem

ω_{i2} : contribuição do grupo para o fator acêntrico do tipo segunda ordem

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	16
2.1	DIAGRAMA TERMODINÂMICO	16
2.2	EQUILÍBRIO DE FASES	20
2.3	PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS	22
2.4	MÉTODOS PREDITIVOS DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS	24
2.4.1	Joback e Reid (1987)	24
2.4.2	Constantinou e Gani (1994)	24
2.4.3	Ourique e Telles (1997)	25
2.4.4	Marrero e Fontdevila (1999)	26
2.4.5	Marrero e Gani (2001)	27
2.4.6	Sanghvi e Yalkowsky (2006)	28
2.4.7	Han e Peng (1993)	28
2.4.8	Constantinou et al. (1995)	29
2.5	EXTRATOS NATURAIS REGIONAIS	29
2.5.1	Óleo de Jambu	30
2.5.2	Óleo de Tucumã	31
2.5.3	Óleo de Copaíba	31
3	MÉTODOS E PROCEDIMENTOS	33
3.1	DADOS EXPERIMENTAIS	33
3.1.1	Propriedades Críticas (pressão e temperatura) e Termofísicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico)	34
3.2	CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS	34
3.3	CRITÉRIOS DE ANÁLISE DAS PROPRIEDADES CALCULADAS (TEMPERATURA DE EBULIÇÃO, TEMPERATURA CRÍTICA, PRESSÃO CRÍTICA E FATOR ACÊNTRICO)	35
3.4	PREDIÇÕES DAS PROPRIEDADES PARA EXTRATOS NATURAIS	38
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	41
4.1	AVALIAÇÃO DOS MÉTODOS DE PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES DE COMPONENTES PUROS	41
4.1.1	Temperatura de Ebulição e Propriedades Críticas	41

4.1.1.1 Hidrocarbonetos.....	41
4.1.1.2 Álcoois, Ácidos Graxos e Ésteres.....	48
4.1.2 Fator Acêntrico	55
4.2 PREDIÇÃO DAS PROPRIEDADES DE EXTRATOS NATURAIS DE INTERESSE PARA A APLICAÇÃO DA TECNOLOGIA SUPERCRÍTICA.....	59
4.3 ESTADO FÍSICO DA MATÉRIA A PARTIR DO DIAGRAMA P-T.....	60
CONCLUSÃO.....	63
REFERÊNCIAS.....	64
ANEXO A – DADOS EXPERIMENTAIS DO CARVALHO JUNIOR (2000).....	70
ANEXO B – AVALIAÇÃO PARA A TEMPERATURA DE EBULIÇÃO (T_b).....	77
ANEXO C – AVALIAÇÃO PARA A TEMPERATURA CRÍTICA (T_c)	79
ANEXO D – AVALIAÇÃO PARA A PRESSÃO CRÍTICA (P_c).....	81
ANEXO E – AVALIAÇÃO PARA O FATOR ACÊNTRICO (ω)	83
ANEXO F – PROPRIEDADES CALCULADAS PARA AS COMPOSIÇÕES DOS EXTRATOS NATURAIS EM ESTUDO	85

1 INTRODUÇÃO

A indústria química está em crescimento contínuo no que tange a necessidade de produtos diversos, seja pela conversão de matérias-primas específicas em produtos desejados, ou ainda, através de extração a partir de produtos selecionados (SANTANA, 2017; SILVA, 2016).

Para a realização desses processos necessita-se de conhecimentos em termodinâmica, no que tange às propriedades das substâncias envolvidas, pois estas direcionarão o comportamento do sistema (MACHADO, 1998).

Entretanto, a depender da substância ou matéria-prima utilizada não há dados empíricos que possam nortear o desenvolvimento do trabalho, havendo necessidade neste caso, de se calcular as propriedades termodinâmicas e críticas destas substâncias (MACHADO, 1998; SILVA, 2016).

A necessidade das propriedades dos componentes puros representa uma das limitações do uso das equações de estado para descrever o comportamento do equilíbrio de fases de substâncias naturais a altas pressões como por exemplo: ácidos graxos, álcoois e ésteres de ácidos graxos, pois para estas substâncias estas propriedades a determinação das suas propriedades são consideradas hipotéticas. Isto porque, estas substâncias se decompõem abaixo de suas temperaturas críticas e às vezes abaixo da temperatura de ebulição (ARAÚJO, 1997).

Uma solução de engenharia para este problema é o emprego de métodos preditivos para as propriedades críticas, que são estimativas que utilizam modelos matemáticos. Exemplos de tais métodos são os modelos de contribuição de grupo, nos quais a estrutura molecular da substância em estudo é dividida em grupos funcionais e o somatório destas contribuições é utilizado para estimar o valor de suas propriedades críticas (temperatura e pressão) e termodinâmicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico) (GANI, 2019).

O método de contribuição de grupo mais antigo foi desenvolvido por Lydersen em 1955, a partir do qual podiam-se estimar as propriedades críticas de uma substância (temperatura, pressão e volume) (ARVELOS, 2013). Já em 1987 Joback e Reid tomaram por base o trabalho de Lydersen e reavaliaram os parâmetros dos grupos propostos, além de estimar mais onze propriedades (MOURA *et al.*, 2000). Assim, outros métodos de contribuição de grupos foram propostos, como: Constantinou e Gani (1994), Ourique e Telles (1997), Marrero e Fontdevila (1999), Marrero e Gani (2001) e Sanghvi e Yalkowsky (2006).

Já para a estimativa do fator acêntrico, a primeira proposição de um método foi em 1955 por Pitzer, sendo este dependente dos dados de pressão de vapor disponível.

Devido a possibilidade de compostos orgânicos poderem se degradar em determinadas condições de pressão e temperatura e, em determinadas situações, quando não é possível plotar curvas de pressão de vapor, outros métodos preditivos foram propostos por Han e Peng (1993) e Constantinou et al. (1995).

Portanto, a proposta deste trabalho é estudar as propriedades críticas (temperatura crítica e pressão crítica) e termofísicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico) de substâncias puras e de extratos naturais regionais a partir das metodologias preditivas de contribuição de grupo.

Especificamente, espera-se alcançar tais objetivos:

- i. Definir, dentro de um conjunto de métodos de contribuição de grupos selecionados, o mais adequado para estimação de valores de Temperatura de Ebulição (T_b), Temperatura Crítica (T_c) e Pressão Crítica (P_c) e Fator Acêntrico (ω), aplicados a substâncias puras (hidrocarbonetos, ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos e álcoois);
- ii. Calcular, a partir dos melhores métodos preditivos, as propriedades termofísicas e críticas dos extratos naturais regionais de Copaíba, Jambu e Tucumã.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste sentido, Fernandes et al. (2006) definem termodinâmica como o estudo de mudanças de estado (condições de trabalho) das substâncias puras e/ou misturas ao sofrerem alterações na sua temperatura, pressão e seu estado de segregação. Ainda ressaltam que pode ser gerado calor e trabalho a partir das interações ocorridas entre misturas, sejam reacionais ou de separação. Para o estudo de propriedades das substâncias, utiliza-se o diagrama termodinâmico como ferramenta auxiliar para proposição e análise de projetos.

Contudo, historicamente os dados das variáveis de estado só foram possíveis de serem relacionadas a partir do estudo dos gases perfeitos, realizado por Benoit-Pierre Émile Clapeyron (1799-1864), o qual conseguiu estabelecer uma relação entre volume (V), a temperatura (T) e a pressão (P) de um gás com a quantidade de partículas que compõe o gás por meio de uma regra empírica (GEROLA et al., 2010).

Mas ao se tratar de gases reais, o físico Johannes Diderik Van der Waals (1837-1923) verificou que a equação de Clapeyron não atendia às especificidades, corrigindo a equação de gases ideais ao introduzir o volume finito ocupado pelas moléculas de gás e as forças intermoleculares existentes (BROWN et al., 2005; MAGALHÃES et al., 2009). Embora não seja possível obter resultados aceitáveis, a partir desta foi possível o desenvolvimento de novas equações de estado, a fim de aumentar a eficácia da predição.

Ao se utilizar equações de estado cúbicas para predizer o equilíbrio de fases, especialmente em condições supercríticas, as propriedades termofísicas dos componentes puros tem influencia relevante, segundo Spiliotis et al. (1994).

O presente trabalho avaliou-se alguns métodos de contribuição de grupo para o cálculo de propriedades termofísicas e críticas para melhor calcular as propriedades de compostos orgânicos que não podem ser obtidas experimentalmente.

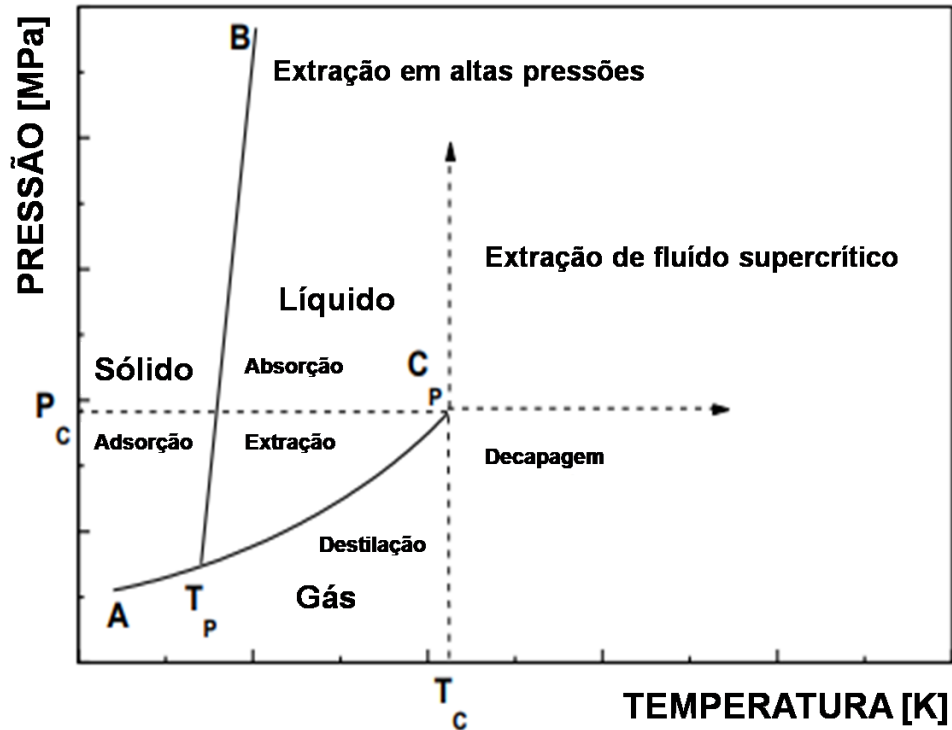
2.1 DIAGRAMA TERMODINÂMICO

Conceitua-se *diagrama termodinâmico* como o gráfico contendo o comportamento da substância e suas condições: pressão, temperatura, volume, entalpia e entropia, além da coexistência entre suas fases (CARMO, 2009; SMITH et al., 2007).

Segundo Smith et al. (2007) há diversos tipos de diagramas termodinâmicos que podem relacionar um conjunto de propriedades. Os mais comuns são: Temperatura (T) *versus* Entropia (S), Pressão (P) *versus* Entalpia (H) (normalmente $\ln P$ x H), Entalpia (H) *versus*

Entropia (S), além da relação entre Pressão (P) *versus* Temperatura (T), representado na Figura 1.

Figura 1 – Diagrama termodinâmico relacionando P-T de uma substância pura e regiões/fases existentes.



Fonte: MACHADO (1998), traduzido.

Neste diagrama pode-se verificar o comportamento das fases para uma substância pura, destacadas a seguir:

- A – Tp: curva de sublimação, transição da fase sólida para gasosa
- B – Tp: curva de fusão, transição da fase sólida para líquida
- Tp – Cp: curva de ebulição, transição da fase líquida para gasosa

Os pontos Tp, Cp, Pc e Tc são definidos como:

➤ Tp (Ponto triplo): Russell (1994) define como ponto triplo aquele em que há a coexistência das três fases, cada uma em equilíbrio com as demais. Na temperatura deste ponto, a pressão de vapor na fase líquida é a mesma de sublimação do sólido.

➤ Cp (Ponto crítico): ponto de maior temperatura, a qual determina que a partir daquele ponto não existirá distinção entre as fases líquida e gasosa (RUSSELL, 1994). Isso se dá à proporção que é adicionado calor à um sistema líquido-gasoso, as moléculas tendem

a tornar-se gás devido a temperatura aumentar. Entretanto, com o aumento da pressão as moléculas propendem a retornar ao seu estado líquido.

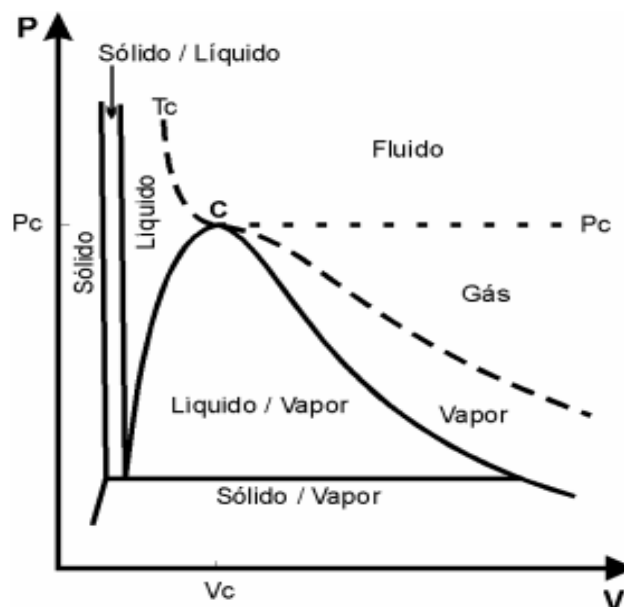
No ponto crítico é estabelecido um valor de temperatura e pressão, denominados temperatura crítica e pressão crítica, respectivamente.

Russel (1995) diz que temperatura crítica (T_c) é aquela que o gás pode ser condensado em decorrência do aumento da pressão. Essa pressão por sua vez denomina-se como pressão crítica (P_c). Ressalta-se que quanto maior forem as forças intermoleculares proporcionalmente a temperatura crítica aumentará.

Para Carrilho et al. (2001) e Russell (1994) quanto mais próximo do ponto crítico, ao longo da curva de equilíbrio líquido-gás, as propriedades intrínsecas convergirão para o mesmo ponto até serem equivalentes, como por exemplo: densidade, viscosidade, índice de refração, condutividade térmica. Em condições superiores a esse ponto tem-se o fluido supercrítico, conquanto ele seja um gás, pode ter a densidade de uma fase líquida e ainda, tem poder de agir como solvente de líquidos e sólidos (ATKINS, 2006).

Quando se deseja estudar a relação pressão (P) e seu volume específico (V), Figura 2, percebe-se a coexistência das fases em seu equilíbrio termodinâmico. Visualiza-se as regiões que há duas fases: sólido – líquido/ sólido – vapor/ líquido – vapor, os quais encontram-se em equilíbrio em determinado valor de pressão e temperatura (FERNANDES et al., 2006).

Figura 2 – Diagrama termodinâmico relacionando P-V de uma substância pura e regiões/fases existentes.

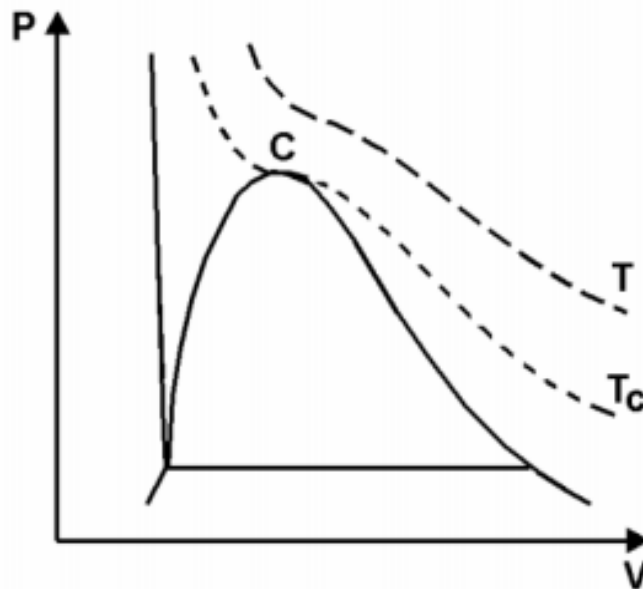


Fonte: FERNANDES et al. (2006)

Assim como explicitado anteriormente, no ponto crítico (C) encontra-se a maior pressão *versus* temperatura para uma substância pura em equilíbrio na sua fase líquido – vapor, não diferenciando-se em suas propriedades.

Fernandes et al. (2006) ressalta que há a possibilidade de traçar isotermas secundárias (linha em que a temperatura se mantém constante) sob a isoterma da temperatura crítica (T_c). Quando a isoterma secundária está acima da T_c não há alteração na fase da substância, mantendo-se em seu estado de vapor, conforme pode ser visualizado na Figura 3.

Figura 3 – Isoterma em $T > T_c$.



Fonte: FERNANDES et al. (2006).

Já para as isotermas T abaixo da isoterma T_c (Figura 4), Fernandes et al. (2006), descreve três possibilidades:

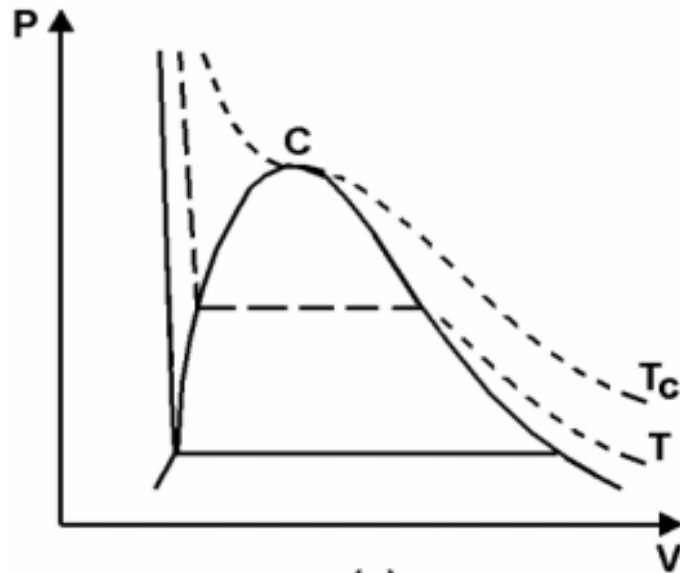
- Altas pressões: a isoterma possui uma inclinação elevada. A substância apresenta-se na sua fase líquida, seu volume quase não sofre alteração. Ao declinar a pressão do sistema, a isoterma encontra-se com a curva, onde o líquido está saturado, ou seja, a substância está em seu estado líquido 100%.

- Segmento horizontal: este por sua vez toca a curva em dois pontos: na extremidade esquerda a substância está em seu estado líquido saturado, ou seja, 100% na fase líquida; e o ponto à direita indica que a substância se encontra em estado de vapor saturado, ou seja, sua concentração é de 100% na fase de vapor, e os pontos intermediários neste segmento indicam

as misturas possíveis de líquido e vapor. Esta mudança ocorre à pressão constante, denominada de pressão de saturação ou pressão de vapor.

- Após o ponto de vapor saturado: a isoterma segue na região de vapor.

Figura 4 – Isoterma em $T < T_c$.



Fonte: FERNANDES et al. (2006).

Para as demais regiões, onde há uma única fase, exige uma relação que envolva a pressão, volume e temperatura em estado de equilíbrio, podendo ser estudadas em função uma das outras.

2.2 EQUILÍBRIO DE FASES

Um sistema homogêneo, isto é, constituído de apenas uma fase com propriedades uniformes, quando observado microscopicamente suas moléculas encontram-se em um mesmo tipo de agregação. Entretanto, ao aplicar uma perturbação a esse sistema pode apresentar-se em duas ou mais fases, ou seja, há coexistência de fases, sendo esta bastante importante na determinação da pureza de uma substância (OLIVEIRA, 2012).

Russel (1994) conceitua *equilíbrio* como o estado em que ocorrem processos opostos com a mesma velocidade, ao tempo que não se observa nenhuma variação, quer dizer, em sistemas fechados termodinamicamente, restringe-se à temperatura e volume constante, ou a temperatura e pressão constantes (FERNANDES et al., 2006).

A coexistência de fases ocorre em condições de temperatura e pressão definidas, onde buscam estabelecer um equilíbrio entre si, além de ser possível a determinação das composições em cada fase, desde que sejam conhecidos os critérios de equilíbrio termodinâmico (CARMO, 2009; FERNANDES et al., 2006).

Para que seja atingido esse equilíbrio termodinâmico, além das temperaturas e pressão serem iguais nas fases em que a substância se apresenta, o potencial químico também deve ser respeitado, para cada constituinte e em qualquer ponto do sistema (CASTELLAN, 1995; CARVALHO, 2019).

Mafra (2005) conceitua os três possíveis potenciais existentes em processos industriais os quais provocam algum tipo de perturbação no sistema:

➤ Potencial térmico: origina o fluxo de calor, a partir da diferença de temperatura (T) e origina o fluxo de calor;

➤ Potencial mecânico: origina o fluxo de trabalho de expansão ou compressão, a partir da diferença de pressão (P);

➤ Potencial químico: responsável pela transferência de massa

Sendo assim:

$$T^I = T^{II}(\text{Potencial térmico}) \quad (01)$$

$$P^I = P^{II}(\text{Potencial mecânico}) \quad (02)$$

$$G^I = G^{II}(\text{Potencial químico}) \quad (03)$$

Onde:

➤ T^i : temperatura na fase i [K]

➤ P^i : pressão na fase i [Pa]

➤ G^i : energia livre de Gibbs na fase i [J/ mol]

➤ I e II: fases da substância em que se apresenta

No entanto, segundo Carmo (2009) a grandeza ‘energia de Gibbs’ (G) é de difícil manipulação, sendo mais viável seu estudo através da fugacidade e seu coeficiente. Assim, relacionam-se as grandezas:

$$G_i - G_i^{gi} = RT \ln \frac{f_i}{P} \quad (04)$$

$$\phi_i = \frac{f_i}{x_i P} \quad (05)$$

Onde:

- f_i : representa a fugacidade
- ϕ_i : representa o coeficiente da fugacidade
- x_i : representa a composição molar do composto i

Para equilíbrios líquido-vapor, as condições de equilíbrio são fornecidas pelos potenciais químicos a uma determinada temperatura e pressão, devendo ser definido também a igualdade das fugacidades para ambas as fases (SILVA, 2014):

$$f_i^I = f_i^{II} \quad (06)$$

Carmo (2019) ressalta que os critérios (1), (2) e (6) podem ser aplicados aos equilíbrios de fases para substâncias puras ou misturas.

Os coeficientes de fugacidade podem ser calculados pela relação termodinâmica generalizada (SILVA, 2014):

$$\ln \phi_i^\alpha = -\frac{1}{RT} \int_{\infty}^{V^\alpha} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_j} - \frac{RT}{V} \right] dV - \ln Z_m^\alpha \quad (07)$$

Onde:

- α : representa a fase a ser calculada
- V : volume total
- n_i : número de moles do componente i
- ϕ_i^α : coeficiente de fugacidade, que pode ser obtido a partir da equação de estado, representado por P na equação (7)

2.3 PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

A modernização da indústria química traz consigo a adequação tecnológica, bem como melhoria na qualidade dos materiais produzidos, sendo necessária a destreza científica dos processos, exigindo-se o conhecimento das propriedades termofísicas das substâncias em manuseio (SOUZA, 2008).

Souza (2008) ressalta que a falta dessas informações acarreta falhas no processo, seja em equipamentos, no desenvolvimento, ou ainda, na elaboração do projeto ao selecionar os valores de referência das propriedades a serem usadas no decorrer do processo.

Dados experimentais de propriedades críticas e termofísicas de constituintes de extratos naturais são bastante escassos na literatura, provavelmente devido a pouca comercialização dessas substâncias puras e principalmente devido à dificuldade na medida experimental (ARAUJO, 1997).

Por se degradarem antes mesmo de alcançar a temperatura crítica há a necessidade de calcular suas propriedades, através de um método preditivo (SILVA, 2014), quando não disponíveis em literaturas.

Neste trabalho trabalharemos com quatro propriedades termodinâmicas:

➤ Temperatura de ebulição (T_b): é o ponto em que a pressão atmosférica se iguala à pressão de vapor do líquido, havendo a mudança do seu estado físico, passagem da forma líquida para vapor. Ou seja, as condições do ambiente determinarão o ponto de ebulição. Toma-se como referência padrão a pressão atmosférica de 1 atm (760 mmHg) (SILVA, 2017; LIMA, 2020).

➤ Temperatura Crítica (T_c) e Pressão Crítica (P_c): Segundo Nannoolal et al. (2007) e Arvelos (2013) e as propriedades T_c e P_c são bastante importantes para correlações termodinâmicas e de fenômenos de transporte, com base em teorias de estados correspondentes para definir as propriedades temperatura e pressão, respectivamente.

➤ E, o fator acêntrico (ω): é a propriedade, relacionada com a esfericidade de substâncias, importantíssima para a descrição do comportamento termodinâmico de componentes puros e/ ou comportamento das fases em uma mistura, utilizados como parâmetros de entrada em algumas equações de estado (EVANGELISTA *et al.*, 2018).

Através deste parâmetro é possível avaliar se o comportamento de um determinado fluido se desvia do princípio dos estados correspondentes. Assim, gases nobres apresentam fatores acênicos aproximadamente nulos, enquanto, para as demais substâncias, seus valores são positivos e inferiores à unidade (ARAUJO, 1997).

2.4 MÉTODOS PREDITIVOS DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

2.4.1 Joback e Reid (1987)

Em 1955 Lydersen desenvolveu os primeiros métodos de contribuição de grupo, através dos quais podiam-se estimar propriedades críticas (ARVELO, 2013). Entretanto, em 1987, Joback e Reid, propuseram para substâncias puras um método de contribuição de grupos para estimar onze propriedades, além dos já avaliados por Lydersen (MOURA et al., 2000).

A principal diferença entre os dois métodos está na descrição funcional para a estimativa da pressão crítica e a proposição da expressão para o cálculo da temperatura de ebulição por contribuição de grupos.

As expressões para temperatura de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica são:

$$T_b = 198,2 + \sum n_i T_{bi} \quad (08)$$

$$T_c = T_b * \left(0,584 + 0,965 \sum n_i T_{ci} - \left(\sum n_i T_{ci} \right)^2 \right)^{-1} \quad (09)$$

$$P_c = \left(0,113 + 0,0032 n_A - \sum n_i P_{ci} \right)^{-2} \quad (10)$$

Onde:

- n_i : número de grupos
- T_{bi} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i [K]
- T_{ci} : valor da temperatura crítica para o grupo i [K]
- P_{ci} : valor da pressão crítica para o grupo i [bar]
- n_A : número total de átomos da molécula

2.4.2 Constantinou e Gani (1994)

Constantinou e Gani (1994) propuseram um novo método de contribuição de grupos para predição da temperatura de ebulição e propriedades críticas para componentes

orgânicos, baseando-se nas estruturas moleculares dos compostos. Nesta feita, formaram dois grupos: o de primeira ordem para grupos funcionais simples e de segunda ordem formados por grupos mais complexos.

Tem-se as seguintes equações:

$$\frac{T_b}{204,359} = \ln \left(\sum n_i T_{bi1} + \sum n_i T_{bi2} \right) \quad (11)$$

$$\frac{T_c}{181,128} = \ln \left(\sum n_i T_{ci1} + \sum n_i T_{ci2} \right) \quad (12)$$

$$(P_c - 1,3705)^{-0,5} - 0,100220 = \left(\sum n_i P_{ci1} + \sum n_i P_{ci2} \right) \quad (13)$$

Onde:

- n_i : número de grupos
- T_{bi1} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i do tipo primeira ordem [K]
- T_{bi2} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i do tipo segunda ordem [K]
- T_{ci1} : valor da temperatura crítica para o grupo i do tipo primeira ordem [K]
- T_{ci2} : valor da temperatura crítica para o grupo i do tipo segunda ordem [K]
- P_{ci1} : valor da pressão crítica para o grupo i do tipo primeira ordem [$\text{bar}^{-0,5}$]
- P_{ci2} : valor da pressão crítica para o grupo i do tipo segunda ordem [$\text{bar}^{-0,5}$]

2.4.3 Ourique e Telles (1997)

Ourique e Telles (1997) propuseram um método de contribuição semi-empírico para estimar propriedades de compostos orgânicos puros, no qual a composição e a estrutura são ambas levadas em conta.

Tem-se as seguintes equações:

$$(T_b)_q = 172,69 + \sum_{j=1}^{N_q} n_{j,q} (g(T_b)_{j,q}) + \sum_{k=1}^{S_q} m_{k,q} (g(T_b)_{12})_{k,q} \quad (14)$$

$$(T_c)_q = 299,80 + \sum_{j=1}^{N_q} n_{j,q} (g(T_c)_{j,q}) + \sum_{k=1}^{S_q} m_{k,q} (g(T_c)_{12})_{k,q} \quad (15)$$

$$(P_c)_q^{-2} = 0,0951 + \sum_{j=1}^{N_q} n_{j,q} (g(P_c)_{j,q}) + \sum_{k=1}^{S_q} m_{k,q} (g(P_c)_{12})_{k,q} \quad (16)$$

Onde:

- $n_{j,q}$: número de grupos individualmente
- $m_{k,q}$: número de par de grupos (interação entre componentes)
- $g(T_b)_{j,q}$: valor da temperatura de ebulição do grupo individualmente [K]
- $(g(T_b)_{12})_{k,q}$: valor da temperatura de ebulição da interação entre os pares [K]
- $g(T_c)_{j,q}$: valor da temperatura crítica do grupo individualmente [K]
- $(g(T_c)_{12})_{k,q}$: valor da temperatura crítica da interação entre os pares [K]
- $g(P_c)_{j,q}$: valor da pressão crítica do grupo individualmente [bar^{-2}]
- $(g(P_c)_{12})_{k,q}$: valor da pressão crítica da interação entre os pares [bar^{-2}]

2.4.4 Marrero e Fontdevila (1999)

Marrero e Fontdevila (1999) propuseram uma técnica para predição de compostos orgânicos puros. Este estudo foi dividido em três níveis: o primário, que considera a contribuição por grupos mais simples e os demais, considera o envolvimento de grupos polifuncionais e grupos estruturais (ARVELOs, 2013).

As expressões são as seguintes:

$$T_b = 204,66 + \sum n_i T_{bi} \quad (17)$$

$$T_c = \frac{T_b}{(0,5851 - 0,9286 \sum n_i T_{ci} - (\sum n_i T_{ci})^2)} \quad (18)$$

$$P_c = \left(0,1285 - 0,0059 n_A - \sum n_i P_{ci} \right)^{-2} \quad (19)$$

Onde:

- n_i : número de grupos
- T_{bi} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i [K]
- T_{ci} : valor da temperatura crítica para o grupo i [K]
- P_{ci} : valor da pressão crítica para o grupo i [bar]
- n_A : número total de átomos da molécula

2.4.5 Marrero e Gani (2001)

Marrero e Gani (2001) este método de contribuição leva em consideração os grupos e ligações e não apenas a contabilização de grupos (ARVELOS, 2013), bem como grupos de até terceira ordem.

As expressões são as seguintes:

$$\frac{T_b}{222,543} = \ln \left(\sum n_i T_{bi1} + \sum m_j T_{bj2} + \sum o_k T_{bk3} \right) \quad (20)$$

$$\frac{T_c}{231,239} = \ln \left(\sum n_i T_{ci1} + \sum m_j T_{cj2} + \sum o_k T_{ck3} \right) \quad (21)$$

$$(P_c - 5,9827)^{-0,5} - 0,108998 = \left(\sum n_i P_{ci1} + \sum m_j P_{cj2} + \sum o_k P_{ck3} \right) \quad (22)$$

Onde:

- $n_i/ m_j/ o_k$: número de grupos
- T_{bi1} : valor da temperatura de ebulição para o grupo i do tipo primeira ordem [K]
- T_{bj2} : valor da temperatura de ebulição para o grupo j do tipo segunda ordem [K]
- T_{bk3} : valor da temperatura de ebulição para o grupo k do tipo terceira ordem [K]
- T_{ci1} : valor da temperatura crítica para o grupo i do tipo primeira ordem [K]
- T_{cj2} : valor da temperatura crítica para o grupo j do tipo segunda ordem [K]
- T_{ck3} : valor da temperatura crítica para o grupo k do tipo terceira ordem [K]
- P_{ci1} : valor da pressão crítica para o grupo i do tipo primeira ordem [bar]
- P_{cj2} : valor da pressão crítica para o grupo j do tipo segunda ordem [bar]
- P_{ck3} : valor da pressão crítica para o grupo k do tipo terceira ordem [bar]

2.4.6 Sanghvi e Yalkowsky (2006)

Para o método de predição desenvolvido por Sanghvi e Yalkowsky (2006), a temperatura de ebulição relaciona-se com a entalpia e a entropia. Estas por sua vez levam em consideração duas variáveis independentes: o flexibilizador (τ) e de ligação de hidrogênio (HBP).

As expressões são as seguintes:

$$T_b = \frac{\sum n_i b_i}{[87 + 0.35(\tau) + 15(HBP)]} \quad (23)$$

$$\tau = (sp^3 + 0.5 * sp^2 + 0.5 * rings - 1) \quad (24)$$

$$HBP = \sqrt{(\#OH) + (\#COOH) + 0.0625(\#NH)} \quad (25)$$

Onde:

- n_i : número de grupos
- b_i : valor de contribuição para entalpia de ebulição para o grupo i [kJ/mol]
- sp^3 e sp^2 : número total de não-anéis e átomos sp^3 e sp^2 não emparelhados
- rings: número de anéis simples independentes, fundido ou conjugados presentes na molécula
- #: número respectivo aos grupos alifáticos ou aromáticos presentes

2.4.7 Han e Peng (1993)

No método de Han e Peng (1993) foi desenvolvido um método de cálculo de fator acêntrico para compostos orgânicos o qual considera apenas as informações estruturais dos compostos, sendo definido pela equação:

$$\omega = 0,004423 * \left[\ln \left(3,3063 + \sum n_i \epsilon_i \right) \right]^{3,651} \quad (26)$$

Onde:

- n_i : número de grupos

- ϵ_i : contribuição do grupo para o fator acêntrico

2.4.8 Constantinou et al. (1995)

Constantinou et al. (1995) leva em consideração dois tipos de grupos, assim como no método de predição das propriedades críticas, sendo descrito pela equação:

$$\omega = 0,4085 \left[\ln \left(1,1507 + \left(\sum n_i \omega_{i1} + \sum n_i \omega_{i2} \right) \right)^{1/0,5050} \right] \quad (27)$$

Onde:

- n_i : número de grupos
- ω_{i1} : contribuição do grupo para o fator acêntrico do tipo primeira ordem
- ω_{i2} : contribuição do grupo para o fator acêntrico do tipo segunda ordem

2.5 EXTRATOS NATURAIS REGIONAIS

A região Amazônica é considerada um dos ecossistemas mais ricos de todo o planeta, fazendo com que essa região detenha alto grau de complexidade, exemplificada pela sazonalidade característica da mesma, além de possuir inúmeras fontes de matéria-prima, em destaque os Produtos Florestais Não-Madeireiros, que têm sido explorados pelo homem há milhares de anos por meio do extrativismo vegetal (CÁUPER, 2006). Esses produtos consistem em bens de origem biológica que não sejam madeira, tais como, sementes, flores, frutos, folhas, raízes, cascas, látex, óleos vegetais e essenciais, corantes, fibras, resinas, entre outros (TICKTIN, 2004).

Os óleos vegetais constituem o grupo de substâncias que podem ser extraídas de várias partes de uma planta, principalmente das sementes ou grãos de oleaginosas. Estes diferenciam-se dos óleos essenciais por não apresentarem volatilidade, não serem obtidos através de destilação e por serem constituídos predominantemente de ésteres de glicerol e ácidos graxos (monoglicerídeos, diglicerídeos e triglicerídeos), além de outros compostos como os ácidos graxos livres, tocoferol, carotenóides, proteínas, esteróis, clorofilas e vitaminas (HUI, 1996).

Devido às suas propriedades biológicas, bioquímicas e fitoquímicas, estes óleos possuem diversas possibilidades de aplicação: desde o uso em cosméticos, fármacos naturais

e indústria de alimentos. Neste último, sua aplicação vai desde a produção de óleo vegetal bruto e refinado ou, em alguns casos, podem ser consumidos *in natura* a exemplo, o óleo de oliva (*Olea europaea*) e o óleo de palma ou azeite de dendê (*Elaeis Guineensis*) (FERREIRA, 2016).

Já na indústria cosmética, os óleos vegetais também possuem aplicações como, por exemplo, o óleo de andiroba (*Carapa guianensis Aubl.*) e o óleo de buriti (*Mauritia flexuosa L. f.*) utilizados na fabricação de loções hidratantes, sabonetes, shampoos e/ou como fixador de fragrâncias (FERREIRA, 2016).

Na indústria de fármacos e fitoterápicos têm-se o uso do óleo de cumaru (*Dipteryx odorata Aubl.*) para o tratamento da tuberculose, além ser utilizado para reumatismo, otalgias (dor de ouvido) e outros (ARAÚJO et al., 2004).

2.5.1 Óleo de Jambu

O jambu (*Spilanthes oleracea*) pertence à família Asteraceae, nativa da Amazônia, de clima tropical. Essa planta é uma hortaliça bastante cultivada e consumida na região Norte do Brasil, principalmente no estado do Pará.

Por ser uma hortaliça é bastante presente na culinária nortista do Brasil, compondo diversos pratos, os principais: pato no tucupi, o tacacá e saladas. Pode ser usado também no preparo de infusões de folhas e flores na medicina tradicional para o tratamento de dispepsia, malária, infecções de boca e garganta, além de ser cicatrizante, anestésica, diurética, digestiva (REVILLA, 2004).

Lorenzi e Matos (2002) diz que o jambu possui em torno de 0,7% de óleo essencial, os quais estão sendo fornecidos direto para as indústrias de cosméticos, pela sua qualidade farmacológica. Tal efeito farmacológico dar-se pelas suas substâncias químicas: transcariofileno, germacreno D, L-dodeceno, espatulenol e espilantol (BORGES et al., 2012).

No trabalho de Borges et al. (2014) verificou-se que o óleo essencial de jambu é composto por 66 substâncias, os quais compõe 98,25% do óleo essencial total. Dentre estes os compostos majoritários são (em fração mássica): β -pineno (7,79%), β -mirceno (15,86%), Dictamnol (14,11%), Germacreno D (7,98%), carotol (3,41%), β -cis-ocimeno (2,85%), dehydro aromadendrene (2,25%), hexadecil acetato (2,52%) e outros constituintes menores (41,48%).

2.5.2 Óleo de Tucumã

O tucumã (*Astrocaryum vulgare*) ou tucumã do Pará é um fruto oleaginoso, de uma palmeira amazônica. Encontra-se em formato ovóide, composto por uma polpa grudenta e fibrosa e de coloração amarelo alaranjada, nutritivo, rico em lipídeos e compostos como a provitamina A. Apresenta uma única semente (amêndoa), de onde pode ser extraída uma gordura de cor branca (VASCONCELOS, 2010).

Esta espécie encontra-se em terras firmes, com distribuição geográfica do Norte da América do Sul, centralizado no leste da Amazônia. Outra espécie de relevância é a espécie originária do estado do Amazonas, o tucumã do Amazonas (*A. tucuma Mart.*) seguindo a mesma distribuição geográfica do tucumã do Pará, porém estende-se até o norte da América do Sul acima do Estado do Pará (VASCONCELOS, 2010).

O uso desse fruto dar-se de várias formas. Para o tucumã do Pará: consumo *in natura*, em sorvete, picolé, alimentação de animais. Seu óleo pode ser aplicado como: óleo comestível, sabão, cosméticos e medicamentos (SHANLEY, 2005).

Já o tucumã do Amazonas possui usos análogos, porém destaca-se seu uso *in natura* em sanduíches, recheios para tapioca e pizzas. O caroço aplica-se na alimentação de animais e defumação de borracha (SHANLEY, 2005).

Segundo Guedes (2006), o óleo de tucumã apresenta a composição predominantemente em ácidos graxos poliinsaturados, como: ácido oleico (58,5%), ácido linoléico (3,8%), ácido linolênico (5,5%) e ácidos graxos saturado, como: o ácido palmítico (29,6%) e ácido esteárico (3%).

2.5.3 Óleo de Copaíba

O óleorresina de copaíba é proveniente de árvores pertencentes ao gênero *Copaifera spp.*, encontradas na África e em regiões tropicais e subtropicais da América do Sul, em destaque: na Venezuela, Guianas, Colômbia e Brasil (SHANLEY; MEDINA, 2005).

Estas plantas possuem casca aromática, folhagem densa, flores pequenas e frutos secos do tipo vagem. As sementes são de cor preta, ovóide com um arilo amarelo rico em lipídeos. Das 72 espécies, pode-se encontrar 16 delas exclusivamente no Brasil, principalmente nos estados do Pará e Amazonas (VEIGA; PINTO, 2002).

Segundo Ferreira (2016), devido às suas propriedades físicas, bioquímicas, biológicas e fito-químicas, o óleo-resina de copaíba possui várias possibilidades de aplicação destacadas a seguir:

➤ Na indústria de cosméticos: pode ser usado na fabricação de sabonetes, cremes, shampoos e loções capilares, além de ser um excelente fixador de fragrâncias.

➤ Na indústria de tintas e vernizes: pode ser usado como secativo e/ou solventes para tintas em pó. Ainda, é usado como “amolecedor” de vernizes, além de dar às tintas e vernizes a característica de resistência a altas temperaturas.

➤ Fins medicinais: sua principal aplicação é como anti-inflamatório e cicatrizante, além de ser indicado para quem possui sinusite, dermatite e psoríase. Possui ainda efeito analgésico, antiúlceral, antitumoral e antirreumático e é indicado como repelente de insetos, além de ter atividade antimicrobiana e antibacteriana.

➤ Indústria de fotografia: pode ser usado como acelerador na revelação de fotos, como combustível para iluminação, como inibidor de corrosão de aço em solução salina, dentre outras aplicações.

O óleo-resina de copaíba recebe essa denominação por ser uma mistura do óleo com uma parte resinosa não volátil cuja coloração varia do amarelo ao marrom. Sua composição química é definida em muitos trabalhos, como sendo uma mistura de ácidos diterpenos e de sesquiterpenos (FERREIRA, 2016).

Galúcio (2016) em seu trabalho caracteriza o óleo-resina de copaíba é composto por: 92,43% de sesquiterpenos e 7,58% de ácidos diterpenos. Dos quais dividem-se: α -copaeno (18,55%), β -Cariofileno (31,40%), germacreno D (6,74%), γ -cadineno (5,70%), α -humuleno (4,85%) e outros de menor composição (25,19%), ácido copálico (3,04%), ácido pinifólico (0,57%) e outros não identificados (3,97%).

Os sesquiterpenos e diterpenos são metabolitos secundários sintetizados por plantas com a função de atuarem como inseticidas. Estes fazem parte das famílias de compostos com diversidade em suas estruturas, podendo ser classificados de acordo com o número de unidades de isoprenos (compostos de cinco carbonos). Assim, os sesquiterpenos possuem três unidades de isopreno (C15) e os diterpenos possuem quatro unidades (C20) (GALÚCIO, 2016).

3 MÉTODOS E PROCEDIMENTOS

Dentre as propriedades críticas e termofísicas de interesse nesse trabalho para as substâncias puras (hidrocarbonetos, ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos e álcoois), estão: temperatura de ebulição e propriedades críticas (T_c e P_c), além do fator acêntrico, discriminados na Tabela 1 por métodos a ser aplicados.

Tabela 1 – Métodos a serem usados para estimar as propriedades críticas dos componentes puros neste trabalho.

Propriedades	Método
T_b (Temperatura de ebulição)	Joback e Reid (1987)
	Constantinou e Gani (1994)
	Ourique e Telles (1997)
	Marrero e Fontdevila (1999)
	Marrero e Gani (2001)
	Sanghvi e Yalkowsky (2006)
T_c e P_c (Temperatura crítica e Pressão crítica)	Joback e Reid (1987)
	Constantinou e Gani (1994)
	Ourique e Telles (1997)
	Marrero e Fontdevila (1999)
	Marrero e Gani (2001)
ω (Fator acêntrico)	Han e Peng (1993)
	Constantinou et al. (1995)

Fonte: Própria.

3.1 DADOS EXPERIMENTAIS

Inicialmente realizou-se um levantamento das literaturas sobre os métodos de contribuição de grupos e correlações utilizando os portais de periódicos da CAPES e afins. Foram selecionados os métodos mais estudados e os mais recentes a fim de compará-los para definir qual seria o mais indicado para prever as propriedades termodinâmicas dos grupos funcionais aqui em estudo.

3.1.1 Propriedades Críticas (pressão e temperatura) e Termofísicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico)

Segundo Veggi (2009), a determinação (experimental ou calculada) das propriedades termodinâmicas, podem ser limitadas devido a degradação de compostos de interesse presente em extratos de produtos naturais. Podendo estas estar relacionadas às condições de operações de equipamentos à altas pressões e/ ou temperaturas.

Assim essa problemática pode ser contornada ao utilizar-se métodos de contribuição de grupos. A partir deste trabalho será identificado o melhor método preditivo, estatisticamente, para determinado grupo funcional orgânico, neste caso os: hidrocarbonetos, ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos e álcoois, principais componentes encontrados em extratos naturais.

Na tabela 2 resume as referências literárias utilizadas para fins de comparação com o valor calculado com ou a partir de cada método preditivo em estudo neste trabalho.

Tabela 2 – Referência dos dados experimentais de propriedades críticas e termofísicas de ácidos graxos, ésteres de ácidos graxos, álcoois e hidrocarbonetos.

Grupo funcional	Nº de substâncias	Referência literária
Ésteres de ácidos graxos	20	SIMMROCK et al. (1986)/
Ácidos graxos	20	AMBROSE e GUIASSE (1987)
Álcoois	30	YAWS (2008)
Hidrocarbonetos	30	YAWS (2008)

Fonte: Própria.

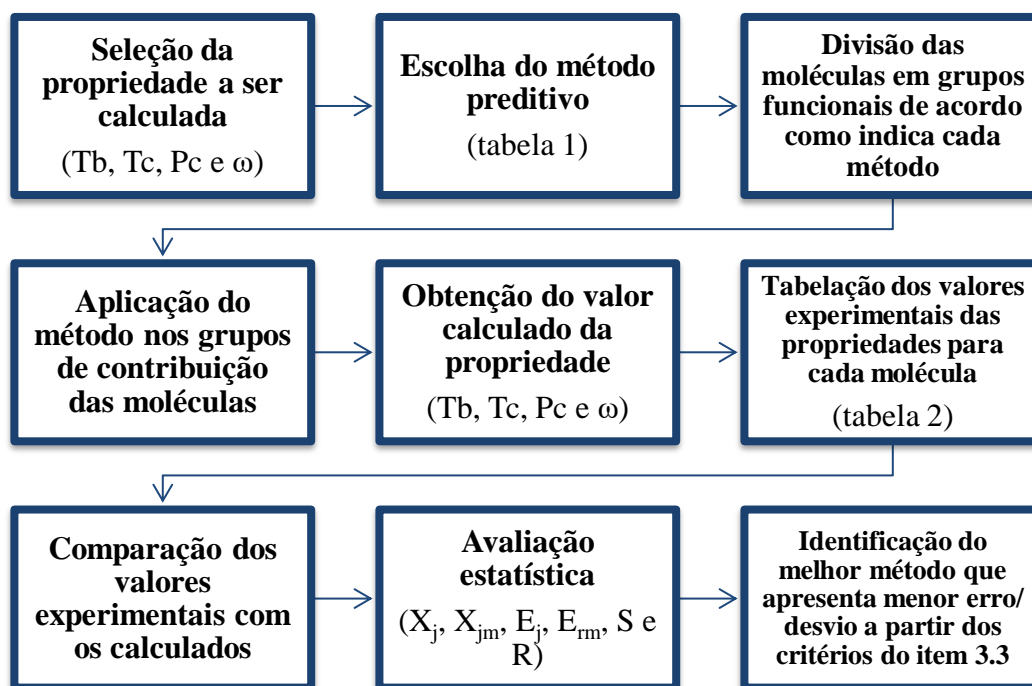
3.2 CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

Para as propriedades Temperatura de ebulição e Propriedades críticas (Temperatura crítica e Pressão crítica), utilizou-se os métodos preditivos propostos por: Joback e Reid (1987), Constantinou e Gani (1994), Ourique e Telles (1997), Marrero e Fontdevila (1999), Marrero e Gani (2001) e Sanghvi e Yalkowsky (2006).

Já para o cálculo do fator acêntrico utilizou-se dois métodos de contribuição que se baseiam na estrutura molecular: Han e Peng (1993) e Constantinou et al. (1995).

Na figura 5 pode ser observado o desenho metodológico para a realização dos cálculos das propriedades supracitadas para os grupos funcionais listados na tabela 2.

Figura 5 – Desenho metodológico para a definição do melhor método de contribuição de grupo para as propriedades: Temperatura de ebulição e propriedades críticas (pressão e temperatura).



Fonte: Própria.

3.3 CRITÉRIOS DE ANÁLISE DAS PROPRIEDADES CALCULADAS (TEMPERATURA DE EBULIÇÃO, TEMPERATURA CRÍTICA, PRESSÃO CRÍTICA E FATOR ACÊNTRICO)

A atribuição de significados físicos a parâmetros de uma substância é requisito importante ao se utilizar modelos empíricos, sendo desta forma possível a identificação da influência de cada propriedade no desempenho do processo (MARTÍNEZ et al., 2003).

Portanto como critério de análise das propriedades calculadas através dos métodos preditivos em estudo, baseiam-se em medidas de tendência central e medidas de dispersão descritas a seguir:

a) Erro Relativo Percentual (X_j)

É o quociente entre os valores calculados de cada propriedade através de cada método preditivo e os valores experimentais advindos das literaturas, em módulo, para se obter resultados positivos.

$$X_j = \frac{Y_{calculado} - Y_{experimental}}{Y_{experimental}} * 100 \quad (28)$$

Em módulo:

$$E_j = \left| \frac{Y_{calculado} - Y_{experimental}}{Y_{experimental}} \right| * 100 \quad (29)$$

Onde:

- X_j : erro relativo percentual
- E_j : erro relativo percentual (em módulo)
- $Y_{calculado}$: valores das propriedades calculadas através dos métodos preditivos
- $Y_{experimental}$: valores experimentais das propriedades advindas de literaturas

b) Média do Erro Relativo Percentual (X_{rm})

É a medida de tendência central do erro relativo percentual:

$$X_{rm} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j \quad (30)$$

Em módulo:

$$E_{rm} = \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E_j \right| \quad (31)$$

Onde:

- X_{rm} : média do erro relativo percentual
- X_j : erro relativo percentual

- E_{rm} : média do erro relativo percentual (em módulo)
- E_j : erro relativo percentual (em módulo)
- N : número de amostras

c) Desvio Padrão (S)

É a medida da dispersão dos erros relativos percentuais em torno da média:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (X_j - X_{rm})^2} \quad (32)$$

Onde:

- X_j : erro relativo percentual
- X_{rm} : média do erro relativo percentual
- N : número de amostras

e) Faixa de Erro (R)

É a diferença entre os erros relativos percentual de maior e o menor valor

$$R = X_{j,máximo} - X_{j,mínimo} \quad (33)$$

Onde:

- $X_{j,máximo}$: erro relativo percentual de valor máximo
- $X_{j,mínimo}$: erro relativo percentual de valor mínimo

Os parâmetros para definição dos melhores métodos preditivos para as propriedades termodinâmicas em estudo são:

- Medida de tendência central: média do erro relativo percentual (X_{rm}).
- Medida de dispersão: desvio padrão (S).

E como critério, tem-se:

➤ Menor valor da média do erro relativo percentual (X_{rm}) e do desvio padrão (S) – tem-se o melhor método.

➤ Ou se, obtiver menor média correspondente ao maior desvio padrão, ou vice-versa, selecionar-se o método preditivo pelo menor valor de faixa de erro (R).

O erro relativo percentual e a média em módulo (E_j e E_{rm}) são utilizados para caracterizar melhor os erros que podem ser compensados por desvios positivos ou negativos quando calculados por X_j e X_{rm} .

3.4 PREDIÇÕES DAS PROPRIEDADES PARA EXTRATOS NATURAIS

As propriedades preditas para algumas substâncias puras serão relacionadas aos compostos contribuintes dos extratos naturais selecionados (óleo de jambu, de tucumã e de copaíba), a exemplos: β -caroteno, α -tocoferol, ácidos graxos e alguns ésteres de ácidos graxos.

A fim de determinar as propriedades dos extratos selecionados, tomará como fundamento as avaliações estatísticas realizadas neste trabalho, tendo como critério de divisão da molécula proposto por cada método preditivo indicado para o grupo funcional constituinte dos respectivos extratos naturais.

Para a identificação das propriedades físicas dos extratos será utilizada o método de Kay (1936), o qual consiste em combinar o valor da propriedade de cada constituinte e a sua respectiva fração mássica em relação a sua composição no óleo, desta forma tem-se:

$$M_{\text{óleo}} = \sum W_A * M_A \quad (34)$$

$$T_{b,\text{óleo}} = \sum W_A * T_{b,A} \quad (35)$$

$$T_{c,\text{óleo}} = \sum W_A * T_{c,A} \quad (36)$$

$$P_{c,\text{óleo}} = \sum W_A * P_{c,A} \quad (37)$$

Onde:

- $M_{\text{óleo}}$: massa molar do óleo [mol]
- M_A : massa molar do constituinte [g/mol]

- W_A : fração molar do constituinte
- $T_{b,A}$: temperatura de ebulição do constituinte [K]
- $T_{c,A}$: temperatura crítica do constituinte [K]
- $P_{c,A}$: pressão crítica do constituinte [bar]
- $T_{b,\text{óleo}}$: temperatura de ebulição do óleo [K]
- $T_{c,\text{óleo}}$: temperatura crítica do óleo [K]
- $P_{c,\text{óleo}}$: pressão crítica do óleo [bar]

Será realizada a predição das propriedades dos seguintes extratos naturais: óleo de jambu, de tucumã e de copaíba. A composição percentual de cada constituinte destes extratos foi selecionada das literaturas indicadas na tabela 3. Assim, será possível identificar qual o estado de agregação das moléculas de uma substância pura e de extratos naturais quando submetidos a diferentes condições de pressão e temperatura.

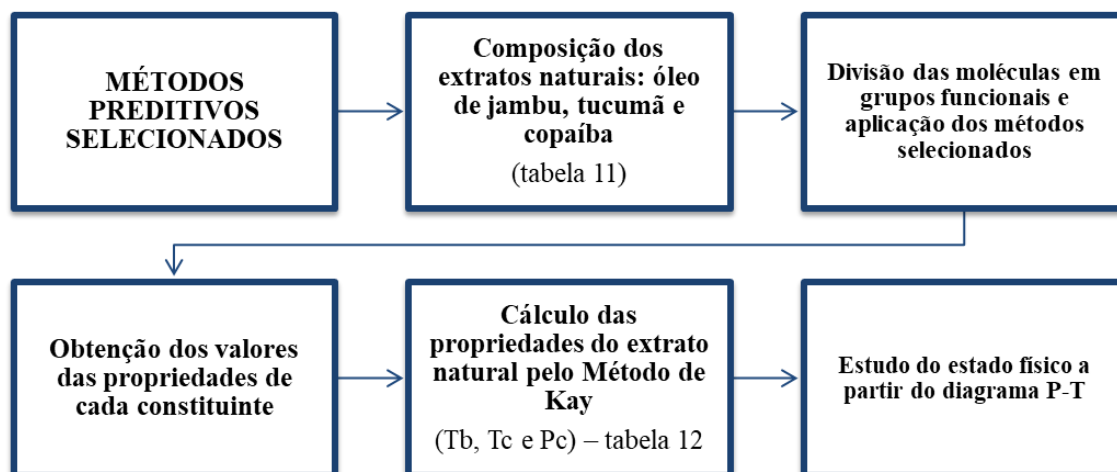
Tabela 3 – Referência da composição dos óleos e extratos utilizados neste presente trabalho.

Óleos e Extratos em estudo	Referências
Óleo de jambu	BORGES et al. (2014)
Óleo de tucumã	VASCONCELOS (2010)
Óleo de copaíba	GALÚCIO (2016)

Fonte: Própria.

Na figura 6 pode ser observado o desenho metodológico para a realização dos cálculos das propriedades supracitadas para os extratos naturais listados na tabela 3.

Figura 6. Desenho metodológico para a definição do melhor método de contribuição de grupo para as propriedades: Temperatura de ebulição e propriedades críticas (pressão e temperatura) de extratos naturais de interesse desse trabalho.



Fonte: Própria.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 AVALIAÇÃO DOS MÉTODOS DE PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES DE COMPONENTES PUROS

4.1.1 Temperatura de Ebulição e Propriedades Críticas

Os compostos selecionados para a avaliação dos métodos preditivos em estudo foram extraídos do trabalho de Carvalho Junior (2000), dispostos no anexo A. E os valores de referência dos mesmos retirou-se das literaturas dispostas na tabela 2.

Os resultados obtidos para a avaliação das propriedades: temperatura de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica das funções químicas: alcanos, alcenos, hidrocarbonetos aromáticos, álcoois, ésteres e ácidos graxos ou carboxílicos com seus respectivos parâmetros estatísticos, estão dispostos nos anexos B, C e D.

4.1.1.1 Hidrocarbonetos

Quando se trata de estimação de propriedades físicas e críticas de hidrocarbonetos, pouco se tem informação de interferência das ligações existentes nas cadeias. Por este motivo, optou-se em fazer a aplicação dos métodos para a classe dos hidrocarbonetos, de acordo com a sua classificação:

- a) Saturados – alcanos de cadeia simples, ramificados e cíclicos
- b) Insaturados – alcenos e alcinos de cadeia simples, ramificados e cíclicos
- c) Aromáticos

Os métodos preditivos mais indicados para a estimação de valores da temperatura de ebulição e das propriedades críticas (temperatura e pressão crítica) dos hidrocarbonetos indicados acima estão dispostos na tabela 4, 5 e 6, respectivamente.

Tabela 4 – Métodos selecionados para estimação de temperatura de ebulição (T_b) para hidrocarbonetos.

Hidrocarbonetos	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Saturados	15	-0,3085	3,9804	15,5402	Joback e Reid (1987)
Insaturados	15	0,1324	4,4991	18,2177	Ourique e Telles (1997)
Aromáticos	15	-3,5784	2,0577	6,4743	Constantinou e Gani (1994)

Fonte: Própria.

Tabela 5 – Métodos selecionados para estimação de temperatura crítica (T_c) para hidrocarbonetos.

Hidrocarbonetos	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Saturados	15	-0,4698	4,4168	16,2281	Joback e Reid (1987)
Insaturados	15	-0,1792	1,8645	7,7192	Marrero e Gani (2001)
Aromáticos	15	-3,4538	2,4111	9,9808	Constantinou e Gani (1994)

Fonte: Própria.

Tabela 6 – Métodos selecionados para estimação de pressão crítica (P_c) para hidrocarbonetos.

Hidrocarbonetos	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Saturados	15	-0,8926	3,9811	16,2472	Joback e Reid (1987)
Insaturados	15	-0,6135	4,4397	17,4789	Joback e Reid (1987)
Aromáticos	15	-3,9310	4,8458	14,5786	Joback e Reid (1987)

Fonte: Própria.

Ao buscar referências nas literaturas de métodos de contribuições de grupos para a estimação de temperatura de ebulição para os hidrocarbonetos observou-se que as aplicações são feitas de modo geral ao grupo funcional no todo.

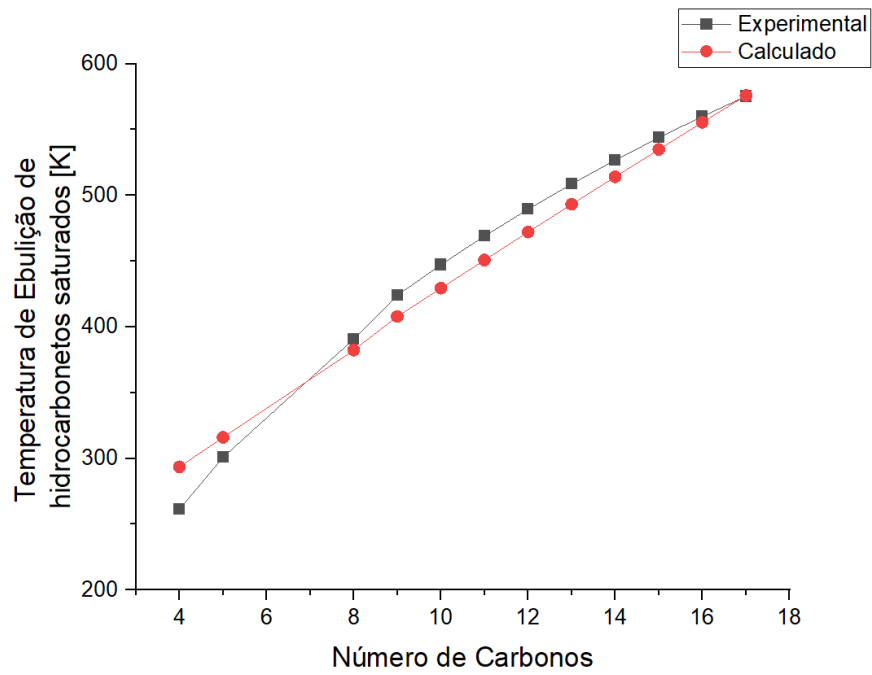
Neste estudo para os alcanos o método mais indicado (aquele que obteve menor erro relativo e desvio padrão) foi o de Joback e Reid (1987), o que pode ser justificado por serem compostos de cadeias mais simples, ou seja, a frequência de cada grupo presente nas cadeias possui mais influência na estimação das propriedades em estudo do que a interação entre estes grupos e parâmetros estruturais.

Diferentemente para os alcenos e alcinos, o método de Ourique e Telles (1997) mostrou-se mais indicado, o que pode estar relacionado a forma de cálculo da temperatura de ebulição, que no método citado leva em consideração a composição e estrutura dos compostos, inclusive as ligações existentes entre os grupos que os compõe. Para a temperatura crítica, o método mais indicado é o de Marrero e Gani (2001) o qual considera que os grupos podem contribuir em três ordens, além de considerar as ligações existentes entre os grupos constituintes da molécula. Já para a pressão crítica, o método de Joback e Reid (1987) é o indicado, pois para essa estimativa leva-se em consideração apenas o número total de átomos da molécula e a contribuição dos grupos presentes.

Para os aromáticos, o método de Constantinou e Gani (1994) apresentou melhores resultados estatísticos para a estimativa das temperaturas de ebulição e crítica, pois neste método há duas partes importantes para os parâmetros: a primeira que inclui uma constante universal para o ajuste da equação em sua regressão, a fim de minimizar o desvio padrão entre os valores experimentais; e a segunda, que divide os grupos em ordens de contribuição, onde o primeiro é composto por grupos mais simples e o de segunda, composto por grupos mais complexos. Para a estimativa da pressão crítica segue a mesma justificativa dos hidrocarbonetos insaturados.

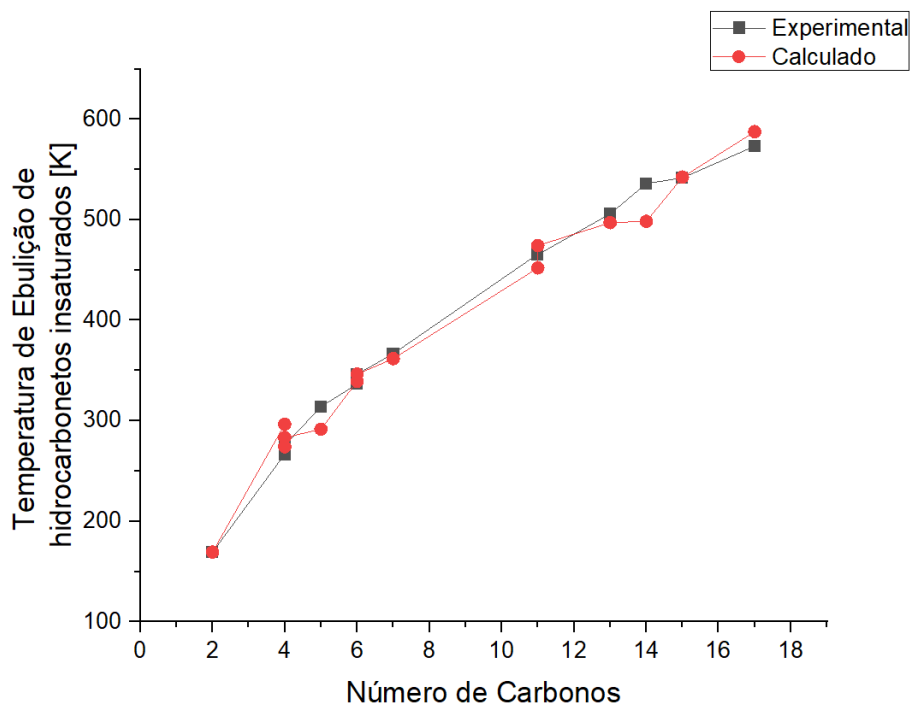
Como representação da seleção dos métodos preditivos indicados nas tabelas 4, 5 e 6, as figuras 7 a 15 apresentam as consistências entre os dados experimentais e a predição das temperaturas de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica, em função do número de carbonos presentes na cadeia.

Figura 7 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos saturados.



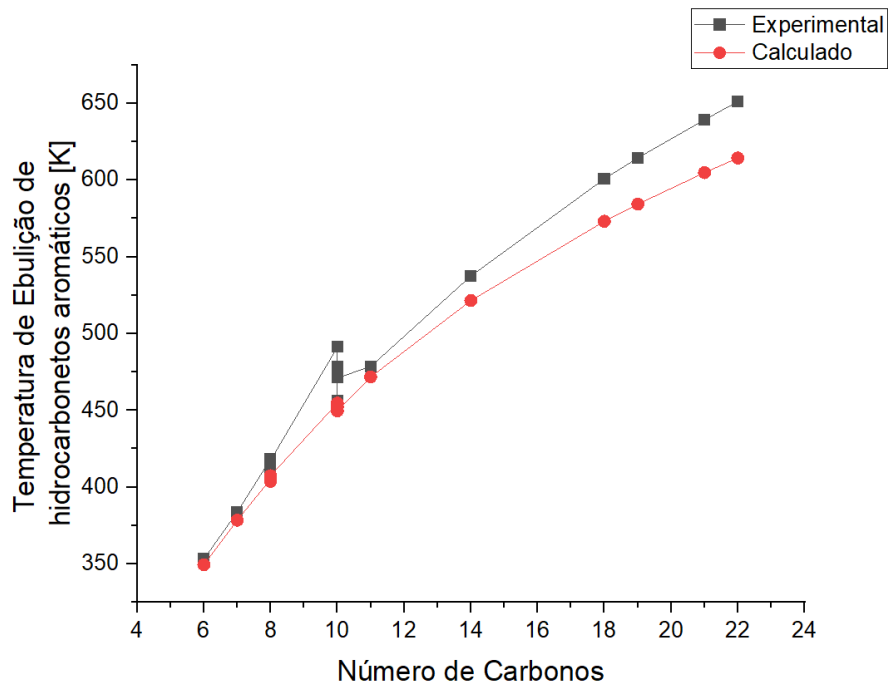
Fonte: Própria.

Figura 8 — Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos insaturados.



Fonte: Própria.

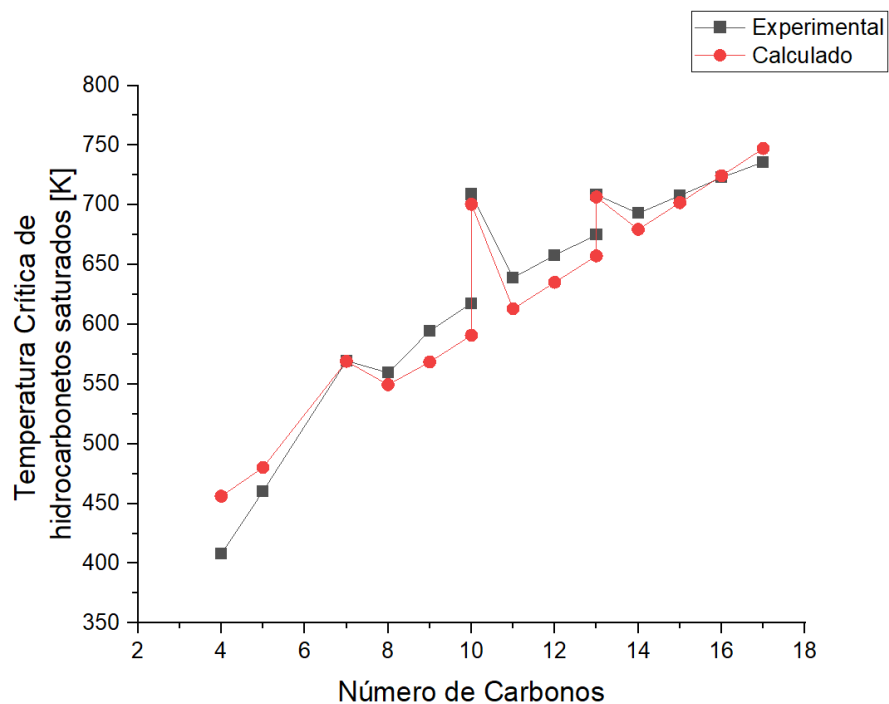
Figura 9 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos aromáticos.



At

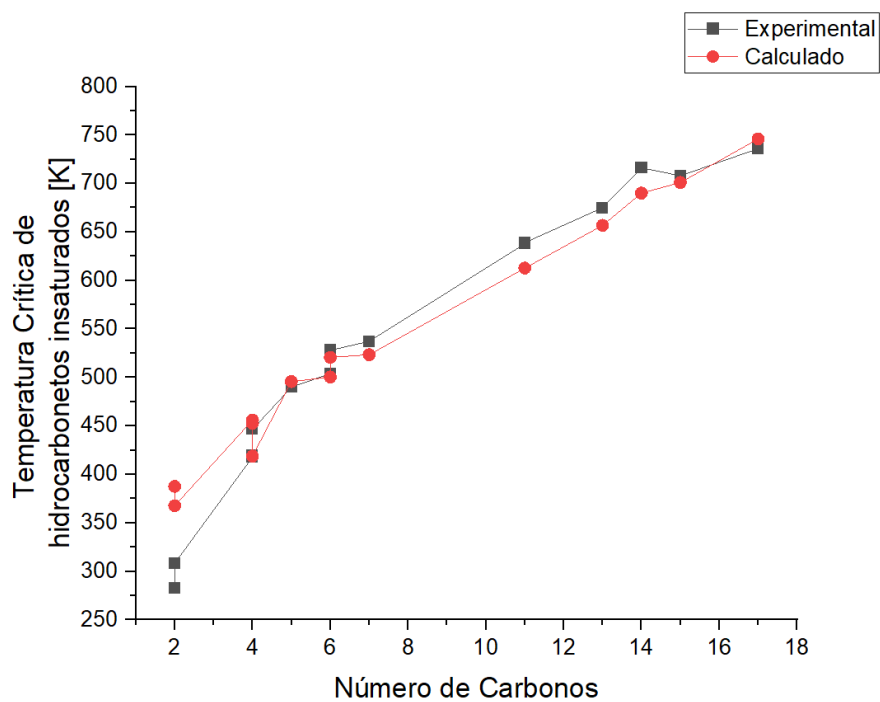
Fonte: Própria.

Figura 10 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos saturados.



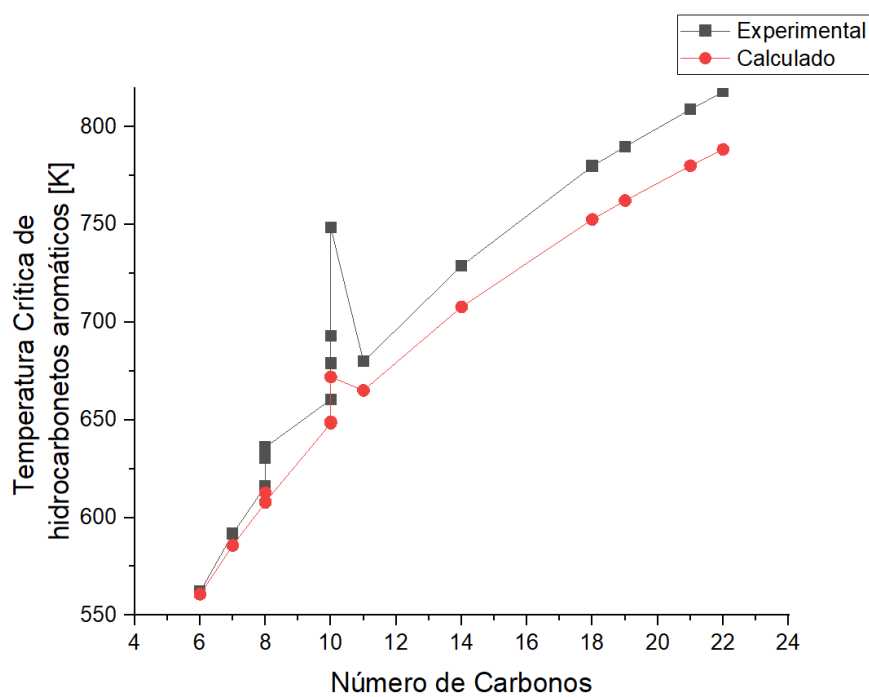
Fonte: Própria.

Figura 11 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos insaturados.



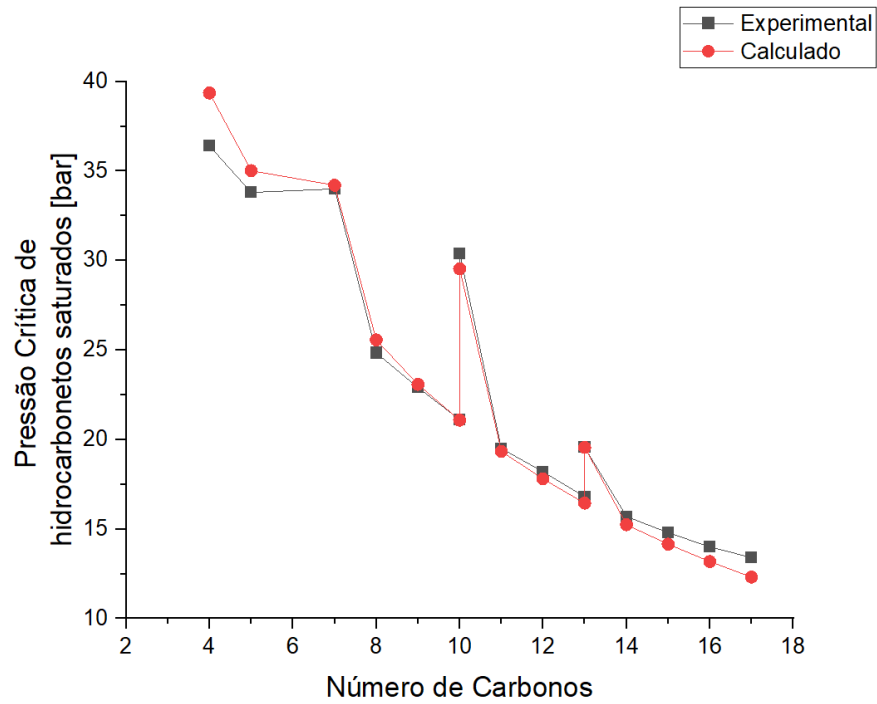
Fonte: Própria.

Figura 12 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de hidrocarbonetos aromáticos.



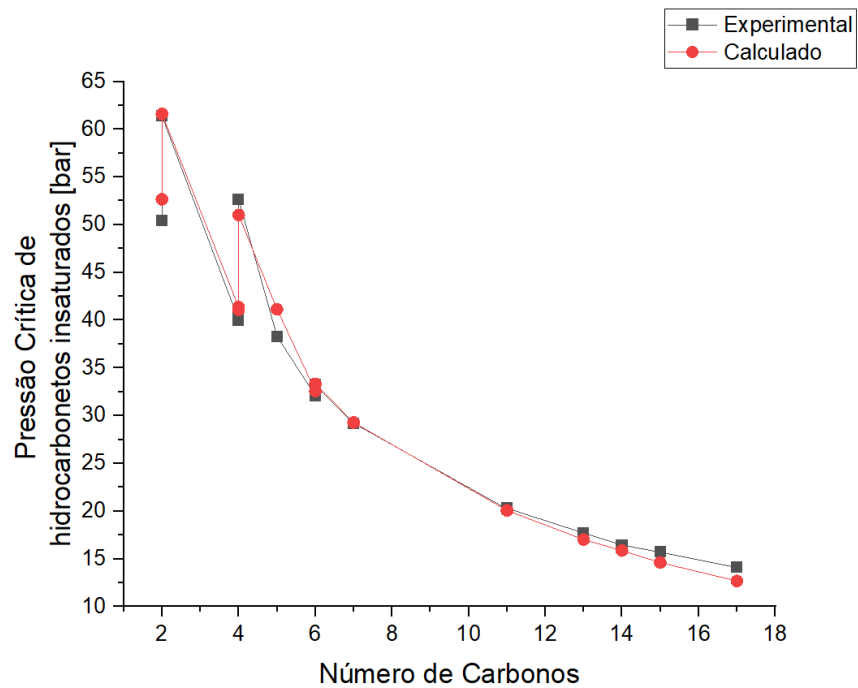
Fonte: Própria.

Figura 13 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos saturados.



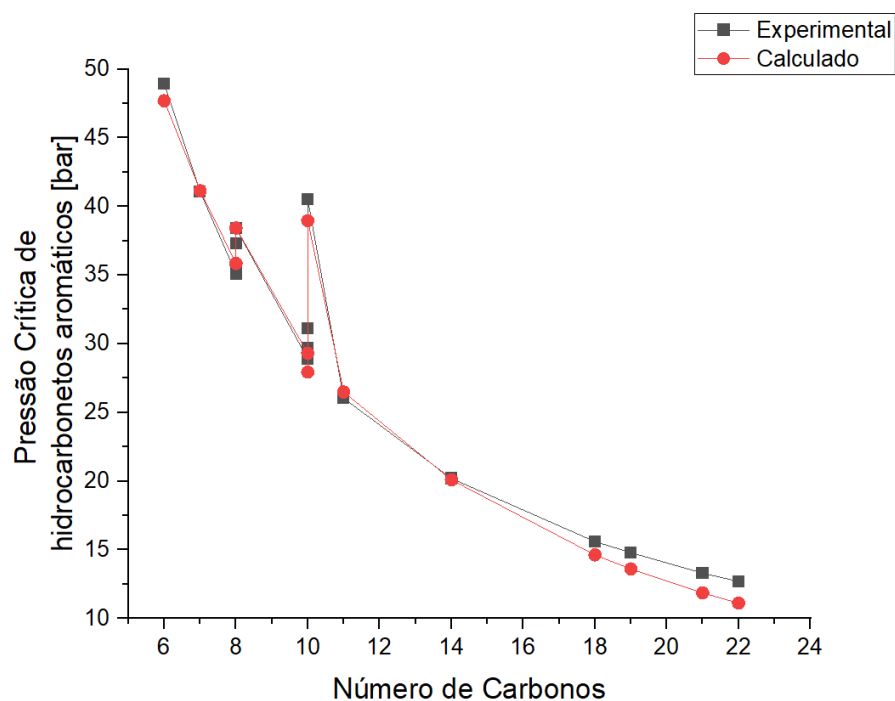
Fonte: Própria.

Figura 14 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos insaturados.



Fonte: Própria.

Figura 15 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de hidrocarbonetos aromáticos.



Fonte: Própria.

4.1.1.2 Álcoois, Ácidos Graxos e Ésteres

Para a aplicação dos métodos preditivos às funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres, considerou-se compostos ramificados e fenólicos (no caso dos álcoois).

Os métodos preditivos mais indicados para a estimação de valores da temperatura de ebulição e das propriedades críticas (temperatura e pressão crítica) das funções químicas acima estão dispostos na tabela 7, 8 e 9, respectivamente.

Tabela 7 – Métodos selecionados para estimação de temperatura de ebulição (T_b) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.

Funções Químicas	N	X _{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Álcoois	30	-0,3644	6,1473	27,3367	Ourique e Telles (1997)
Ácidos Graxos	20	0,0573	4,4523	18,6220	Sanghvi e Yalkowsky (2006)
Ésteres	20	-0,3644	6,1473	27,3367	Sanghvi e Yalkowsky (2006)

Fonte: Própria.

Tabela 8 – Métodos selecionados para estimação de temperatura crítica (Tc) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.

Funções Químicas	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Álcoois	30	0,2875	4,0111	22,9824	Joback e Reid (1987)
Ácidos Graxos	20	1,9485	12,3579	63,1747	Constantinou e Gani (1994)
Ésteres	20	-0,5717	1,6230	5,4172	Joback e Reid (1987)

Fonte: Própria.

Tabela 9 – Métodos selecionados para estimação de pressão crítica (Pc) para as funções químicas: álcoois, ácidos graxos e ésteres.

Funções Químicas	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Álcoois	30	-3,5089	5,6819	32,7992	Joback e Reid (1987)
Ácidos Graxos	20	1,0124	22,6184	108,5236	Marrero e Gani (2001)
Ésteres	20	-0,1576	6,5565	30,9270	Joback e Reid (1987)

Fonte: Própria.

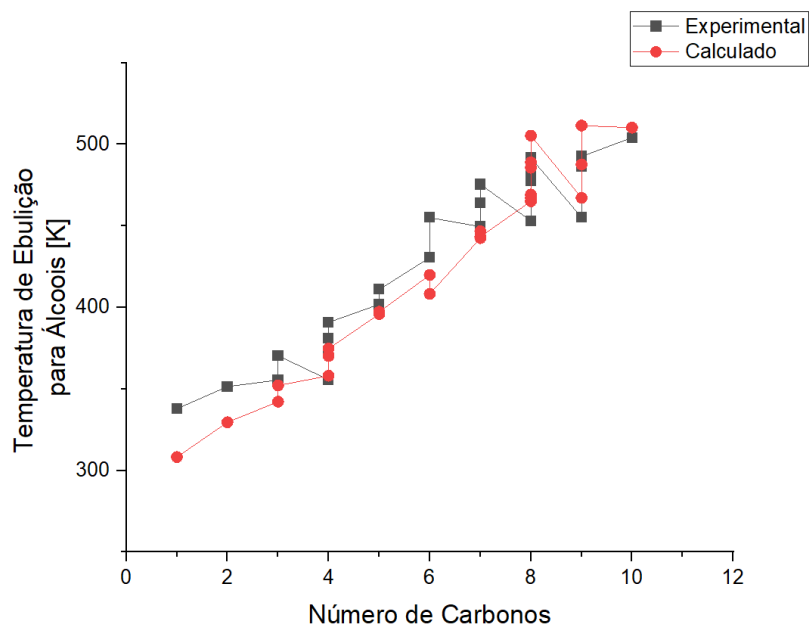
Para a definição da Temperatura de ebulição para os álcoois o método mais indicado é o de Ourique e Telles (1997) como justificado anteriormente para os alcenos, nesse método considera-se a composição e estrutura do composto pelos grupos funcionais individuais e a interação existente entre os pares de funcionais. Para os ácidos graxos/ carboxílicos e os ésteres o melhor método é de Sanghvi e Yalkowsky (2006), pois nesta predição leva-se em consideração a ordem do carbono, além da hibridização do mesmo e os parâmetros de hidrogênio (-OH, -COOH, -NH₂ e -NH) presentes nas moléculas.

No que tange às propriedades críticas de álcoois e ésteres, em ambos se sugere o método de Joback e Reid (1987) pois segundo os critérios estabelecidos das análises estatísticas este método apresentou menor erro médio percentual, bem como seu desvio padrão.

Quanto aos ácidos graxos ou carboxílicos, os métodos com os quais se obteve melhores dados estatísticos para predição das propriedades críticas foram: temperatura e pressão, respectivamente são: Constantinou e Gani (1994) e Marrero e Gani (2001), em ambos se considera grupos de primeira, segunda e terceira ordem, a depender da complexidade do grupo funcional, além ainda dos tipos de ligações entre os mesmos.

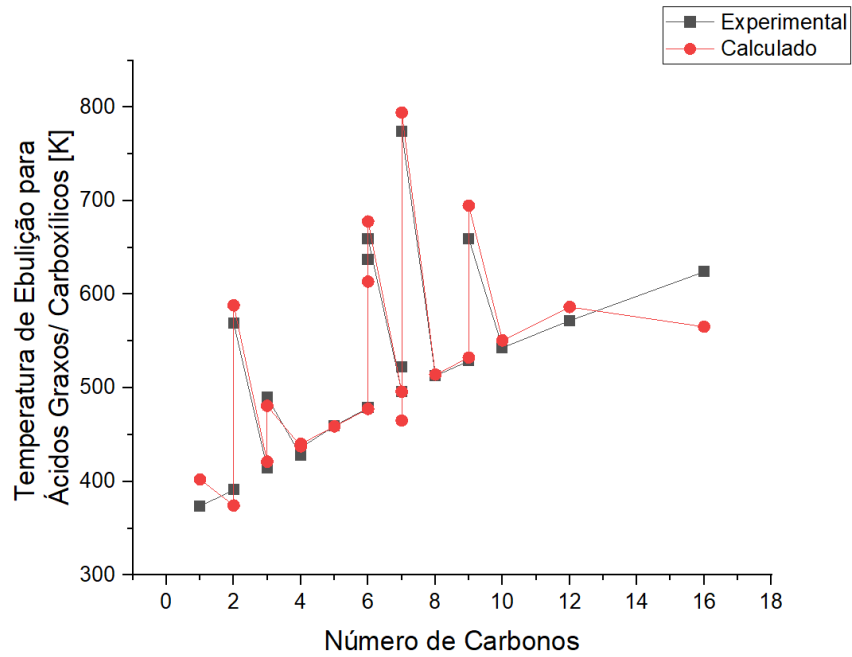
Como representação da seleção dos métodos preditivos indicados nas tabelas 7, 8 e 9, as figuras 16 a 24 apresentam as consistências entre os dados experimentais e a predição das temperaturas de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica, em função do número de carbonos presentes na cadeia.

Figura 16 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de álcoois.



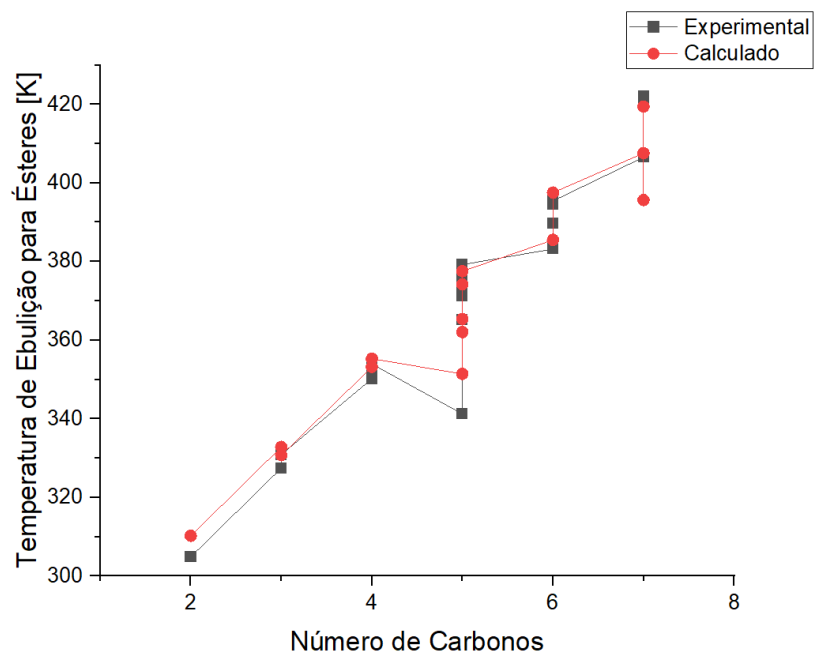
Fonte: Própria.

Figura 17 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de ácidos graxos/ carboxílicos.



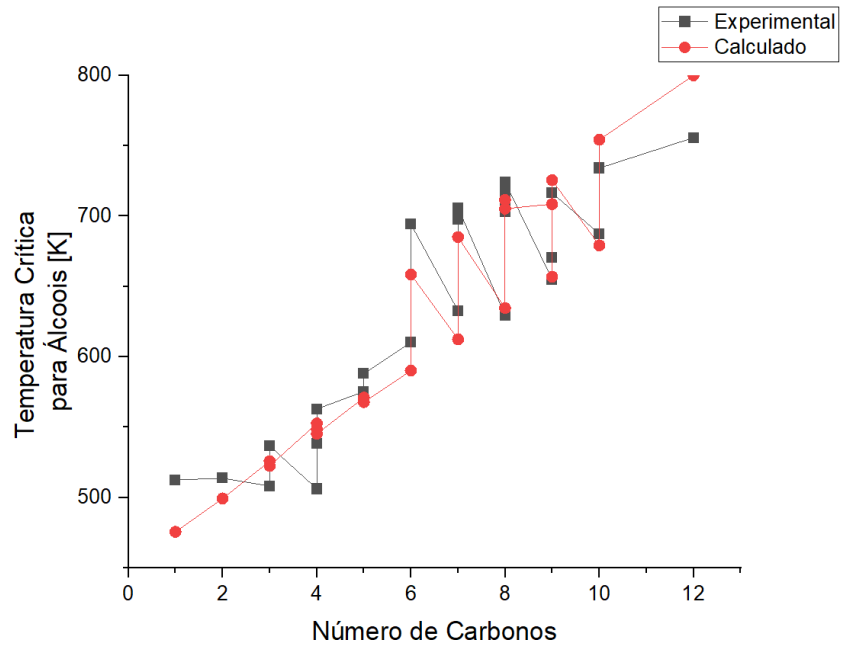
Fonte: Própria.

Figura 18 – Teste de consistência para estimar a temperatura de ebulição de ésteres.



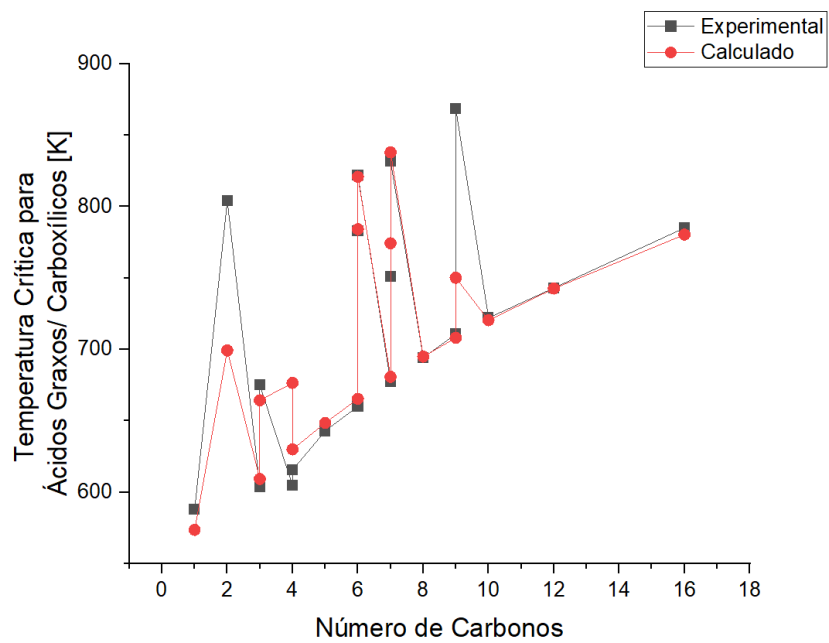
Fonte: Própria.

Figura 19 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de álcoois.



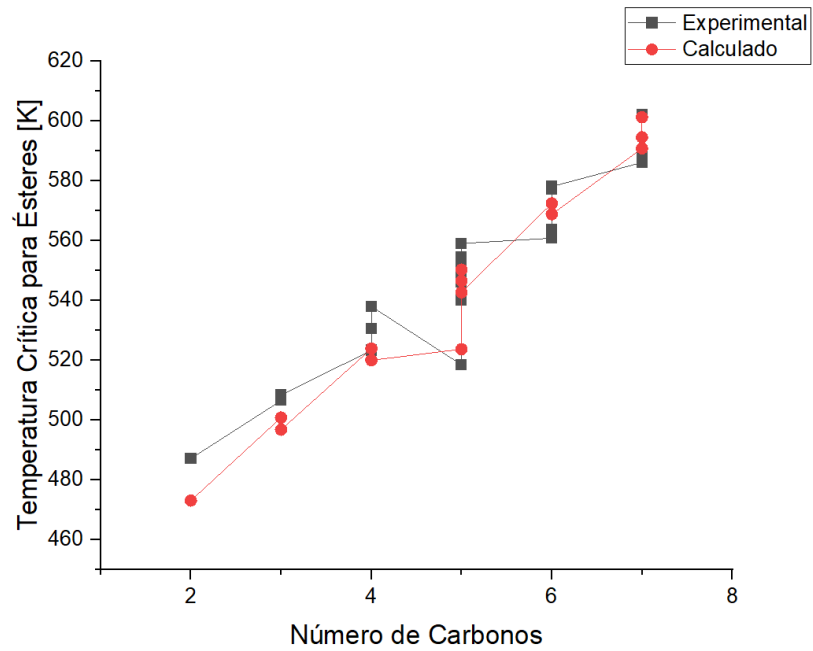
Fonte: Própria.

Figura 20 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de ácidos graxos/ carboxílicos.



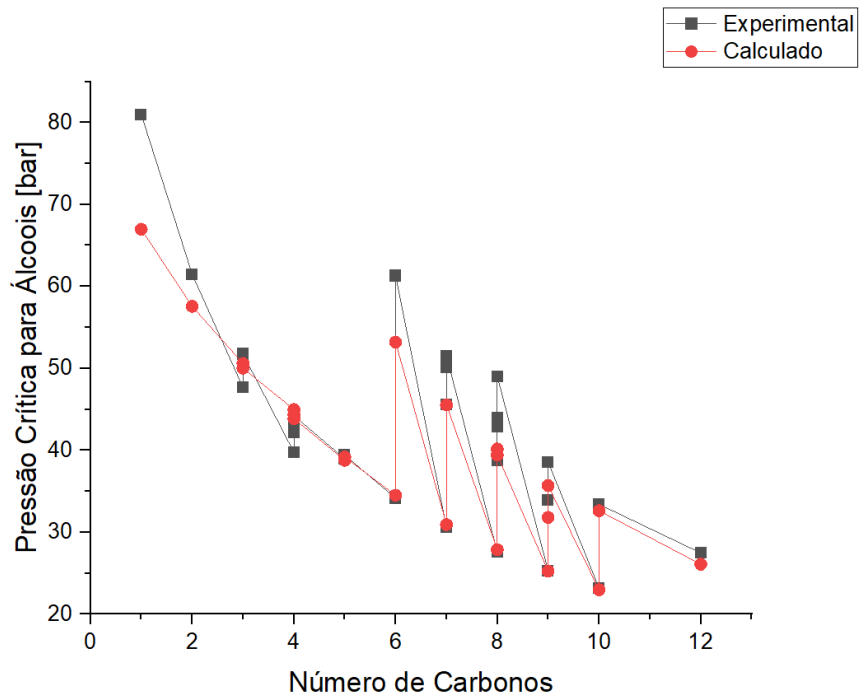
Fonte: Própria.

Figura 21 – Teste de consistência para estimar a temperatura crítica de ésteres.



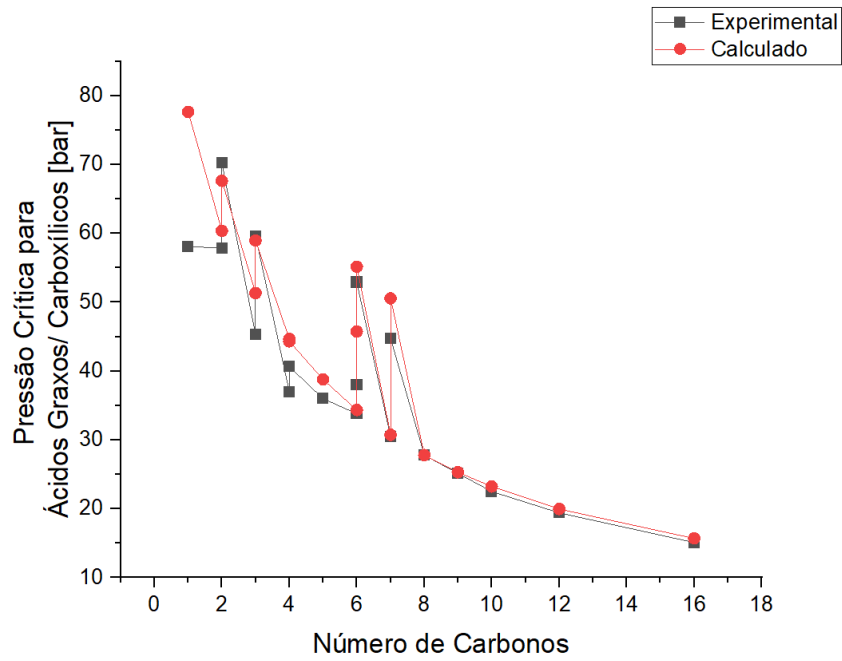
Fonte: Própria.

Figura 22 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de álcoois.



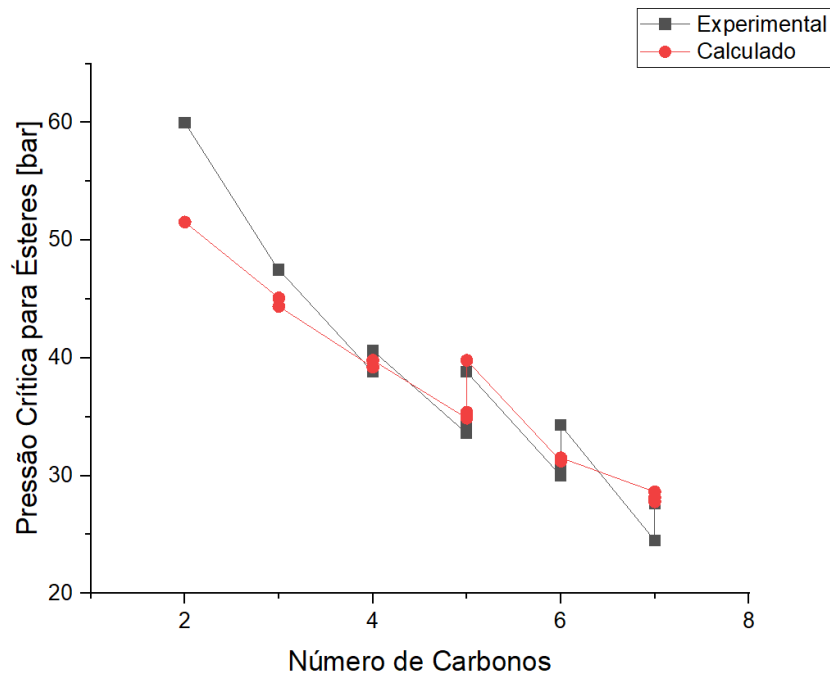
Fonte: Própria.

Figura 23 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de ácidos graxos/ carboxílicos.



Fonte: Própria.

Figura 24 – Teste de consistência para estimar a pressão crítica de ésteres.



Fonte: Própria.

4.1.2 Fator Acêntrico

A avaliação dos métodos para estimar o fator acêntrico das funções químicas em estudo neste trabalho, utilizou-se dois métodos diretos de predição: Han e Peng e Constantinou et al (1995), ou seja, estes não dependem de outros dados que não sejam aqueles da contribuição dos grupos funcionais da molécula.

Na tabela 10, estão apresentados os métodos selecionados para cada função química em estudo: hidrocarbonetos saturados, hidrocarbonetos insaturados, hidrocarbonetos aromáticos, álcoois, ácidos graxos e ésteres, de acordo com a avaliação estatística prevista. E, no anexo E encontra-se os resultados obtidos para a avaliação com seus respectivos parâmetros estatísticos.

Tabela 10 – Métodos selecionados para estimação do fator acêntrico (ω) para as funções químicas: hidrocarbonetos, álcoois, ácidos graxos e ésteres.

Funções Químicas	N	X_{rm} (%)	S (%)	R (%)	Método Preditivo
Hidrocarbonetos saturados	15	-2,6605	21,1896	100,9133	Constantinou et al (1995)
Hidrocarbonetos insaturados	15	5,0138	50,4775	223,3643	Constantinou et al (1995)
Hidrocarbonetos aromáticos	15	-0,1293	8,2090	25,9053	Han e Peng (1993)
Álcoois	30	-2,2948	16,5901	59,4819	Han e Peng (1993)
Ácidos Graxos	20	0,6525	15,9567	83,2295	Constantinou et al (1995)
Ésteres	12	3,7962	5,0438	19,1734	Han e Peng (1993)

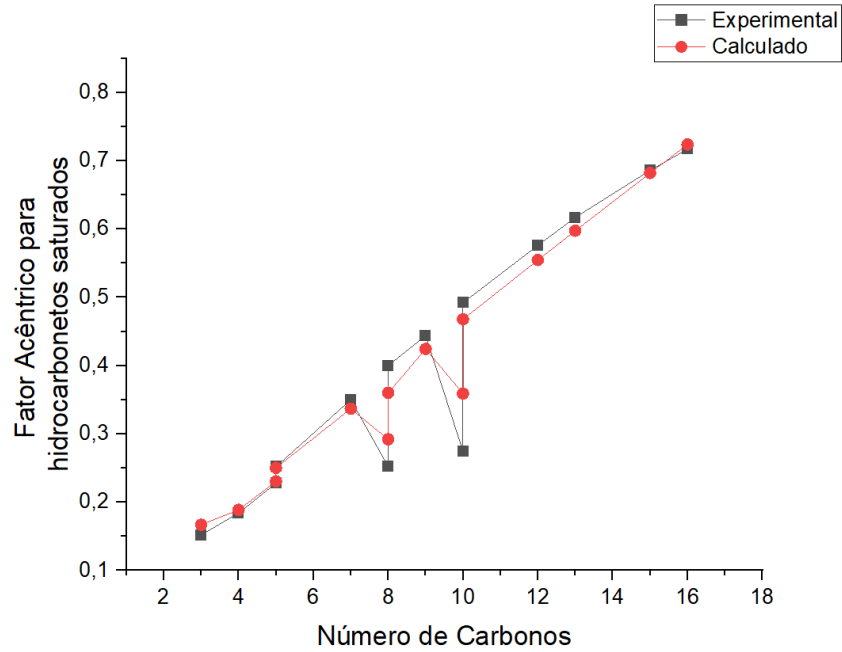
Fonte: Própria.

Em análise as informações obtidas, percebeu-se que o método de Han e Peng (1993) é o método que possui menor média de erro relativo percentual, bem como desvio padrão. Para a diminuição destes efeitos o método propõe termos corretivos quando for estimado a propriedade para as funções químicas citadas anteriormente.

Por outro lado, o método de Constantinou et al (1995) sugerido para as funções químicas: hidrocarbonetos saturados e insaturados e ácidos graxos, considera os grupos de primeira ordem (mais simples) e de segunda ordem (os mais complexos), além de ser indicado para a estimação de fator acêntrico de substâncias de cadeia curta.

Nas figuras 25 a 30 apresentam-se as consistências entre os dados experimentais e a predição do fator acêntrico para cada função química, de acordo com a tabela 10, em função do número de carbonos presentes na cadeia.

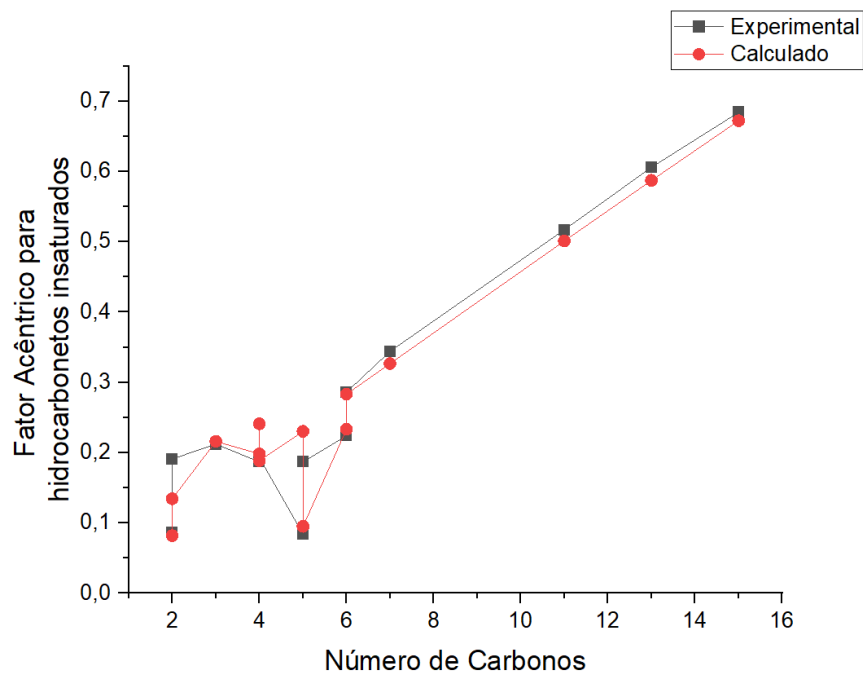
Figura 25 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos saturados.



At

Fonte: Própria.

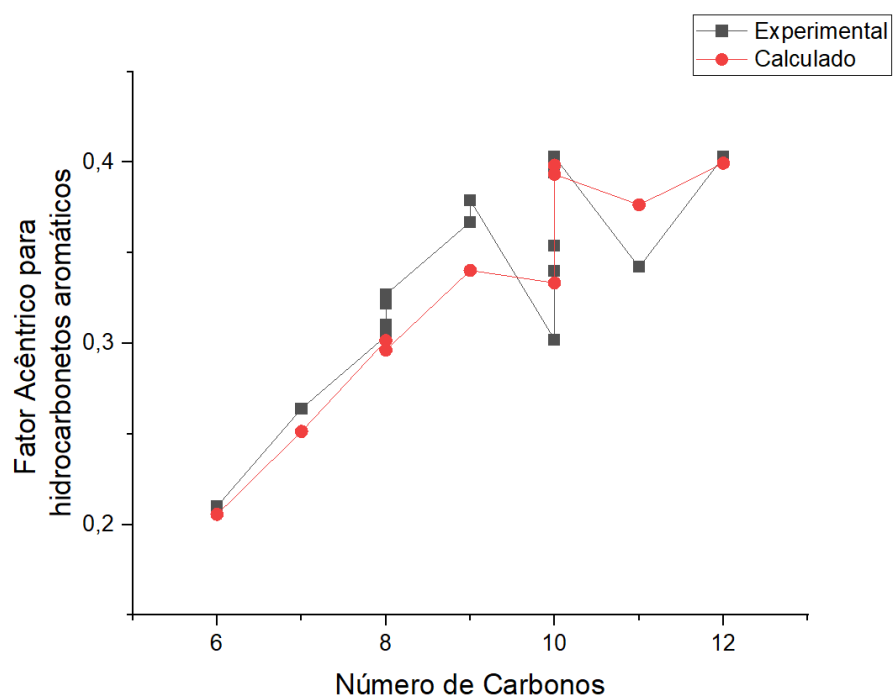
Figura 26 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos insaturados.



A

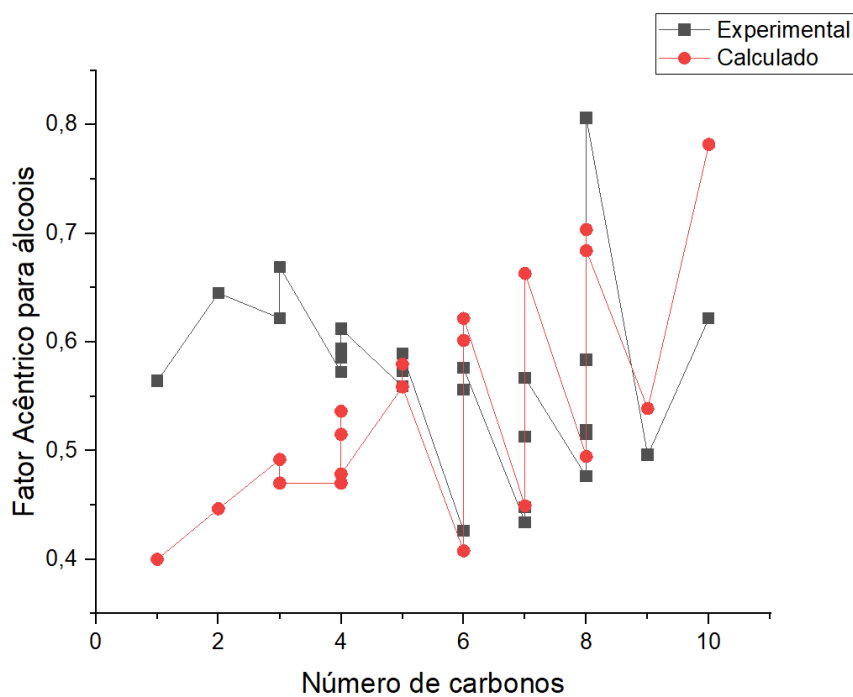
Fonte: Própria.

Figura 27 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de hidrocarbonetos aromáticos.



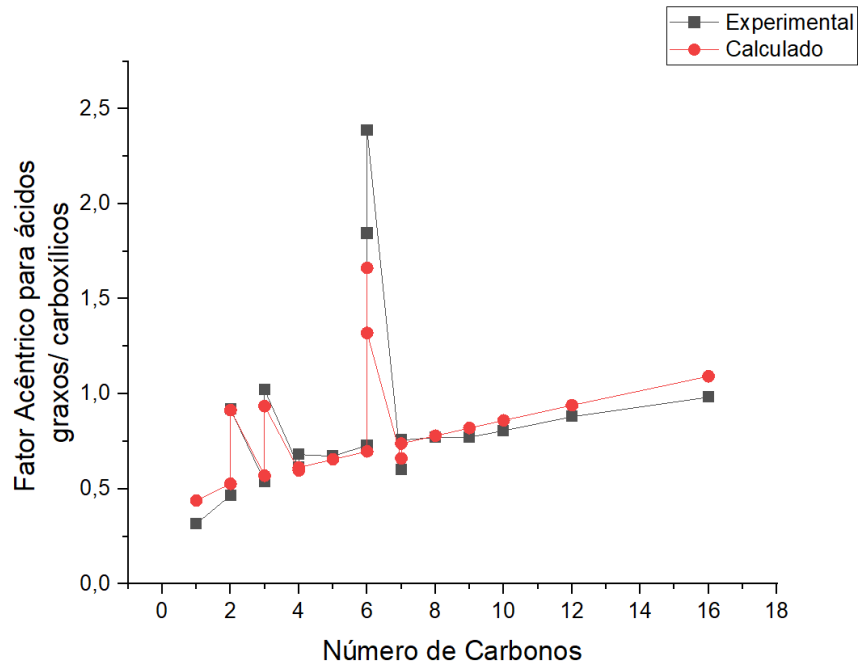
Fonte: Própria.

Figura 28 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de álcoois.



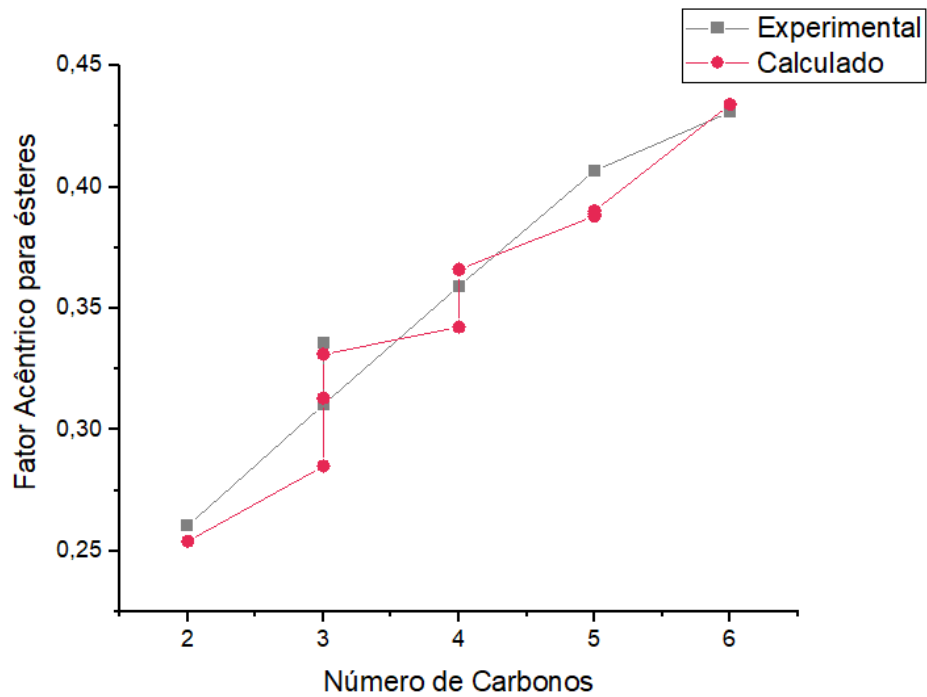
Fonte: Própria.

Figura 29 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de ácidos graxos/ carboxílicos.



Fonte: Própria.

Figura 30 – Teste de consistência para estimar o fator acêntrico de ésteres.



Fonte: Própria.

4.2 PREDIÇÃO DAS PROPRIEDADES DE EXTRATOS NATURAIS DE INTERESSE PARA A APLICAÇÃO DA TECNOLOGIA SUPERCRÍTICA

Para conseguir prever as propriedades: temperatura de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica dos extratos selecionados neste trabalho: óleo de jambu, óleo de tucumã e óleo-resina de copaíba, utilizou-se os métodos preditivos indicados no item anterior para cada constituinte dos extratos, levando em consideração suas funções orgânicas (tabela 11).

Tabela 11 – Fração mássica dos constituintes dos extratos naturais de interesse desse trabalho.

Constituinte	Fração mássica (W _A)		
	Óleo de Jambu	Óleo de Tucumã	Óleo de copaíba
Dehydro Aromadendrene	0,07435	-	-
β-Pineno	0,12975	-	-
Mirceno	0,21045	-	-
Germacreno D	0,13165	-	0,11780
Cis-ocimeno	0,08035	-	-
Dictamnol	0,19295	-	-
Carotol	0,08595	-	-
Hexadecil Acetato	0,07705	-	-
Ácido Oleico	-	0,58500	-
Ácido Linoléico	-	0,03800	-
Ácido Linolênico	-	0,05500	-
Ácido Palmítico	-	0,29600	-
Ácido Esteárico	-	0,03000	-
α-copaeno	-	-	0,23590
β-Cariofileno	-	-	0,36440
γ-cadineno	-	-	0,10740
α-humuleno	-	-	0,0989
ácido copálico	--	-	0,0503
ácido pinifólico	-	-	0,0256

Fonte: Própria.

Como metodologia para cálculo das propriedades críticas e termofísicas, utilizou-se o método de Kay (1936) para a estimativa das propriedades de cada óleo, tendo em vista o conhecimento da composição mássica de seus constituintes. As propriedades calculadas dos extratos estão indicadas na tabela 12 e dos seus constituintes encontram-se no anexo F.

Tabela 12 – Propriedades calculadas para os extratos naturais de interesse desse trabalho.

Extrato	MM [g/mol]	T_b [K]	T_c [K]	P_c [bar]
Óleo de Jambu	174,6685	595,4565	671,4067	23,6427
Óleo de Tucumã	275,6444	572,8677	775,0878	22,2435
Óleo de Copaíba	212,7255	673,1460	680,4493	20,4337

Fonte: Própria.

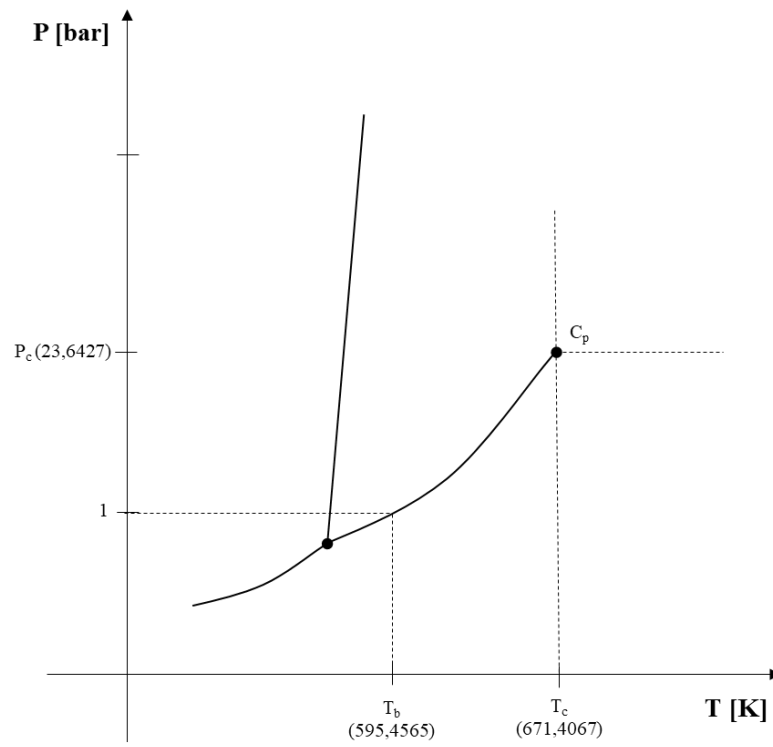
4.3 ESTADO FÍSICO DA MATÉRIA A PARTIR DO DIAGRAMA P-T

Com base nos dados calculados para temperatura de ebulição, temperatura crítica e pressão crítica é possível compreender o comportamento das substâncias puras e dos extratos naturais.

Para analisarmos o estado de agregação das moléculas, consideremos que a temperatura ambiente (30 °C ou 303,15 K) e a pressão atmosférica (1 atm ou 1 bar), as moléculas podem apresentar-se próximas ao estado sólido, líquido ou de vapor.

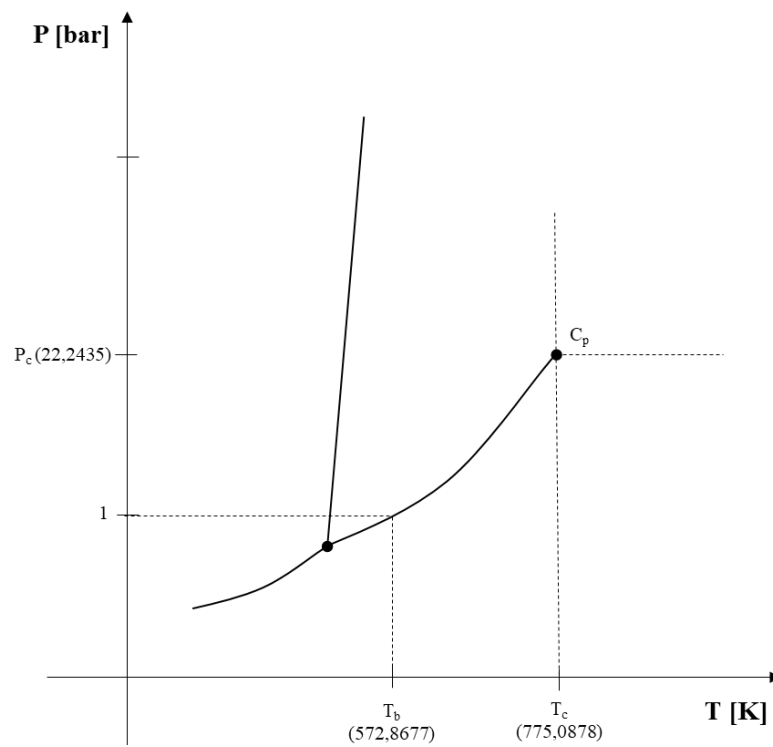
Segundo Russel (1994), as temperaturas de fusão e ebulição são pontos de referências apenas quando a pressão for igual a 1 bar, sendo assim, quando se mantém a pressão constante e a temperatura ambiente, nota-se que os extratos em estudo (óleo de jambu, óleo de tucumã e óleo de copaíba) se apresentam em estado sólido, a partir das observações dos diagramas P-T dispostos nas figuras 31 a 33.

Figura 31 – Diagrama P-T para o óleo de jambu.



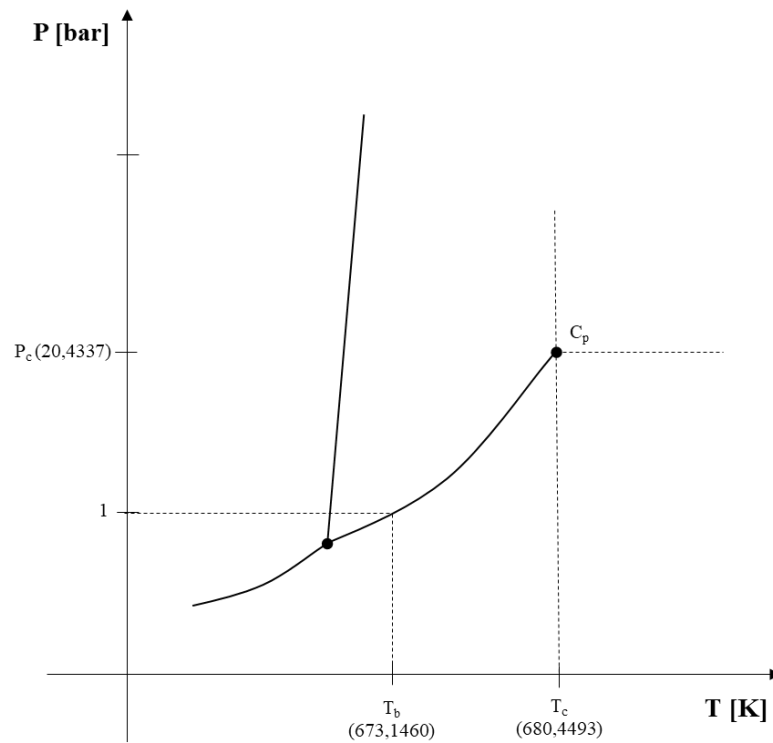
Fonte: Própria.

Figura 32 – Diagrama P-T para o óleo de tucumã.



Fonte: Própria.

Figura 33 – Diagrama P-T para o óleo de copaíba.



Fonte: Própria.

Em condições supercríticas, ou seja, em condições em que a pressão e a temperatura do solvente encontram-se acima do ponto crítico, os estados de agregação das substâncias podem apresentar mudanças quando comparadas aos resultados em condições ambiente. Ou seja, quanto maior a pressão a temperatura tende a diminuir, levando assim o estado do físico das substâncias para a forma líquida. Por outro lado, ao aumentarmos a temperatura do sistema, o estado de segregação das moléculas da substância tende a ir para o estado de vapor, devido às forças intermoleculares existentes (RUSSEL, 1994; BROWN, 2005).

CONCLUSÃO

As indústrias químicas encontram-se em um contínuo estado de transição, em diferentes direções, uma vez que a sociedade necessita de diversos produtos cada vez mais modernos e alternativos, com vistas à sustentabilidade. Assim, produtos melhores e versáteis precisam ser sintetizados, projetados e fabricados.

Como a produção dos mesmos é à base de produtos químicos, seja por extração ou conversão de matérias primas, há a necessidade de conhecimento do comportamento do sistema primeiramente para que se delineie o desenvolvimento, desde da sua concepção à sua concretização.

Desta maneira, identificar as propriedades termodinâmicas é primordial, podendo estas serem encontradas em literaturas, ou quando não disponíveis, podem ser estimadas através de modelos preditivos, como objeto de estudo deste trabalho, os modelos de contribuição de grupos.

Por sua vez, essa metodologia apresentou-se como uma excelente alternativa para a predição de propriedades físicas (temperatura de ebulição e fator acêntrico) e críticas (temperatura e pressão crítica) de substâncias puras pertencentes às funções orgânicas: hidrocarbonetos saturados, insaturados e aromáticos, álcoois, ácidos graxos/ carboxílicos e ésteres.

A avaliação estatística das propriedades aqui estudadas possibilitou relacionar o método de contribuição de grupo mais ideal para cada função orgânica. E como forma de verificação dos mesmos, foi realizado um teste de consistência entre os valores experimentais e os calculados para que pudesse ser observado o quanto os dados estão condizentes com a literatura. E assim possibilitar a definição do método, de forma que através destes pudesse prever as propriedades termodinâmicas de extratos naturais em que sejam conhecidas apenas suas composições mássicas.

Assim, foi possível a construção dos diagramas de fase (Pressão *versus* Temperatura) para os extratos em estudo, a fim de observar o comportamento físicos dessas substâncias seja em condições ambientes e/ou supercríticas.

Por fim, muito ainda se tem a estudar sobre os métodos preditivos, principalmente os mais atuais. Entretanto é inegável a importância destes para os processos químicos, onde muitas vezes os dados são desconhecidos.

REFERÊNCIAS

AMBROSE, D.; GHIASSE, N. B. **Vapour Pressures and Critical Temperatures and Critical Pressures of Some Alkanoic Acids: C-1 to C-10.** Journal of Chemical Thermodynamics, v.19, p. 505-519, 1987. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0021-9614\(87\)90147-9](https://doi.org/10.1016/0021-9614(87)90147-9)>. Acessado em: 31 ago. 2020.

ARAÚJO, V. F. et al. **Sistema de extração de sementes de Cumaru.** Universidade de Brasília, Brasília, 2004.

ARVELOS, S. **Avaliação de métodos de contribuição de grupos sobre o desempenho da equação de Peng-Robinson na avaliação do equilíbrio químico e de fases envolvendo triglicerídeos, ésteres e glicol.** 2013. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia- MG, 2013. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15210>>. Acessado em: 6 abr. 2020.

ATKINS, P. W. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente.** 3. ed. Porto Alegre: Bookman, 2006.

BORGES, L. S.; NUNES, K. N. M.; JACQUES, R. A.; LIMA, G. P. P. **Perfil cromatográfico do óleo essencial de jambu identificados por cromatógrafo a gás acoplado a espectrômetro de massas.** Revista Cultivando o Saber, v. 7, n. 3, p. 254-266, 2014. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/11449/141228>>. Acessado em: 20 mai. 2021.

BROWN, T. L.; LEMAY JR, E.; BURSTEN, B. E. **Química: A Ciência Central.** 9. ed. São Paulo: Pearson Makron Books, 2005.

CARMO, F. R. **Desenvolvimento de ambiente computacional para cálculos termodinâmicos de substâncias puras e misturas e modelagem de equilíbrio líquido-vapor a pressões baixas e moderadas utilizando equações de estado cúbicas.** 2009. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza- CE, 2009. Disponível em: <http://www.eq.ufc.br/TFC/TFC_2009_Carmo.pdf>. Acessado em: 8 abr. 2020.

CARRILHO, E.; TAVARES, M. C. H.; LANÇAS, F. M. **Fluídos supercríticos em química analítica. i. Cromatografia com fluído supercrítico: conceitos termodinâmicos.** Revista Química Nova, v. 24, n. 4, p. 509-515, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0100-40422001000400012>>. Acessado em: 29 mar. 2020.

CARVALHO, F. D. **Medição experimental e modelagem termodinâmica do equilíbrio líquido-vapor de sistemas contendo líquido iônico, água e álcool.** 2019. Dissertação (Mestrado em ciências) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade de São Paulo, Lorena- SP, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/D.97.2019.tde-28112019-170130>>. Acessado em: 8 abr. 2020.

CASTELLAN, G. W. **Fundamentos de físico-química.** 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1995.

CÁUPER, G. C. B. et al. **Biodiversidade amazônica**. Centro Cultural dos Povos da Amazônia, Vol. 1, Manaus, 2006.

ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Termodinâmica**. 7. ed. Porto Alegre: AMGH, 2013.

CERIANI, R.; GANI, R.; LIUC, Y. A. **Prediction of vapor pressure and heats of vaporization of edible oil/ fat compounds by group contribution**. Fluid Phase Equilibria, v. 337, p. 53-59, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.fluid.2012.09.039>>. Acessado em: 22 mai. 2020.

CONSTANTINOU, L.; GANI, R. **New group contribution method for estimating properties of pure compounds**. AIChE Journal, Vol. 40, No. 10, 1697-1710, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/aic.690401011>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

CONSTANTINOU, L.; GANI, R.; O'CONNEL, J. P. **Estimation of the acentric factor and the liquid molar volume at 298 K using a new group contribution method**. Fluid Phase Equilibria, v. 103, p. 11-22, 1995. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0378-3812\(94\)02593-P](https://doi.org/10.1016/0378-3812(94)02593-P)>. Acessado em: 20 mai. 2020.

EVANGELISTA, N. S.; CARMO, F. R.; SANT'ANA, H. B. **Estimation of physical constants of Biodiesel- Related fatty acid alkyl esters: Normal Boiling Point, Critical Temperature, Critical Pressure and Acentric Factor**. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 57, p. 8552-8565, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b01310>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

FERNANDES, F. A. N.; PIZZO, S. M.; MORAES JR, D. **Termodinâmica Química**. 1. ed. Universidade Federal do Ceará – UFC, Fortaleza- CE, 2006. Disponível em: <http://www.eq.ufc.br/MD_Termodinamica.pdf>. Acessado em: 25 Mar. 2020.

GALUCIO, C. S. **Valoração do óleo-resina de copaíba a partir da destilação molecular**. 2016. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas- SP, 2016. Disponível em: <http://repositorio.unicamp.br/jspui/bitstream/REPOSIP/321869/1/Galucio_CleysondeSouza_D.pdf>. Acessado em: 8 jul. 2021.

GANI, R. **Group contribution- based property estimation methods: advances and perspectives**. Current Opinion in Chemical Engineering, v. 23, p. 184-196, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.coche.2019.04.007>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

GUEDES, A. M. M. **Estudo da extração de óleo da polpa de tucumã por CO₂ supercrítico**. 2006. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade Federal do Pará, Centro Tecnológico, Belém- PA, 2006. Disponível em: <<https://www.ppgcta.propesp.ufpa.br/ARQUIVOS/dissertacoes/2006/Andrea%20Guedes.pdf>>. Acessado em: 20 mai. 2021.

FERREIRA, L. S. **Caracterização Do óleoresina de Copaíba (*Copaifera Reticulata*) coletado sazonalmente na Floresta Nacional do Tapajós, Pará, Brasil.** 2016. Dissertação (Mestrado em Recursos Naturais da Amazônia) – Programa de Pós-Graduação em Recursos Naturais da Amazônia, Universidade Federal do Oeste do Pará, Santarém-PA, 2016. Disponível em: <<http://www.ufopa.edu.br/media/file/site/ufopa/documentos/2019/3fb8276b8cc2d87d8bbb22c88caac3fb.pdf>>. Acessado em: 8 jul. 2021.

GEROLA, A. P.; PELOI, L. S.; HIOKA, N. SANTIN FILHO, Q. **Determinação da entalpia de vaporização de líquidos pelo método do isoteniscópio de SMITH e MENZIES.** Revista Química Nova, v. 33, n. 02, p. 482-488, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0100-40422010000200043>>. Acessado em: 25 Mar. 2020.

HAN, B.; PENG, D. **A group- contribution correlation for predicting the acentric factors of organic compounds.** The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 71, p. 332-334, 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/cjce.5450710223>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

HUI, Y. H. **Bailey's industrial oil and fat products.** New York: John Wiley & Sons, 1996. IAL. Métodos físico-químicos para análise de alimentos - São Paulo: Instituto Adolfo Lutz, 4ª ed./ 1ª ed. Digital, 2008 p. 1020.

JOBACK, K. G.; REID, R. C. **Estimation of pure component properties from group-contributions.** Chemical Engineering Communications, v. 57, p. 233-243, 1987. Disponível em: <<https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00986448708960487>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

LIMA, L. F. **Apostila de físico-química.** Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Londrina, Paraná- PR. Disponível em: <http://paginapessoal.utfpr.edu.br/lisandra/fisico-quimica-alimentos/material-didatico/APOSTILA%20DE%20FISICO%20QUIMICA%20apresentada%20alunos.pdf/at_download/file>. Acessado em: 22 mai. 2020.

LIMA, T. C. B. **Estudo e Comparação de três diferentes Métodos para Cálculo de Pressão de Vapor.** 1997. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas- SP, 1997. Disponível em: <http://taurus.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/267223/1/Lima_ThemisCoelhoBorges_M.pdf>. Acessado em: 11 mar. 2020.

LORENZI H.; MATOS F.J.A. **Plantas medicinais do Brasil: nativas e exóticas cultivadas.** Nova Odessa, SP: Instituto Plantarum. 396 p. 2002.

MACHADO, N. T. **Fractionation of PFAD-Compounds in countercurrent columns using supercritical carbon dioxide as solvent.** 1998. Doctoral Thesis – Technische Universität Hamburg-Harburg. Hamburg- Germany, 1998. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/282211740_Fractionation_of_PFAD-Compounds_in_Countercurrent_Columns_Using_Supercritical_Carbon_Dioxide_as_Solvent>. Acessado em: 11 mar. 2020.

MAFRA, M. R. **Estudo experimental e modelagem termodinâmica do equilíbrio de fases (Líquido-Líquido e Líquido-Vapor) de sistemas de interesse da indústria de fenol.** 2005. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas- SP, 2005. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/267242>>. Acessado em: 21 mar. 2020.

MAGALHÃES, W. F.; FERNANDES, N. G.; FERREIRA, A. C. **Físico-Química I: Termodinâmica do equilíbrio.** Curso de Química, modalidade educação à distância, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, 2009. Disponível em: <http://www.ufjf.br/quimicaead/files/2013/05/YAula6_FQI.pdf>. Acessado em: 25 Mar. 2020.

MARRERO, J. M.; FONTDEVILA, E. P. **Estimation of pure compound properties using group- interaction contributions.** AIChE Journal, v. 45, n. 3, p. 615-621, 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/aic.690450318>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

MARRERO, J. M.; GANI, R. **Group- contribution based estimation of pure component properties.** Fluid Phase Equilibria, v. 183-184, p. 183-208, 2001. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0378-3812\(01\)00431-9](https://doi.org/10.1016/S0378-3812(01)00431-9)>. Acessado em: 20 mai. 2020.

MOURA, L. S. **Obtenção por extração supercrítica do extrato de Funcho (Foeniculum vulgare): Determinação das isotermas de rendimento global, de parâmetros cinéticos, e do equilíbrio de fases.** 2004. Tese (Doutorado em Engenharia de Alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas- SP, 2004. Disponível em: <http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/254916/1/Moura_LucineuiltonSilvade_D.pdf>. Acessado em: 24 abr. 2020.

MOURA, L. S.; CARVALHO JUNIOR, R. N.; MEIRELES, M. A. A.; ARAUJO, M. E. **Seleção de Métodos Preditivos de Propriedades Físicas de Substâncias Termossensíveis.** Anais do XIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ, v. 1, p. 1-10, 2000.

NANNOOLAL, Y.; RAREY, J.; RAMJUGERNATHA, D. **Estimation of pure component properties– Part 2. Estimation of critical property data by group contribution.** Fluid Phase Equilibria, v. 252, p. 1-27, 2007. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378381206004985>>. Acessado em: 22 mai. 2020.

NANNOOLAL, Y.; RAREY, J.; RAMJUGERNATHA, D. **Estimation of pure component properties – Part 3. Estimation of the vapor pressure of non-electrolyte organic compounds via group contributions and group interactions.** Fluid Phase Equilibria, v. 269, p. 117-133, 2008. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378381208001611>>. Acessado em: 22 mai. 2020.

OLIVEIRA, M. J. **Termodinâmica.** 2. ed. São Paulo : Livraria da Física, 2012.

PITZER, K. S. **The volumetric and thermodynamic properties of fluids – I. Theoretical basis and virial coefficients.** Journal of the American Chemical Society, v. 77, n. 13, p.

3427-3433, 1955. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/ja01618a001>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

REVILLA, J. **Cultivando a saúde em hortas caseiras e medicinais**. Manaus: SEBRAE/INPA, 2004. 101P.

RUSSEL, J. B. **Química Geral**. 2. ed. Vol. 1 – São Paulo: Pearson Makron Books, 1994.

SANDLER, S. I. **Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics**. 4. ed. New York: Wiley, 2006.

SANGHVI, R.; YALKOWSKY, S. H. **Estimation of the Normal Boiling Point of Organic Compounds**. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 46, p. 2856-2861, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/ie051277g>>. Acessado em: 20 mai. 2020.

SANTANA, A. L. **Aplicação das tecnologias de fluidos supercríticos e de líquidos pressurizados para a valorização dos rejeitos de cúrcuma: obtenção de compostos bioativos, custo de manufatura, equilíbrio de fases e encapsulamento dos extratos**. 2017. Tese (Doutorado em Engenharia de Alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas- SP, 2017. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/332355>>. Acessado em: 8 abr. 2020.

SHANLEY, P.; MEDINA, G. **Frutíferas e Plantas Úteis na Vida Amazônica**. Belém: CIFOR, Imazon, 2005.

SILVA, G. C. R. **Predição de propriedades, Modelagem e Simulação de processos de conversão de óleos vegetais em biocombustíveis por rota convencional e desoxigenação**. 2016. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte- MG, 2016. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/1843/BUBD-A8PPA5>>. Acessado em: 13 abr. 2020.

SILVA, J. R. R. T. **Diversos modos de pensar o conceito de substância química na história da ciência e sua visão relacional**. *Revista Ciência & Educação (Bauru)*, v. 23, n. 3, p. 707-722, 2017. Disponível em: <<https://www.scielo.br/pdf/ciedu/v23n3/1516-7313-ciedu-23-03-0707.pdf>>. Acessado em: 22 mai. 2020.

SILVA, W. A. **Modelagem e simulação de sistemas multicomponentes a altas pressões aplicada a separação de compostos bioativos**. 2014. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Pará, Belém- PA, 2014. Disponível em: <<http://repositorio.ufpa.br/jspui/handle/2011/7703>>. Acessado em: 6 abr. 2020.

SIMMROCK, K. H.; JANOWSKY, R.; OHNSORGE, A. **Critical Data of Pure Substances**. 1. ed. Vol. 1 – Dechema, 1986.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

SOUZA, M. A. **Determinação das propriedades termofísicas de polpas de frutas tropicais: jaca (*Artocarpus Heterophilus Lamk*) e umbu (*Spondias Tuberosa Arr. Cam.*).** 2008. Dissertação (Mestrado em Engenharia de alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de alimentos, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Itapetinga-BA, 2008. Disponível em: <<http://www2.uesb.br/ppg/ppgecal/wp-content/uploads/2017/04/MICHELLE-SOUZA.pdf>>. Acessado em: 6 mai. 2020.

SPILIOTIS, N.; MAGOULAS, K.; TASSIOS, D. **Prediction of the solubility of aromatic hydrocarbons in supercritical CO₂ with EoS/G^E models.** Journal Fluid Phase Equilibria, n. 102, p. 121 – 141, 1994. Disponível em: <[https://sci-hub.tw/https://doi.org/10.1016/0378-3812\(94\)87072-1](https://sci-hub.tw/https://doi.org/10.1016/0378-3812(94)87072-1)>. Acessado em: 25 Mar. 2020.

TEJA, A. S.; LEE, R.J.; ROSENTHAL, D.; ANSELME, M. **Correlation of the Critical Properties of Alkanes and Alkanols.** Fluid Phase Equilibria, v. 56, p. 153-169, 1990. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0378-3812\(90\)85100-O](https://doi.org/10.1016/0378-3812(90)85100-O)>. Acessado em: 6 set. 2020.

TICKTIN T. **The ecological implications of harvesting non-timber forest products.** Journal of Applied Ecology, 41, 11–21, 2004.

VASCONCELOS, B. E. C. **Avaliação das características físicas, químicas e nutricionais dos óleos do tucumã (*Astrocaryum aculeatum* e *Astrocaryum vulgare*) obtidos com CO₂ pressurizado.** 2010. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade Federal do Pará, Belém- PA, 2010. Disponível em: <https://ppgcta.propesp.ufpa.br/ARQUIVOS/dissertacoes/2010/B%C3%81RBARA_VASCONCELOS.pdf>. Acessado em: 6 set. 2020.

VEGGI, P. C. **Obtenção de extratos vegetais por diferentes métodos de extração: estudo experimental e simulação dos processos.** 2009. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Alimentos) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2009. Disponível em: <http://repositorio.unicamp.br/jspui/bitstream/REPOSIP/254860/1/Veggi_PriscillaCarvalho_M.pdf>. Acessado em: 6 set. 2020.

VEIGA, V.F.; PINTO, A.C. **O Gênero Copaifera L.** Química nova, v.25, n.2, p.273-86, 2002.

VETERE, A. **Predicting the vapor pressures of pure compounds by using the Wagner Equation.** Fluid Phase Equilibria, v. 62, p. 1-10, 1991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/037838129187001P>>. Acessado em: 22 mai. 2020.

YAWS, C. L. **Thermophysical Properties of Chemicals and HydroCarbons.** 1. ed. Rio de Janeiro: William Andrew, 2008.

ANEXO A – DADOS EXPERIMENTAIS DO CARVALHO JUNIOR (2000)

ALCANOS	PM	T _{bexp}	T _{cexp}	P _{cexp}	ω (exp)	d ₂₀ ^o c
METANO	16,043	111,6	190,7	46,3	0,015204	
ETANO	30,07	184,6	305,4	48,8	0,097744	
CICLOPROPANO	42,081	240,3	398	55,5	0,136751	
PROPANO	44,097	231,1	369,7	42,5	0,151602	
BUTANO	58,124	273	425,6	37,6	0,180731	0,5788
2-METIL-PROPANO	58,124	261,5	407,7	36,8	0,189986	
CICLOPENTANO	70,135	322,4	511,8	45,2	0,196952	0,7457
PENTANO	72,151	309,2	470	33,6	0,247566	0,6262
2-METIL-BUTANO	72,151	301,2	461,1	33,4	0,216647	0,6201
2,2-DIMETIL-PROPANO	72,151	282,6	433,8	32	0,198274	
CICLOHEXANO	84,162	353,9	553,5	40,7	0,209415	0,7785
METIL-CICLOPENTANO	84,162	345	533,2	38	0,228548	0,7486
HEXANO	86,178	341,9	507,9	30,2	0,302479	0,6603
2-METIL-PENTANO	86,178	333,4	498,5	30,3	0,272656	0,6532
3-METIL-PENTANO	86,178	336,4	504,4	31,5	0,277524	0,6645
2,2-DIMETIL-BUTANO	86,178	322,9	488,2	31	0,233802	0,6485
2-3-DIMETIL-BUTANO	86,178	331,2	500,3	31,3	0,245001	0,6616
CICLOHEPTANO	98,189	391,9	602	38,1	0,254192	
ETIL-CICLOPENTANO	98,189	376,6	569,5	33,9	0,269524	0,7665
1,1-DIMETIL-CICLOPENTANO	98,189	361	550	34		
C1,2-DIMETIL-CICLOPENTANO	98,189	372	565	34	0,261308	0,7718
T1,2-DIMETIL-CICLOPENTANO	98,189	365	553	34	0,264507	0,7495
C1,3-DIMETIL-CICLOPENTANO	98,189	363,9	551	34	0,26826	
T1,3-DIMETIL-CICLOPENTANO	98,189	364,9	553	34	0,263687	
METIL-CICLOHEXANO	98,189	374,1	572,3	34,7	0,234932	0,7694
HEPTANO	100,205	371,6	540,1	27,4	0,43363	0,6837
2-METIL-HEXANO	100,205	363,2	531	27,5	0,330042	0,6787
3-METIL-HEXANO	100,205	365	535,4	28,2	0,322968	0,686
3-ETIL-PENTANO	100,205	366,6	540,7	28,9	0,30946	0,6982
2,2-DIMETIL-PENTANO	100,205	352,4	520,4	28,2	0,29546	0,6739
2,3-DIMETIL-PENTANO	100,205	363,1	537,6	29,3	0,297617	0,6951
2,4-DIMETIL-PENTANO	100,205	353,8	520,8	27,5	0,295184	0,6727
3,3-DIMETIL-PENTANO	100,205	359,2	536,3	29,6	0,270383	0,6936
2,2,3-TRIMETIL-BUTANO	100,205	354	530,4	30	0,263297	0,6901
CICLOOCTANO	112,216	424,3	647,2	35,5	0,249174	0,8349
PROPIL-CICLOPENTANO	112,216	404,1	603	30	0,344551	0,7763
ETIL-CICLOHEXANO	112,216	404,9	609	30		0,788
1,1-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	392,7	591	29	0,226858	0,7809
C1,2-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	402,9	606	29	0,229313	0,7963
T1,2-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	396,7	596	29		0,776
C1,3-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	393,3	591	29		0,766
T1,3-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	397,6	598	29,7		0,7847
C1,4-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	397,6	598	29		0,7829
T1,4-DIMETIL-CICLOHEXANO	112,216	392,5	587,7	29,7		0,7626
OCTANO	114,232	398,8	569,1	24,9	0,395868	0,7025
2-METIL-HEPTANO	114,232	390,8	560,6	24,9	0,37089	0,698
3-METIL-HEPTANO	114,232	392,1	564,1	25,6	0,368792	0,7058
4-METIL-HEPTANO	114,232	390,9	562,2	25,6		0,7046
3-ETIL-HEXANO	114,232	391,7	566,1	26,3		
2-2-DIMETIL-HEXANO	114,232	380	549,9	25,3		0,6953

ALCANOS	PM	T _b exp	T _c exp	P _c exp	ω (exp)	d ₂₀ ^o c
2,3-DIMETIL-HEXANO	114,232	388,8	564,5	26,5		0,7121
2,4-DIMETIL-HEXANO	112,232	382,8	554,1	25,7		0,696
2,5-DIMETIL-HEXANO	114,232	381,8	549,9	24,9		0,6935
3,3-DIMETIL-HEXANO	114,232	385,1	562,8	26,9		0,71
3,4-DIMETIL-HEXANO	114,232	391,9	569,7	27,2		0,72
3-ETIL-2-METIL-PENTANO	114,232	388,8	567	27,1		0,7193
3-ETIL-3-METIL-PENTANO	114,232	391,4	576,5	28,3		0,7274
2,2,3-TRIMETIL-PENTANO	114,232	383,3	563,5	27,2		0,7161
2,2,4-TRIMETIL-PENTANO	114,232	372,4	543,8	25,8	0,306819	0,6919
2,3,3-TRIMETIL-PENTANO	114,232	387,9	573,5	28,2		0,7262
2,3,4-TRIMETIL-PENTANO	114,232	386,6	566,4	27,4	0,317097	0,7191
2,2,3,3-TETRAMETIL-BUTANO	114,232	379,6	567,8	28,7		
PROFIL-CICLOHEXANO	120,195	429,9	639	28	0,258854	0,7936
NONANO	128,259	423,8	594,8	23	0,444686	0,7176
2-METIL-OCTANO	128,259	416,2	587	23,1		0,7107
3-METIL-OCTANO	128,259	417,4	590	23,4		
2,2-DIMETIL-HEPTANO	128,259	405,9	576,8	23,5		0,7105
2,3-DIMETIL-HEPTANO	128,259	413,7	589,6	24		0,726
2,4-DIMETIL-HEPTANO	128,259	406,1	576,8	23,4		0,7143
2,5-DIMETIL-HEPTANO	128,259	409,2	581,1	23,5		0,7198
2,6-DIMETIL-HEPTANO	128,259	408,4	577,9	23		0,7089
3,3-DIMETIL-HEPTANO	128,259	410,2	588,4	24,3		0,7254
3,4-DIMETIL-HEPTANO	128,259	413,8	591,9	24,6		0,7314
3,5-DIMETIL-HEPTANO	128,259	409,2	583,2	24		0,7225
4,4-DIMETIL-HEPTANO	128,259	408,4	585,4	24,3		0,7221
3-ETIL-2-METIL-HEXANO	128,259	411,2	588,1	24,5		
4-ETIL-2-METIL-HEXANO	128,259	407	580	24		
3-ETIL-3-METIL-HEXANO	128,259	413,8	597,5	25,5		
3-ETIL-4-METIL-HEXANO	128,259	413,6	593,7	25,1		
2,2,3-TRIMETIL-HEXANO	128,259	406,8	588	24,9	0,358471	
2,2,4-TRIMETIL-HEXANO	128,259	399,7	573,5	23,8	0,355846	0,711
2,2,5-TRIMETIL-HEXANO	128,259	397,2	568	23,3	0,357331	0,7072
2,3,3-TRIMETIL-HEXANO	128,259	410,8	596	25,5		
2,3,4-TRIMETIL-HEXANO	128,259	412,2	594,5	25,2		
2,3,5-TRIMETIL-HEXANO	128,259	404,5	579,2	24		0,7818
2,4,4-TRIMETIL-HEXANO	128,259	403,8	581,5	24,3	0,342809	0,711
3,3,4-TRIMETIL-HEXANO	128,259	413,6	602,3	26,2		
3,3-DIETIL-PENTANO	128,259	419,3	610	26,7	0,337387	
3-ETIL-2,2-DIMETIL-PENTANO	128,259	407	590,4	25,5		0,74378
3-ETIL-2,3-DIMETIL-PENTANO	128,259	417,9	606,8	26,9		
3-ETIL-2,4-DIMETIL-PENTANO	128,259	409,9	591,2	25,2		0,7365
2,2,3,3-TETRAMETIL-PENTANO	128,259	413,4	607,5	27,4	0,304379	
2,2,3,4-TETRAMETIL-PENTANO	128,259	406,2	592,6	26	0,313385	0,7389
2,2,4,4-TETRAMETIL-PENTANO	128,259	395,4	574,5	24,8	0,312543	0,7195
2,3,3,4-TETRAMETIL-PENTANO	128,259	414,7	607,5	27,2	0,3145	0,7547
BUTIL-CICLOHEXANO	140,27	454,1	667	31,5	0,361766	0,7992
DECANO	142,286	446,9	616,1	21,1	0,503388	0,73
2-METIL-NONANO	142,286	440,2	610,3	21		0,7281
3-METIL-NONANO	142,286	441	613,4	21,4		0,7354
4-METIL-NONANO	142,286	438,9	610,5	21,4		0,7323
5-METIL-NONANO	142,286	438,3	609,6	21,4		0,7326
3-ETIL-OCTANO	142,286	439,7	613,6	21,9		

ALCANOS	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d20°C
4-ETIL-OCTANO	142,286	436,8	609,6	21,8		
2,4-DIMETIL-OCTANO	142,286	429,1	599,4	21,4		
2,2-DIMETIL-OCTANO	142,286	430,1	602	21,3		
2,3-DIMETIL-OCTANO	142,286	437,5	613,2	21,9		0,7377
2,5-DIMETIL-OCTANO	142,286	431,7	603	21,5		
2,6-DIMETIL-OCTANO	142,286	433,5	603,1	21,5		0,7313
2,7-DIMETIL-OCTANO	142,286	433	602,9	21		0,724
3,3-DIMETIL-OCTANO	142,286	434,4	612,1	22,2		
3,4-DIMETIL-OCTANO	142,286	436,6	614	22,4		
3,5-DIMETIL-OCTANO	142,286	432,6	606,3	21,9		
3,6-DIMETIL-OCTANO	142,286	434	608,3	21,9		
4,4-DIMETIL-OCTANO	142,286	430,7	606,9	22,1		
4,5-DIMETIL-OCTANO	142,286	435,3	612,2	22,4		
4-PROPIL-HEPTANO	142,286	430,7	601	21,8		
4-ISOPROPIL-HEPTANO	142,286	432,1	607,6	22,3		
3-ETIL-2-METIL-HEPTANO	142,286	434,4	610,9	22,3		
4-ETIL-2-METIL-HEPTANO	142,286	429,4	601,8	21,9		
5-ETIL-2-METIL-HEPTANO	142,286	432,9	606,7	21,9		
4-ETIL-3-METIL-HEPTANO	142,286	435,4	614,3	22,8		
3-ETIL-5-METIL-HEPTANO	142,286	431,4	606,6	22,3		
3-ETIL-4-METIL-HEPTANO	142,286	436,2	615,5	22,8		
4-ETIL-4-METIL-HEPTANO	142,286	434	615,7	23,1		
2,2,3-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	430,8	611,7	22,7		
2,2,4-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	421,5	594,5	21,7		0,7275
2,2,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	424	598	21,7		
2,2,6-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	422,1	593,4	21,3		
2,3,3-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	433,4	617,5	23,2		
2,3,4-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	433,1	613,7	22,9		
2,3,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	433,9	612,8	22,4		
2,3,6-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	429,2	604,1	21,9		
2,4,4-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	424,2	600,3	22,2		
2,4,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	429,7	606,9	22,4		
2,4,6-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	420,8	590,3	21,5		
2,5,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	426	602,9	22,2		
3,3,4-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	435,1	622,1	23,7		
3,3,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	428,9	609,5	23,2		
3,4,4-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	434,3	620,9	23,7		
3,4,5-TRIMETIL-HEPTANO	142,286	435,7	612,8	22,4		
3-ISOPROPIL-2-METIL-HEXANO	142,286	439,9	623,4	22,9		
3,3-DIETIL-HEXANO	142,286	439,5	627,8	24,1		
3,4-DIETIL-HEXANO	142,286	437,1	618,8	23,3		
3-ETIL-2,2-DIMETIL-HEXANO	142,286	429,3	611,7	23,1		
4-ETIL-2,2-DIMETIL-HEXANO	142,286	420,2	594,6	22,2		
3-ETIL-2,3-DIMETIL-HEXANO	142,286	436,9	626,8	24,2		
4-ETIL-2,3-DIMETIL-HEXANO	142,286	434,1	617,3	23,4		
3-ETIL-2,4-DIMETIL-HEXANO	142,286	433,3	616,1	23,4		
4-ETIL-2,4-DIMETIL-HEXANO	142,286	434,3	620,9	24,7		
3-ETIL-2,5-DIMETIL-HEXANO	142,286	427,3	603,5	22,4		
4-ETIL-3,3-DIMETIL-HEXANO	142,286	436,1	625,7	24,2		
3-ETIL-3,4-DIMETIL-HEXANO	142,286	435,3	624,5	24,2		
2,2,3,3-TETRAMETIL-HEXANO	142,286	435,5	623	25,1		
2,2,3,4-TETRAMETIL-HEXANO	142,286	432	620,4	23,7		

ALCANOS	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d20°C
2,2,3,5-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	421,6	601,3	22,7		
2,2,4,4-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	427	610,2	22,5		
2,2,4,5-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	421	598,5	22,2		
2,2,5,5-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	410,6	581,4	21,9		
2,3,3,4-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	437,8	633,1	24,8		
2,3,3,5-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	426,3	610,1	23,2		
2,3,4,4-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	434,8	626,6	24,2		
2,3,4,5-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	429,4	613,2	23,4		
3,3,4,4-TETRAMETIL- HEXANO	142,286	443,2	646,7	25,7		
2,4-DIMETIL-3-ISOPROPIL-PENO	142,286	430,2	614,4	23,4		
3,3-DIETIL-2-METIL- PENTANO	142,286	442,9	639,9	25,3		
3-ETIL-2,2,3-TRIMETIL-PENTANO	142,286	442,7	646	25,7		
3-ETIL-2,2,4-TRIMETIL- PENTANO	142,286	428,5	615,3	23,7		
3-ETIL-2,3,4-TRIMETIL- PENTANO	142,286	442,6	642,3	25,4		
2,2,3,3,4-PENTAMETIL- PENTANO	142,286	439,2	643,8	25,8		
2,2,3,4,4-PENTAMETIL-PENTANO	142,286	432,5	627,3	24		

ALCENOS	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d20°C
ACETILENO	25	188,4	309,2	62,5	0,185116	
ETILENO	28	169,4	282,8	51,1	0,086595	
ALENO	40	241,2	385,4	53,2	0,160579	
PROPINO	40	249,8	401	53,5	0,212189	
PROPENO	42	225,7	365	46,1		0,5193
1,2-BUTADIENO	54	284	443,7	44,9		
1,3-BUTADIENO	54	268,7	425,1	43,3	0,188882	0,6211
1-BUTINO	54	281,2	463,7	48,6	0,059302	
2-BUTINO	54	300,1	488,7	50,8		
1-BUTENO	56	266,9	419,6	40,2	0,190147	0,5951
2-BUTENO.CIS	56	276,9	433,1	41,6	0,220412	0,6213
2-BUTENO.TRANS	56	274	428,6	41,2	0,21947	0,6042
2-METIL- PROPENO	56	266,3	417,9	40	0,202099	
CICLOBUTENO	56	285,7	463,5	50,4	0,038891	
1,2-PENTADIENO	68	318	503	40,7	0,123246	
1,3-PENTADIENO.CIS	68	315,1	496	39,9	0,21284	
1,4-PENTADIENO	68	299,1	478	37,9	0,329584	
3-METIL-1,2-BUTADIENO	68	314	496	41,1	0,10081	
2-METIL-1,3-BUTADIENO	68	307,2	483,3	37,4	0,149793	
1-PENTINO	68	313,4	493,5	40,5		0,6901
1-PENTENO	70	305,8	464,7	35,5	0,236897	0,6405
2-PENTENO.CIS	70	309,3	474,9	36,4	0,247786	0,6556
2-PENTENO.TRANS	70	309,5	471	35,2	0,260599	0,6482
2-METIL-1-BUTENO	70	304,3	464,8	34,3	0,234776	0,6504
2-METIL-2-BUTENO	70	311,7	470	34,5	0,290587	0,6623
1-HEXENO	84	337,9	508,5	31,6	0,245044	0,6731
2-HEXENO.CIS	84	342	518	32,8		0,6869
2-HEXENO.TRANS	84	341	516	32,7		0,6784
3-HEXENO.CIS	84	339,6	517	32,8		0,6796
3-HEXENO.TRANS	84	340,3	519,9	32,5		0,6772
2-METIL-2-PENTENO	84	340,5	518	32,8		0,6863
3-METIL-2-PENTENO.CIS	84	340,9	518	32,8		0,6986
3-METIL-2-PENTENO.TRANS	84	343,6	521	32,9		0,6942
4-METIL-2-PENTENO.CIS	84	329,6	490	30,4		0,669

ALCENOS	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d20°C
4-METIL-2-PENTENO.TRANS	84	331,7	493	30,4		0,6686
2,3-DIMETIL-1-BUTENO	84	328,8	501	32,4		0,6803
3,3-DIMETIL-1-BUTENO	84	314,4	490	32,5	0,136613	0,6521
2,3-DIMETIL-2-BUTENO	84	346,4	524	33,6	0,261177	
HEPTENO	98	366,8	537,2	28,5	0,333165	0,797
1-OCTENO	112	395,2	571,7	25,8	0,337304	0,7149
1-NONENO	120	420	592	23,4	0,429462	
1-UNDECENO	154	465,8	637	19,9	0,517661	0,7503
1-DODECENO	168	486,5	657	18,5	0,556655	0,7584
1-TRIDECENO	182	505,9	674	17	0,599477	0,7658
1-TETRADECENO	196	524,3	689	15,6	0,644836	0,7745
1-PENTADECENO	210	541,5	704	14,5	0,682898	0,7764
1-HEXADECENO	224	558	717	13,3	0,722482	0,7811
1-HEPTADECENO	238,459	573,2	732,4	12,6		0,7852
1-OCTADECENO	252,486	588	739	11,3		0,7891
1-NONADECENO	266,513	601,7	755,1	11,1		
1-EICOSENO	280,54	614,9	765,4	10,4		0,7886
AROMÁTICOS						
	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d20°C
BENZENO	78	353,3	562	48,9	0,209705	0,8765
TOLUENO	92	383,7	593,1	42,1	0,269293	0,8669
ESTIRENO	104	418,2	617,1	36,9		0,906
ETIL-BENZENO	106	409,2	617,9	37,3	0,311412	0,867
M-XILENO	106	412,2	619	35,6	0,314308	0,8642
O-XILENO	106	417,5	631,1	37,4	0,306641	0,8802
P-XILENO	106,168	411,4	617,4	35,3	0,315224	0,8611
ALFAMETIL-ESTIRENO	118	438,5	654	34		0,9082
PROPILO-BENZENO	120,195	430,2	638,6	32,1	0,344297	0,862
CUMENO	120,195	426,3	631,7	32		0,8618
M-ETIL-TOLUENO	120,195	434,5	637	28,4		
O-ETIL-TOLUENO	120,195	438,3	651	30,4		
P-ETIL-TOLUENO	120,195	435,2	640	29,4		
1,2,3-TRIMETIL-BENZENO	120	449,3	664,5	32,7	0,343025	0,8944
1,2,4-TRIMETIL-BENZENO	120	442,3	649,2	32,3	0,375973	0,8758
NAFTALENO	128	491,1	747,8	40,4	0,314424	
BUTIL-BENZENO	134	456,4	660,7	29,2	0,396019	0,8601
M-DIETIL-BENZENO	134	454,3	663,6	29,3	0,353306	
O-DIETIL-BENZENO	134	457	669,6	29,9	0,344065	
P-DIETIL-BENZENO	134	456,9	657,9	28,1	0,404604	
1,2,3,4-TETRAMETIL-BENZENO	134	478,3	695,1	28,4		0,952
1,2,3,5-TETRAMETIL-BENZENO	134	471,3	679	28,7		0,8903
1,2,4,5-TETRAMETIL-BENZENO	134	470	675,6	29		
1-METIL-NAFTALENO	142	517,8	772	34,9	0,334339	
2-METIL-NAFTALENO	142	514,2	764,3	34,8	0,346555	
PENTIL-BENZENO	148	478,6	679,9	26		0,8585
1-ETIL-NAFTALENO	156	531,5	774,9	31,4		
2-ETIL-NAFTALENO	156	531,5	774,9	31,4		
HEXIL-BENZENO	162	499,3	697,5	23,8		
1-FENIL-HEPTANO	176	519,2	713,5	22		
1-FENIL-OCTANO	190	537,6	728	20,4		
1-FENIL-NONANO	204	555,2	741	19		
1-FENIL-DECANO	218	571,1	753	17,8		

AROMÁTICOS	PM	T _{bexp}	T _{cexp}	P _{cexp}	ω (exp)	d ₂₀ ^{°c}
1-FENIL-UNDECANO	232	586,4	764	16,7		
FENIL-DODECANO	246	600,8	774	15,8		
1-FENIL-TRIDECANO	260	614,4	734	15		
1-FENIL-TETRADECANO	274	627,2	792	14,2		
1-FENIL-PENTADECANO	289	639,2	800	13,5		
1-FENIL-HEXADECANO	303	651,2	808	12,9		
ESTERES DE ÁCIDOS GRAXOS	PM	T _{bexp}	T _{cexp}	P _{cexp}	ω (exp)	d ₂₀ ^{°c}
METIL FORMATO	60,05	305,07	486,7	60	0,423947	0,9742
METIL ACETATO	74,08	330,25	506,9	46,9	0,319942	0,933
ETIL FORMATO	74,08	327,54	507,9	47,39	0,275007	0,9168
ETIL ACETATO	88,11	349,84	524,1	38,5	0,355294	0,9003
METIL PROPIONATO	88,11	352,7	530,6	40	0,342258	0,915
PROPIL FORMATO	88,11	354,05	536,8	40,6	0,33453	0,9058
ISOPROPIL FORMATO	88,11	341,55	521	40		0,8728
ETIL PROPIONATO	102,13	371,94	546,1	33,59	0,39013	0,8917
PROPIL ACETATO	102,13	374,58	549,4	33,29	0,388806	0,8878
METIL BUTIRATO	102,13	375,68	554,4	34,7		0,8984
METIL ISOBUTIRATO	102,13	365,27	540,1	34,29		0,8906
BUTIL FORMATO	102,13	379	559,8	35,89	0,375492	0,8885
ISOBUTIL FORMATO	102,13	371,24	551,3	38,79		0,8854
ETIL BUTIRATO	116,16	394,57	577	30,6		0,8785
ETIL ISOBUTIRATO	116,16	383,2	563,6	34,29		0,8693
PROPIL PROPIONATO	116,16	395,45	578	30		0,8809
ISOBUTIL ACETATO	116,16	389,02	563,9	31,79		0,8712
PROPIL ISOBUTIRATO	130,19	406,55	589,1	27,99		0,8843
ISOPROPIL ISOBUTIRATO	144,22	421,64	601,9	24,5		0,875
ALCOOL	PM	T _{bexp}	T _{cexp}	P _{cexp}	ω (exp)	d ₂₀ ^{°c}
METANOL	32,04	337,77	513	80,097	0,555739	0,7914
ETANOL	46,07	351,45	515,8	63,6	0,637894	0,7893
1-PROPANOL	60,1	370,4	536,9	51,19	0,614265	0,8035
2-PROPANOL	60,1	355,45	516,6	53,7	0,618514	0,7855
1-BUTANOL	74,12	390,61	561,4	44,19	0,60748	0,8098
2-BUTANOL	74,12	372,8	538	41,79	0,552772	0,808
2-METIL -1-PROPANOL	74,12	381,12	547,7	43	0,590821	0,8018
2-METIL-2-PROPANOL	74,12	355,88	508	42,3	0,618851	0,7887
2-METIL-1-BUTANOL	88,15	403,95	580,1	45,59	0,60627	
1-PENTANOL	88,15	410,9	585,9	38,89	0,585727	0,8144
1-HEXANOL	102,18	430,25	610	34,79	0,584272	0,8136
1-HEPTANOL	116,2	449,07	631,9	31,6	0,587821	0,8219
1-OCTANOL	130,23	468,26	652,5	28,6	0,484818	0,827
1-NONANOL	144,26	486,61	671	26,49	0,63339	0,8273
1-DECANOL	158,29	504,12	687	24	0,643723	0,8297
FENOL	94,11	454,89	692,9	61,3	0,464816	1,0576
O-CRESOL	108,14	464,08	695,3	50,09	0,452615	1,0273
M-CRESOL	108,14	475,4	705,4	45,59	0,453615	1,0336
P-CRESOL	108,14	474,98	704,5	51,5	0,50861	1,0178
O-ETIL FENOL	122,17	480,15	703	34,19	0,37537	
2,3-XILENOL	122,17	491,15	722,8	48,59		
2,4-XILENOL	122,17	484,65	707,6	43,6		
2,5-XILENOL	122,17	484,33	706,9	48,59		

ALCOOL	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d ₂₀ ^o c
2,6-XILENOL	122,17	485,15	701	42,59		
M-ETIL FENOL	122,17	487,15	716,4	41,5	0,505992	1,0283
3,4-XILENOL	122,17	498,6	729,8	49,59		
3,5-XILENOL	122,17	492,65	715,6	36,49		
P-ETIL FENOL	122,17	492,15	716,4	40,49	0,490667	
2-PROPIL FENOL	136,2	493,15	705	38,5	0,596016	
4-PROPIL FENOL	136,2	505,75	715	36		
2-TERBUTIL FENOL	150,22	494,15	715	34,5		
4-TERBUTIL FENOL	150,22	512,65	730	33		
4-ISOBUTIL FENOL	150,22	513,15	720	34,99		
2,4 DIMETIL-6-TERBUTIL FENOL	178,28	522,15	724	27,99		
2,5 DIMETIL-4-TERBUTIL FENOL	178,28	541,44	737	21,99		
2,6 DIMETIL-4-TERBUTIL FENOL	178,28	523,06	726	27		
3,4 DIMETIL-6-TERBUTIL FENOL	178,28	532,54	731	24,99		
4-ETIL-2-TERBUTIL FENOL	178,28	523,15	728	27		
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS	PM	Tbexp	Tcexp	Pcexp	ω (exp)	d ₂₀ ^o c
ÁCIDO FÓRMICO	46,03	374,04	588	54,99	0,352147	1,22
ÁCIDO ACÉTICO	60,05	391,03	592,71	57,86	0,461053	1,0492
ÁCIDO PROPIONICO	74,08	414,31	604	45,3	0,538666	0,9922
ÁCIDO BUTÍRICO	88,11	436,87	624	39,5	0,591811	0,9635
ÁCIDO N-VALÉRICO	102,13	459,31	643	36	0,672553	0,9391
ÁCIDO HEXANÓICO	116,16	478,38	663	32	0,692014	0,9274
ÁCIDO HEPTANÓICO	130,19	495,35	679	28,8	0,714192	0,92
ÁCIDO OCTANÓICO	144,22	512,01	694	27	0,766002	0,9088
ÁCIDO NONANÓICO	158,24	527,74	712	23,5		0,9055
ÁCIDO DECANÓICO	172,27	541,92	726	21	0,734201	0,8858

ANEXO B – AVALIAÇÃO PARA A TEMPERATURA DE EBULIÇÃO (T_b)

Tabela B 1 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de hidrocarbonetos saturados.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	-0,3085	2,7994	3,9804	11,1885	-4,3517	15,5402
Constantinou e Gani (1994)	15	-1,4317	2,1095	2,4305	1,6349	-7,3495	8,9844
Ourique e Telles (1997)	15	-1,9434	5,1736	6,8617	10,9472	-16,1339	27,0811
Marrero e Fontdevila (1999)	15	1,5937	3,0194	4,1345	9,1994	-10,6261	19,8255
Marrero e Gani (2001)	15	-2,1890	2,2168	2,9050	0,2083	-11,1519	11,3602
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	15	-10,6547	12,9750	21,3042	12,2946	-57,4543	69,7489

Fonte: Própria.

Tabela B 2 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de hidrocarbonetos insaturados.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	2,9539	6,4834	11,3523	38,4080	-8,4316	46,8395
Constantinou e Gani (1994)	15	-2,1968	4,6998	8,6963	10,2653	-30,2851	40,5503
Ourique e Telles (1997)	15	0,1324	3,0192	4,4991	11,0903	-7,1274	18,2177
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-0,4755	5,2654	7,8172	13,3599	-20,9654	34,3253
Marrero e Gani (2001)	15	-6,5847	6,7408	12,8503	0,7842	-41,6388	42,4230
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	15	0,1042	10,8258	21,5666	41,4688	-62,8007	104,2695

Fonte: Própria.

Tabela B 3 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de hidrocarbonetos aromáticos.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	2,0936	3,3726	4,7666	12,0541	-3,4776	15,5317
Constantinou e Gani (1994)	15	-3,5784	3,5784	2,0577	-0,9422	-7,4165	6,4743
Ourique e Telles (1997)	15	-37,1310	37,1310	13,9684	-16,7964	-67,6243	50,8279
Marrero e Fontdevila (1999)	15	15,2678	15,2678	8,1950	33,6428	0,6686	32,9743
Marrero e Gani (2001)	15	-4,6447	4,6447	2,1483	-1,2355	-8,7819	7,5464
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	15	-7,0769	23,2206	29,4367	54,6625	-56,4124	111,0749

Fonte: Própria.

Tabela B 4 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de álcoois.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	30	3,7536	4,8822	4,8681	16,5108	-6,8640	23,3748
Constantinou e Gani (1994)	30	-5,7417	7,5882	14,1205	6,3539	-47,5626	53,9165
Ourique e Telles (1997)	30	-0,3644	4,6387	6,1473	17,0574	-10,2793	27,3367
Marrero e Fontdevila (1999)	30	2,6645	7,4883	13,1477	38,7881	-42,4417	81,2298
Marrero e Gani (2001)	30	-15,1781	16,2671	26,9238	6,9192	-110,7750	117,6942
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	30	3,6779	8,2581	13,8173	42,7129	-34,9095	77,6224

Fonte: Própria.

Tabela B 5 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de ácidos graxos/ carboxílicos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	4,2056	5,7207	9,2258	29,0516	-7,1283	36,1799
Constantinou e Gani (1994)	20	-3,0942	3,9494	6,6944	7,4841	-23,1848	30,6689
Ourique e Telles (1997)	20	0,6956	6,9153	10,5071	23,9899	-23,8541	47,8440
Marrero e Fontdevila (1999)	20	3,9715	6,1591	10,4954	31,2402	-13,6095	44,8497
Marrero e Gani (2001)	20	-1,1177	3,1072	4,8463	5,5727	-13,8601	19,4329
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	20	0,0573	3,1194	4,4523	7,6529	-10,9691	18,6220

Fonte: Própria.

Tabela B 6 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura de ebulição (T_b) de ésteres.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	0,0534	1,0985	1,4364	2,9906	-2,0382	5,0288
Constantinou e Gani (1994)	20	-0,5996	2,2355	2,9401	3,3156	-6,7628	10,0784
Ourique e Telles (1997)	20	-0,1576	5,4773	10,5975	19,0507	-35,1081	54,1588
Marrero e Fontdevila (1999)	20	-0,1346	1,6625	1,9236	4,2198	-2,8226	7,0424
Marrero e Gani (2001)	20	-0,9479	2,0899	3,1064	2,0953	-9,6908	11,7861
Sanghvi e Yalkowsky (2006)	20	-0,0431	1,0924	1,7835	2,9834	-6,1700	9,1534

Fonte: Própria.

ANEXO C – AVALIAÇÃO PARA A TEMPERATURA CRÍTICA (T_c)

Tabela C 1 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (T_c) de hidrocarbonetos saturados.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	-0,4698	2,8586	4,1468	11,8645	-4,3636	16,2281
Constantinou e Gani (1994)	15	-0,8666	1,5159	2,6255	1,5302	-9,2301	10,7603
Ourique e Telles (1997)	15	-3,5297	6,3868	9,1215	9,2913	-25,8251	35,1164
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-0,6148	3,2835	5,7617	8,9151	-18,3934	27,3084
Marrero e Gani (2001)	15	-0,9730	0,9920	1,0187	0,1430	-4,2868	4,4298

Fonte: Própria.

Tabela C 2 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (T_c) de hidrocarbonetos insaturados.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	3,3200	6,8154	11,4698	37,2499	-6,1660	43,4160
Constantinou e Gani (1994)	15	3,4438	4,0425	6,7151	18,7149	-1,2504	19,9653
Ourique e Telles (1997)	15	-0,0293	3,0901	4,5322	12,0880	-6,8536	18,9416
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-71,9977	73,3300	53,7756	9,9926%	-145,0512	155,0438
Marrero e Gani (2001)	15	-0,1792	1,2458	1,8645	3,7338	-3,9853	7,7192

Fonte: Própria.

Tabela C 3 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (T_c) de hidrocarbonetos aromáticos.

Método	N	X _{rm} (%)	E _{rm} (%)	S (%)	X _{max} (%)	X _{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	1,9504	3,3300	4,6022	11,4961	-4,8944	16,3905
Constantinou e Gani (1994)	15	-3,4538	3,4538	2,4111	-0,2303	-10,2111	9,9808
Ourique e Telles (1997)	15	-36,8864	36,8864	12,7085	-17,2567	-64,4762	47,2195
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-443,3009	443,3009	664,4295	-11,5607	-2683,0219	2671,4612
Marrero e Gani (2001)	15	-4,7407	4,7407	5,3389	-0,3304	-17,2251	16,8947

Fonte: Própria.

Tabela C 4 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (Tc) de álcoois.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	30	0,2875	3,5014	4,0111	15,7953	-7,1871	22,9824
Constantinou e Gani (1994)	30	-6,8712	7,5137	9,3224	3,6308	-37,0855	40,7163
Ourique e Telles (1997)	30	-1,2346	4,9256	6,7782	20,6358	-10,6028	31,2386
Marrero e Fontdevila (1999)	30	-78,6427	102,9685	197,2903	305,0236	-865,9414	1170,9650
Marrero e Gani (2001)	30	-11,8007	12,6555	17,9763	7,4171	-74,7417	82,1588

Fonte: Própria.

Tabela C 5 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (Tc) de ácidos graxos/ carboxílicos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	5,5306	8,9302	13,7474	43,1048	-9,1059	52,2106
Constantinou e Gani (1994)	20	1,9485	5,1472	12,3579	49,5523	-13,6224	63,1747
Ourique e Telles (1997)	20	5,1727	10,1417	15,7295	51,2208	-20,9577	72,1785
Marrero e Fontdevila (1999)	20	7,6119	11,2736	16,4395	66,1737	0,3243	65,8494
Marrero e Gani (2001)	20	8,8701	9,8836	13,9113	64,8671%	-7,1873	72,0544

Fonte: Própria.

Tabela C 6 – Avaliação dos métodos de predição para a temperatura crítica (Tc) de ésteres.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	-0,5717	1,4132	1,6230	2,0659	-3,3513	5,4172
Constantinou e Gani (1994)	20	-4,2052	5,8464	9,8233	3,2537	-32,7649	36,0186
Ourique e Telles (1997)	20	-1,1555	1,4572	1,9485	1,0033	-6,4339	7,4373
Marrero e Fontdevila (1999)	20	0,4423	3,0595	4,2968	12,8013	-5,8159	18,6172
Marrero e Gani (2001)	20	-0,2620	1,2274	1,6969	2,3995	-5,2807	7,6801

Fonte: Própria.

ANEXO D – AVALIAÇÃO PARA A PRESSÃO CRÍTICA (Pc)

Tabela D 1 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de hidrocarbonetos saturados.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	-0,8926	3,0177	3,9811	8,1240	-8,1233	16,2472
Constantinou e Gani (1994)	15	-1,2100	3,7857	5,8884	9,4263	-17,8249	27,2512
Ourique e Telles (1997)	15	-99,9861	99,9861	0,0023	-99,9827	-99,9895	0,0069
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-20,5521	22,3563	13,9163	9,0799	-45,5074	54,5874
Marrero e Gani (2001)	15	50,6034	67,2089	113,7443	360,9089	-29,9142	390,8232

Fonte: Própria.

Tabela D 2 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de hidrocarbonetos insaturados.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	-0,6135	3,2912	4,4397	7,4259	-10,0530	17,4789
Constantinou e Gani (1994)	15	5,1872	8,4546	12,1779	29,2036	-7,6395	36,8431
Ourique e Telles (1997)	15	-99,9876	99,9876	0,0026	-99,9835	-99,9909	0,0074
Marrero e Fontdevila (1999)	15	1089,5580	1156,4536	2993,8075	11431,2802	-95,4396	11526,7198
Marrero e Gani (2001)	15	26,1879	57,0028	79,8534	171,6331	-35,8871	207,5202

Fonte: Própria.

Tabela D 3 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de hidrocarbonetos aromáticos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	15	-3,9310	4,6678	4,8458	2,1260	-12,4526	14,5786
Constantinou e Gani (1994)	15	-12,5248	12,5248	3,4056	-8,2145	-20,5957	12,3812
Ourique e Telles (1997)	15	-99,9836	99,9836	0,0079	-99,9603	-99,9916	0,0313
Marrero e Fontdevila (1999)	15	-93,7149	93,7149	4,9900	-80,9054	-99,1034	18,1979
Marrero e Gani (2001)	15	67,2678	94,7871	214,4014	609,8723	-38,2822	648,1546

Fonte: Própria.

Tabela D 4 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de álcoois

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	30	-3,5089	5,8114	5,6819	13,2208	-19,5785	32,7992
Constantinou e Gani (1994)	30	5,4392	30,9763	53,6883	169,7374	-32,5556	202,2931
Ourique e Telles (1997)	30	-99,9901	99,9901	0,0021	-99,9828	-99,9930	0,0102
Marrero e Fontdevila (1999)	30	5,0994	95,0126	280,8754	1473,1186	-97,7911	1570,9096
Marrero e Gani (2001)	30	19,6629	48,5432	87,0554	316,0594	-41,0105	357,0699

Fonte: Própria.

Tabela D 5 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de ácidos graxos/ carboxílicos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	24,3398	29,0479	49,3119	214,1288	-33,5511	247,6799
Constantinou e Gani (1994)	20	-5,8006	17,2048	32,5237	40,2409	-96,6950	136,9358
Ourique e Telles (1997)	20	153,6642	179,2740	264,3174	1009,0351	-72,9613	1081,9964
Marrero e Fontdevila (1999)	20	-5,1868	28,4817	26,4820	85,0580	2,2204	82,8376
Marrero e Gani (2001)	20	1,0124	12,9545	22,6184	33,6320	-74,8916	108,5236

Fonte: Própria.

Tabela D 6 – Avaliação dos métodos de predição para a pressão crítica (Pc) de ésteres.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Joback e Reid (1987)	20	-0,1576	4,6790	6,5565	16,8464	-14,0806	30,9270
Constantinou e Gani (1994)	20	2,5360	7,6913	9,2544	14,1266	-20,4899	34,6165
Ourique e Telles (1997)	20	30,4101	38,3216	64,6018	232,6047	-43,1394	275,7441
Marrero e Fontdevila (1999)	20	-2,3508	6,7532	13,0479	15,3603	-51,6742	67,0345
Marrero e Gani (2001)	20	2,7370	5,7535	6,7302	19,1338	-14,8331	33,9668

Fonte: Própria.

ANEXO E – AVALIAÇÃO PARA O FATOR ACÊNTRICO (ω)

Tabela E 1 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de hidrocarbonetos saturados.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	15	3,8168	13,6162	28,0601	72,8987	-56,1565	129,0553
Constantinou et al. (1995)	15	-2,6605	10,8335	21,1896	30,9607	-69,9526	100,9133

Fonte: Própria.

Tabela E 2 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de hidrocarbonetos insaturados.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	15	16,4190	16,4888	48,8876	191,1936	-0,5235	191,7171
Constantinou et al. (1995)	15	5,0138	23,4977	50,4775	174,2371	-49,1272	223,3643

Fonte: Própria.

Tabela E 3 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de hidrocarbonetos aromáticos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	15	-0,1293	6,5763	8,2090	15,6824	-10,2229	25,9053
Constantinou et al. (1995)	15	-9,4372	18,6855	29,5761	23,6787	-97,9235	121,6023

Fonte: Própria.

Tabela E 4 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de álcoois.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	30	-2,2948	13,3940	16,5901	28,6987	-30,7832	59,4819
Constantinou et al. (1995)	30	20,5724	25,8755	24,0854	59,7691	-18,3358	78,1049

Fonte: Própria.

Tabela E 5 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de ácidos graxos/ carboxílicos.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	20	-3,2623	10,8030	18,1522	43,0620	-48,5656	91,6276
Constantinou et al. (1995)	20	0,6525	9,2176	15,9567	38,5078	-44,7217	83,2295

Fonte: Própria.

Tabela E 6 – Avaliação dos métodos de predição para o fator acêntrico (ω) de ésteres.

Método	N	X_{rm} (%)	E_{rm} (%)	S (%)	X_{max} (%)	X_{min} (%)	R (%)
Han e Peng (1993)	12	3,7962	5,2702	5,0438	12,9262	-6,2472	19,1734
Constantinou et al. (1995)	12	-6,7663	16,1887	24,5501	16,8447	-52,8595	69,7042

Fonte: Própria.

**ANEXO F – PROPRIEDADES CALCULADAS PARA AS COMPOSIÇÕES DOS
EXTRATOS NATURAIS EM ESTUDO**

Tabela F 1 – Propriedades calculadas das substâncias constituintes dos extratos naturais de interesse neste presente trabalho.

Constituinte	MM [g/mol]	Tb [K]	Tc [K]	Pc [bar]
Dehydro Aromadendrene	202,33	562,6900	778,4835	20,3455
β-Pineno	136,23	528,9100	593,0398	28,0838
Mirceno	136,23	561,5800	534,4093	25,5076
Germacreno D	204,35	641,7300	662,2842	19,4237
Cis-ocimeno	136,24	552,6600	526,9816	26,4611
Dictamnol	178,27	637,5500	802,3543	29,1868
Carotol	222,37	754,5300	877,3747	22,2499
Hexadecil Acetato	284,50	649,6147	835,2469	11,5614
Ácido Oleico	282,47	570,7201	768,3296	24,4540
Ácido Linoléico	280,45	583,4836	769,3299	26,6251
Ácido Linolênico	278,43	596,3636	770,3246	29,2028
Ácido Palmítico	256,40	565,3596	780,3814	15,6815
Ácido Esteárico	284,48	555,9205	767,3238	22,6082
α-copaeno	204,35	630,6100	671,8487	20,0191
β-Cariofileno	204,35	679,0200	675,6790	20,2723
γ-cadineno	204,35	695,9100	664,6200	19,5268
α-humuleno	204,35	750,4200	671,1339	20,5676
ácido copálico	304,47	784,5576	24,5907	784,5576
ácido pinifólico	334,45	806,7788	26,2579	806,7788

Fonte: Própria.