



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE EQUAÇÕES DE  
ESTADO PARA LÍQUIDOS IÔNICOS A PARTIR DE DADOS  
DE VELOCIDADE DO SOM**

Autora: Mariana Ricken Barbosa

Orientador: Prof. Dr. Martín Aznar

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química. Área de Concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos.

Campinas – São Paulo

Junho de 2012.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

B234d	<p>Barbosa, Mariana Ricken Determinação de parâmetros de equações de estado para líquidos iônicos a partir de dados de velocidade do som / Mariana Ricken Barbosa. --Campinas, SP: [s.n.], 2012.</p> <p>Orientador: Martín Aznar. Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.</p> <p>1. Líquidos iônicos. 2. Equilíbrio líquido-vapor. 3. Equação de estado. I. Aznar, Martín, 1966-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.</p>
-------	--

Título em Inglês: Determination of parameters of equation of state for ionic liquids through speed of sound data

Palavras-chave em Inglês: Ionic liquids, Liquid-vapor equilibria, Equations of state

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Maria Alvina Krähenbühl, Luiz Gustavo Martins Vieira

Data da defesa: 29-06-2012

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Mariana Ricken Barbosa e aprovada em 29 de junho de 2012  
pela banca examinadora constituída pelos doutores:

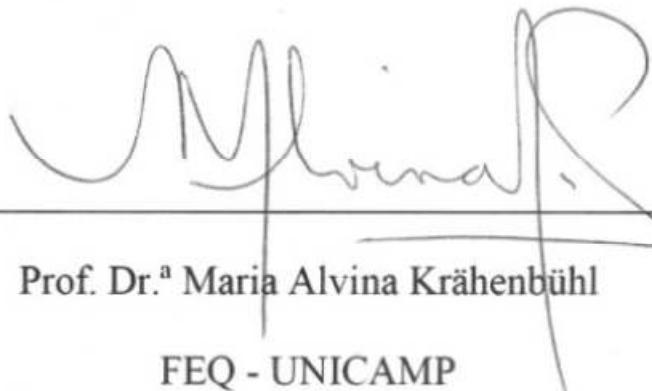
---



Prof. Dr. Martin Aznar

FEQ - UNICAMP

---



Prof. Dr.ª Maria Alvina Krähenbühl

FEQ - UNICAMP

---



Prof. Dr. Luiz Gustavo Martins Vieira

FEQ - UFU



Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química  
defendida por Mariana Ricken Barbosa.

---



Prof. Dr. Martin Aznar

FEQ - UNICAMP  
(Orientador)



*Dedico essa dissertação:  
A Deus  
Aos meus pais, Wolney e Arlete  
À minha irmã, Milena  
Ao meu afilhado, Mateus  
Aos meus amigos.*



## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente, quero agradecer a Deus por ter me concedido amor, que me fez superar as dificuldades, e por ter colocado em minha vida pessoas especiais, ficando aqui, meu sincero sentimento de admiração, gratidão e respeito:

Aos meus pais, Wolney e Arlete, pela educação, compreensão, dedicação e pelo amor. Eles que estão comigo no dia-a-dia, mesmo distante fisicamente, mas sempre me auxiliando a escolher o caminho mais adequado.

À minha irmã pelos conselhos e diálogos que nos fortaleceram como Ser.

Ao meu afilhado, Mateus, que com o sorriso encantador deixa tudo parecer leve e natural.

Aos meus amigos Ana Luísa Seara, Basílio Bogarin, Bruna Cabral, Carolina Araújo, Cintya Wink, Grasiele Jorge, Ivo Medeiros, Lilian Fernandes, Lívia Tizzo, Natália Oliveira e Roberta Azevedo pela cumplicidade, passeios, conversas, enfim, pelo carinho.

Aos meus companheiros de laboratório (LEF) Ênio Rocha, Júlio Lopes e Leonardo Hadlich pelas discussões de problemas termodinâmicos, risadas e cafés.

Ao meu orientador, Martín Aznar, pelas dicas e suporte necessários para a execução desse trabalho.

Ao pessoal do PaTH-Aveiro/Portugal, pelo aprendizado dos experimentos envolvendo o equilíbrio líquido-vapor e pela hospitalidade.

À CAPES e FAEPEX pelo apoio financeiro.



## RESUMO

Os líquidos iônicos são compostos químicos cujas propriedades termofísicas têm sido estudadas a fim de aplicá-los em diversos processos, tais como o de separação. No caso da destilação, para realizar o projeto, otimização e a operação do sistema, necessita-se conhecer o equilíbrio líquido-vapor, cujo cálculo pode ser realizado por equações de estado cúbicas. Essas expressões contêm parâmetros de atração e repulsão que são dependentes de propriedades críticas, as quais não são possíveis de determinar experimentalmente para os líquidos iônicos, mas podem ser estimadas por grandezas mensuráveis, como, por exemplo, a velocidade do som. Neste trabalho, as propriedades críticas, temperatura de ebulação e os termos atrativo e repulsivo de equações de estado cúbicas para os líquidos iônicos baseados no íon imidazólio  $[C_2mim]$   $[EtSO_4]$ ,  $[C_2mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_6mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_5mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_4mim]$   $[PF_6]$ ,  $[C_2mim]$   $[PF_6]$ ,  $[C_6mim]$   $[PF_6]$ ,  $[C_8mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_8mim]$   $[PF_6]$ ,  $[C_8mim]$   $[BF_4]$ ,  $[C_4mim]$   $[BF_4]$ ,  $[C_6mim]$   $[BF_4]$  e  $[C_4mim]$   $[NTf_2]$ , foram determinados a partir de dados de velocidade do som, volume molar e capacidades caloríficas, minimizando uma função objetivo através do algoritmo genético PIKAIA. As frações molares da fase líquida do equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários incluindo imidazólios foram calculadas pelo software *Phase Equilibrium 2000* e comparadas com os dados experimentais. Os líquidos iônicos com ânions  $[BF_4]^-$  e  $[NTf_2]^-$  apresentaram resultados similares de ELV para a maioria das equações de estado e regras de mistura quando se utilizou os valores de temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas obtidos pelo processo de otimização e pelo método de contribuição de grupo proposto por Valderrama e Rojas (2009). Para os imidazólios contendo íons  $[PF_6]^-$  e  $[EtSO_4]^-$ , os desvios médios relativos para as frações molares na fase líquida foram menores quando se utilizaram as propriedades termofísicas calculadas por velocidade do som e regra de mistura de van der Waals.

Palavras-chave: Líquidos iônicos, Propriedades críticas, Parâmetros de equação de estado, Velocidade do som, Equilíbrio líquido-vapor



## ABSTRACT

Ionic liquids are chemical compounds whose thermophysical properties have been studied in order to apply them in a large amount of processes, for example, separation process. In case of distillation, one needs to know liquid-vapor equilibria whose determination can be done through cubic equations of state in order to design, optimize and operate the system. In those equations, there are attractive and repulsive parameters which are dependent on critical properties that, for ionic liquids, cannot be experimentally determined but can be estimated by measurable variables, such as speed of sound. In this work, the critical properties, boiling temperature and the attractive and repulsive parameters of cubic equations of state for ionic liquids based on imidazolium [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], were determined using speed of sound, molar volume and heat capacities data, minimizing an objective function using PIKAIA genetic algorithm. Liquid mole fractions of binary liquid-vapor equilibria with imidazolium were calculated by *Phase Equilibrium 2000 software* and then compared with experimental data. Ionic liquids with [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> and [NTf<sub>2</sub>]<sup>-</sup> anions showed similar results for most of the equations of state and mixing rules when the normal boiling temperature, critical pressure and temperature were used and estimated by an optimization procedure and group contribution method proposed by Valderrama and Rojas (2009). Imidazolium-based ionic liquids with [PF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> and [EtSO<sub>4</sub>]<sup>-</sup> ions had the smallest relative mean deviations of liquid mole fractions when the thermophysical properties were calculated by speed of sound and the van der Waals's mixing rule were used.

Key-Words: Ionic liquids, Critical properties, Parameters of equation of state, Speed of sound, Liquid-vapor equilibria



# SUMÁRIO

RESUMO .....	xii
ABSTRACT.....	xiii
LISTA DE FIGURAS.....	xvii
LISTA DE TABELAS .....	xxi
NOMENCLATURA .....	xxxii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO .....	1
1.1.Objetivo.....	2
1.2.Organização do Trabalho.....	2
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1.Líquidos Iônicos.....	5
2.1.1-Definição.....	5
2.1.2-Propriedades Físico-Químicas .....	6
a-)Temperatura de fusão.....	6
b-) Viscosidade.....	7
c-) Miscibilidade.....	8
2.1.3-Impacto Ambiental.....	9
2.1.4-Aplicações.....	10
2.2.Propriedades Críticas.....	12
2.3.Velocidade do Som.....	14
2.4.Equações de Estado.....	18
2.5.Equilíbrio Líquido-Vapor.....	21
CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA PROPOSTA.....	23
3.1.Função Objetivo.....	23
3.2.Propriedades Termofísicas.....	24
3.3.Métodos de Otimização.....	26
3.3.1-Algoritmo Genético.....	26
3.4.Regras de mistura.....	28
3.5.Descrição do conteúdo dos Anexos e Apêndices.....	29
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	31
4.1.Validação da metodologia.....	31
4.2.Resultados para líquidos iônicos.....	39

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS.....	61
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	63
ANEXO I.....	71
ANEXO II .....	97
APÊNDICE A .....	99
APÊNDICE B.....	103
APÊNDICE C.....	107
APÊNDICE D .....	109
APÊNDICE E.....	131
APÊNDICE F .....	135
APÊNDICE G .....	139
APÊNDICE H.....	155

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1- Resultado da simulação computacional para os líquidos iônicos (a) [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ], (b) [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] e (c) [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: Rodrigues, 2010).....	5
Figura 2.2- Estrutura química de (a) [C <sub>1</sub> mim] [Cl], (b) [C <sub>4</sub> mim] [MeSO <sub>4</sub> ] e (c) [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	6
Figura 2.3- Miscibilidade de 1,2 etanodiol em Δ[C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ], ◇[C <sub>4</sub> mim] [Tf <sub>2</sub> N] e ◆[C <sub>6</sub> mim] [Tf <sub>2</sub> N]. (Fonte: Makowska et al., 2010) .....	8
Figura 2.4- Miscibilidade ◆ [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] / 1,2-propanodiol, ◇ [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] / 1,3-propanodiol, ▲[C <sub>4</sub> mim] [Tf <sub>2</sub> N] / 1,2-propanodiol e Δ[C <sub>4</sub> mim] [Tf <sub>2</sub> N] / 1,3-propanodiol. (Fonte: Makowska et al., 2010).....	8
Figura 2.5- Análise de riscos dos LIIs de ânion tetrafluoroborato (a) e (b) comparados com a acetona (c) em aspectos de R- liberação; S- alcance temporal; B- bioacumulação; A- atividade biológica; U - incerteza associada. (Fonte: Jastorff et al., 2003).....	9
Figura 2.6- Número de publicações científicas em função dos anos conforme pesquisa realizada na ferramenta de pesquisa Scifinder. (Fonte: Linguito, 2011).....	11
Figura 2.7- Número de artigos publicados em função das sub-áreas de conhecimento. (Fonte: Rodrigues, 2010).....	11
Figura 2.8- Taxa mássica na direção <i>x</i> do volume de controle <i>dv</i> .....	14
Figura 2.9- Diagrama pVT de uma substância pura.....	18
Figura 2.10- Desvio percentual médio de propriedades termodinâmicas calculadas a partir de EOS SRK e PR. (Fonte: Demneh et al., 2010) .....	21
Figura 3.1- Esquema típico de um algoritmo genético. (Fonte: KONDAGESKI, 2008). ....	27
Figura 4.1- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o hexano.....	32
Figura 4.2- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o hexano. ....	33
Figura 4.3- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o hexano.....	33
Figura 4.4- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de Rkm para o hexano. ....	33
Figura 4.5- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o octano.....	34
Figura 4.6- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o octano. ....	34
Figura 4.7- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o octano. ....	35
Figura 4.8- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de Rkm para o octano. ....	35
Figura 4.9- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o decano.....	36

Figura 4.10- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o decano.....	36
Figura 4.11- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o decano.....	36
Figura 4.12- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de RKm para o decano.....	37
Figura 4.13- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e hexano a 298,7 K.....	37
Figura 4.14- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e octano a 308,7 K.....	38
Figura 4.15- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e decano a 333,7 K.....	39
Figura 4.16- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ] a 333,15 K.....	41
Figura 4.17- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ] a 333,15 K. ....	42
Figura 4.18- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ] a 333,15 K. ....	42
Figura 4.19- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	43
Figura 4.20- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	43
Figura 4.21- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	43
Figura 4.22- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 333,15 K. ....	44
Figura 4.23- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 333,15 K. ....	44
Figura 4.24- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 333,15 K. ....	45
Figura 4.25- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	45
Figura 4.26- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	46
Figura 4.27- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,15 K. ....	46
Figura 4.28- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 308,4 K. ....	47
Figura 4.29- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 308,4 K. ....	47
Figura 4.30- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 308,4 K. ....	47

Figura 4.31- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298,15 K .....	48
Figura 4.32- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298,15 K.....	48
Figura 4.33- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298,15 K .....	49
Figura 4.34- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 298,15 K.....	49
Figura 4.35- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 298,15 K.....	50
Figura 4.36- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 298,15 K.....	50
Figura 4.37- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,11 K. ....	51
Figura 4.38- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,11 K.....	51
Figura 4.39- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 353,11 K. ....	51
Figura 4.40- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 298,15 K.....	52
Figura 4.41- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 298,15 K. ....	52
Figura 4.42- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 298,15 K. ....	53
Figura 4.43- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 313,15 K. ....	53
Figura 4.44- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 313,15 K.....	54
Figura 4.45- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] a 313,15 K. ....	54
Figura 4.46- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 313,15 K.....	55
Figura 4.47- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 313,15 K. ....	55
Figura 4.48- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 313,15 K.....	55
Figura 4.49- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 330 K.....	56
Figura 4.50- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 330 K.....	56

Figura 4.51- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] a 330 K.....	57
Figura 4.52- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298 K.....	57
Figura 4.53- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298 K.....	58
Figura 4.54- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] a 298 K.....	58
Figura H.1- Dados de velocidade do som calculadas por RNA e experimentais.....	156

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1- Temperatura de fusão de líquidos iônicos em função do ânion. (Fonte: Wasserscheid & Keim, 2000 ; Ngo et al., 2003).....	6
Tabela 2.2- Temperatura de fusão de líquidos iônicos em função do tamanho do cátion. (Fonte: Wasserscheid & Keim, 2000 ; Ngo et al., 2003).....	7
Tabela 2.3- Valores de viscosidade para líquidos iônicos a 25 ° C. (Fonte: Baker et al., 2001; Seddon et al., 2002).....	7
Tabela 2.4- Erro médio absoluto no cálculo de propriedades críticas para os diversos métodos de contribuição de grupo. (Fonte: Nannoolal et al., 2007).....	13
Tabela 2.5- Equações sugeridas para os cálculos de propriedades termofísicas. (Fonte: Valderrama, 2003).....	20
Tabela 3.1- Valores dos parâmetros de equações de estado cúbicas. (Fonte: ARCE, 2002).....	24
Tabela 4.1- Valores das propriedades críticas e temperatura de ebulação obtidas por AG e literatura..	31
Tabela 4.2 – Resultado dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PR e SRKm.....	32
Tabela 4.3 – Resultado dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PT e RKm. ....	32
Tabela 4.4- Valores das propriedades críticas e temperatura normal de ebulação obtidas por AG e literatura.....	40
Tabela 4.5- Resultado dos parâmetros de atração e repulsão para as EDEs PR e SRKm.. ..	40
Tabela 4.6- Resultado dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PT e RKm.....	41
Tabela 4.7- Desvios médios relativos para a fração molar da fase líquida obtida com dados de entrada calculados pela velocidade do som. ....	59
Tabela 4.8- Desvios médios relativos para a fração molar da fase líquida obtida com dados de entrada calculados por Valderrama e Rojas (2009). ....	59
Tabela I.1- Dados de velocidade do som calculados para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	71
Tabela I.2- Dados de densidade experimental para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ]. (Fonte: TOMÉ et al., 2008).....	71
Tabela I.3- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	72
Tabela I.4- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	72
Tabela I.5- Dados de expansividade térmica para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	73
Tabela I.6- Dados de velocidade do som calculados para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	73
Tabela I.7- Dados de densidade experimental para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: GARDAS et al., 2007)....	74
Tabela I.8- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	74
Tabela I.9- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	75
Tabela I.10- Dados de expansividade térmica para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	75
Tabela I.11- Dados de velocidade do som experimental para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....	76

Tabela I.12- Dados de densidade experimental para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).76	
Tabela I.13- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].(Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....77	
Tabela I.14- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....77	
Tabela I.15- Dados de expansividade térmica para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)..78	
Tabela I.16- Dados de velocidade do som experimental para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....78	
Tabela I.17- Dados de densidade experimental para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....79	
Tabela I.18- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....79	
Tabela I.19- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....80	
Tabela I.20- Dados de expansividade térmica para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....80	
Tabela I.21- Dados de velocidade do som experimental para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....81	
Tabela I.22- Dados de densidade experimental para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....81	
Tabela I.23- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....82	
Tabela I.24- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005).....82	
Tabela I.25- Dados de expansividade térmica para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)..83	
Tabela I.26- Dados de velocidade do som experimental para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006).....83	
Tabela I.27- Dados de densidade experimental para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006).....84	
Tabela I.28- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....84	
Tabela I.29- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006).....84	
Tabela I.30- Dados de expansividade térmica para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006).....85	
Tabela I.31- Dados de velocidade do som para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....85	
Tabela I.32- Dados de densidade experimental para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: TAGUCHI et al., 2009)..85	
Tabela I.33- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....86	
Tabela I.34- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....86	
Tabela I.35- Dados de expansividade térmica para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....86	

Tabela I.36- Dados de velocidade do som para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	87
Tabela I.37- Dados de densidade experimental para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. (Fonte: ESPERANÇA et al., 2008).....	87
Tabela I.38- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	88
Tabela I.39- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	88
Tabela I.40- Dados de expansividade térmica para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	89
Tabela I.41 Dados de velocidade do som para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	89
Tabela I.42- Dados de densidade experimental para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: GARDAS et al., 2007)....	89
Tabela I.43- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	90
Tabela I.44- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	90
Tabela I.45- Dados de expansividade térmica para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	90
Tabela I.46- Dados de velocidade do som para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	91
Tabela I.47- Dados de densidade experimental para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. (Fonte: GARDAS et al., 2007)...91	91
Tabela I.48- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	91
Tabela I.49- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	92
Tabela I.50- Dados de expansividade térmica para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	92
Tabela I.51- Dados de velocidade do som para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	92
Tabela I.52- Dados de densidade experimental para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. (Fonte: GARDAS et al., 2007)....93	93
Tabela I.53- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	93
Tabela I.54- Dados de compressibilidade isotérmica para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	93
Tabela I.55- Dados de expansividade térmica para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	94
Tabela I.56- Dados de velocidade do som para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	94
Tabela I.57- Dados de densidade para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] (GARDAS & COUTINHO, 2007).....	94
Tabela I.58- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	95
Tabela I.59- Dados de velocidade do som para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	95
Tabela I.60- Dados de densidade para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] (GARDAS & COUTINHO, 2007).....	95
Tabela I.61- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	96
Tabela II.1 – Valores das variáveis e constantes referentes ao AG PIKAIA.....	97
Tabela C.1- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas por AG.....	107
Tabela C.2- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas na literatura (SMITH, 2000).....	107
Tabela D.1 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ] .....	109
Tabela D.2 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	109

Tabela D.3 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ]. . . . .	110
Tabela D.4 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ]. . . . .	110
Tabela D.5- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	111
Tabela D.6 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	111
Tabela D.7- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	112
Tabela D.8- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	112
Tabela D.9- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. . . . .	113
Tabela D.10- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. . . . .	113
Tabela D.11- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. . . . .	114
Tabela D.12- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. . . . .	114
Tabela D.13- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	115
Tabela D.14- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	115
Tabela D.15- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	116
Tabela D.16- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	116
Tabela D.17- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. . . . .	117
Tabela D.18- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. . . . .	117
Tabela D.19- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. . . . .	118
Tabela D.20- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. . . . .	118
Tabela D.21- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	119
Tabela D.22- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	119

Tabela D.23- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	119
Tabela D.24 - Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	120
Tabela D.25- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	120
Tabela D.26- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	120
Tabela D.27- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	121
Tabela D.28- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	121
Tabela D.29- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	121
Tabela D.30- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	122
Tabela D.31- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	122
Tabela D.32- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. .....	123
Tabela D.33- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	123
Tabela D.34- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	123
Tabela D.35- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	124
Tabela D.36- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	124
Tabela D.37- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	124
Tabela D.38- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	125
Tabela D.39- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	125
Tabela D.40- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]. .....	125
Tabela D.41- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	126
Tabela D.42- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros $T_c$ , $p_c$ e $T_b$ obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]. .....	126

Tabela D.43- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	126
Tabela D.44- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	127
Tabela D.45- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	127
Tabela D.46- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	127
Tabela D.47- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	127
Tabela D.48- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	127
Tabela D.49- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PR para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	127
Tabela D.50- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de SRKm para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	127
Tabela D.51- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de PT para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	127
Tabela D.52- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros T <sub>c</sub> , p <sub>c</sub> e T <sub>b</sub> obtidos por AG para EDE de RKm para [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	127
Tabela E.1- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas por AG.....	131
Tabela E.2- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).....	132
Tabela E.3- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid e propriedades termofísicas obtidas por AG.....	132
Tabela E.4- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).....	133
Tabela E.5- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Adachi-Sugie e propriedades termofísicas obtidas por AG.....	133
Tabela E.6- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Adachi-Sugie e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).....	134
Tabela F.1- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e hexano com propriedades termofísicas calculadas.....	135
Tabela F.2- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e octano com propriedades termofísicas calculadas.....	135
Tabela F.3- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e decano com propriedades termofísicas calculadas.....	136
Tabela F.4- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e hexano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.....	136

Tabela F.5- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e octano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.....	137
Tabela F.6- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e decano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.....	137
Tabela G.1- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	139
Tabela G.2- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	140
Tabela G.3- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	140
Tabela G.4- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	141
Tabela G.5- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	141
Tabela G.6- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	142
Tabela G.7- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	142
Tabela G.8- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	143
Tabela G.9- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	143
Tabela G.10- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	144
Tabela G.11- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	144
Tabela G.12- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	144
Tabela G.13- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	144
Tabela G.14- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	145
Tabela G.15- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	145
Tabela G.16- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	146
Tabela G.17- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	146
Tabela G.18- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	147

Tabela G.19- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	147
Tabela G.20- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] .....	147
Tabela G.21- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	148
Tabela G.22- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	148
Tabela G.23- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	149
Tabela G.24- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ].....	149
Tabela G.25- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	149
Tabela G.26- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	149
Tabela G.27- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [EtSO <sub>4</sub> ].....	150
Tabela G.28- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	150
Tabela G.29- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] .....	151
Tabela G.30- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ] .....	151
Tabela G.31- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	152
Tabela G.32- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	152
Tabela G.33- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ] .....	152
Tabela G.34- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ].....	153
Tabela G.35- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	153
Tabela G.36- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ].....	154
Tabela G.37- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	154
Tabela G.38- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>2</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ] .....	154

Tabela G.39- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO <sub>2</sub> e [C <sub>8</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]. . . . .	154
Tabela H.1- Imidazólios com seus respectivos subgrupos de Knotts et al. (2001) e massa molecular utilizados na RNA. . . . .	154



# NOMENCLATURA

## Abreviaturas

ER <sub>m</sub>	erro médio relativo percentual
LI	líquido iônico
ELV	equilíbrio líquido-vapor
pVT	pressão, volume e temperatura
EDE	equação de estado cúbica
RNA	rede neural artificial
AG	algoritmo genético

## Siglas

LD	Lydersen
AB	Ambrose
KR	Klincewicz
JR	Joback
vdW	van der Waals
RK	Redlich-Kwong
SRK	Soave-Redlich-Kwong
PR	Peng-Robinson
PT	Patel-Teja
SRKm	Soave-Redlich-Kwong com volume transladado
RKm	Redlich-Kwong com volume transladado

## Latinas

<i>E</i>	potencial eletrostático (J/C)
<i>Q</i>	carga do íon (C)
<i>d</i>	distância de separação dos íons (m)
<i>v</i>	velocidade de um elemento de fluido na direção conforme subscrito (m/s)
<i>x</i>	abscissa do plano cartesiano (m)
<i>y</i>	ordenada do plano cartesiano (m)
<i>z</i>	cota do plano cartesiano (m)
<i>V</i>	volume molar (m <sup>3</sup> /kmol)
<i>t</i>	tempo (s)
<i>df</i>	diferencial infinitesimal de força (N)
<i>p</i>	pressão (Pa)
<i>g</i>	aceleração da gravidade (m/s <sup>2</sup> )
<i>r</i>	aceleração do fluido (m/s <sup>2</sup> )
<i>B</i>	módulo adiabático de “bulk” (-)
<i>s</i>	condensação em um ponto qualquer (-)
<i>u</i>	velocidade do som (m/s)

$v$	volume de fluido ( $\text{m}^3$ )
$c_p$	capacidade calorífica isobárica ( $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}/\text{K}$ )
$c_v$	capacidade calorífica isocórica ( $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}/\text{K}$ )
$R$	constante universal dos gases ( $\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1}/\text{K}$ )
$T$	temperatura (K)
$f$	fugacidade (Pa)
$x_i$	fração molar do elemento $i$ na fase líquida (-)
$y_i$	fração molar do elemento $i$ na fase gasosa (-)
$n$	número de mols (kmol)
$b$	termo repulsivo de equações de estado cúbicas ( $\text{m}^3/\text{kmol}$ )
$c$	parâmetro de volume ( $\text{m}^3/\text{kmol}$ )
$a$	termo atrativo de equações de estado cúbicas ( $\text{J} \cdot \text{m}^3/\text{kmol}^2$ )
$m$	parâmetro auxiliar dependente do fator acêntrico (-)
$w$	fator acêntrico (-)
$q$	número de grupos (-)
$A_{cpk}$	parâmetro de Joback-Reid ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-1}/\text{mol}$ )
$B_{cpk}$	parâmetro de Joback-Reid ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-2}/\text{mol}$ )
$C_{cpk}$	parâmetro de Joback-Reid ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-3}/\text{mol}$ )
$k_k$	coeficiente de compressibilidade isotérmica ( $\text{Pa}^{-1}$ )
$k_a$	coeficiente de expansividade térmica ( $\text{K}^{-1}$ )
$M$	massa molecular (kg/kmol)
$T_b$	temperatura normal de ebulição (K)
$k$	parâmetro de interação binária do termo atrativo da equação de vdW (-)
$l$	parâmetro de interação binária do termo repulsivo da equação de vdW (-)
A	subgrupo ligado a um grupo sem anel
B	subgrupo ligado a um grupo com anel
C	subgrupo ligado a um grupo sem anel aromático
D	subgrupo ligado a um álcool primário
S	entropia molar ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-1}/\text{mol}$ )
H	entalpia molar (J/mol)
U	energia interna molar (J/mol)

## Gregas

$\eta$	constante de Madelung (-)
$\rho$	densidade ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$\phi$	coeficiente de fugacidade (-)
$\mu$	número de componentes
$\Omega$	parâmetro auxiliar (-)
$\lambda$	parâmetro de interação regra de mistura Adachi-Sugie (-)
$\zeta$	parâmetro de interação regra de mistura Adashi-Sugie (-)
$\sigma$	parâmetro de interação regra de mistura Adashi-Sugie (-)
$\delta$	parâmetro de interação regra de mistura Panagiotopoulos-Reid (-)
$\tau$	parâmetro de interação regra de mistura Panagiotopoulos-Reid (-)
$\nu$	parâmetro de interação regra de mistura Panagiotopoulos-Reid (-)
$\gamma$	parâmetro da equação de estado de Patel-Teja (-)

$\alpha$	parâmetro auxiliar no termo atrativo de equações de estado cúbicas (-)
$\kappa$	tolerância

## Superescritos

exp	informações experimentais
EOS	propriedade obtida por equação de estado cúbica
t	propriedade transladada
V	fase vapor
L	fase líquida
o	estado de referência

## Subescritos

x	direção x do plano cartesiano
y	direção y do plano cartesiano
z	direção z do plano cartesiano
r	propriedade reduzida
m	propriedade de mistura
o	propriedade cujo valor é conhecido
ac	termo acústico
c	propriedade crítica
i	componente i
j	componente j
cal	propriedade calculada
exp	propriedade experimental
t	velocidade do fluido nas direções x, y e z
q	número de grupos de Joback
a	referido ao parâmetro de energia
b	referido ao parâmetro de volume
RKm	propriedade obtida por equação Redlich-Kwong modificada
SRKm	propriedade obtida por equação Soave-Redlich-Kwong modificada
PR	propriedade obtida por equação Peng-Robinson
PT	propriedade obtida por equação Patel-Teja
V&R	Valderrama e Rojas

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

A preocupação com o meio ambiente, de forma efetiva, ganhou força apenas na década de 70, resultando na elaboração de leis internas de proteção ambiental por vários países. Tais leis, entre outros aspectos, tratam da emissão de gases responsáveis pelo aquecimento global para a atmosfera, do uso de compostos tóxicos e do incentivo à utilização de fontes energéticas limpas.

Esses são fatores que interferem diretamente na atividade industrial, sendo necessário o desenvolvimento de tecnologias sustentáveis e competitivas, seguindo o modelo proposto pela química verde, que se baseia na redução da quantidade de rejeitos, matéria-prima, energia, periculosidade e de custo operacional a partir da substituição de solventes voláteis e tóxicos, do uso de matéria-prima renovável e disponível em abundância, do monitoramento e controle de processos químicos e da otimização dos processos de separação pela utilização eficiente de energia (TUNDO et al., 2000).

Neste contexto, em 1990 foi verificada a hidrofobicidade, isto é, imiscibilidade em água, de alguns líquidos iônicos, tais como  $[C_4mim][PF_6]$  e  $[C_4mim][BF_4]$  (PAPAICONOMOU et al., 2007). Essa característica permite utilizá-los em processos de extrações supercrítica e líquido-líquido de sistemas aquosos no lugar de benzeno e outros solventes orgânicos voláteis prejudiciais à saúde humana e vegetal (BLANCHARD et al., 1999).

Os líquidos iônicos são sais compostos por um cátion orgânico de tamanho superior ao ânion orgânico ou inorgânico. Esses íons interagem fracamente e formam um retículo cristalino de baixa energia responsável pelo baixo valor de temperatura de fusão em relação aos sais, comumente inferior a 100 ° C (WILKES, 2002).

Pesquisas desenvolvidas por Savage et al. (1994) relataram que até o final da década de 90 existiam poucos líquidos iônicos. Após alguns anos, verificou-se a possibilidade de realizar a síntese desses compostos pela modificação entre estruturas positivas e negativas da molécula, tamanho da cadeia alquílica e introdução de grupos oxigenados (WELTON, 1999). Esse rearranjo modifica as propriedades físico-químicas e de transporte, como por exemplo, hidrofobicidade, viscosidade, densidade e solubilidade (VENTURA et al., 2012).

Rebelo et al. (2005) mencionaram que um líquido iônico decompõe-se, em muitos casos, a temperaturas próximas à temperatura normal de ebulação, o que impossibilita a determinação experimental de temperatura, pressão e volume críticos.

Valderrama e Rojas (2009) utilizaram um método de contribuição de grupo baseado na metodologia de Lydersen-Joback-Reid para determinar a pressão e a temperatura críticas, o fator acêntrico e a temperatura normal de ebulação. Entretanto, essa abordagem pode resultar em medidas imprecisas, uma vez que essas grandezas não foram utilizadas no ajuste dos dados.

## 1.1 OBJETIVO

O objetivo desse trabalho foi a determinação da temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas e dos parâmetros de repulsão e atração das equações de estado cúbicas: Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson e Patel-Teja, para os líquidos iônicos: [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], a partir da minimização da função objetivo por algoritmo genético PIKAIA e dos dados de velocidade do som, volume molar e capacidades caloríficas obtidos pela literatura.

Além disso, o equilíbrio líquido-vapor para sistemas binários contendo líquidos iônicos foi calculado pelo *software Phase Equilibrium 2000* com os parâmetros resultantes da otimização por algoritmo genético e comparado com os dados experimentais existentes na literatura e com os resultados obtidos pelas mesmas equações de estado, mas com os termos atrativo e repulsivo calculados a partir das propriedades críticas estimadas por Valderrama e Rojas (2009).

## 1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

A Dissertação está organizada da seguinte forma:

O Capítulo 2, intitulado “Revisão Bibliográfica”, apresenta a definição e as propriedades dos líquidos iônicos, as motivações para o estudo dessas substâncias, o histórico do desenvolvimento das equações de estado, os métodos de contribuição de grupo para estimar as propriedades críticas de

compostos químicos e uma breve descrição do *software PE 2000*, que foi utilizado para a modelagem do equilíbrio líquido-vapor binário.

O Capítulo 3, “Metodologia Proposta”, descreve o procedimento utilizado para a determinação dos parâmetros por algoritmo genético, as equações e os dados utilizados na função objetivo e a descrição do conteúdo presente nos anexos e apêndices desse trabalho.

No Capítulo 4, denominado “Resultados e Discussões”, apresentam-se os resultados das simulações para o hexano, octano e decano, cujas propriedades críticas e temperatura normal de ebulação podem ser determinadas experimentalmente. Essa etapa foi importante para a validação da metodologia proposta a fim de aplicá-la aos cálculos envolvendo líquidos iônicos contendo cátions de imidazólio, os quais possuem dados de equilíbrio líquido-vapor binário disponíveis na literatura e cujos resultados também são apresentados nesse capítulo.

No Capítulo 5, “Conclusões e Sugestões para Futuros Trabalhos”, citam-se a diferença entre os valores calculados pela velocidade do som e por Valderrama e Rojas (2009) para as temperatura e pressão críticas, a temperatura normal de ebulação e as frações molares da fase líquida de alguns imidazólios, a possibilidade de estimar os termos atrativos e repulsivos das equações de estado cúbicas e sugestões para aprimorar os resultados e ampliar a abordagem utilizada para outros líquidos iônicos.



## CAPÍTULO 2

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 2.1 LÍQUIDOS IÔNICOS

##### 2.1.1- Definição

Os líquidos iônicos (LIs) são formados pela união de íons, sendo que o cátion apresenta uma estrutura assimétrica com átomos de carbono e tamanho relativamente superior ao ânion, o qual é simétrico e orgânico ou inorgânico (AZNAR, 2007).

A assimetria encontrada nas moléculas dos líquidos iônicos dificulta a organização de uma rede compacta de baixa entropia; como consequência, tais compostos, geralmente, exibem temperatura de fusão inferior a 100 °C e permanecem estáveis no estado líquido numa ampla faixa de temperatura, de aproximadamente 300 °C (BANDRÉS et al., 2008).

Na Figura 2.1 se apresentam os resultados de simulações computacionais para os LIs de ânion hexafluorofosfato e cátion imidazólio, cujas regiões polares estão destacadas pela cor vermelha, enquanto as áreas em verde representam as seções apolares, que são compostas pelas cadeias carbônicas laterais dos cátions.

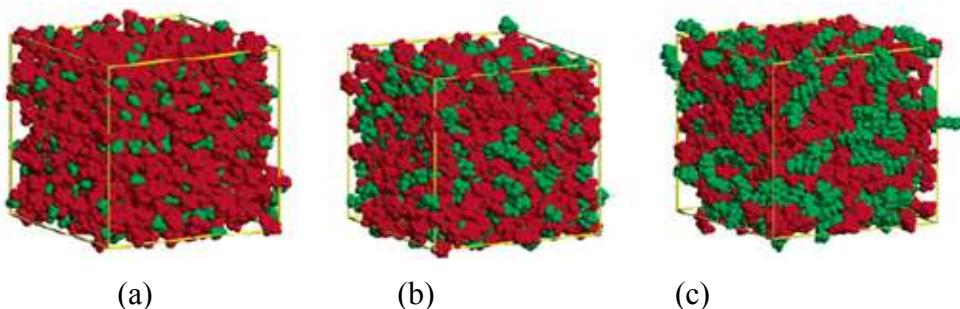


Figura 2.1- Resultado da simulação computacional para os líquidos iônicos (a)  $[C_2mim][PF_6]$ , (b)  $[C_4mim][PF_6]$  e (c)  $[C_8mi][PF_6]$ . (Fonte: Rodrigues, 2010)

A história de síntese dos LIs pode ser dividida em três gerações. A primeira ocorreu nos anos 70 e foi desenvolvida pela Academia de Força Aérea Americana, cujo enfoque foi o estudo de líquidos iônicos compostos por uma mistura de halogenetos e ácidos de Lewis, como por exemplo  $[C_2mim][Cl]$  /  $AlCl_3$  (GIERNOTH, 2010).

O avanço para a segunda geração aconteceu na década de 90 pela observação de ânions estáveis em meio aquoso e no ar, tais como  $[BF_4]^-$ ,  $[PF_6]^-$  e  $[NO_3]^-$ . A terceira geração é representada por LIIs comumente conhecidos por substâncias projetadas, pois é estimado que aproximadamente  $10^{18}$  compostos possam ser sintetizados a partir de combinações entre ânions, tais como:  $[CF_3SO_3]^-$ ,  $[EtSO_4]^-$ ,  $[Br]^-$ ,  $[NTf_2]^-$ , e cátions, como por exemplo piridíneo, pirrolidíneo, fosfônio, triazólio, piridazíneo e imidazólio, que assumem importância na atuação como solvente, suporte líquido de substratos, reagentes e catalisadores em síntese orgânica (CHIAPPE & PIERACCINI, 2005).

Na Figura 2.2 se apresenta, como exemplo, a estrutura química de três líquidos iônicos, cloreto de 1, 3-dimetilimidazólio, metilsulfato de 1-butil-3-metilimidazólio e bis trifluoromethylsulfonil amida de 1-pentil-3-metilimidazólio. Onde os círculos brancos, cinzas, azuis, verde escuro, amarelos e vermelhos representam os átomos de hidrogênio, carbono, nitrogênio, cloro, enxofre e oxigênio, respectivamente.

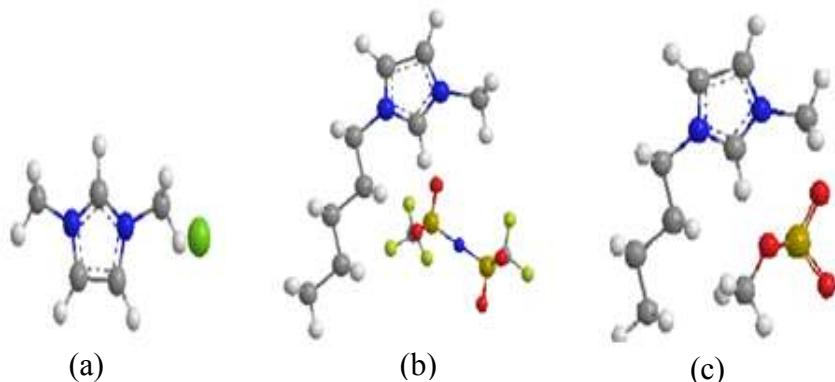


Figura 2.2- Estrutura química de (a)  $[C_1mim][Cl]$ , (b)  $[C_5mim][NTf_2]$  e (c)  $[C_4mim][MeSO_4]$ .

### 2.1.2- Propriedades Físico-Químicas

#### a) Temperatura de Fusão

A temperatura de fusão dos líquidos iônicos difere de um elemento a outro em decorrência da estrutura molecular desses compostos. Nas Tabelas 2.1 e 2.2 se mostram, respectivamente, a diferença do valor dessa propriedade termofísica devido ao tipo de ânion e ao número de átomos de carbono presentes no cátion.

Tabela 2.1- Temperatura de fusão de líquidos iônicos em função do ânion.  
(Fonte: Wasserscheid & Keim, 2000 ; Ngo et al., 2003)

Líquido iônico	Temperatura de fusão (°C)
$[C_4mim][PF_6]$	10
$[C_4mim][CF_3SO_3]$	16
$[C_4mim][N(SO_2CF_3)_2]$	-4

Tabela 2.2- Temperatura de fusão de líquidos iônicos em função do tamanho do cátion.  
 (Fonte: Wasserscheid & Keim, 2000 ; Ngo et al., 2003)

Substância	Temperatura de fusão (°C)
	
R = metil, R' = etil ([C <sub>2</sub> mim] [Cl])	87
R = metil, R' = n-butil ([C <sub>4</sub> mim] [Cl])	65
R = metil, R' = n-decil ([C <sub>10</sub> mim] [Cl])	38

A partir da Tabela 2.1 nota-se a necessidade de considerar o tipo de ânion no estudo sobre a temperatura de fusão do líquido iônico.

Pelos dados apresentados na Tabela 2.2 apresenta dados em que se percebe a diminuição da temperatura de fusão conforme o aumento no tamanho do cátion do imidazólio. Isto ocorre devido à diminuição da energia reticular causada pela conformação e pelo afastamento dos íons na cadeia, o que pode ser verificado pela expressão que relaciona a distância de separação e o potencial eletrostático presente entre os íons positivos e negativo, conforme equação abaixo (DAVIS, 2004).

$$E = \eta \frac{Q_1 Q_2}{d} \quad (1.1)$$

### b) Viscosidade

A variação no valor da viscosidade para os líquidos iônicos deve-se à possibilidade de formação de interações fortes do tipo ligação de hidrogênio e ao tipo de ânion que compõe a molécula.

Análises experimentais mostram que a viscosidade pode ser direta ou inversamente proporcional ao tamanho das cadeias laterais do cátion e os ânions cloreto e hexafluorofosfato são mais viscosos para um mesmo cátion.

Na Tabela 2.3 são apresentados alguns valores de viscosidade para tetrafluoroborato de 1-hexil-3-metilimidazólio, hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazólio, tetrafluoroborato de 1-etil-3-metilimidazólio, tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazólio e hexafluorofosfato de 1-octil-3-metilimidazólio.

Tabela 2.3- Valores de viscosidade para líquidos iônicos a 25 °C.  
 (Fonte: Baker et al., 2001; Seddon et al., 2002)

<b>Líquido iônico</b>	<b>Viscosidade (Pa.s)</b>
[C <sub>6</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]	0,174
[C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]	0,320
[C <sub>2</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]	0,206
[C <sub>4</sub> mim] [BF <sub>4</sub> ]	0,180
[C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]	0,682

### c) Miscibilidade

Existe uma ampla faixa de miscibilidade dos líquidos iônicos com substâncias orgânicas e inorgânicas. A solubilidade em compostos polares é explicada pelas interações do tipo ligações de hidrogênio, dipolo-dipolo e iônicas. E, em fluidos menos polares, pela existência de cadeia alquílica nos cátions.

A fim de exemplificar a miscibilidade de substâncias em líquidos iônicos, nas Figuras 2.3 e 2.4 se mostram, respectivamente, a interferência dessa propriedade de acordo com o tamanho do cátion em 1,2 etanodiol e com o tipo de ânion em dióis.

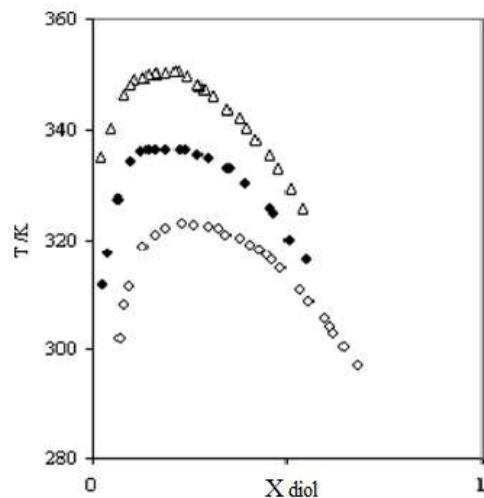


Figura 2.3-Miscibilidade de 1,2 etanodiol em  $\Delta$   $[C_2mim][NTf_2]$ ,  $\diamond [C_4mim][Tf_2N]$  e  $\blacklozenge [C_6mim][Tf_2N]$ . (Fonte: Makowska et al., 2010)

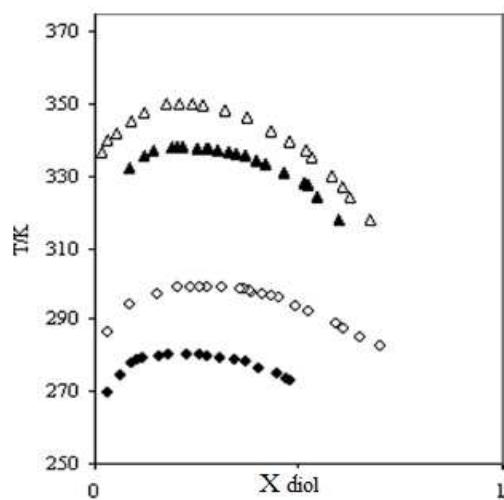


Figura 2.4- Miscibilidade  $\blacklozenge [C_4mim][BF_4]$  / 1,2-propanodiol,  $\diamond [C_4mim][BF_4]$  / 1,3-propanodiol,  $\blacktriangle [C_4mim][Tf_2N]$  / 1,2-propanodiol e  $\Delta [C_4mim][Tf_2N]$  / 1,3-propanodiol.  
(Fonte: Makowska et al., 2010)

### 2.1.3- Impacto Ambiental

A toxicidade é afetada tanto pelo cátion que compõe o líquido iônico (em ordem crescente de influência tem-se amônio, fosfônio, piridínio, imidazólio) quanto pelo ânion, sendo que os íons cloreto e trifluorometanosulfonato são os mais tóxicos, seguidos de tetrafluoroborato e hexafluorofosfato (RANKE et al., 2004).

Jastorff et al. (2003) desenvolveram uma metodologia, a qual está exemplificada na Figura 2.5, capaz de avaliar teoricamente o risco ambiental dos líquidos iônicos, sendo que os aspectos considerados foram: liberação, alcance temporal, bioacumulação, atividade biológica e incerteza associada, os quais estão organizados em uma escala de 1 a 4, que representam, respectivamente, nível muito baixo e muito alto.

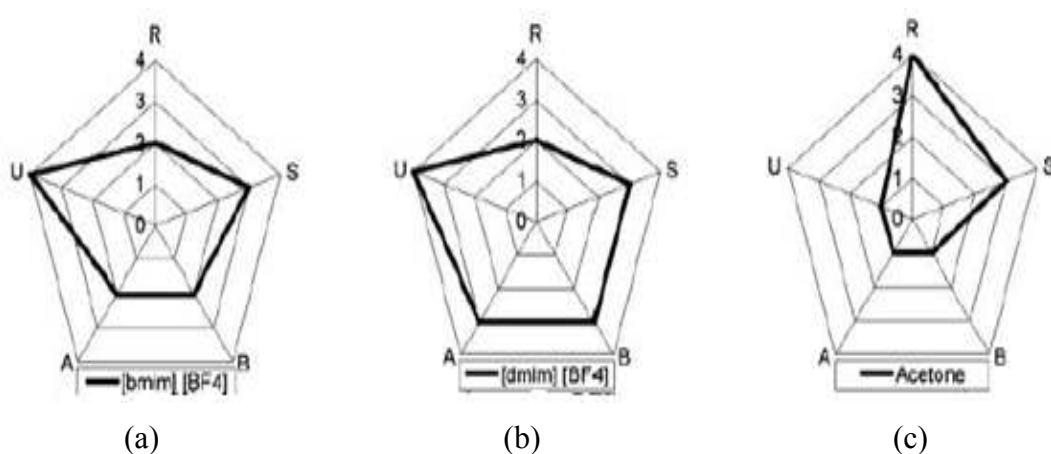


Figura 2.5- Análise de riscos dos LIs de ânion tetrafluoroborato (a) e (b) comparados com a acetona (c) em aspectos de R- liberação; S- alcance temporal; B- bioacumulação; A- atividade biológica; U - incerteza associada. (Fonte: Jastorff et al., 2003)

A partir da Figura 2.5, observa-se que a liberação da acetona apresenta nível 4 devido à alta volatilidade e propagação dessa substância na atmosfera. Os imidazólios de tetrafluoroborato apresentam baixa pressão de vapor e são pouco solúveis em água, isso faz com que a liberação desses LIs esteja no nível 2.

O estudo do alcance temporal baseia-se na transformação biótica e abiótica, solubilidade em água e na sorção pela fase sólida. Entretanto, apesar da escassez de informações quantitativas sobre decomposição e biodegradação dos imidazólios mencionados na Figura 2.5, pode-se estimar que tal parâmetro esteja no nível 4 a partir do conhecimento da estrutura química desses compostos. Por outro lado, o alcance temporal da acetona encontra-se no nível 3 devido à degradação da mesma no ar pela ação da luz; como consequência, tem-se geração de grupos hidroxilas.

Com relação ao fator denominado bioacumulação, considera-se que a acetona, por ser volátil e biodegradável, apresenta nível 1. Para os líquidos iônicos, a tendência de permanecer no meio ambiente é desconhecida, mas se pode considerar uma possível incorporação dos mesmos em regiões da membrana celular com polaridade semelhante.

A atividade biológica pode ser determinada por testes toxicológicos específicos, tais como *Microtox test*, que avaliam a percentagem de inibição da luminescência de uma suspensão de bactérias marinhas, como, por exemplo, a *Vibrio fischeri* na presença de substâncias tóxicas. A partir das análises efetuadas para a atividade biológica, concluiu-se que o  $[C_{10}mim][BF_4]$  apresenta um nível superior de risco comparado ao obtido pelo  $[C_4mim][BF_4]$  e pela acetona.

O último fator do pentagrama é a incerteza, a qual se admite ter nível diferente de zero, apesar do conhecimento dos demais itens contidos na Figura 2.5 para determinados compostos químicos, como é o caso da acetona, a fim de evitar a possibilidade de completa rejeição de risco. Em contrapartida, existem questionamentos sobre o impacto dos líquidos iônicos no meio ambiente e os efeitos toxicológicos por eles causados, o que acarreta numa incerteza elevada para essas substâncias. (RANKE et al., 2007).

#### 2.1.4- Aplicações

Desde a década de 90, a indústria química tem sido pressionada a adotar medidas para a redução, prevenção e a eliminação dos impactos ambientais, tais como o uso de substâncias seletivas e com baixo potencial de causar acidentes químicos, explosões, incêndios e danos à saúde humana e ao meio ambiente, devido ao uso de solventes com alto grau de inflamabilidade e volatilidade.

Uma alternativa que vem sendo estudada é o uso de líquidos iônicos em aplicações catalíticas e de separação, pois são bons solventes para materiais orgânicos ou inorgânicos e apresentam baixa pressão de vapor, alta estabilidade térmica, química e eletroquímica (FULLER et al., 1997; HUDDLESTON et al., 1998).

Comumente, encontra-se na literatura o uso de líquidos iônicos como agente redutor de atrito em peças mecânicas (YE et al., 2001), fluidos de transferência de calor (BRENNECKE & MAGINN, 2001) e em processos que envolvem reações químicas, secagem de gás, separação gasosa e extração líquido-líquido (EARLE et al., 1998).

Essa variedade de aplicações pode ser observada no número de publicações científicas ao longo dos anos, conforme se mostra na Figura 2.6.

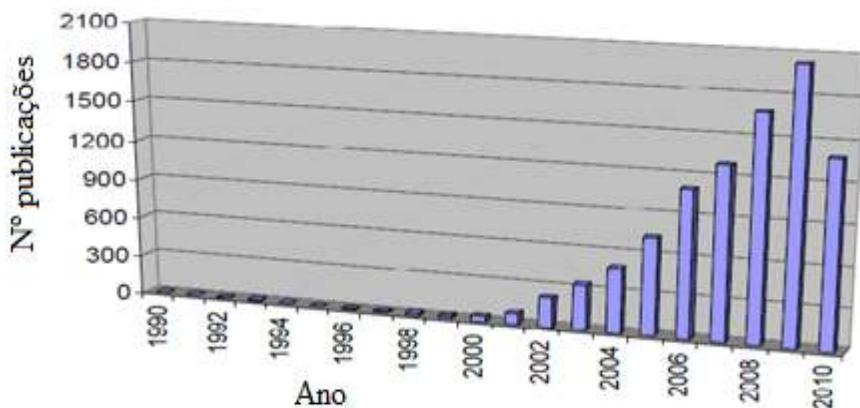


Figura 2.6- Número de publicações científicas em função dos anos conforme pesquisa realizada na ferramenta de pesquisa Scifinder. (Fonte: Linguito, 2011)

De acordo com a Figura 2.6, observa-se que o crescimento do número de estudos baseados em líquido iônico tem um comportamento exponencial até o ano 2008, sendo que podem ser divididos de acordo com a quantidade de artigos e as respectivas sub-áreas de conhecimento, conforme identificado na Figura 2.7.

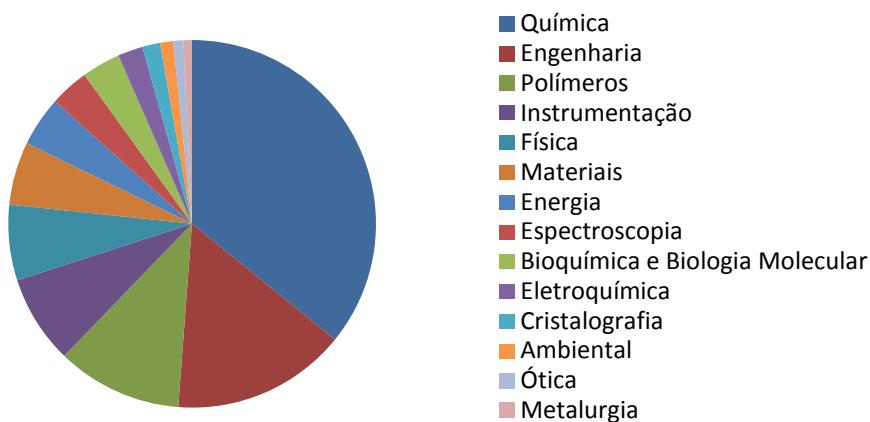


Figura 2.7- Número de artigos publicados em função das sub-áreas de conhecimento. (Fonte: Rodrigues, 2010).

Entretanto, estudos feitos pelos membros da Chemical Industry Vision 2020 Technology Partnership identificaram que a comercialização dos líquidos iônicos não tem acompanhado o crescimento do número de publicações científicas envolvendo a caracterização e aplicação de líquidos iônicos devido ao elevado preço de venda dessas substâncias.

Esse grupo apresenta como solução para eliminar as barreiras da utilização dos líquidos iônicos em escala industrial, a definição das variáveis que envolvem o processo, sejam essas relacionadas com as dimensões de equipamentos, condições operacionais, determinação prática dos mecanismos de catálise, interação dos LIs com outros materiais, impacto ambiental, salubridade e custos.

No entanto, a execução de experimentos para a obtenção dos fatores mencionados acima envolve dificuldade, toxicidade, tempo e dinheiro. Tais impasses podem ser contornados efetuando-se a modelagem e a simulação a partir de propriedades termofísicas, as quais podem ser obtidas por equações e condições térmicas ou mecânicas pré-definidas em conjunto com os dados de propriedades críticas.

## 2.2 PROPRIEDADES CRÍTICAS

O ponto crítico de um composto é caracterizado pela inexistência da distinção entre fase líquida e vapor, ausência de tensão superficial e calor de vaporização e pelo infinito valor de capacidade calorífica isobárica e condutividade térmica (BELLAN, 2000).

O primeiro relato do ponto crítico foi feito por Charles Cagniard de la Tour, em 1821, a partir da constatação do desaparecimento da interface gás-líquido de certos materiais quando estes eram aquecidos em um recipiente fechado (FERRET, 2006).

Desde então, medidas experimentais de temperatura, pressão e volume críticos de diversas substâncias foram determinadas. Contudo, substâncias de alto peso molecular são susceptíveis a decomposição térmica e outras reações em regiões próximas ao estado crítico. Como consequência, foram desenvolvidas técnicas preditivas capazes de estimar essas propriedades, como por exemplo os métodos de contribuição de grupo.

Esses tipos de métodos utilizam informações de estrutura química molecular, a qual é dividida em grupos funcionais e então é realizado o somatório do número de frequência de cada grupo multiplicado pela respectiva contribuição sobre as propriedades termofísicas e de transporte.

O primeiro método de contribuição de grupo usado para a determinação de propriedades críticas foi proposto por Lydersen (1955), o qual definiu 43 grupos para estimar a temperatura, pressão e o volume críticos a partir da regra de Guldberg, que estabelece a relação entre as temperaturas normal de ebulação e a crítica como sendo, aproximadamente, equivalente a dois terços.

A partir das idéias de Lydersen, Ambrose (1978) desenvolveu um método para a determinação precisa das propriedades críticas de diversos compostos orgânicos a partir da inclusão do número de Platt, o qual representa o número de átomos de carbono da molécula menos três (JALOWKA & DAUBERT, 1986). Entretanto, essa abordagem apresenta limitações, pois a isomerização não é levada em consideração e um pequeno número de compostos inorgânicos está incluído na análise.

Klincewicz e Reid (1984) apresentaram uma abordagem comparativamente menos complexa às antecessoras, sendo composta por equações que utilizam o peso molecular e a contagem de átomos constitutivos da molécula. Os resultados obtidos são próximos aos de Lydersen e menos precisos comparados aos de Ambrose.

Joback e Reid (1987) definiram 41 grupos, os quais não se interagem e representam uma quantidade insuficiente, como é observado pela ausência de distinção entre o anel aromático e o alifático.

Nannoolal et al. (2007) calcularam a temperatura crítica e a pressão crítica utilizando a abordagem proposta por Lydersen (LD), Ambrose (AB), Klincewicz-Reid (KR) e Joback-Reid (JR). O erro médio absoluto com relação ao valor experimental para diversos componentes encontra-se na Tabela 2.4.

Tabela 2.4- Erro médio absoluto no cálculo de propriedades críticas para os diversos métodos de contribuição de grupo. (Fonte: Nannoolal et al., 2007)

Substância	Tc (K)				p <sub>c</sub> (kPa)			
	JR	AB	LD	KR	JR	AB	LD	KR
Alcanos	11,2	4,2	13,1	11,6	72,0	65,0	71,0	225,0
Alcenos	4,5	2,7	5,6	5,8	80,0	93,0	67,0	134,0
Alcinos	9,3	12,4	11,6	3,4	142,0	115,0	248,0	148,0
Aromáticos	6,9	3,8	6,5	12,6	126,0	92,0	164,0	326,0
Alcanos cíclicos	3,4	3,6	3,9	3,4	80,0	138,0	136,0	86,0
Alcenos cíclicos	7,6	3,3	6,4	9,7	38,0	434,0	8,0	252,0

Valderrama e Alvarez (2006) utilizaram os melhores resultados obtidos por Lydersen e por Joback-Reid para elaborar o método modificado de Lydersen-Joback-Reid a partir da alteração dos parâmetros envolvidos nas expressões das propriedades críticas e da manutenção do equacionamento de pressão e volume críticos de acordo com a metodologia de Lydersen e de temperaturas normal de ebulação e crítica conforme a proposta de Joback-Reid.

Erros podem ser verificados na estimativa de propriedades termofísicas caso as constantes críticas não sejam determinadas com precisão. Conforme observado por Brule e Starling (1984) o erro de 4 % na temperatura crítica resultou num valor calculado para a pressão de vapor do tolueno 35 % superior ao valor experimental.

Por essa razão, caso exista a necessidade de estimar informações físicas, químicas ou de transporte a partir de equações de estado, que podem apresentar como dados de entrada as propriedades críticas, deve-se fazer o uso de propriedades que são diretamente mensuráveis, como, por exemplo, a velocidade do som.

## 2.3 VELOCIDADE DO SOM

Dentre os tipos de ondas mecânicas existentes, pode-se destacar as sonoras, as quais são determinadas com alta precisão pelo princípio da propagação em meios deformáveis ou elásticos a partir da vibração das partículas constituintes em torno das respectivas posições de equilíbrio.

A equação da onda acústica em função de propriedades termofísicas é deduzida a partir de equações da dinâmica dos fluidos, ou seja: equações de estado, Continuidade e Quantidade de Movimento (COSTA, 2008).

A relação entre a velocidade de uma partícula e a massa específica, expressa pela Equação 2.1, é determinada pela consideração de um volume infinitesimal fixo no espaço através do qual elementos do fluido atravessam-no.

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} dv = \left\{ \rho v_x - \left[ \rho v_x + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} dx \right] \right\} dy dz \quad (2.1)$$

A massa fluindo na direção  $x$  através do volume de controle é apresentada na Figura 2.8.

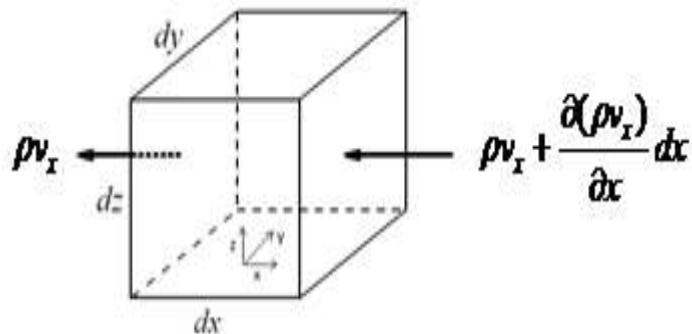


Figura 2.8- Taxa mássica na direção  $x$  do volume de controle  $dv$ .

Efetuando-se o balanço material para as direções  $y$  e  $z$  e combinando-as, tem-se o fluxo mássico total.

$$-\left[ \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \right] dv = -[\nabla \cdot (\rho v_t)] dv \quad (2.2)$$

Assim, a Equação da Continuidade é definida pela Equação 2.3.

$$-\nabla \cdot (\rho v_t) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.3)$$

Considerando que o volume infinitesimal apresenta uma massa “ $dm$ ” de fluido sobre o qual é aplicada uma força infinitesimal “ $df$ ”, tem-se, pela segunda lei de Newton, que a força atuante no volume na direção x é dada pela Equação 2.4.

$$df_x = \left[ p - \left( p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dy dz = -\frac{\partial p}{\partial x} dv \quad (2.4)$$

Igualmente para as componentes  $df_y$  e  $df_z$  e combinando as três componentes, tem-se o balanço de força completo.

$$df = -\nabla p dv + g \rho dv \quad (2.5)$$

A aceleração do fluido, “ $r$ ” é obtida através da derivada da velocidade da partícula quando o elemento de fluido com velocidade  $v_t(x, y, z, t)$  move-se para um ponto  $(x+dx, y+dy, z+dz)$  no instante de tempo  $t+dt$ .

$$r = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{v_t(x + v_x dt, y + v_y dt, z + v_z dt, t + dt) - v_t(x, y, z, t)}{dt} \quad (2.6)$$

Com todos os incrementos sendo infinitesimais, a velocidade é expressa pelo primeiro termo da expansão da série de Taylor.

$$v_t(x + v_x dt, y + v_y dt, z + v_z dt, t + dt) = v_t(x, y, z, t) + \frac{\partial v}{\partial x} v_x dt + \frac{\partial v}{\partial y} v_y dt + \frac{\partial v}{\partial z} v_z dt + \frac{\partial v_t}{\partial t} dt \quad (2.7)$$

Substituindo-se Equação 2.7 em 2.6, obtém-se a expressão final para a aceleração.

$$r = \frac{\partial v_t}{\partial x} v_x + \frac{\partial v_t}{\partial y} v_y + \frac{\partial v_t}{\partial z} v_z + \frac{\partial v_t}{\partial t} = \frac{\partial v_t}{\partial t} (v_t \cdot \nabla) v_t \quad (2.8)$$

A massa “ $dm$ ” do elemento fluido é definida como  $\rho dv$ , substituindo-se na equação da aceleração e desprezando-se o efeito da força peso, tem-se a Equação de Euler.

$$-\nabla p = \rho \left[ \frac{\partial v_t}{\partial t} + (v_t \cdot \nabla) v_t \right] \quad (2.9)$$

A relação isentrópica entre variações de densidade com a pressão para situações que se afastam da condição de idealidade pode ser representada pela série de Taylor abaixo.

$$p = p_0 + \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s (\rho - \rho_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} \right)_s (\rho - \rho_0)^2 + \dots \quad (2.10)$$

Como uma onda sonora é um movimento ondulatório de pequena amplitude, pode-se eliminar os termos de ordem superior a 1. Assim, tem-se uma relação linear entre a variação da pressão e a respectiva mudança na densidade, Equação 2.11 (CARRIJO, 2008).

$$p - p_0 = B(\rho - \rho_0)/\rho_0 \quad (2.11)$$

em que “B” é  $\rho_0 \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s$ , denominado por módulo adiabático de “bulk”. Em termos de pressão acústica  $p_{ac}$  e condensação “s”, com  $s = (\rho - \rho_0)/\rho_0$ , tem-se a Equação 2.12.

$$p_{ac} = B \cdot s \quad (2.12)$$

A partir da Equação 2.3 e pela hipótese que “s” é muito menor que 1, reescreve-se a equação da continuidade do seguinte modo.

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot v_t = 0 \quad (2.13)$$

Aplicando-se a consideração acima de “s” e que  $(v_t \cdot \nabla) v_t \ll \partial v_t / \partial t$ , a equação de Euler é reescrita pela Equação 2.14 (KINSLER et al., 1982).

$$\rho_0 \left( \frac{\partial v_t}{\partial t} \right) = -\nabla p_{ac} \quad (2.14)$$

Combinando-se as equações 2.12, 2.13 e 2.14.

$$\nabla^2 p_{ac} - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = 0 \quad (2.15)$$

em que  $u^2$  é definido pela razão entre  $B$  e  $\rho_0$ .

Combinando-se as equações 2.10 e 2.15, chega-se à relação fundamental entre a velocidade do som,  $u$ , e propriedades macroscópicas do fluido, Equação 2.16, com a suposição que os processos

acústicos são quase adiabáticos, ou seja, a troca de energia térmica entre as partículas é insignificante e, assim, a entropia do fluido permanece constante.

$$u^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S \quad (2.16)$$

A expressão acima não apresenta utilidade prática no cálculo de propriedades termodinâmicas, pois não se consegue mensurar experimentalmente a entropia. A Equação 2.17 apresenta a forma conveniente de expressar a velocidade do som com grandezas experimentalmente obtidas, cuja dedução encontra-se no Apêndice A.

$$u^2 = - \frac{V^2}{M} \frac{c_p}{c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad (2.17)$$

Riazi e Mansoori (1993) mostraram como o segundo coeficiente virial e o fator de compressibilidade podem ser determinados a partir da velocidade do som.

Shabani et al. (1998) calcularam o fator de compressibilidade, a entalpia, a capacidade calorífica isobárica para os gases metano, etano, propano, isobutano e butano a partir de equações cúbicas de estado Redlich-Kwong (1972) e Peng-Robinson (1976) e a capacidade calorífica a pressão constante para o n-alcano através de dados experimentais de velocidade do som, temperatura e volume.

Dayton et al. (1999) determinaram a densidade e a capacidade calorífica isocórica para o composto 1,1,1,2-tetrafluoretano a pressões até 30 MPa com incertezas de 0,002 e 0,02, respectivamente, a partir da relação entre o fator de compressibilidade e a velocidade do som.

Hurly (2000) apresentou medidas da velocidade do som do brometo de hidrogênio e tricloreto de boro em relação a temperatura e a pressão, cujos dados foram usados para deduzir a equação de estado para a fase vapor e usada nos cálculos da densidade do vapor e da capacidade calorífica isobárica do gás ideal, ambos com incerteza de 0,1 %, e na estimativa de propriedades de transporte, tal como a viscosidade, com incerteza de 10 %.

Benedetto et al. (2001) propuseram uma equação para o cálculo da energia de Helmholtz cujos parâmetros são obtidos diretamente pelo ajuste de dados referentes à velocidade do som. Tal equação pode ser usada na predição de densidade da fase vapor do 1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropano com erro de 0,015 %.

## 2.4 EQUAÇÕES DE ESTADO

A relação entre pressão, temperatura e volume para um dado sistema é definida através de equações de estado (EDE), a partir das quais se consegue obter informações pVT, como por exemplo, pressão de vapor e densidade de substância pura, e em conjunto com as inter-relações fornecidas pela termodinâmica clássica estimam-se funções desvio do comportamento de gás ideal, que são importantes para os cálculos de equilíbrio de fase (ALVES, 2006).

A Figura 2.9 apresenta o diagrama típico de pressão em função do volume (pVT) para uma substância pura.

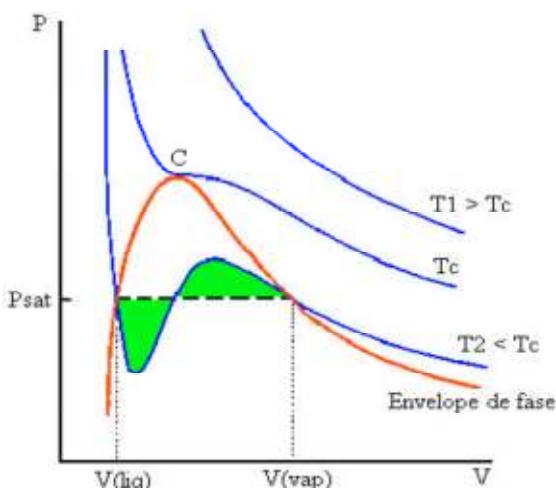


Figura 2.9- Diagrama pVT de uma substância pura.

O diagrama pVT acima apresenta três isotermas obtidas a partir do cálculo de equações cúbicas, sendo a isoterna intermediária denominada de isoterna crítica, com inflexão no ponto C. Para a temperatura acima desta, tem-se a isoterna supercrítica, que apresenta um decréscimo monotônico na pressão com o aumento do volume molar. Finalmente, a temperatura abaixo da crítica, dita isoterna subcrítica, apresenta uma diminuição da pressão na região do líquido com pequenos incrementos no volume, um cruzamento na linha do líquido saturado, seguido de um ponto de mínimo e máximo em sequência um cruzamento da linha do vapor saturado e o prosseguimento na região do vapor.

Tais curvas devem apresentar um comportamento em concordância com os dados experimentais. Em virtude deste fato, necessita-se de fundamentos para a elaboração das equações de estado, as quais são divididas em três grupos: empíricas, teóricas e semi-empíricas.

A primeira categoria necessita de uma vasta quantidade de dados experimentais dos componentes puros e contém muitos parâmetros ajustáveis e, como consequência, a aplicação é restrita a extrapolações quanto à variação do tipo de substâncias e às condições de temperatura e pressão.

A segunda baseia-se na termodinâmica estatística e apresenta poucos parâmetros, os quais têm significado físico. Entretanto, o tempo despendido para o cálculo e as limitações teóricas existentes tornam as previsões pouco precisas.

Por fim, as semi-empíricas aliam os aspectos empíricos aos teóricos, sendo capazes de fornecer bons resultados para um número amplo de componentes puros e rotas para previsões quantitativas de propriedades termofísicas de substâncias puras e misturas a partir de poucos parâmetros ajustáveis (DEMNEH et al., 2010).

A expressão de van der Waals (vdW), proposta em 1873, destaca-se no grupo das equações de estado empíricas e foi proposta com base na observação de que o fator de compressibilidade desvia-se consideravelmente da unidade a pressões mais altas e temperaturas mais baixas. A formulação desta relação matemática considerou o volume ocupado pela molécula devido a forças repulsivas, a atração molecular por forças coesivas e serviu como inspiração para o desenvolvimento de expressões a fim de prever as propriedades termodinâmicas e de equilíbrio de fase (JI & LEMPE, 1997).

Anos depois, Clausius relatou em sua tese a dependência do termo atrativo com a temperatura e alterou a dependência do volume de acordo com a consideração que as moléculas a baixas temperaturas não se movem livremente, mas formam um aglomerado de moléculas com fortes forças de atração (PARTINGTON, 1949).

Redlich e Kwong (1949) estavam preocupados com a representatividade correta das equações de estado cúbicas sobre altas e baixas pressões. Assim, alteraram o termo atrativo da equação de van der Waals como função da temperatura e obtiveram bons resultados para sistemas gasosos.

Soave (1972) considerou a existência de variações no comportamento de substâncias com diferentes temperatura e pressão reduzidas sobre a equação proposta por Redlich e Kwong (RK) a partir da introdução do fator acêntrico de Pitzer no termo atrativo e manutenção da expressão para o termo repulsivo. Essa modificação foi importante nos cálculos de otimização empregados na indústria de hidrocarbonetos, que passava por um período de crise econômica.

Depois da proposta de Soave, muitas modificações foram apresentadas no meio científico para melhorar a previsão de propriedades. Esses trabalhos não foram limitados por proposta de novos modelos de temperatura no termo atrativo, mas consideraram, também, modificações da dependência do volume do termo atrativo.

Peng e Robinson (1976) modificaram a equação de Soave em dois aspectos, o primeiro com relação à função que é dependente da temperatura reduzida e do fator acêntrico e o segundo na dependência volumétrica do termo atrativo. Estas modificações permitiram obter melhores resultados para volumes de líquidos e representações melhores para o equilíbrio líquido-vapor de misturas.

Patel e Teja (1982) apresentaram uma equação de estado capaz de representar o equilíbrio líquido-vapor para diversas misturas. Essa equação de estado contém dois parâmetros empíricos que foram correlacionados em termos do fator acêntrico para as substâncias apolares.

As relações pVT de Soave-Redlich-Kwong (SRK) e Peng-Robinson (PR) são utilizadas como ferramenta eficaz quando se necessita de informações termodinâmicas e de equilíbrio de fases para o projeto de equipamentos e otimização de processos. Sendo assim, elas servem como referência para as modificações a serem feitas nas EDEs para determinar eficientemente as propriedades desejadas.

Tendo em vista a existência de diversas equações de estado cúbicas, Valderrama (2003) relatou de forma simplificada as expressões recomendadas para o cálculo de uma determinada propriedade, conforme apresenta a Tabela 2.5.

**Tabela 2.5- Equações sugeridas para os cálculos de propriedades termofísicas.**  
(Fonte: Valderrama, 2003)

<b>Propriedade</b>	<b>EDE</b>
Volume de vapor saturado	SRK, PR
Volume de líquido saturado para fluidos apolares	Patel-Teja-Valderrama
Volume de líquido comprimido	Correlações empíricas
Entalpia e entropia de gases a alta pressão	PR
Entalpia e entropia de gases a baixa pressão	SRK, PR

O volume de líquido comprido pode ser estimado com relativa precisão, além de correlações empíricas como mencionado na tabela acima, a partir da utilização de volume transladado na equação de estado, Equação 2.18, que se baseia na correção do volume do líquido calculado pela equação de estado a partir de uma correlação mais ou menos empírica.

$$V^{\exp} = V^{EOS} + V^t \quad (2.18)$$

Peneloux et al. (1982) sugeriram uma fórmula, Equação 2.19, dependente das propriedades críticas e do fator acêntrico, que não altera o cálculo da pressão de vapor das substâncias.

$$V^t = 0,40768.(0,00385 + 0,08775w).\frac{RT_c}{P_c} \quad (2.19)$$

Demneh et al. (2010) estudaram a capacidade de predição de propriedades físicas de diversas substâncias puras pelas equações de SRK e PR, o resultado é apresentado na Figura 2.10.

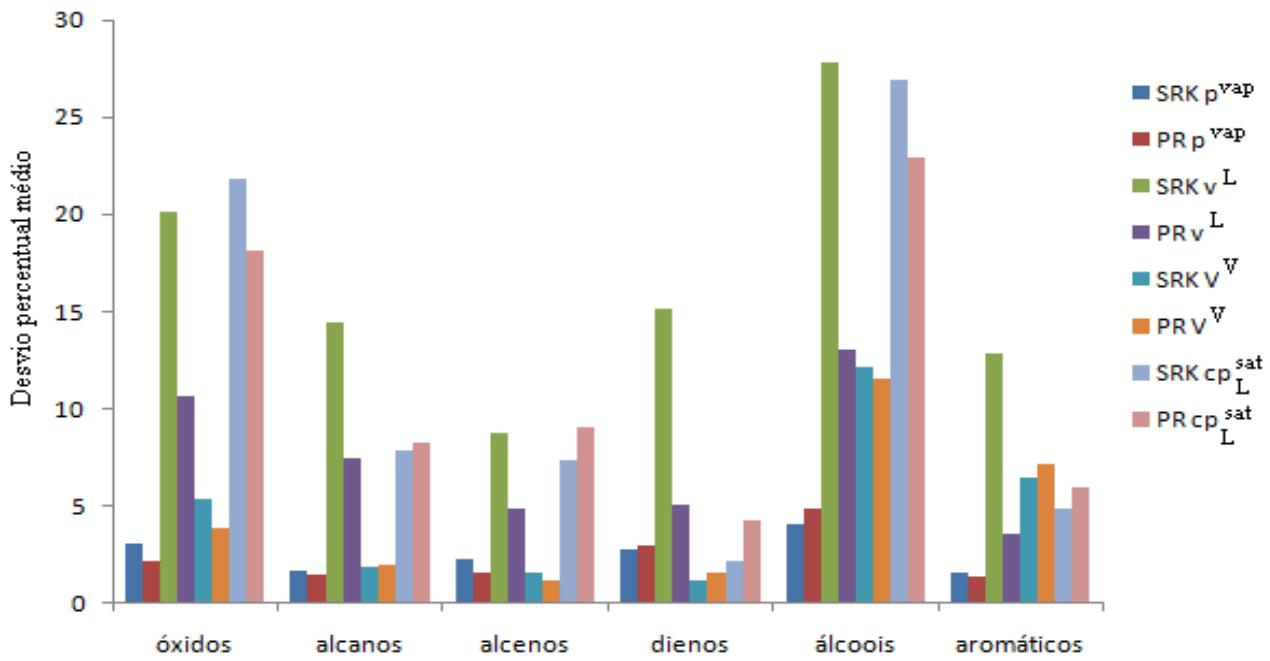


Figura 2.10- Desvio percentual médio de propriedades termodinâmicas calculadas a partir de EOS SRK e PR. (Fonte: Demneh et al., 2010)

A Figura 2.10 mostra que maiores desvios percentuais médio foram obtidos na determinação do volume líquido e capacidade calorífica líquida. Isto pode ser justificado pela consideração de ambas as equações de estado apresentarem fatores de compressibilidade críticos iguais para todos os compostos químicos (AHLERS & GMEHLING, 2001).

## 2.5 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR

Considerando um sistema isolado, com fase vapor e líquida em contato direto, o equilíbrio termodinâmico está relacionado com o movimento relativo das moléculas em relação à interface que divide as fases.

Devido ao efeito da temperatura, as moléculas movimentam-se aleatoriamente umas em relação às outras, inclusive nas imediações da interface líquido-vapor, de forma que em todo momento há moléculas que atravessam a interface, indo da fase líquida em direção à fase vapor e vice-versa.

O equilíbrio líquido-vapor (ELV) ocorre quando a quantidade por unidade de tempo das moléculas que atravessam a interface em um sentido (do líquido ao vapor) e no outro (do vapor ao líquido) se igualam. Sendo assim, não ocorrem variações das propriedades macroscópicas de um determinado sistema em função do tempo decorrido. Então, pode-se dizer ainda que todos os potenciais que possam afetar a condição de equilíbrio do sistema são igualados.

As equações de ELV para um sistema fechado à temperatura e pressão constantes, contendo  $\mu$  componentes, são dadas pela igualdade das pressões, temperaturas e dos potenciais químicos para todos os componentes em ambas as fases, já que a variação da energia de Gibbs é igual a zero.

Sendo os potenciais químicos considerados variáveis difíceis de serem medidas e manipuladas matematicamente, o equilíbrio termodinâmico é expresso então em função das fugacidades, as quais têm o objetivo de expressar o potencial químico de forma generalizada, ou seja, válida para o gás ideal e para uma mistura fluida qualquer, Equação 2.20.

$$f_i^v = f_i^l \quad i = 1, 2, \dots, \mu \quad (2.20)$$

As fugacidades podem ser expressas através de coeficientes de fugacidade, em relação à fase vapor e fase líquida, ou de coeficientes de atividade para a fase líquida. A equação que define o equilíbrio líquido-vapor, através da abordagem  $\phi - \phi$ , é dada abaixo.

$$x_i \bar{\phi}_i^L p = y_i \bar{\phi}_i^V p \quad (2.21)$$

Os coeficientes de fugacidade para a fase líquida e vapor podem ser calculados pelas equações que se seguem (PRAUSNITZ, 1969).

$$\ln \bar{\phi}_i^V = \frac{1}{RT} \int_{V^V}^{\infty} \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_{i \neq j}} - \frac{RT}{V} \right] dV - \ln \left( \frac{pV^V}{RT} \right) \quad (2.22)$$

$$\ln \bar{\phi}_i^L = \frac{1}{RT} \int_{V^L}^{\infty} \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_{i \neq j}} - \frac{RT}{V} \right] dV - \ln \left( \frac{pV^L}{RT} \right) \quad (2.23)$$

O software escolhido para predizer o equilíbrio líquido-vapor de misturas binárias contidas nesta Dissertação foi a versão gratuita de *Phase Equilibrium 2000 (PE 2000)*.

O PE 2000 foi desenvolvido pelo professor Brunner e colaboradores na Universidade Técnica de Hamburgo-Harburg e tem sido utilizado como uma importante ferramenta para predizer, satisfatoriamente, o equilíbrio de fases. Para isto, podem ser utilizadas quarenta equações de estado e sete regras de mistura cujos parâmetros de interação binária são obtidos por otimização segundo o algoritmo Simplex modificado de Nelder-Mead (REN et al., 2010).

## CAPÍTULO 3

### METODOLOGIA PROPOSTA

#### 3.1 FUNÇÃO OBJETIVO

Uma função objetivo comumente empregada nos processos de otimização é a equação de mínimos quadrados, que se baseia no somatório dos desvios quadráticos entre a variável predita pelo modelo e a experimental, conforme Equação 3.1.

$$\sum_{i=1}^n (u_{ical} - u_{i\ exp})^2 < \kappa \quad (3.1)$$

De acordo com a Equação 2.17, nota-se a possibilidade de determinar a velocidade do som a partir de dados de volume molar, temperatura, capacidades caloríficas isobárica e isocórica e do comportamento volumétrico dos líquidos iônicos expresso em termos de equações de estado cúbicas, tais como Peng-Robinson (PR), Soave-Redlich-Kwong (SRK), Redlich-Kwong (RK) e Patel-Teja (PT), que têm como expressão generalizada a Equação 3.2.

$$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a_c \alpha(T)}{V(V + b) + c(V - b)} \quad (3.2)$$

Os parâmetros contidos na Equação 3.2, representados por  $\alpha(T)$ ,  $b$  e  $c$  apresentam diferentes expressões que dependem da EDE utilizada, conforme apresentado na Tabela 3.1.

Tabela 3.1- Valores dos parâmetros de equações de estado cúbicas (Fonte: ARCE, 2002).

<b>EDE</b>	<b>RK</b>	<b>SRK</b>	<b>PR</b>	<b>PT</b>
$a_c$	$\Omega_a R^2 T_c^2 p_c^{-1}$			
$\alpha(T)$	$T^{-1/2}$	$[I+m(I-T_r^{0.5})]^2$	$[I+m(I-T_r^{0.5})]^2$	$[I+m(I-T_r^{0.5})]^2$
$\Omega_a$	$0,42748 T_c^{0.5}$	$0,4275$	$0,4572$	$3\gamma^2+3(I-2\gamma)\Omega_b+\Omega_b^2+I-3\gamma$
$\gamma$	-	-	-	$0,329-0,0768w+0,0212w^2$
$m$	-	$0,489+1,574w-0,176w^2$	$0,375+1,542w-0,2699w^2$	$0,452+1,3098w-0,2959w^2$
$b$	$\Omega_b R T_c p_c^{-1}$			
$\Omega_b$	$0,08662$	$0,0866$	$0,0778$	$\Omega_b^3+(2-3\gamma)\Omega_b^2+3\gamma^2\Omega_b-\gamma^3$
$c$	$0$	$0$	$b$	$(I-3\gamma) R T_c p_c^{-1}$

### 3.2 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS

A partir da revisão bibliográfica, constatou-se que para o cálculo da velocidade do som em líquidos, é necessário dados experimentais de capacidades caloríficas isocórica e isobárica, cujos valores são ausentes para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

Para esses imidazólios, a dependência da capacidade calorífica com a temperatura à pressão constante foi estimada pela abordagem proposta por Ge et al. (2008), a qual se baseia no método de contribuição de grupo de Joback-Reid, Equação 3.3, em conjunto com o princípio dos estados correspondentes, Equação 3.4.

$$c_p^0(T) = \left[ \sum_{k=1}^q q_q A_{cpk} - 37,93 \right] + \left[ \sum_{k=1}^q q_q B_{cpk} + 0,21 \right] T + \left[ \sum_{k=1}^q q_q C_{cpk} - 3,91 \cdot 10^{-4} \right] T^2 + \left[ \sum_{k=1}^q q_q D_{cpk} + 2,06 \cdot 10^{-7} \right] T^3 \quad (3.3)$$

$$\frac{c_p^L - c_p^0}{R} = 1,586 + \frac{0,49}{1-T_r} + w \left[ 4,2775 + \frac{6,3(1-T_r)^{1/3}}{T_r} + \frac{0,4355}{1-T_r} \right] \quad (3.4)$$

em que  $A_{cpk}$ ,  $B_{cpk}$ ,  $C_{cpk}$ ,  $D_{cpk}$  são os parâmetros de Joback e  $T_r$  é a relação entre a temperatura desejada e a temperatura crítica, cujo valor foi extraído do artigo de Valderrama e Rojas (2009).

A influência da capacidade calorífica isobárica com a pressão foi estimada pela Equação 3.5 (GOODWIN et al., 2003).

$$c_p(T, p) = c_p^0 - \int_{p^0}^p T \left( \frac{\partial^2 V}{\partial T^2} \right)_p dp \quad (3.5)$$

A capacidade calorífica isocórica foi calculada pela Equação 3.6, cuja dedução provém de relações descritas no Apêndice B.

$$c_v = c_p - TV \frac{k_\alpha^2}{k_k} \quad (3.6)$$

em que  $k_\alpha$  e  $k_k$  são definidos pelas equações a seguir.

$$k_\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (3.7)$$

$$k_k = - \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \quad (3.8)$$

Para os líquidos iônicos: [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], a velocidade do som experimental foi estimada pela Equação 3.9.

$$u^2 = \frac{c_p}{c_v} \frac{V}{k_k} \quad (3.9)$$

Para os imidazólios: [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], a velocidade do som foi determinada a partir de uma rede neural artificial, cuja explicação encontra-se no Apêndice H. Os valores de densidade, velocidade do som, razão entre capacidades caloríficas isobárica e isocórica e de coeficientes de compressibilidade isotérmica e expansividade térmica para os líquidos iônicos estudados, encontram-se no Anexo I.

### 3.3 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Após definir a função objetivo, efetua-se a minimização da mesma pelo ajuste dos parâmetros contidos na equação e assim se escolhe o modelo matemático capaz de prever a variável desejada.

Os métodos de otimização comumente empregados na estimativa de parâmetros são os métodos determinísticos, os quais utilizam uma estimativa inicial dos parâmetros e a partir de cálculos iterativos determina-se o mínimo da função objetivo numa região de busca. Dentre os métodos determinísticos, destacam-se os métodos de Gauss Newton, quasi-Newton e Levenberg-Marquardt, os quais utilizam o gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo. As principais vantagens desses métodos são a convergência rápida e a alta precisão dos valores obtidos.

Entretanto, é comum observar a não linearidade entre as variáveis dependente e independente, o que dificulta a minimização da função objetivo devido à existência de mínimos locais, a alta correlação entre os parâmetros e o desconhecimento de uma boa estimativa inicial dos parâmetros.

Esses problemas podem ser contornados a partir de métodos estocásticos, tais como Monte Carlo, algoritmo genético, recozimento simulado e enxame de partículas, que são caracterizados pelo caráter aleatório na busca do ótimo, extensos números de avaliações da função objetivo e por efetuarem uma busca global na região de interesse. Outra vantagem destes métodos é a independência de uma estimativa inicial dos parâmetros e a inexistência de cálculos de derivadas durante a otimização.

#### 3.3.1. Algoritmo Genético

O algoritmo genético (AG) foi proposto por Holland (1975), como uma técnica de busca que se comporta semelhantemente aos processos de evolução de espécies, tais como hereditariedade, seleção natural, mutação e *crossing over*.

Essa técnica de inteligência artificial consiste em, para um determinado problema matemático, gerar uma população aleatória de soluções, a partir da qual se avaliará a adequação de cada cromossomo sobre a função objetivo num processo iterativo, criar um novo conjunto de indivíduos, selecionar conforme o ajuste na função dos cromossomos pais, efetuar o cruzamento assim como a alteração nos novos cromossomos, inserir e testar a nova descendência na nova população (SPEARS, 1998). Tais etapas são efetuadas em um processo iterativo até que se encontre a solução ou alcance o número pré-definido de gerações, conforme apresentado a Figura 3.1.



Figura 3.1- Esquema típico de um algoritmo genético. (Fonte: KONDAGESKI, 2008).

A eficiência do algoritmo genético em um problema de otimização é determinada através dos operadores genéticos (seleção, cruzamento e mutação) e dos parâmetros genéticos (tamanho da população inicial, taxa de mutação e taxa de cruzamento).

A etapa de seleção consiste na escolha dos indivíduos que participarão da reprodução. O desenvolvimento desta fase pode ser feito pelos métodos roleta e elitismo, sendo que o primeiro consiste na locação de cada indivíduo da população em uma seção da roleta, que deve ser proporcional ao índice de aptidão à função objetivo, e a cada giro da roleta um indivíduo é escolhido para participar da geração da nova população. O elitismo é uma opção que visa a manter um número de indivíduos mais adaptados em cada geração e evita a perda de indivíduos nas etapas de reprodução e mutação.

O operador de cruzamento efetua a combinação dos cromossomos pais e gera os cromossomos filhos. Existem diversos tipos de operadores de cruzamento, como por exemplo o cruzamento em um ponto, que se baseia na divisão em um ponto aleatório da cadeia dos cromossomos previamente escolhidos seguido da cópia de uma porção dos cromossomos de cada pai, e o cruzamento uniforme, no qual os ascendentes contribuem com porções aleatórias para o descendente.

O operador de mutação introduz modificações aleatórias nos cromossomos filhos através de troca de bit, em que o operador de mutação inverte um dado gene pelo alelo correspondente, e por mutação de probabilidade dinâmica, ou seja, há uma diminuição na probabilidade de ocorrência de modificações cromossômicas com o aumento de gerações (GOLDBERG, 1989).

O tamanho da população influi no desempenho e na eficiência do algoritmo genético a partir da determinação do número de cromossomos na população. Este parâmetro está relacionado com a cobertura do espaço de busca do problema e deve ser selecionado de forma a garantir a representabilidade no domínio da função em um tempo computacional aceitável bem como prevenir convergências para soluções locais.

A taxa de mutação define a probabilidade com que a mutação sucederá. A escolha de uma pequena taxa de mutação previne a estagnação da resposta, o que acarreta em uma convergência prematura. Ao passo que, com uma taxa muito alta, a procura da solução torna-se essencialmente aleatória.

A taxa de cruzamento indica a probabilidade com que o cruzamento ocorrerá, sendo que taxas altas causam a rápida introdução de novas estruturas. Mas se essa for muito elevada, a maioria da população será substituída e, como consequência, poderá ocorrer perda de estruturas de alta aptidão, ao passo que o uso de um pequeno valor acarretará em um subaproveitamento de informação e o algoritmo tornar-se-á lento (CASTRO, 1994).

O algoritmo genético utilizado nessa dissertação foi o PIKAIA, que é uma subrotina de otimização de domínio público escrita em linguagem FORTRAN, cujo objetivo é maximizar a função objetivo a partir de parâmetros normalizados (CHARBONNEAU & KNAPP, 1996).

### 3.4 REGRAS DE MISTURA

O cálculo de equilíbrio líquido-vapor envolve o uso de regras de mistura para estimar os termos atrativo e repulsivo existentes nas equações de estado cúbicas em função da concentração dos componentes que formam a mistura.

Existem na literatura diversas equações que visam representar a relação entre as constantes  $a_c$  e  $b$  com a fração molar. Comumente, empregam-se os parâmetros de interação binária e os conceitos de composição local (MOLLERUP, 1981) e de contribuição de grupo (TOCHIGI, et al., 1986).

As regras de misturas utilizadas nesse trabalho foram: regra clássica de van der Waals (1873) com parâmetro de interação binária nos coeficientes de atração e repulsão, Panagiotopoulos-Reid (1985) e Adachi-Sugie (1986), que estão disponíveis no *software PE 2000* e representadas pelas Equações 3.10 a, 3.10 b; 3.11 a, 3.11 b e 3.12 a, 3.12 b, respectivamente.

$$a_{cij} = \sqrt{a_{ci} a_{cj}} (1 - k_{ij}) , \text{ com } k_{ij} = k_{ji} \quad (3.10a)$$

$$b_{ij} = \frac{b_i + b_j}{2} (1 - l_{ij}) , \text{ com } l_{ij} = l_{ji} \quad (3.10b)$$

$$a_{cij} = \sqrt{a_{ci}a_{cj}}(1 - \delta_{ij} + v_{ij}x_i) , \text{ com } v_{ij} = \delta_{ij} - \delta_{ji} = -v_{ji} \quad (3.11a)$$

$$b_{ij} = \frac{b_i + b_j}{2}(1 - \tau_{ij}) , \text{ com } \tau_{ij} = \tau_{ji} \quad (3.11b)$$

$$a_{cij} = \sqrt{a_{ci}a_{cj}}(1 - \lambda_{ij} + \sigma_{ij}(x_i - x_j)) , \text{ com } \lambda_{ij} = \lambda_{ji} \text{ e } \sigma_{ij} = -\sigma_{ji} \quad (3.12a)$$

$$b_{ij} = \frac{b_i + b_j}{2}(1 - \zeta_{ij}) , \text{ com } \zeta_{ij} = \zeta_{ji} \quad (3.12b)$$

Assim, os termos atrativo e repulsivo de uma mistura podem ser calculados pelas Equações 3.13 e 3.14, respectivamente.

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j a_{cij} \quad (3.13)$$

$$b_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j b_{ij} \quad (3.14)$$

### 3.5 DESCRIÇÃO DO CONTEÚDO DOS ANEXOS E APÊNDICES

No Anexo I estão contidos os dados referentes à densidade, velocidade do som, razão entre capacidades caloríficas isobárica e isocórica e aos coeficientes de compressibilidade isotérmica e expansividade térmica para os líquidos iônicos estudados nessa dissertação.

No Anexo II são mostrados os principais operadores do algoritmo genético PIKAIA escolhidos para a determinação dos parâmetros:  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$ .

No Apêndice A é apresentada a dedução da velocidade do som em termos de grandezas que podem ser experimentalmente mensuráveis.

No Apêndice B é mostrada a dedução da equação para estimar a capacidade calorífica isocórica em função da temperatura e pressão.

No Apêndice C são apresentados os valores dos parâmetros de interação binária referentes à regra de mistura de vdW para o equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários contendo alcanos.

No Apêndice D são mostradas as tabelas com os resultados da velocidade do som obtidos pelos parâmetros calculados a partir da otimização da função objetivo.

No Apêndice E estão os valores dos parâmetros de interação binária da regra de mistura de van der Waals, Panagiotopoulos-Reid e Adachi-Sugie para o equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários contendo líquidos iônicos.

No Apêndice F é apresentado o resultado das frações molares resultantes da modelagem ELV para os alcanos.

No Apêndice G são mostrados os resultados das frações molares da fase líquida referente à modelagem ELV contendo líquidos iônicos.

No Apêndice H é descrita a rede neural artificial utilizada para a determinação da velocidade do som para os imidazólios: [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 4.1 VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA

A primeira etapa desse trabalho consistiu na verificação da eficácia do método de otimização utilizado na estimativa de temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas a partir da comparação do resultado desses parâmetros com os valores experimentais coletados na literatura para três substâncias simples, hexano, octano e decano.

A determinação de  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  foi feita pela minimização da Equação 3.1 a partir da escolha dos operadores do algoritmo genético PIKAIA, que estão descritos no Anexo II, e dos dados obtidos pelo site do *National Institute of Standards and Technology* (NIST) referentes à velocidade do som, ao volume molar e à razão entre as capacidades caloríficas isobárica e isocórica, nas faixas de temperatura de 290-505 K, 330-565 K e 390-615 K para o hexano, octano e decano, respectivamente, e pressão de 0,1 a 100 MPa.

As equações de estado cúbicas utilizadas foram Patel-Teja (PT), Peng-Robinson (PR), Soave-Redlich-Kwong (SRKm) e Redlich-Kwong (Rkm), sendo que as duas últimas apresentam o volume molar transladado pela fórmula de Peneloux et al. (1982).

Os valores retirados na literatura (SMITH et al., 2000) e os parâmetros resultantes do processo de otimização são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1- Valores das propriedades críticas e temperatura de ebulação obtidas por AG e pela literatura.

Alcano	Calculados por velocidade do som			Obtidos por literatura		
	$T_c$ (K)	$p_c$ (bar)	$T_b$ (K)	$T_c$ (K)	$p_c$ (bar)	$T_b$ (K)
Hexano	512,0	29,7	344,0	507,5	30,1	341,9
Octano	561,0	24,5	392,8	568,8	24,9	398,8
Decano	612,0	21,2	438,0	617,7	21,2	447,3

A partir da Tabela 4.1, observa-se que, para os alcanos: hexano, octano e decano, os valores obtidos através do algoritmo genético PIKAIA e da velocidade do som para a pressão crítica, temperatura crítica e temperatura normal de ebulação apresentaram resultados semelhantes aos encontrados na literatura.

De posse a esses dados, determinou-se os termos atrativo e repulsivo das EDE. Os resultados são mostrados nas Tabelas 4.2 e 4.3.

Tabela 4.2- Valores dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PR e SRKm.

Alcano	PR		SRKm	
	$a_c$ (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b \cdot 10$ (m <sup>3</sup> /kmol)	$a_c$ (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b \cdot 10$ (m <sup>3</sup> /kmol)
Hexano	$2,8 \cdot 10^6$	1,1	$2,6 \cdot 10^6$	1,2
Octano	$4,1 \cdot 10^6$	1,5	$3,8 \cdot 10^6$	1,7
Decano	$5,6 \cdot 10^6$	1,9	$5,2 \cdot 10^6$	2,1

Tabela 4.3- Valores dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PT e RKm.

Alcano	PT		RKm	
	$a_c$ (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b \cdot 10$ (m <sup>3</sup> /kmol)	$a_c$ (J.K <sup>0,5</sup> .m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b \cdot 10$ (m <sup>3</sup> /kmol)
Hexano	$2,8 \cdot 10^6$	1,1	$5,9 \cdot 10^7$	1,2
Octano	$4,1 \cdot 10^6$	1,5	$9,0 \cdot 10^7$	1,7
Decano	$5,7 \cdot 10^6$	1,8	$1,3 \cdot 10^8$	2,1

A verificação do ajuste foi realizada a partir da elaboração de gráficos com os pontos nos eixos das abscissas e ordenadas referentes à velocidade do som calculada e experimental, respectivamente, conforme mostrado nas Figuras 4.1 a 4.4 para o hexano, as Figuras 4.5 a 4.8 para o octano e nas Figuras 4.9 a 4.12 para o decano.

A reta em vermelho de ângulo 45° nas Figuras 4.1 à 4.12 representa a situação em que o valor da velocidade do som calculada é igual ao da velocidade experimental.

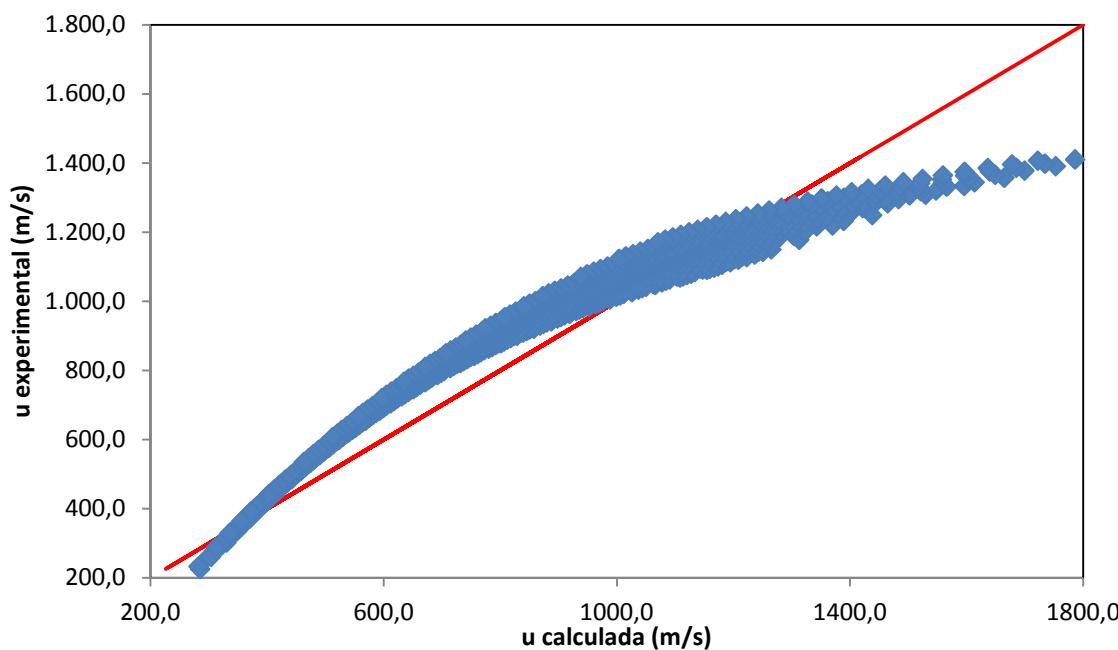


Figura 4.1- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o hexano.

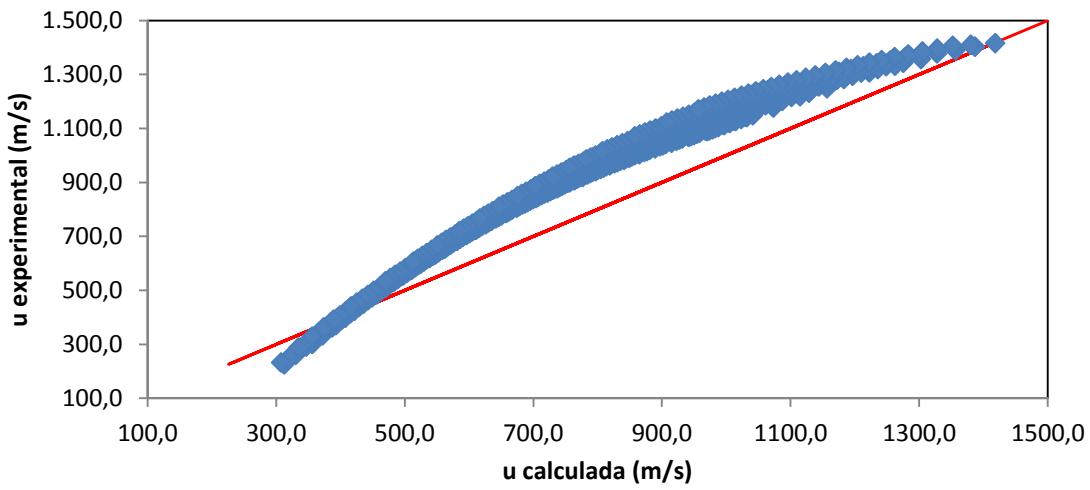


Figura 4.2- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o hexano.

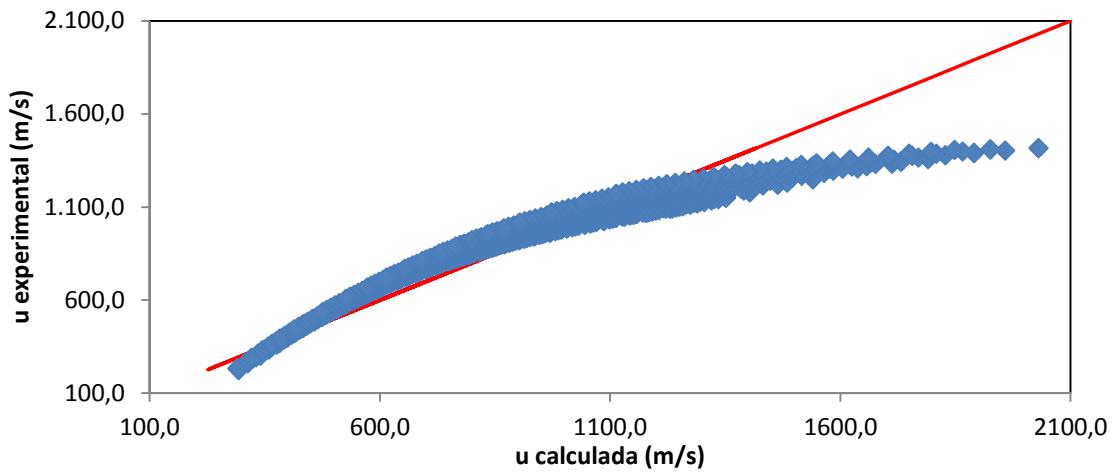


Figura 4.3- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o hexano.

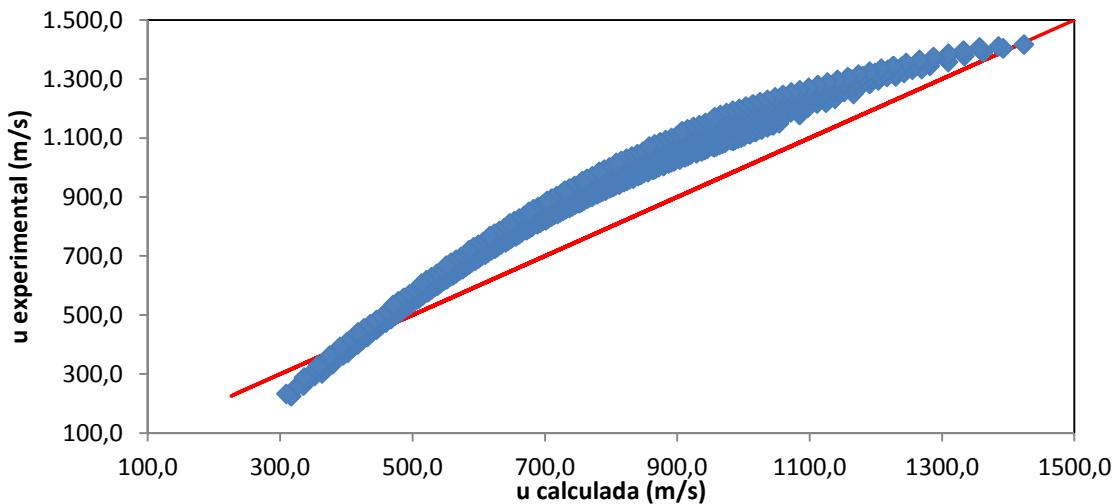


Figura 4.4- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de Rkm para o hexano.

Pode-se observar pelas Figuras 4.1 a 4.4 que as velocidades do som calculadas para o hexano a partir dos parâmetros obtidos por algoritmo genético e das diferentes equações de estado cúbicas apresentam pequenos desvios percentuais relativos médios quando comparadas às velocidades do som experimentais, sendo iguais a 9,7 %, 8,8 %, 14,7 % e 13,9 % para as respectivas EDEs: PR, PT, SRKm e RKm.

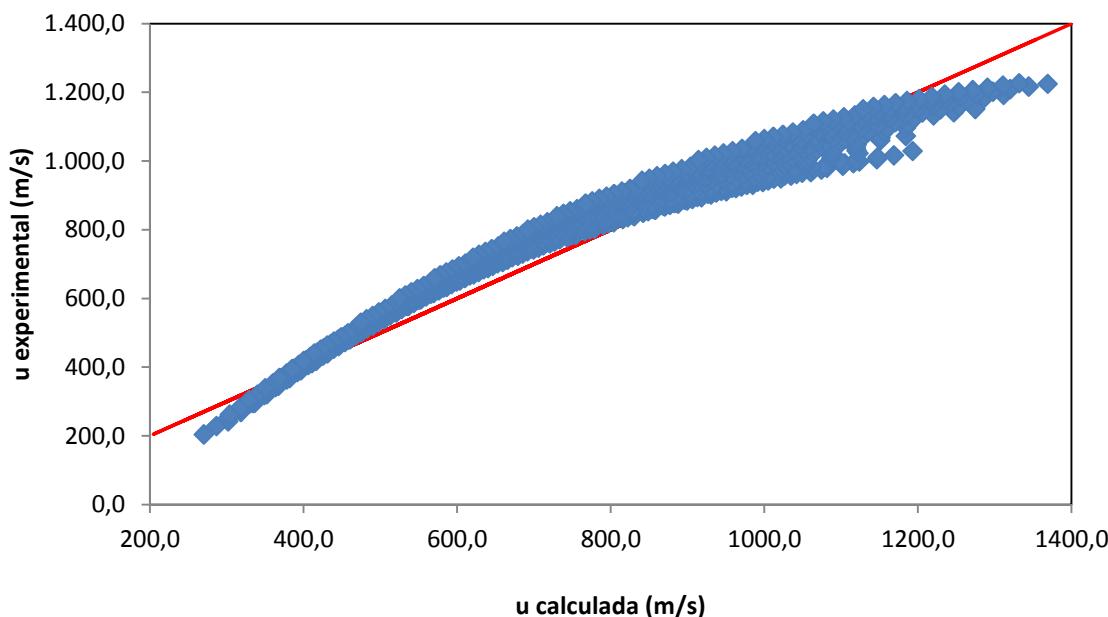


Figura 4.5- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o octano.

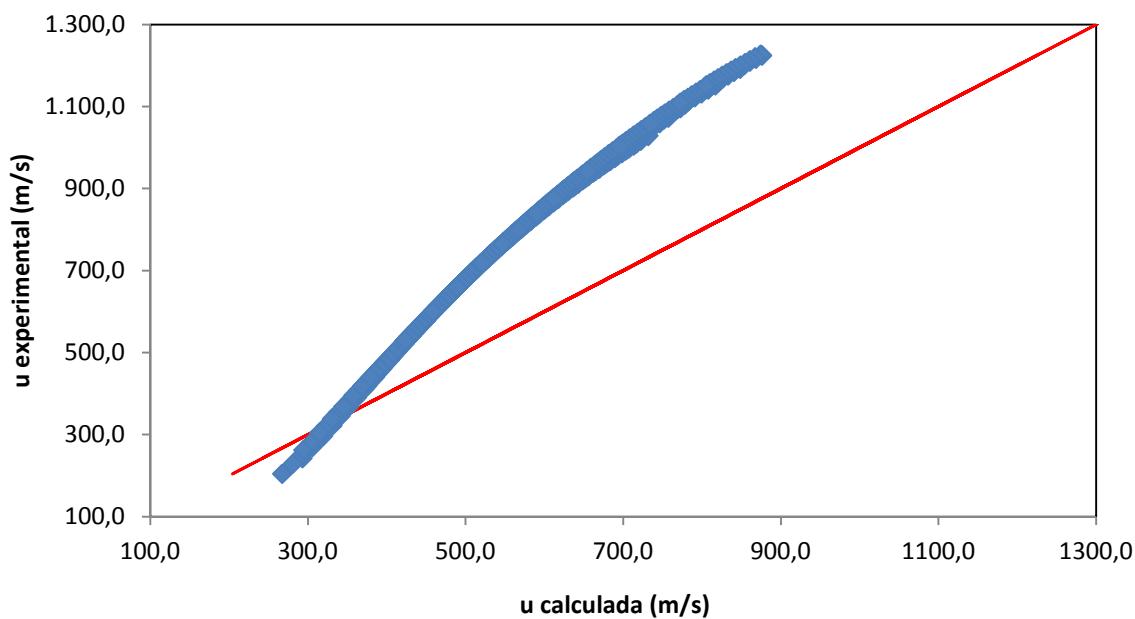


Figura 4.6- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o octano.

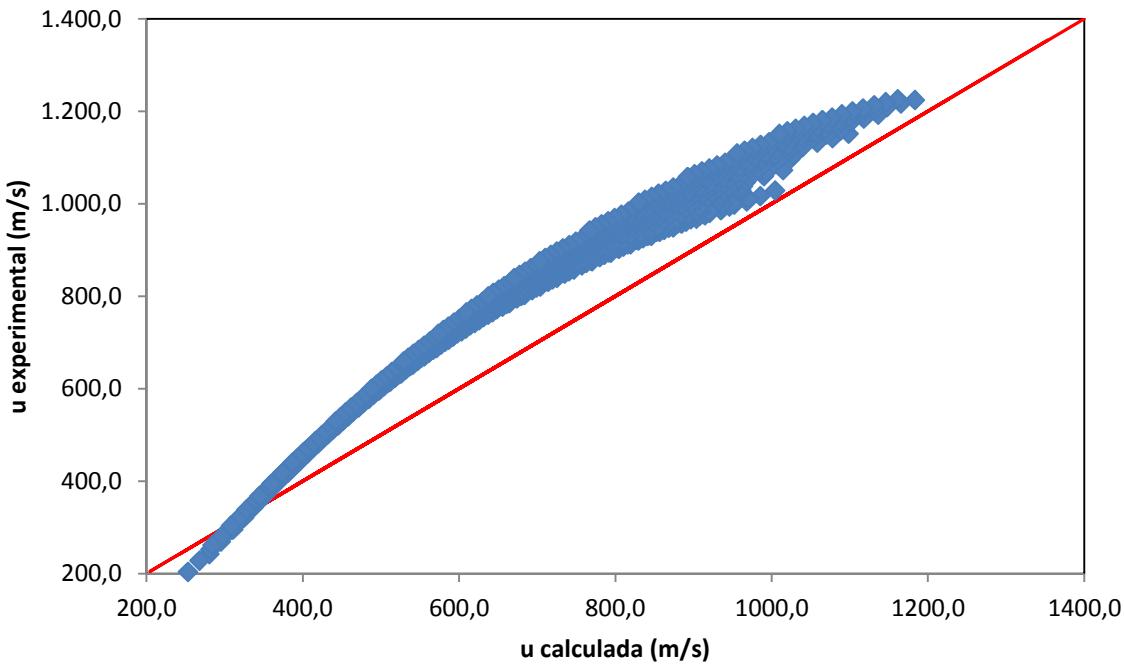


Figura 4.7- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o octano.

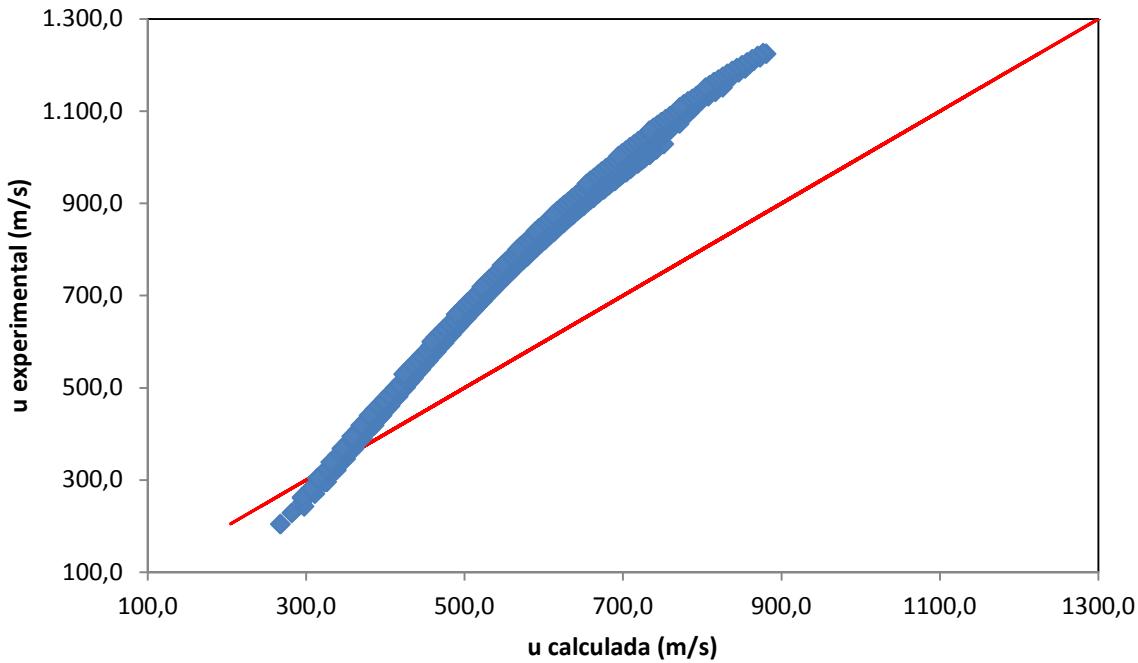


Figura 4.8- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de RKm para o octano.

A partir das Figuras 4.5 a 4.8, percebe-se que as velocidades do som calculadas para o octano a partir dos parâmetros resultantes do processo de otimização e equações de estado PT e PR apresentam os menores desvios percentuais relativos médios e iguais a 14,1 % e 6,7 %, respectivamente. A EDE de SRKm exibe desvio de 25,8 % e a RKm de 24,6 %.

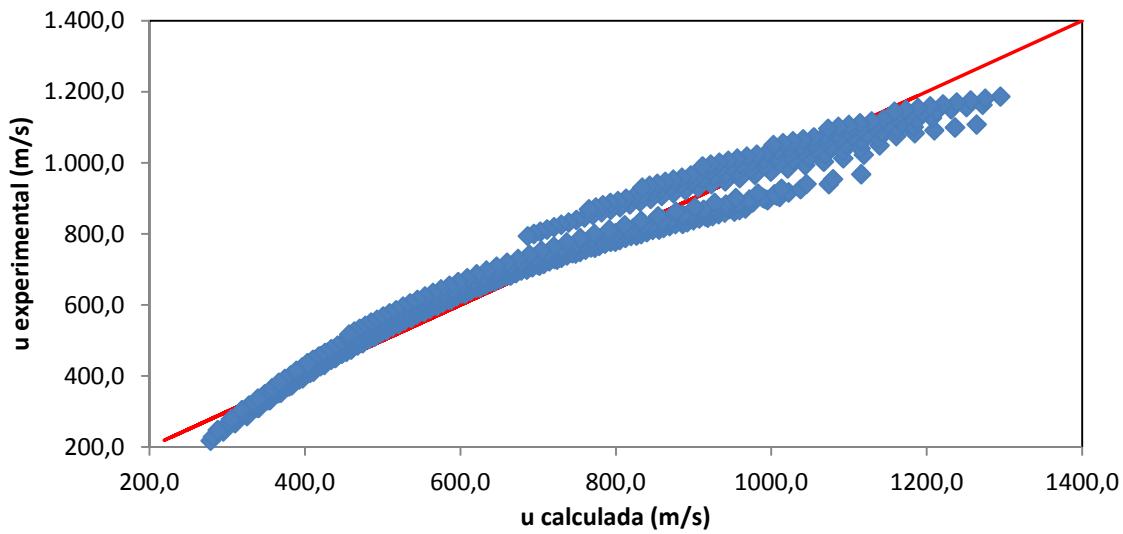


Figura 4.9- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PR para o decano.

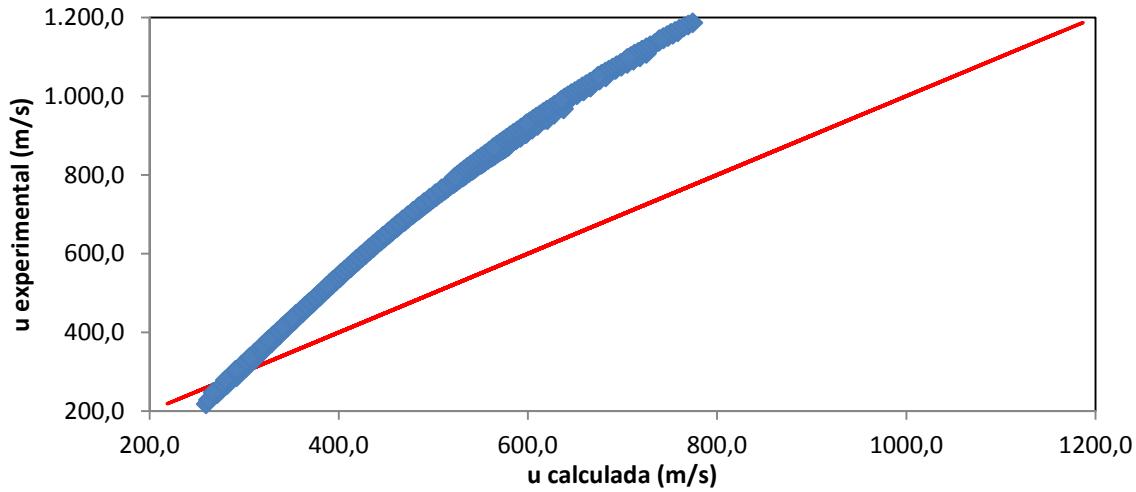


Figura 4.10- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de SRKm para o decano.

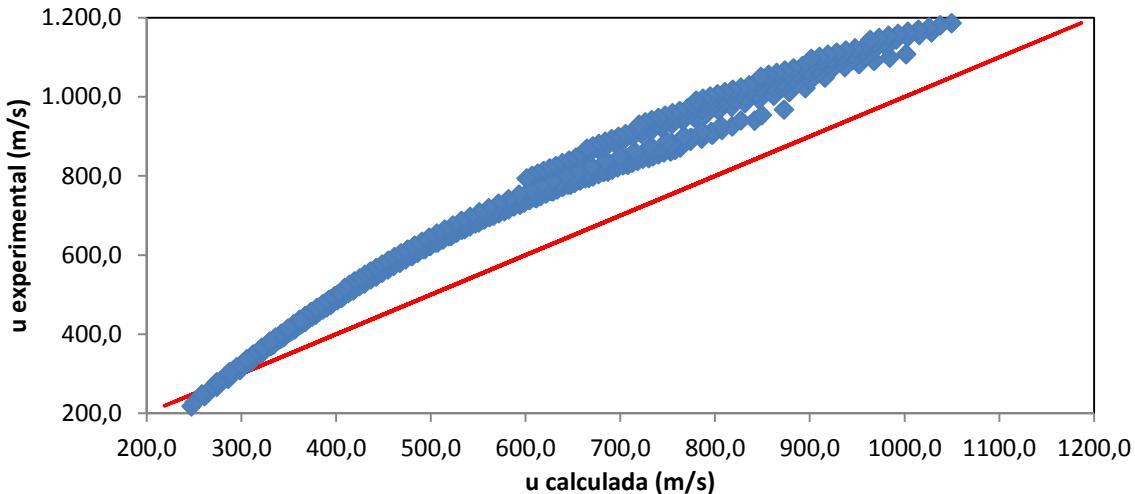


Figura 4.11- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de PT para o decano.

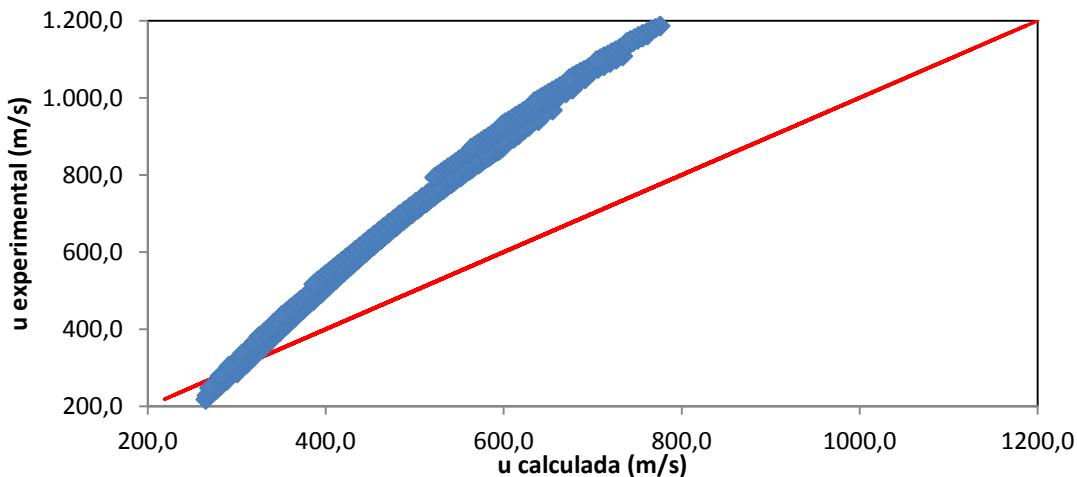


Figura 4.12- Velocidades do som experimentais e calculadas a partir da EDE de RKm para o decano.

Nas Figuras 4.9 à 4.12, nota-se que as velocidades do som calculadas para o decano pelos parâmetros resultantes do processo de otimização e pela equação de estado cúbica de PR apresentam menor desvio percentual relativo médio e equivalente a 5,7 %. As demais EDEs, PT, SRKm e RKm, exibem desvios de 17,5 %, 28,6 % e 27,1 %, respectivamente.

De posse dos valores contidos na Tabela 4.1 e dos dados experimentais (RICE & NIKHELI, 1994), pode-se, com auxílio do software PE 2000, estimar o equilíbrio líquido-vapor dos sistemas binários: pentano / hexano a 298,7 K, pentano / octano a 308,7 K e pentano / decano a 333,7 K.

Os resultados são apresentados nas Figuras 4.13 a 4.15 e Tabelas F1 a F6 do Apêndice F. Os parâmetros de interação binária da regra de mistura de vdW estão nas Tabelas C1 a C2 do Apêndice C.

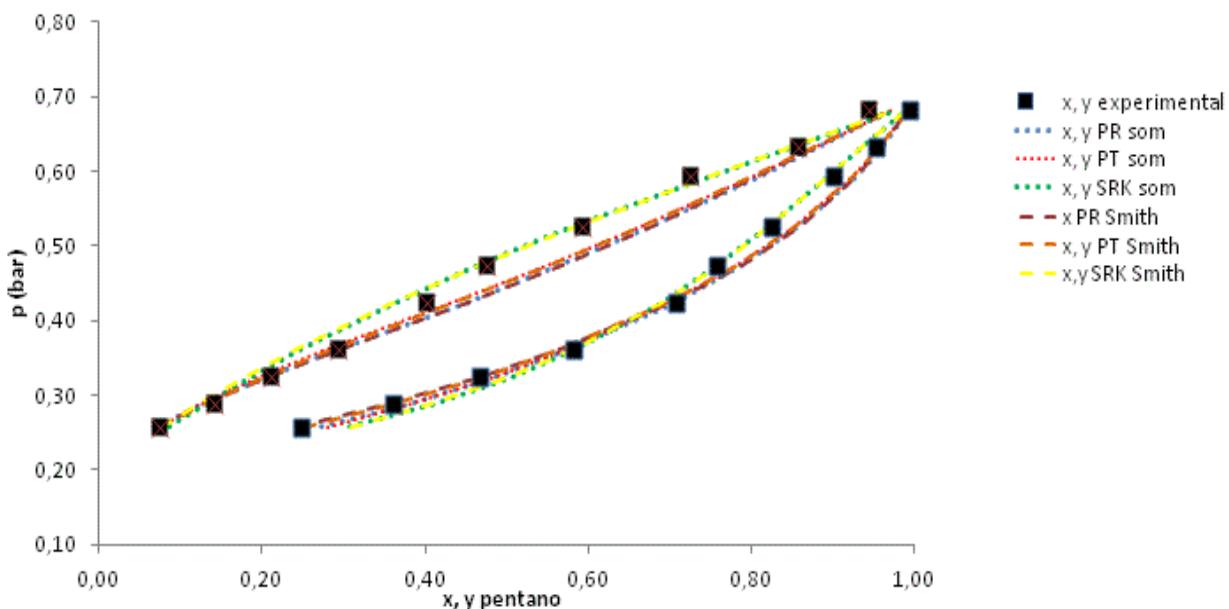


Figura 4.13- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e hexano a 298,7 K.

Observa-se na Figura 4.13 a semelhança entre os valores de fração molar líquida experimental e calculada a partir dos parâmetros  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  obtidos pelo processo de otimização e pela literatura, sendo que o desvio percentual relativo médio foi inferior a 8 % para as equações de estado cúbicas de PR, SRKm e PT.

As frações molares da fase vapor foram melhor preditas a partir das informações coletadas na literatura para a temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas, sendo que o desvio percentual relativo médio para todas as EDEs utilizadas foi inferior a 3% contra 5% quando se utilizaram os parâmetros advindos do processo de otimização.

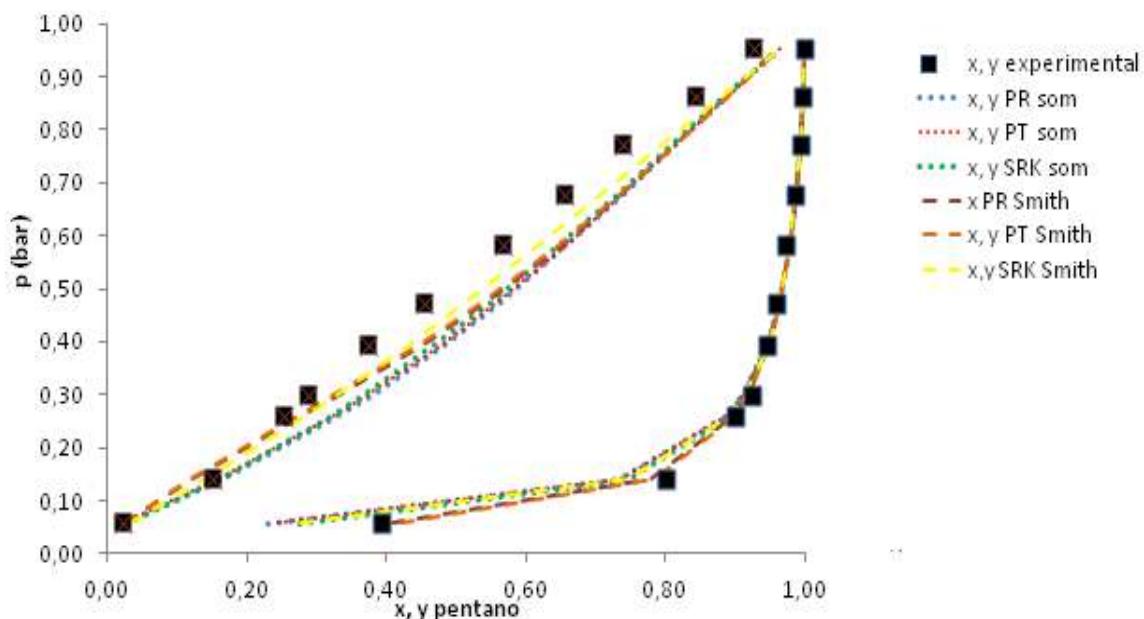


Figura 4.14- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e octano a 308,7 K.

A partir da Figura 4.14, nota-se que a distribuição simulada de composição molar em função da pressão é semelhante ao experimental.

O desvio relativo médio percentual para a fração molar líquida quando se utilizaram as EDEs de PR, PT e SRKm e valores  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  coletados na literatura foi inferior a 13,2 %, ao passo que com os parâmetros calculados por algoritmo genético o desvio máximo foi de 15,6 % para a equação de Peng-Robinson.

Os valores para a fração molar de vapor calculados para o equilíbrio líquido-vapor entre pentano e octano apresentam desvios relativos médios percentuais inferiores a 2 % e 5 %, para os casos em que se utilizou as propriedades termofísicas experimentais e resultantes do processo de otimização por algoritmo genético, respectivamente.

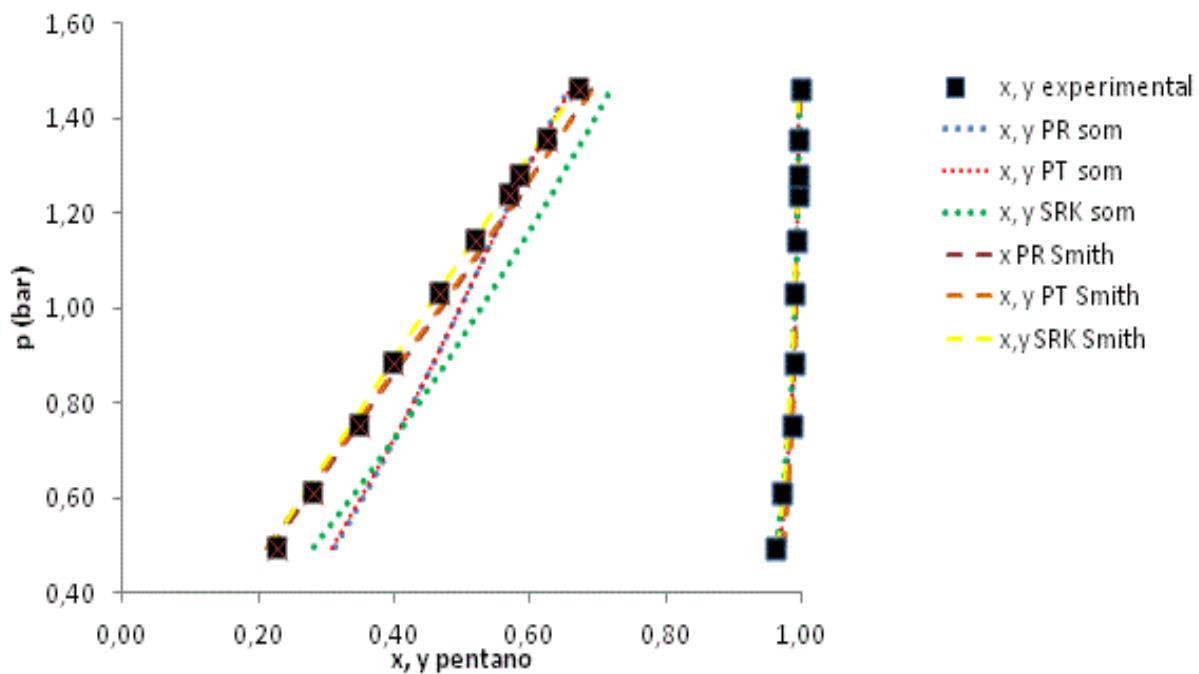


Figura 4.15- Dados experimentais e calculados de equilíbrio entre pentano e decano a 333,7 K.

Na Figura 4.15, nota-se que a predição para a fração molar da fase vapor foi eficiente tanto com os parâmetros  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  obtidos pelo processo de otimização quanto os coletados na literatura, sendo que o desvio percentual relativo médio foi inferior a 0, 3 % para as equações de PR, SRKm e PT.

As frações molares líquidas foram melhor preditas a partir das informações coletadas na literatura para a temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas, sendo que o desvio percentual relativo médio para todas as EDEs empregadas foi inferior a 3 % contra 15 % quando se utilizaram os parâmetros advindos da minimização da Equação 3.1.

Sendo assim, através da verificação da capacidade preditiva do equilíbrio líquido-vapor com as propriedades termofísicas determinadas por algoritmo genético, conclui-se que a metodologia utilizada pode ser aplicada aos líquidos iônicos.

## 4.2 RESULTADOS PARA LÍQUIDOS IÔNICOS

Os parâmetros  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  presentes na Tabela 4.4 foram determinados pela literatura e minimização da Equação 3.1 por algoritmo genético PIKAIA com as opções: seleção por roleta e elitismo, recombinação de um ponto e mutação uniforme. As variáveis de entrada e constantes utilizadas estão descritas no Anexo II e os dados experimentais no Anexo I.

Tabela 4.4- Valores das propriedades críticas e temperatura normal de ebulação obtidas por AG e literatura.

<b>Líquido Iônico</b>	<b>Calculados por velocidade do som</b>			<b>Calculados por Valderrama e Rojas (2009)</b>		
	<b><math>T_c</math> (K)</b>	<b><math>p_c</math> (bar)</b>	<b><math>T_b</math> (K)</b>	<b><math>T_c</math> (K)</b>	<b><math>p_c</math> (bar)</b>	<b><math>T_b</math> (K)</b>
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	1068,5	38,8	690,0	1067,5	40,5	712,7
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1200,0	32,0	793,0	1249,3	32,7	816,7
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	580,0	23,3	401,0	674,0	19,5	508,8
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	653,0	24,0	450,0	643,2	20,4	495,2
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1277,0	31,0	841,0	1269,9	27,6	862,4
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	633,0	21,0	443,0	719,4	17,3	554,6
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1286,0	29,0	855,0	1281,1	25,6	885,3
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	686,0	21,2	484,0	690,0	17,9	541,0
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1310,0	28,0	875,0	1292,8	23,9	908,2
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	678,0	19,1	480,0	764,9	15,5	600,3
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	705,0	18,9	505,0	737,0	16,0	586,7
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1332,0	25,5	899,0	1317,8	21,0	954,0
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	695,0	17,2	498,0	810,8	14,0	646,1

Os valores das propriedades termofísicas mostrados na Tabela 4.4 foram aplicados na determinação dos termos atrativo e repulsivo das equações de estado cúbicas: Redlich-Kwong e Soave-Redlich-Kwong com volume molar transladado pela fórmula de Peneloux et al. (1982), Peng-Robinson e Patel-Teja. Os resultados são apresentados nas tabelas 4.5 e 4.6, nas quais também estão presentes o erro médio relativo percentual entre a velocidade do som calculada e experimental.

Tabela 4.5- Resultado dos parâmetros de atração e repulsão para as EDEs PR e SRKm.

<b>Líquido iônico</b>	<b>PR</b>			<b>SRKm</b>		
	<b><math>a_c</math></b> (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	<b><math>b \cdot 10</math></b> (m <sup>3</sup> /kmol)	<b>ER<sub>m</sub></b> (%)	<b><math>a_c</math></b> (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	<b><math>b \cdot 10</math></b> (m <sup>3</sup> /kmol)	<b>ER<sub>m</sub></b> (%)
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	9,3.10 <sup>6</sup>	1,8	15,1	8,7.10 <sup>6</sup>	2,0	21,6
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,4.10 <sup>7</sup>	2,4	15,2	1,3.10 <sup>7</sup>	2,7	27,2
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	4,6.10 <sup>6</sup>	1,6	6,9	4,3.10 <sup>6</sup>	1,8	40,8
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	5,6.10 <sup>6</sup>	1,8	12,6	5,2.10 <sup>6</sup>	2,0	35,1
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,7.10 <sup>7</sup>	2,7	35,0	1,6.10 <sup>7</sup>	3,0	37,8
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	6,0.10 <sup>6</sup>	1,9	8,4	5,6.10 <sup>6</sup>	2,2	40,4
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,8.10 <sup>7</sup>	2,9	17,0	1,7.10 <sup>7</sup>	3,2	28,4
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	7,0.10 <sup>6</sup>	2,1	19,2	6,6.10 <sup>6</sup>	2,3	48,4
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,9.10 <sup>7</sup>	3,0	19,9	1,8.10 <sup>7</sup>	3,4	33,1
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,6.10 <sup>6</sup>	2,3	13,4	7,1.10 <sup>6</sup>	2,6	41,7
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	8,3.10 <sup>6</sup>	2,4	8,7	7,8.10 <sup>6</sup>	2,7	55,9
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	2,2.10 <sup>7</sup>	3,4	11,9	2,1.10 <sup>7</sup>	3,8	29,9
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	8,9.10 <sup>6</sup>	2,6	10,8	8,3.10 <sup>6</sup>	2,9	46,4

Tabela 4.6- Resultado dos termos atrativo e repulsivo para as EDEs PT e RKm.

Líquido iônico	PT			RKm		
	$a_c$ (J.m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b_{10}$ (m <sup>3</sup> /kmol)	ER <sub>m</sub> (%)	$a_c$ (J.K <sup>0,5</sup> .m <sup>3</sup> /kmol <sup>2</sup> )	$b_{10}$ (m <sup>3</sup> /kmol)	ER <sub>m</sub> (%)
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	9,2.10 <sup>6</sup>	1,8	35,1	2,9.10 <sup>8</sup>	2,0	16,1
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,4.10 <sup>7</sup>	2,5	27,6	4,6.10 <sup>8</sup>	2,7	22,2
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	4,6.10 <sup>6</sup>	1,6	6,9	1,0.10 <sup>8</sup>	1,8	40,5
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	5,6.10 <sup>6</sup>	1,8	33,8	1,3.10 <sup>8</sup>	2,0	34,7
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,6.10 <sup>7</sup>	2,7	11,6	5,6.10 <sup>8</sup>	3,0	38,4
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	6,0.10 <sup>6</sup>	1,9	6,3	1,4.10 <sup>8</sup>	2,2	40,0
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,8.10 <sup>7</sup>	2,9	22,8	6,0.10 <sup>8</sup>	3,2	29,1
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	7,1.10 <sup>6</sup>	2,1	8,7	1,7.10 <sup>8</sup>	2,3	47,8
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,9.10 <sup>7</sup>	3,1	15,7	6,6.10 <sup>8</sup>	3,4	33,2
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,6.10 <sup>6</sup>	2,3	8,2	1,9.10 <sup>8</sup>	2,6	41,2
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	8,4.10 <sup>6</sup>	2,4	20,4	2,1.10 <sup>8</sup>	2,7	25,1
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	2,2.10 <sup>7</sup>	3,4	24,8	7,5.10 <sup>8</sup>	3,8	30,1
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	8,9.10 <sup>6</sup>	2,6	10,0	2,2.10 <sup>8</sup>	2,9	45,1

O equilíbrio líquido-vapor para os sistemas binários de sistemas com líquidos iônicos foi estimado a partir dos dados contidos na Tabela 4.4.

Os resultados são mostrados nas Figuras 4.16 a 4.54 e Tabelas G1 a G39 do Apêndice G. Os parâmetros de interação binária da regra de mistura de van der Waals, Panagiotopoulos-Reid e Adachi-Sugie estão nas Tabelas E1 a E6 do Apêndice E.

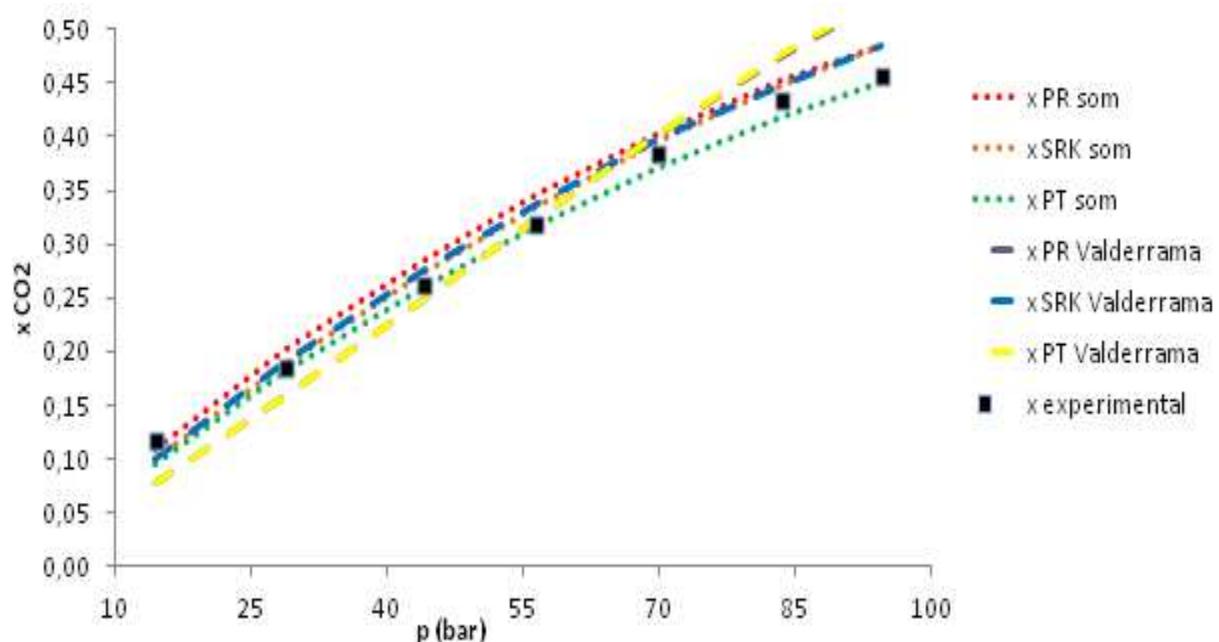


Figura 4.16- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>] a 333,15 K.

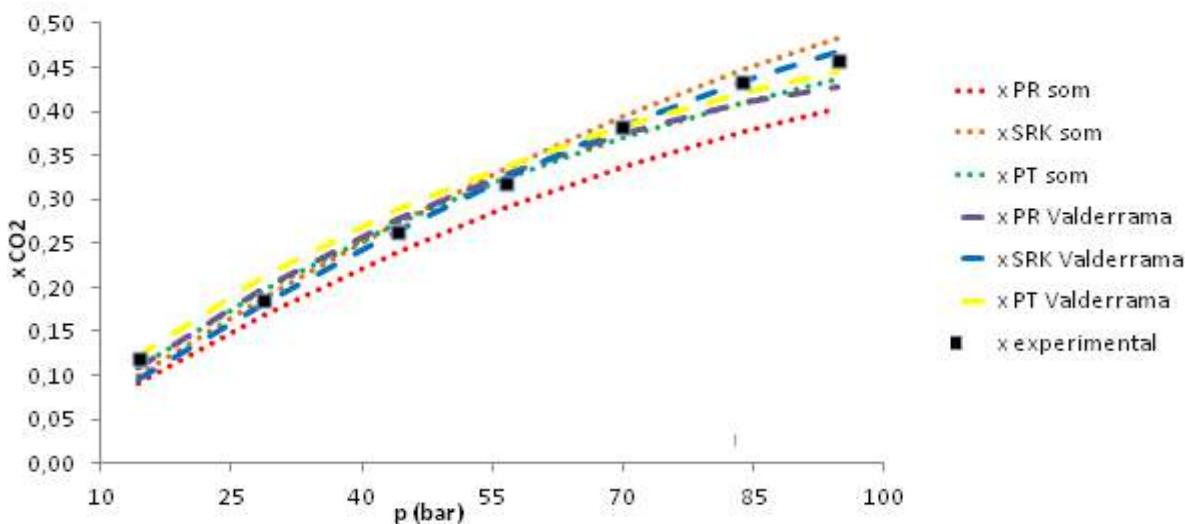


Figura 4.17- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>] a 333,15 K.

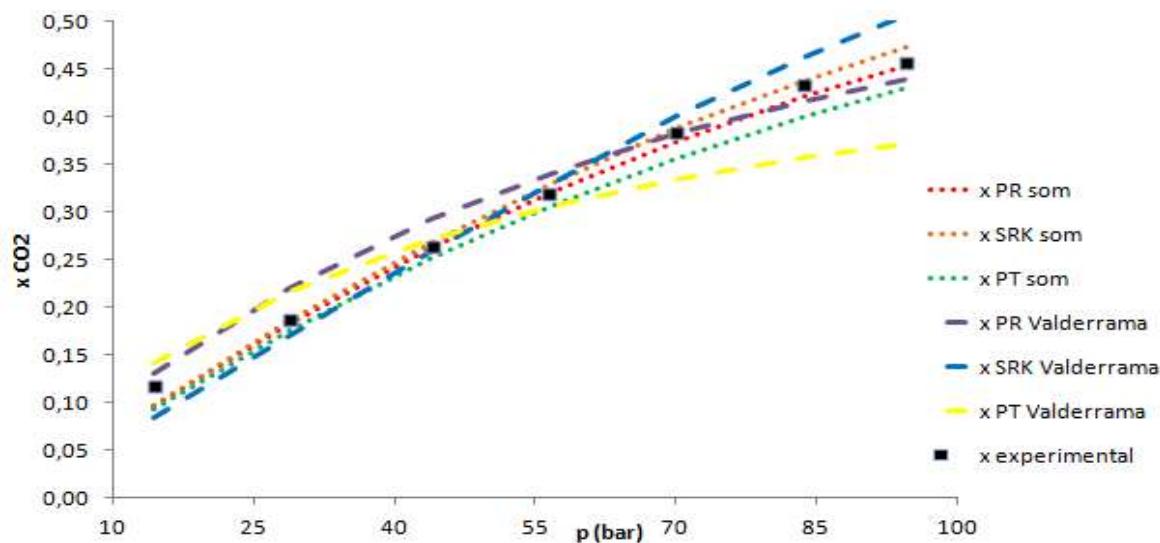


Figura 4.18- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>] a 333,15 K.

A partir das Figuras 4.16 e 4.18 nota-se que as frações molares da fase líquida calculadas a partir das propriedades críticas e temperatura normal de ebulação obtidas por algoritmo genético apresentaram desvios médios relativos percentuais inferiores aos obtidos com o uso dos parâmetros coletados na literatura, sendo que, para o primeiro caso, o maior desvio foi de 7,9 % contra 13,11 %, para o segundo caso, utilizando-se a expressão de PT e regra de mistura de Adachi-Sugie.

Para a regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid e as EDEs de SRKm e PT, os desvios médios relativos percentuais foram similares e inferiores a 6 %, ao passo que a EDE de PR apresentou desvios de 12,5 % quando se utilizaram as propriedades advindas do processo de otimização e 5,5 % quando se adotaram as constantes propostas por Valderrama e Rojas (2009).

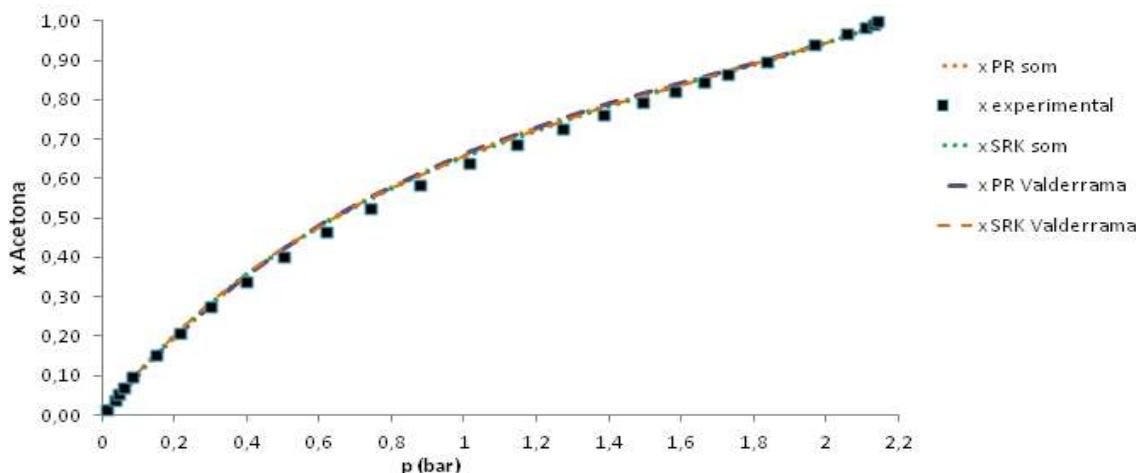


Figura 4.19- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura acetona e  $[C_2mim][NTf_2]$  a 353,15 K.

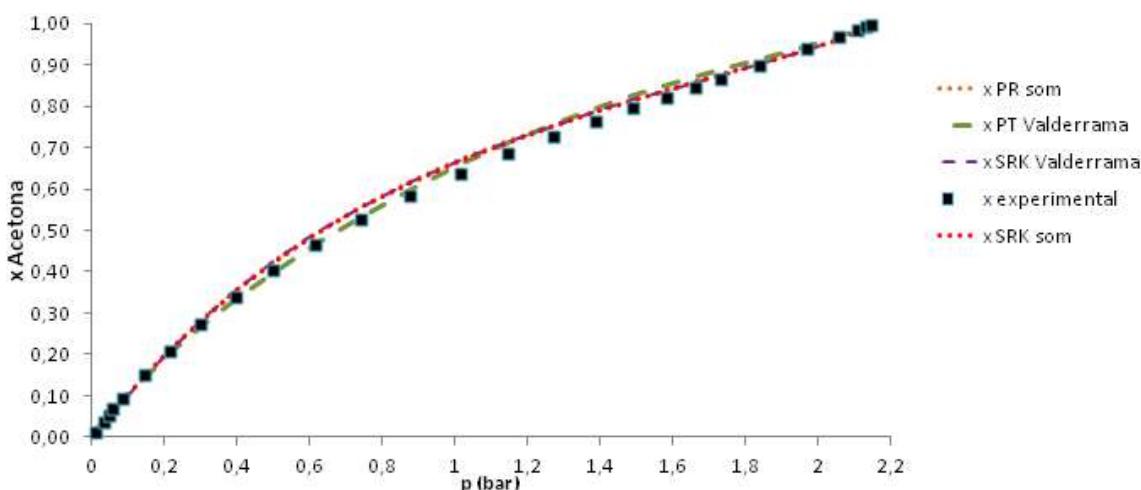


Figura 4.20- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura acetona e  $[C_2mim][NTf_2]$  a 353,15 K.

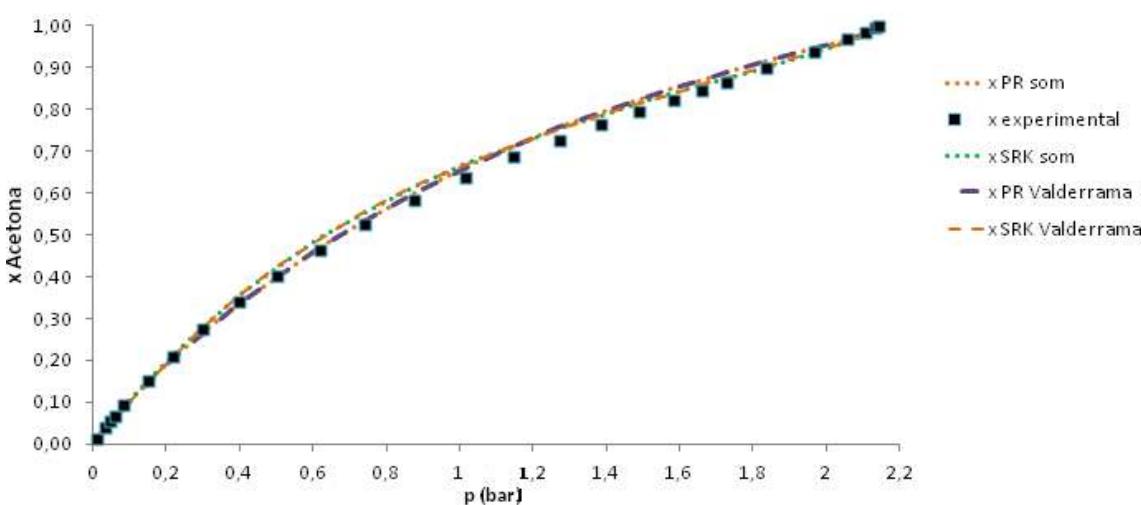


Figura 4.21- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura acetona e  $[C_2mim][NTf_2]$  a 353,15 K.

As Figuras 4.19 a 4.21 mostram que os desvios médios relativos percentuais da fração molar da fase líquida calculada pelos parâmetros resultantes do processo de otimização por algoritmo genético e estimados por Valderrama e Rojas (2009) foram semelhantes e menores que 3,7% para as três regras de misturas e equações de estado cúbicas utilizadas.

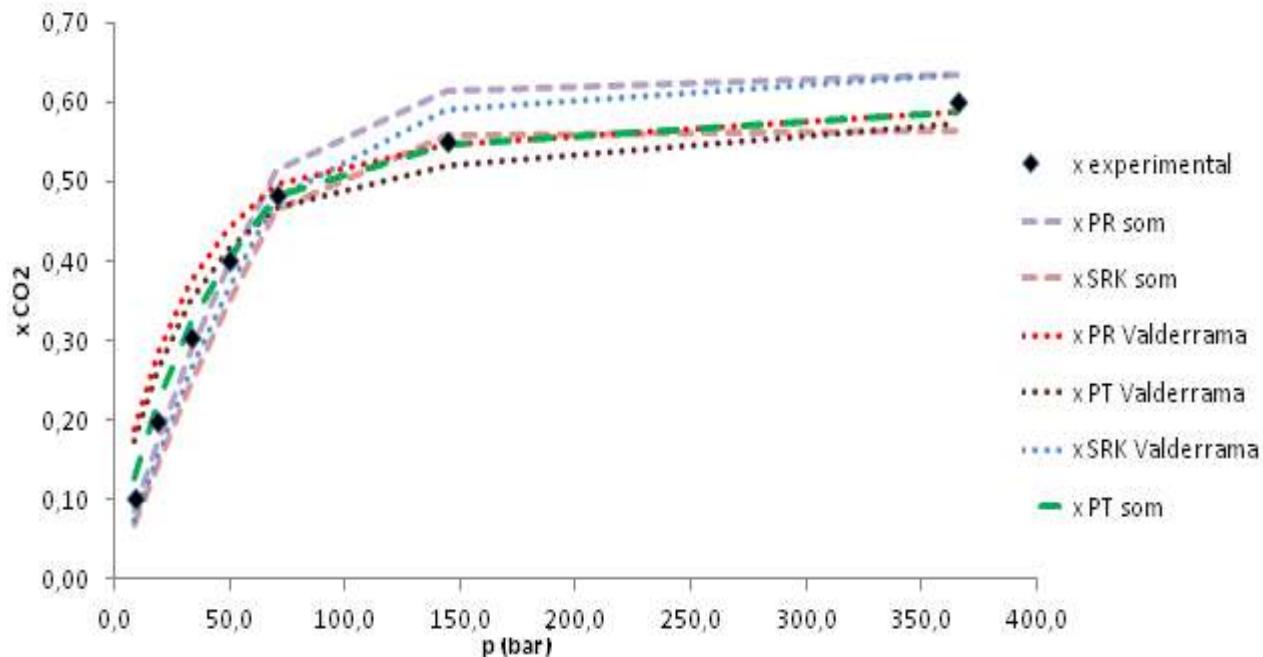


Figura 4.22- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 333,15 K.

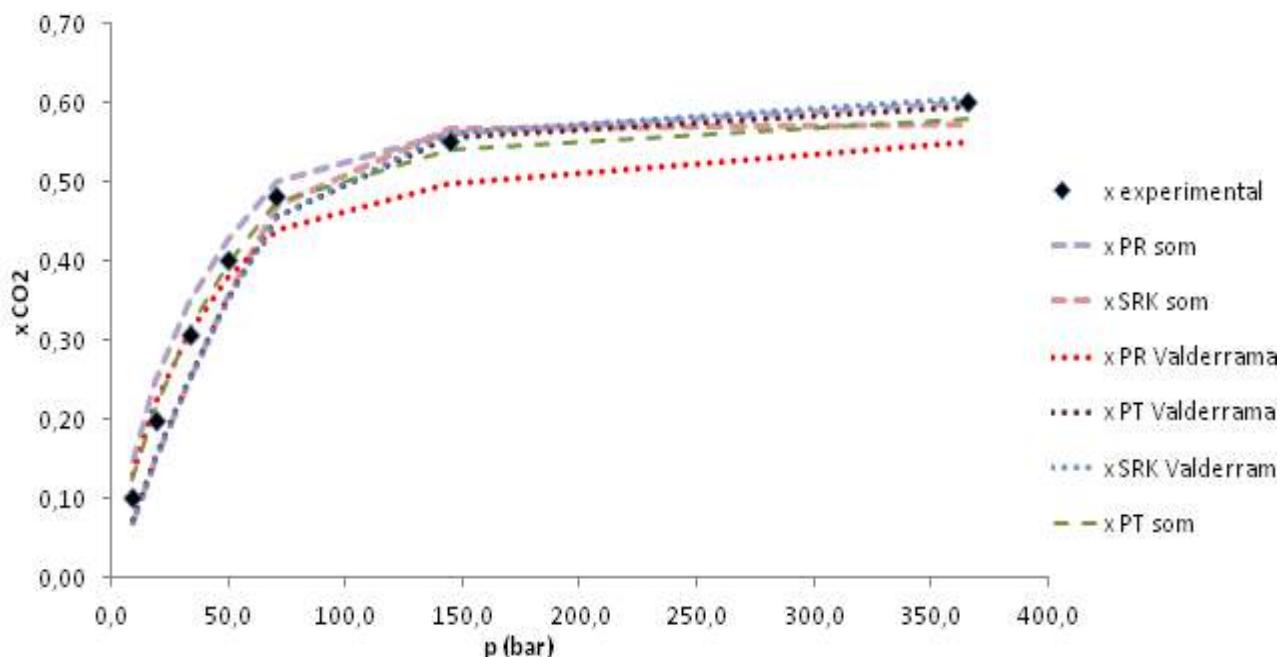


Figura 4.23- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 333,15 K.

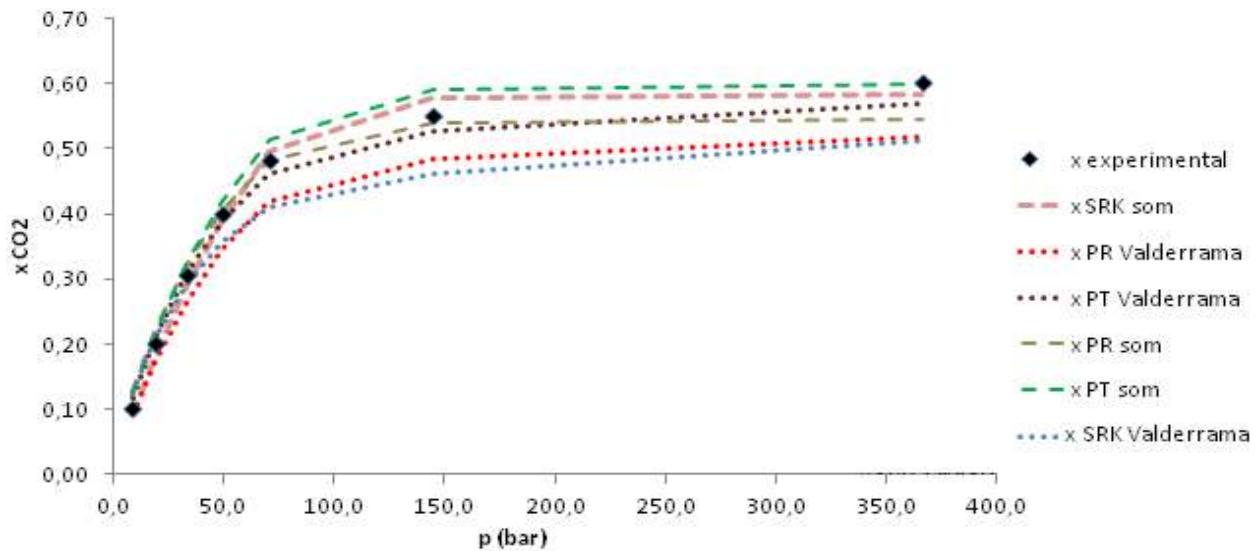


Figura 4.24- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura  $\text{CO}_2$  e  $[\text{C}_4\text{mim}][\text{BF}_4]$  a 333,15 K.

As Figuras 4.22 a 4.24 mostram que o comportamento das frações molares da fase líquida calculadas em função da pressão segue a mesma tendência que os dados experimentais.

Para a regra de mistura quadrática de van der Waals, as equações de PR e PT apresentaram menores desvios médios relativos percentuais de fração molar líquida quando se utilizaram as propriedades termofísicas calculadas pelo algoritmo genético, sendo que o maior desvio foi de 8,4 % contra 23,7 % para a EDE de Peng-Robinson.

Com relação à regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid, o desvio médio relativo percentual foi semelhante para as EDEs de PR e SRKm, as quais descreveram melhor o equilíbrio de fases quando se utilizaram os valores calculados pela velocidade do som e regra de mistura de Adachi-Sugie.

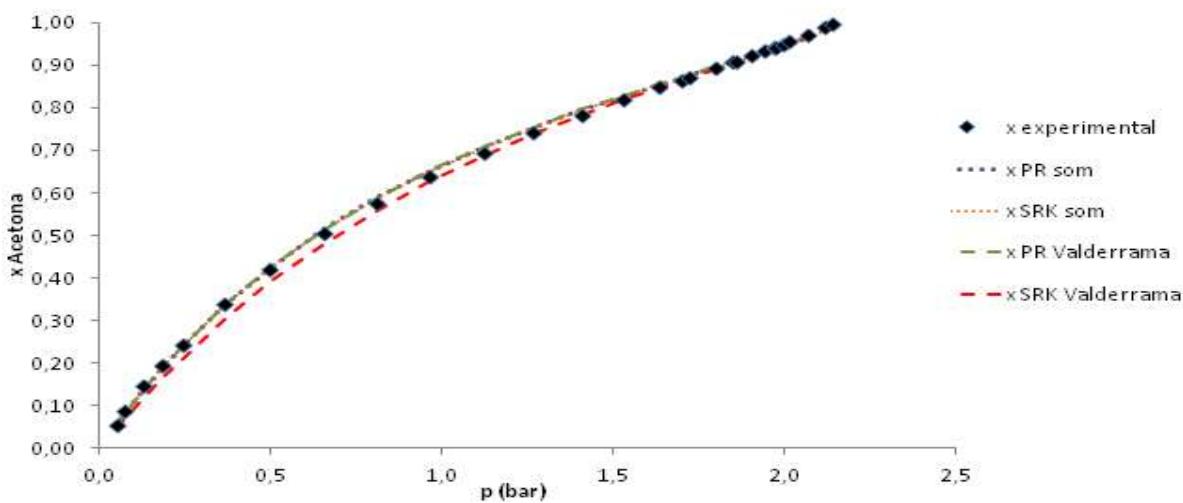


Figura 4.25- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura acetona e  $[\text{C}_4\text{mim}][\text{NTf}_2]$  a 353,15 K.

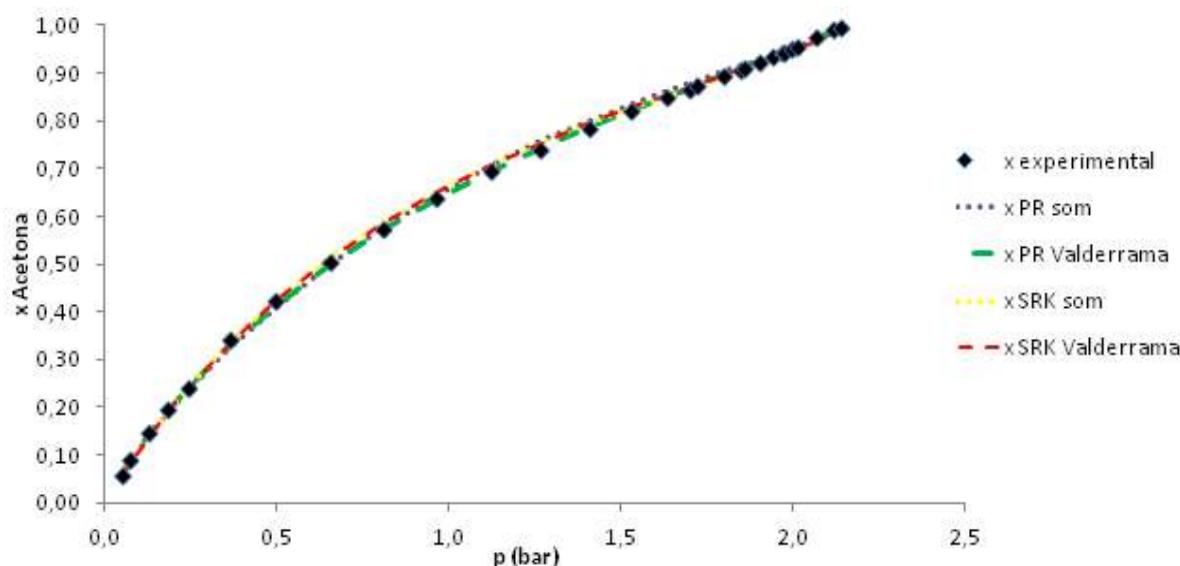


Figura 4.26- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura acetona e  $[C_4mim][NTf_2]$  a 353,15 K.

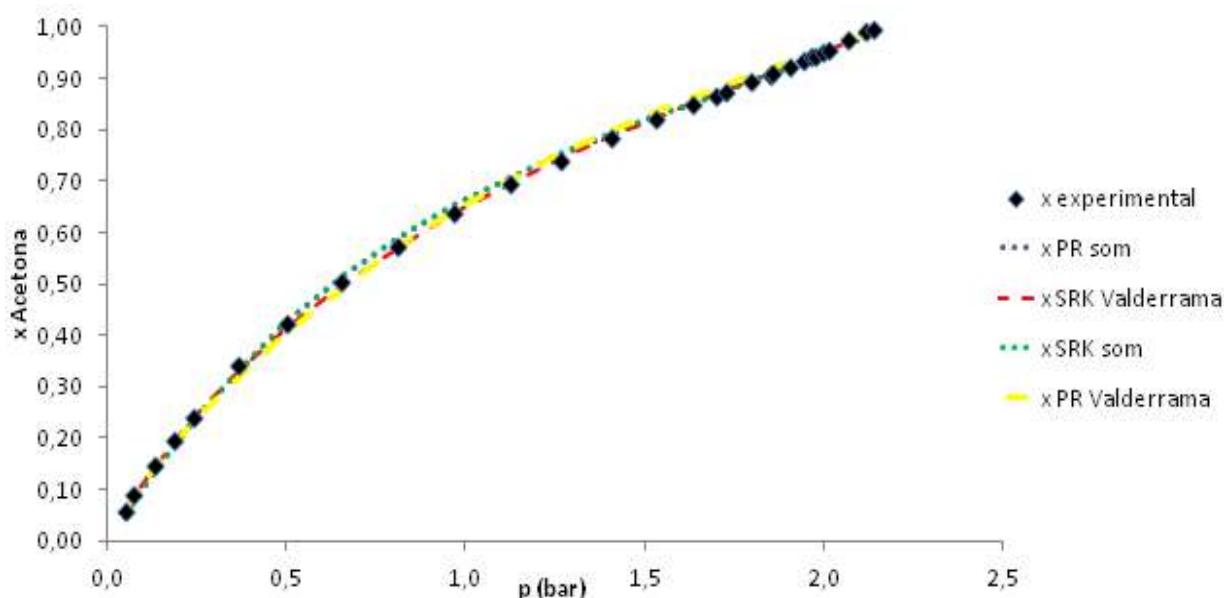


Figura 4.27- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura acetona e  $[C_4mim][NTf_2]$  a 353,15 K.

A partir das Figuras 4.25 a 4.27, observa-se que o perfil da composição molar da fase líquida calculada em função da pressão é análogo aos dados experimentais para as equações de estado cúbicas e regras de mistura utilizadas.

Os desvios médios relativos percentuais foram similares e inferiores a 2 % para todos os casos estudados, com exceção da regra quadrática de van der Waals aplicada à EDE de Soave-Redlich-Kwong com volume transladado e propriedades termofísicas obtidas na literatura, cujo desvio foi de 4,4 %.

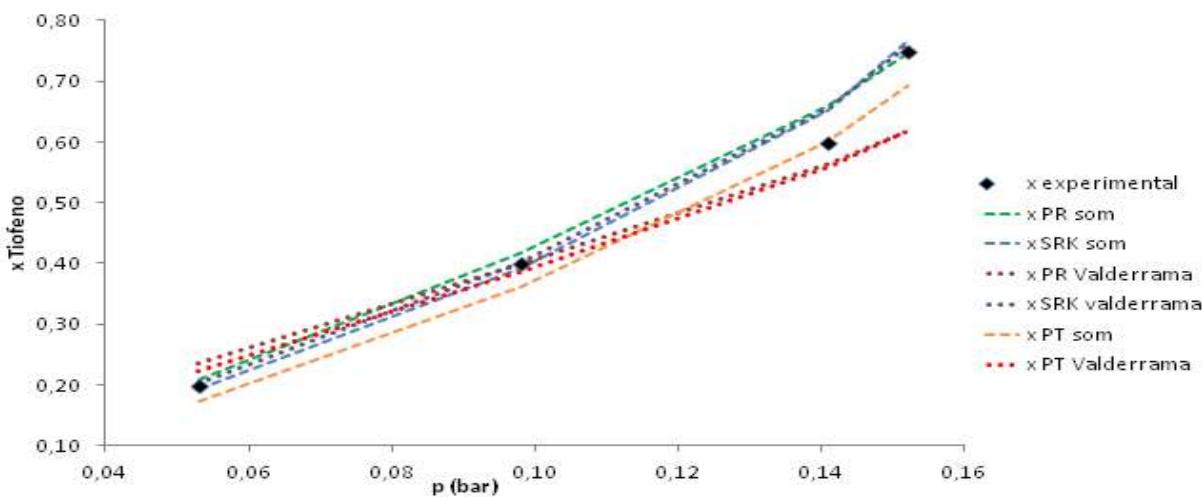


Figura 4.28- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura tiofeno e  $[C_4\text{mim}] \text{[PF}_6]$  a 308,4 K.

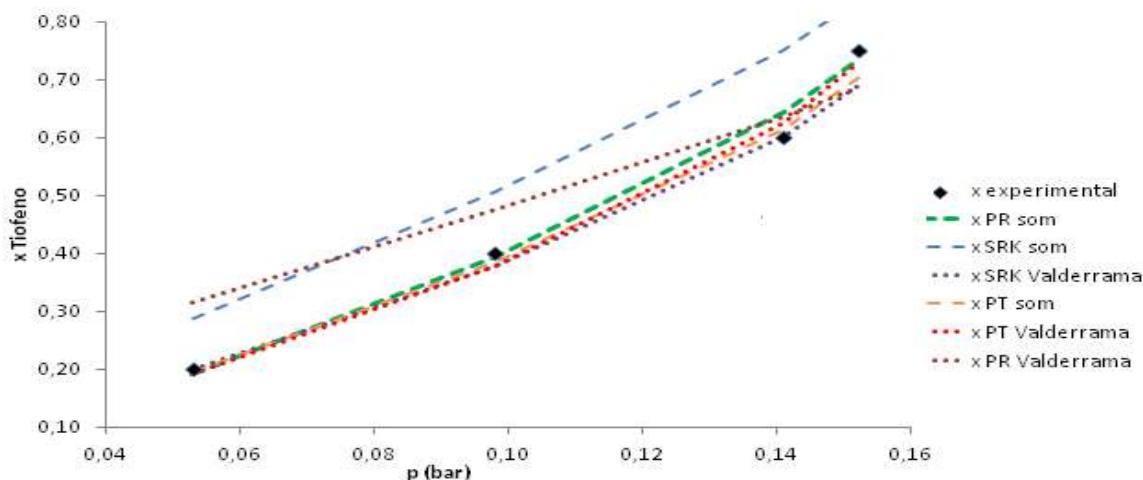


Figura 4.29- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura tiofeno e  $[C_4\text{mim}] \text{[PF}_6]$  a 308,4 K.

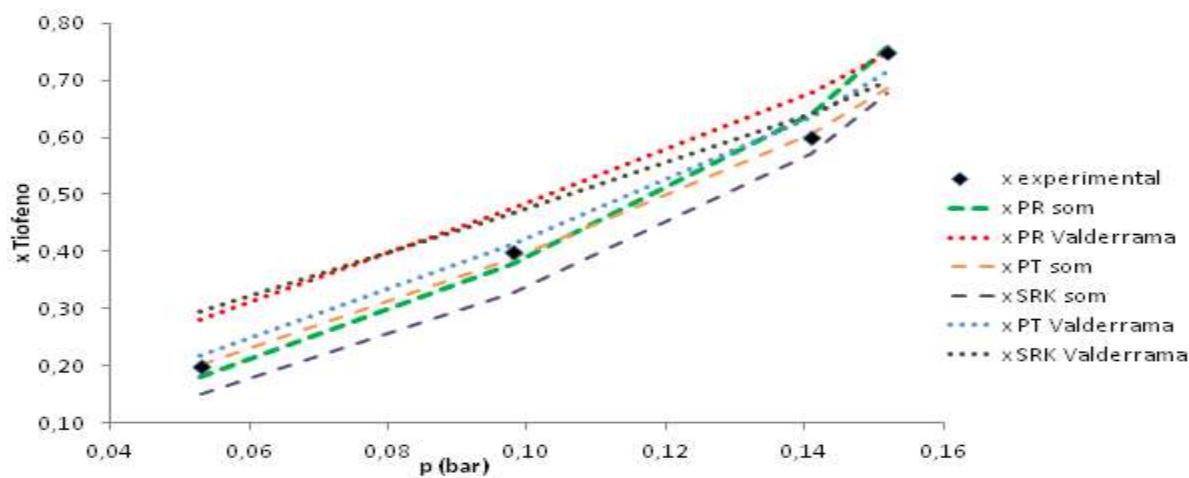


Figura 4.30- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura tiofeno e  $[C_4\text{mim}] \text{[PF}_6]$  a 308,4 K.

As Figuras 4.28 a 4.30 mostram que as equações de PR e PT apresentaram menores desvios médios relativos percentuais de fração molar líquida quando se utilizou as propriedades termofísicas calculadas a partir da velocidade do som.

Para o caso da EDE de SRKm e regra de mistura de vdW, os valores de  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  utilizados não influenciaram no desvio, cujo valor foi de 4 %. Mas, para a regra de Panagiotopoulos-Reid e equação de Soave-Redlich-Kwong com volume transladado, os desvios médios relativos percentuais obtidos pelo cálculo do ELV com o uso dos parâmetros provenientes da otimização por algoritmo genético e dos dados coletados na literatura foram iguais a 26,6 % e 3,7 %, respectivamente.

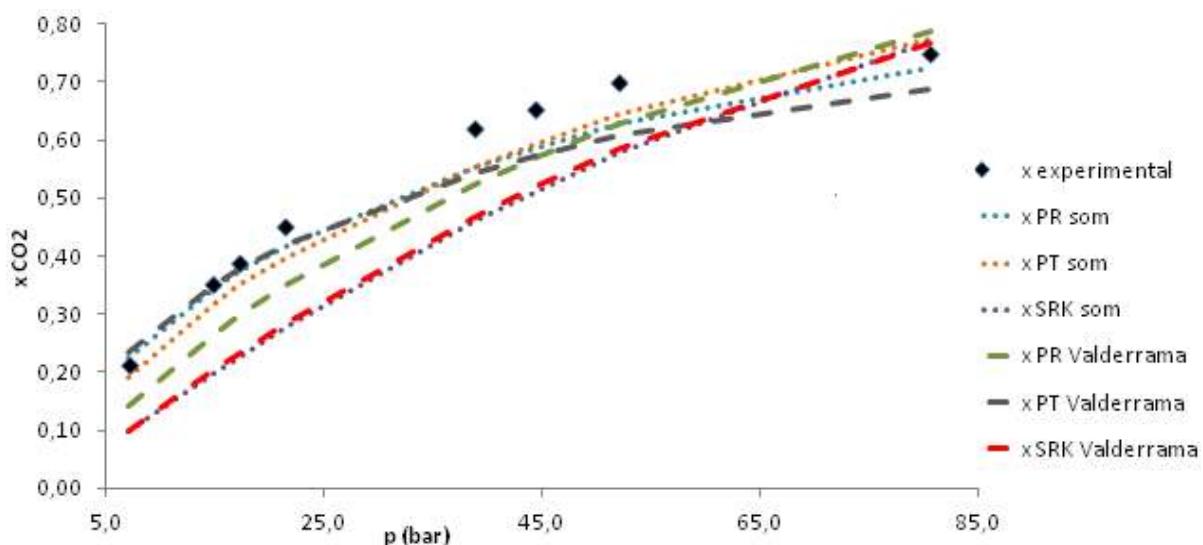


Figura 4.31- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] a 298,15 K.

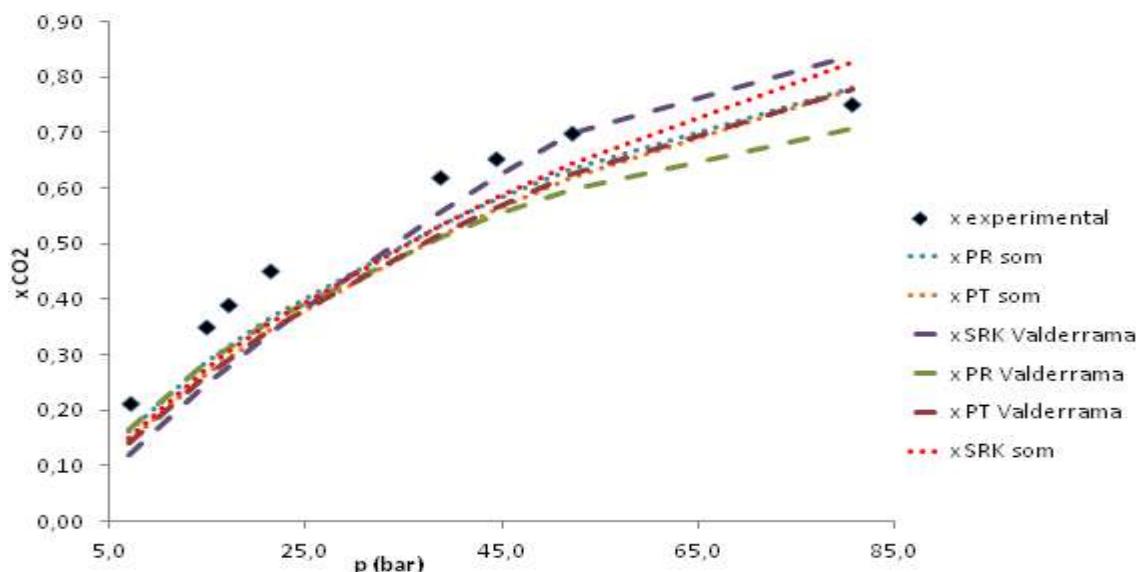


Figura 4.32- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] a 298,15 K.

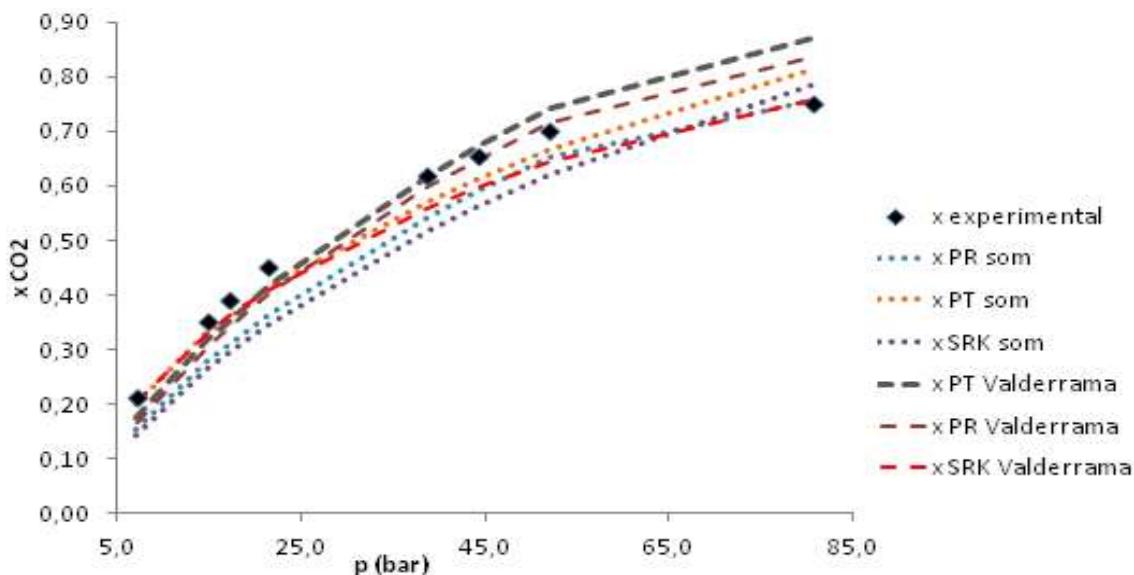


Figura 4.33- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim][NTf<sub>2</sub>] a 298,15 K.

A partir das frações molares da fase líquida obtidas pelas equações de PT e SRKm nota-se, pelas Figuras 4.31 e 4.32, uma semelhança entre o desvio médio relativo percentual, cujo maior valor foi de 30,8 % para a EDE de SRKm e regra de van der Waals.

A utilização dos parâmetros otimizados por algoritmo genético aprimorou os resultados do equilíbrio líquido-vapor para o caso de EDE de Peng-Robinson e regras de mistura de vdW e Panagiotopoulos-Reid. Em contrapartida, para a regra de mistura de Adachi-Sugie e equações de PR e SRKm, obteve-se melhor resultado pelas propriedades críticas e temperatura normal de ebulação estimadas por Valderrama e Rojas (2009).

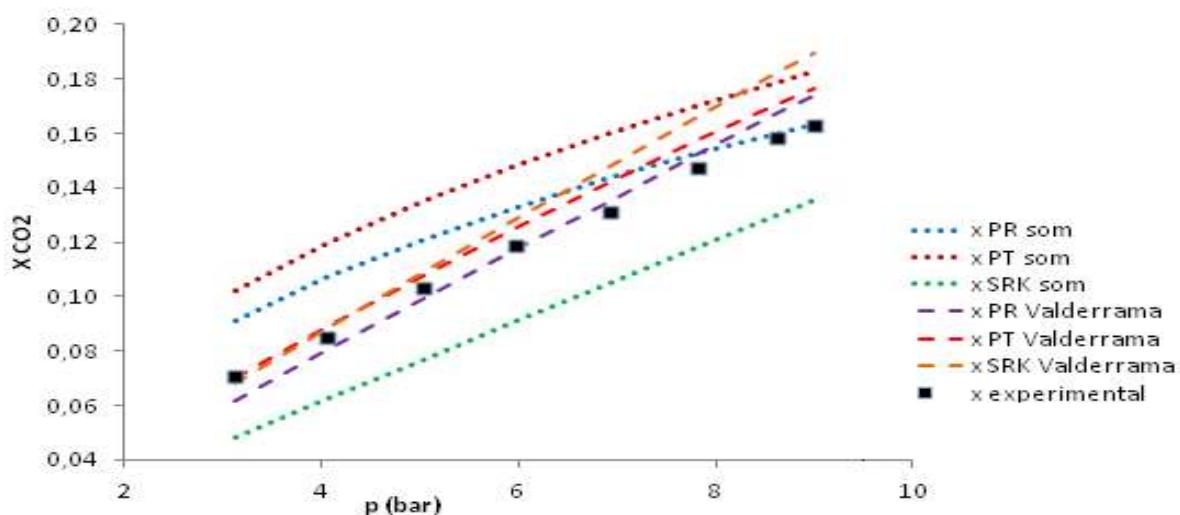


Figura 4.34- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim][BF<sub>4</sub>] a 298,15 K.

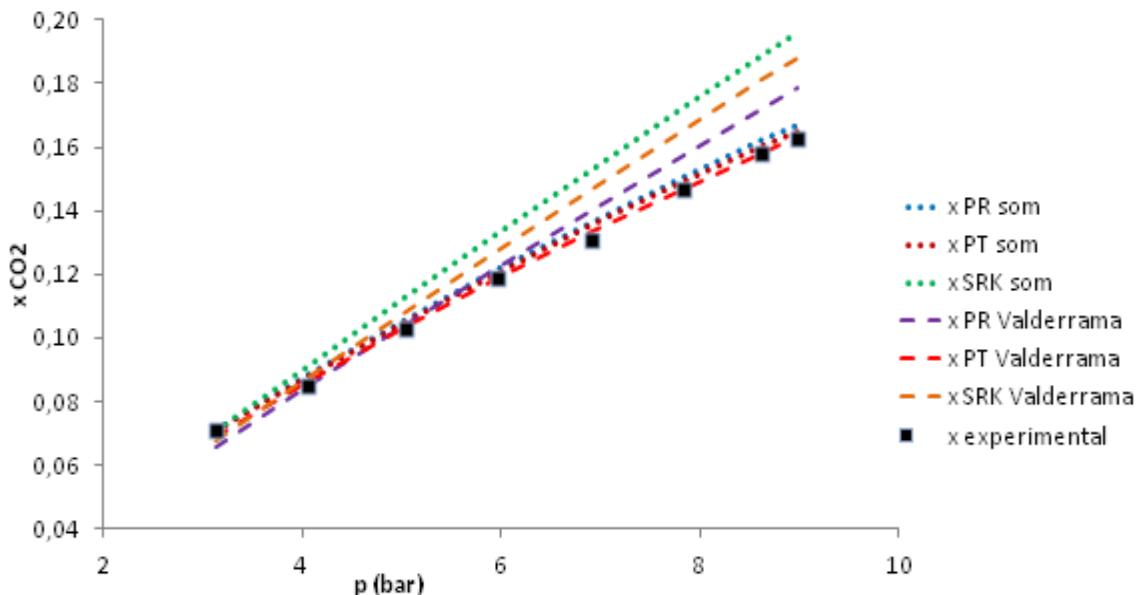


Figura 4.35- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 298,15 K.

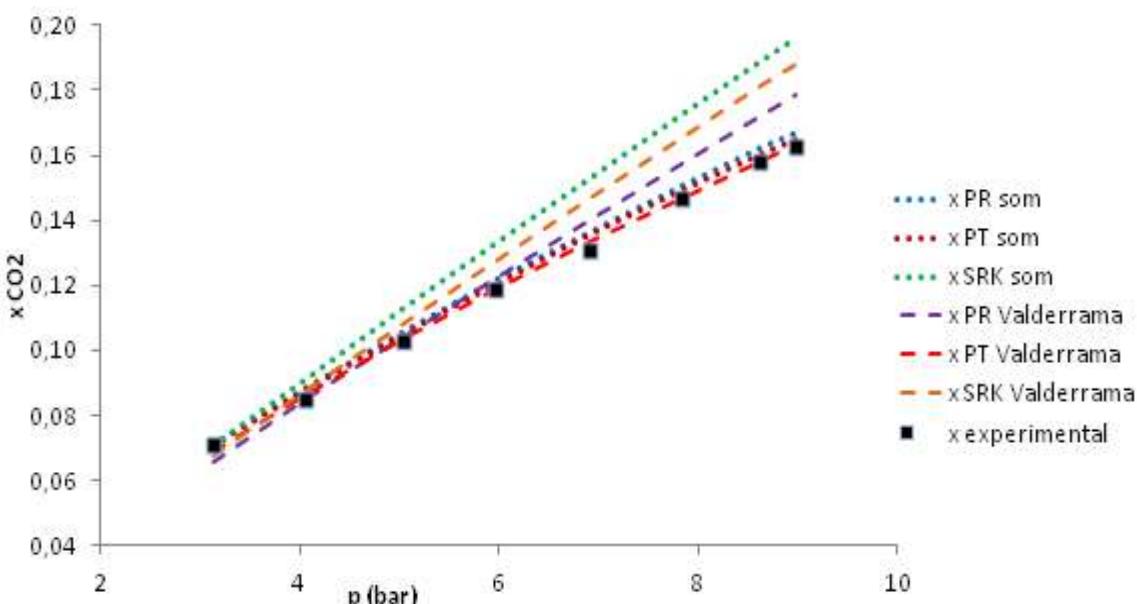


Figura 4.36- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 298,15 K.

Nas Figuras 4.34 e 4.35 mostra-se que as frações molares da fase líquida calculadas pelas equações de PT e SRKm possuem maior desvio médio relativo percentual quando se utilizaram dados de  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  calculados pela velocidade do som.

Por outro lado, a partir da Figura 4.35, nota-se que para a EDE de PR, o desvio foi menor quando se estimou o equilíbrio de fases com as propriedades termofísicas otimizadas por AG e inferior a 2,5 % para a regra de mistura de Adachi-Sugie e equações de estado cúbicas de PR e PT.

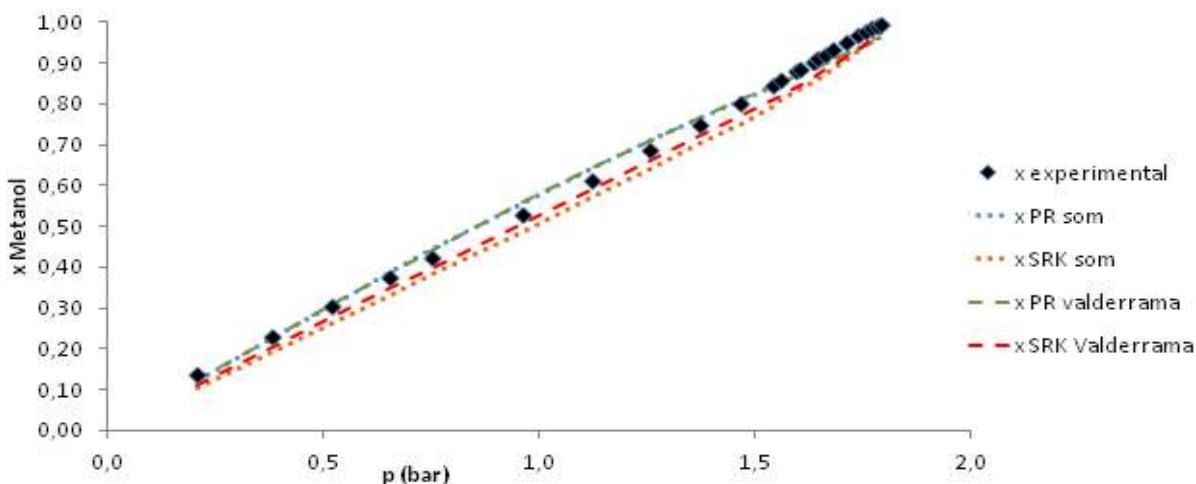


Figura 4.37- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura metanol e  $[C_6mim][NTf_2]$  a 353,11 K.

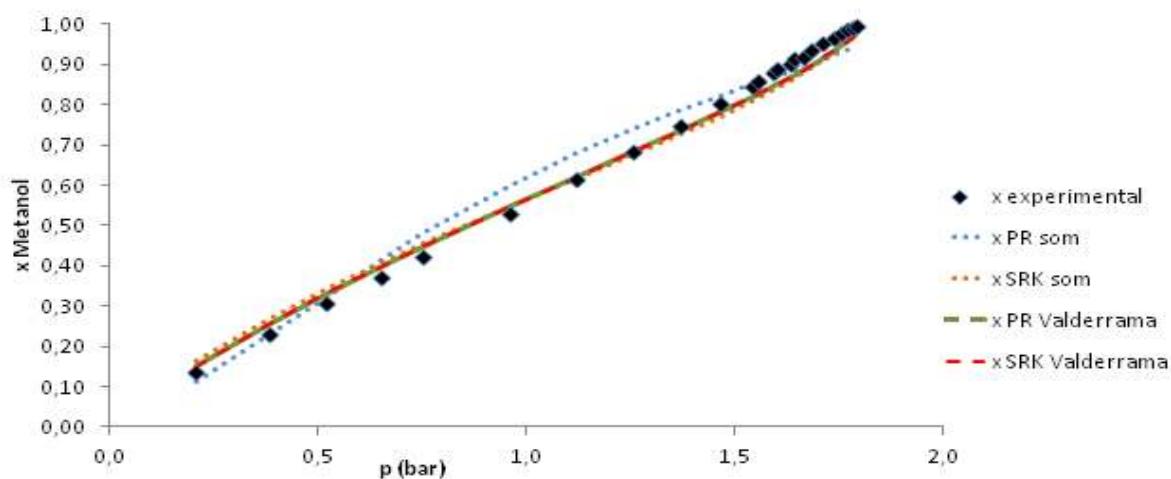


Figura 4.38- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura metanol e  $[C_6mim][NTf_2]$  a 353,11 K.

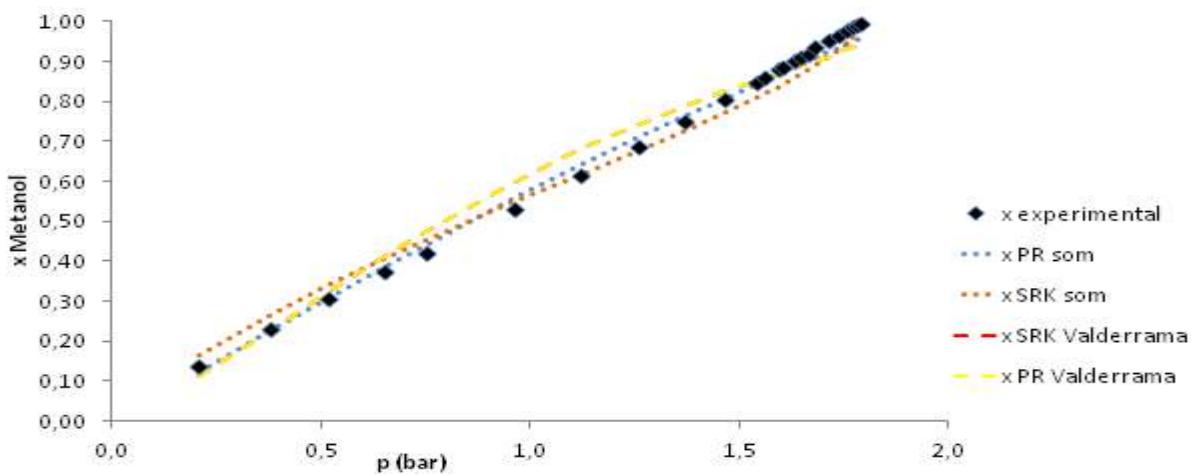


Figura 4.39- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura metanol e  $[C_6mim][NTf_2]$  a 353,11 K.

A partir da Figura 4.37, nota-se que, para a EDE de Peng-Robinson, o desvio médio relativo percentual da fração molar líquida foi independente dos valores das propriedades termofísicas utilizadas no cálculo do equilíbrio de fases e igual a 2,9 %.

Na Figura 4.38 verifica-se que para a equação de PR e SRKm o desvio foi maior para o caso em que se empregaram as constantes calculadas pela velocidade do som.

A partir da Figura 4.39 observa-se que o perfil de concentração da fase líquida em função da pressão do sistema é melhor descrito quando se utilizaram os parâmetros otimizados por algoritmo genético e equação de PR.

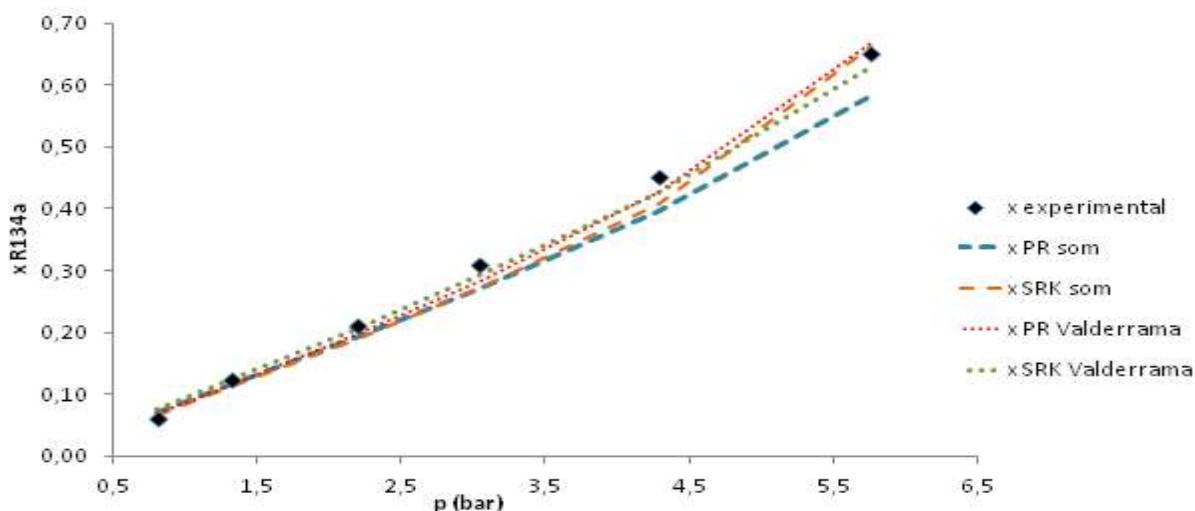


Figura 4.40- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura R134a e  $[C_6mim] [PF_6]$  a 298,15 K.

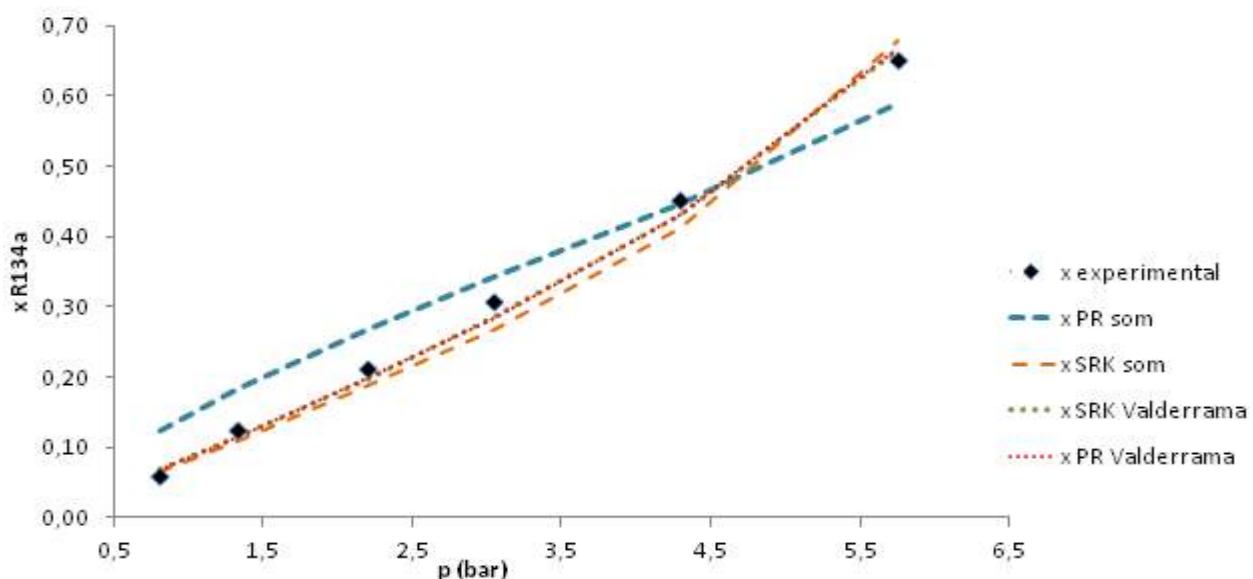


Figura 4.41- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura R134a e  $[C_6mim] [PF_6]$  a 298,15 K.

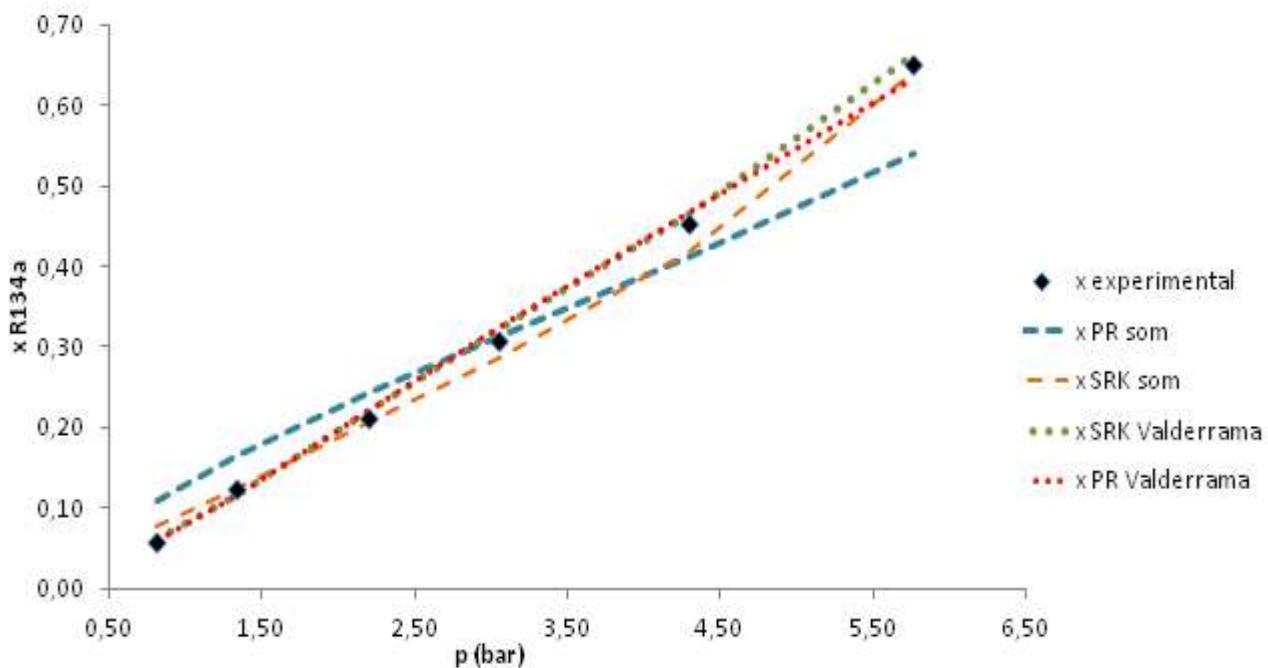


Figura 4.42- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura R134a e  $[C_6mim][PF_6]$  a 298,15 K.

Nas Figuras 4.40 a 4.42 é mostrado que os desvios médios relativos percentuais para a composição molar da fase líquida foram superiores para os casos em que foram utilizados os dados de  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  resultantes do processo de otimização por algoritmo genético, sendo que o maior desvio foi de 34,5 % para a equação de PR e regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid.

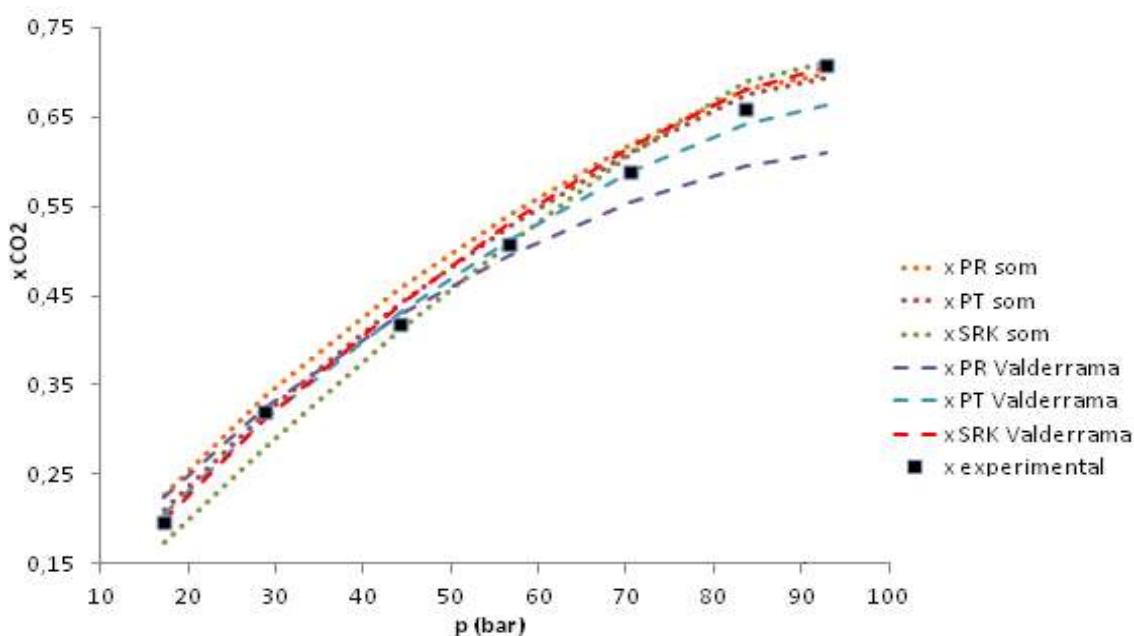


Figura 4.43- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura  $CO_2$  e  $[C_8mim][BF_4]$  a 313,15 K.

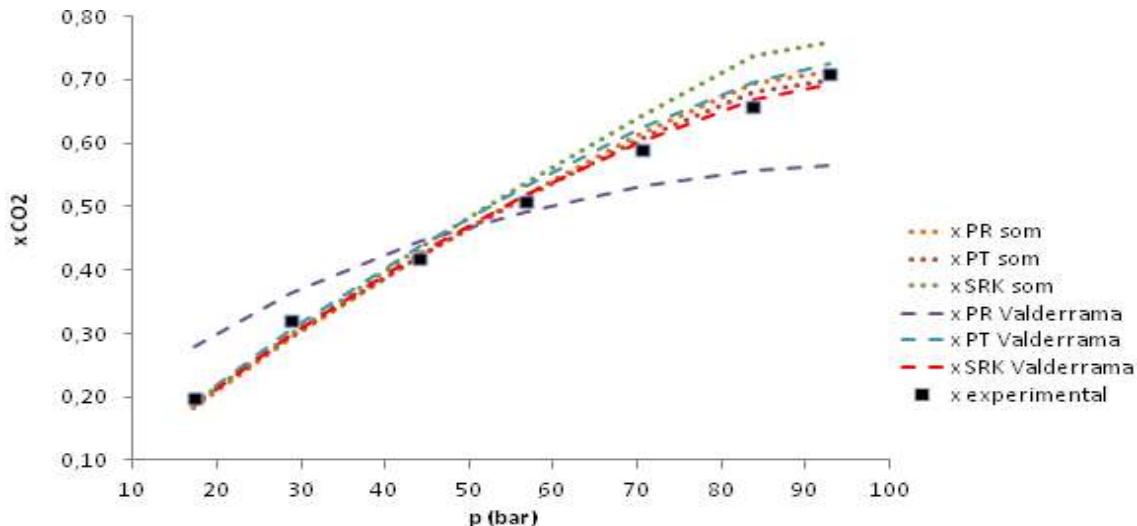


Figura 4.44- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 313,15 K.

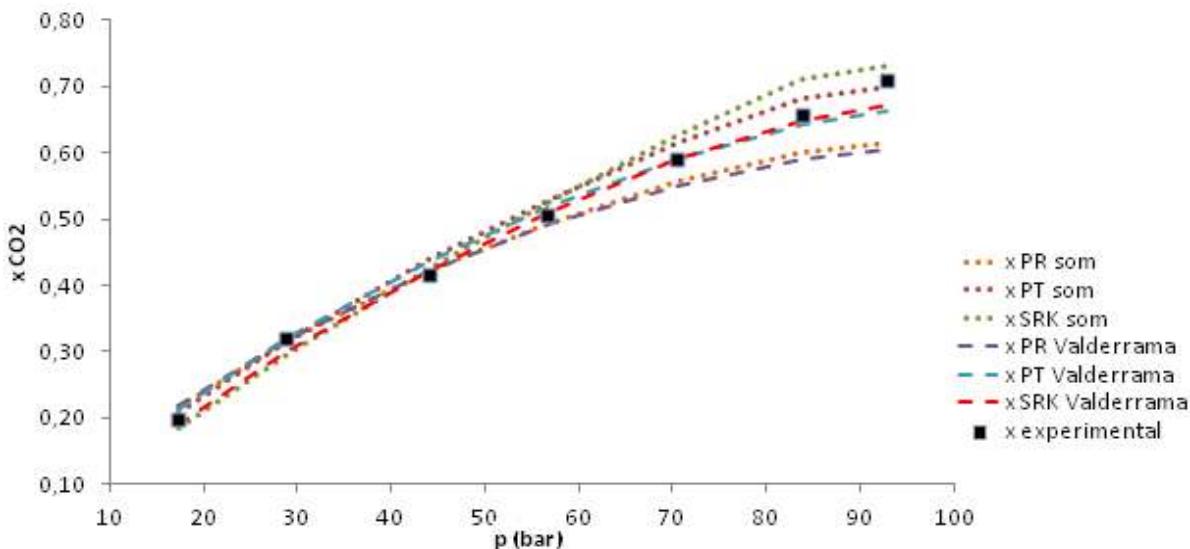


Figura 4.45- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] a 313,15 K.

Na Figura 4.43 observa-se que o uso da EDE de PR na estimativa dos dados de equilíbrio líquido-vapor apresentou menor desvio médio relativo percentual de fração molar da fase líquida para o caso em que se utilizaram as propriedades termofísicas estimadas pela velocidade do som.

Para a regra de mistura de Adachi-Sugie e equações de PT e PR, os desvios foram similares e menores que 6,6 %.

Pela Figura 4.44 é indicado que para as equações de SRKm e PT, os melhores resultados de simulação ELV foram obtidos a partir dos dados de temperatura normal de ebulação, pressão e temperatura críticas estimadas por Valderrama e Rojas (2009). Além disso, para a equação de estado cúbica de PR os desvios apresentam valores semelhantes e inferiores a 7,0 %.

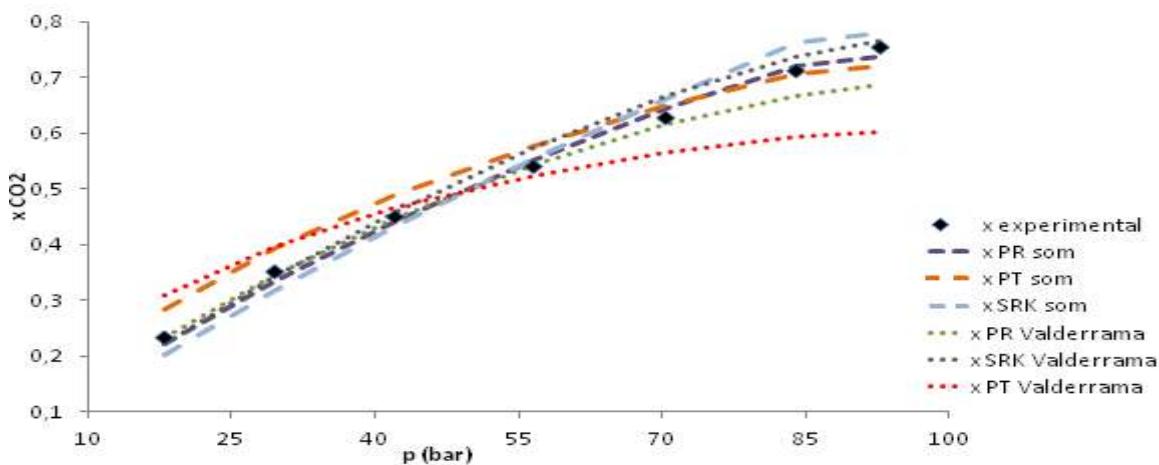


Figura 4.46- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 313,15 K.

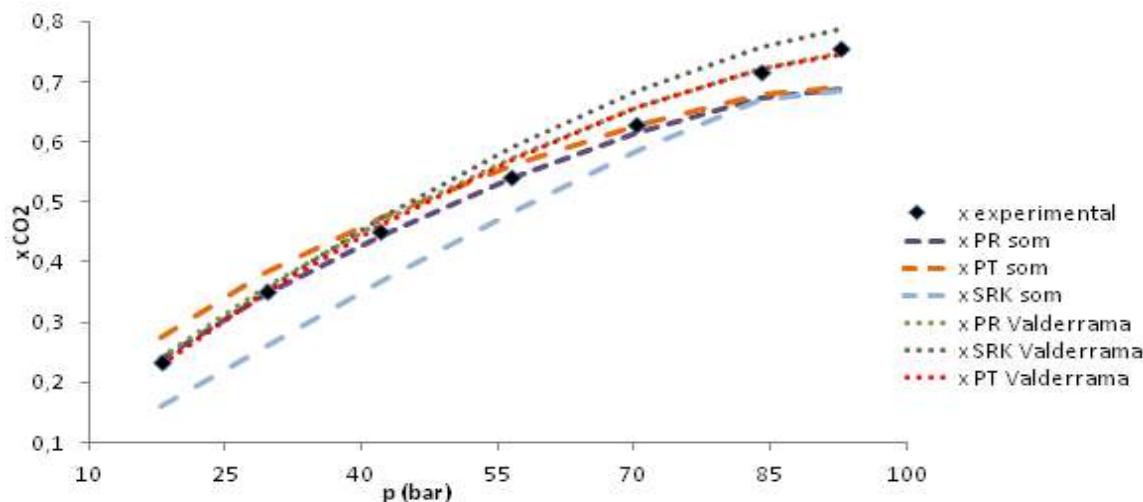


Figura 4.47- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 313,15 K.

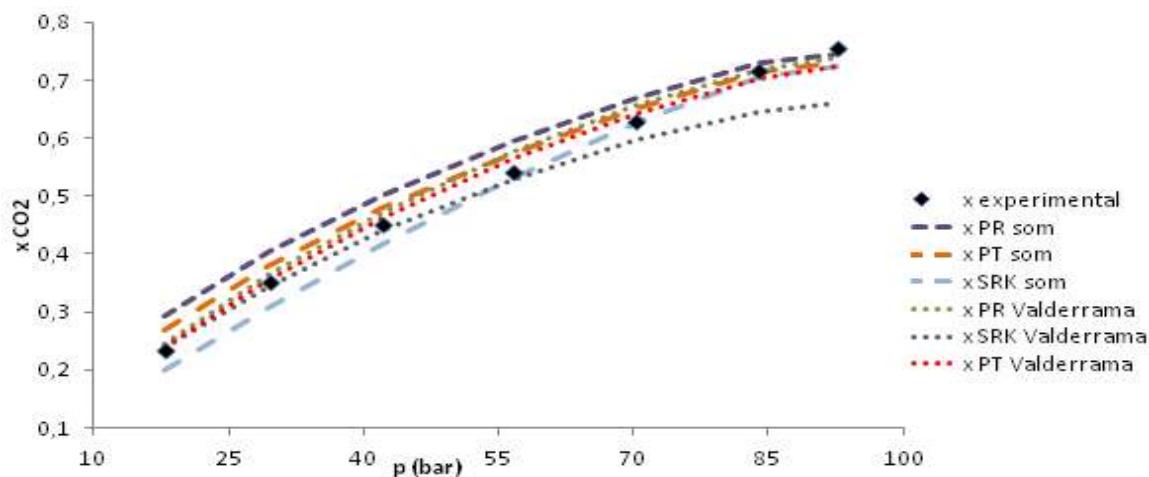


Figura 4.48- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 313,15 K.

A partir das Figuras 4.46 e 4.47, percebe-se que o desvio médio relativo percentual da composição molar líquida foi inferior a 3,2 % para a EDE de PR.

A partir da Figura 4.46, nota-se que os melhores resultados foram obtidos com o uso das propriedades termofísicas calculadas pela velocidade do som e equação de estado de PT. Entretanto, piores resultados foram alcançados com tais parâmetros para as EDEs de PT e SRKm e regras de mistura de Panagiotopoulos-Reid e Adachi -Sugie.

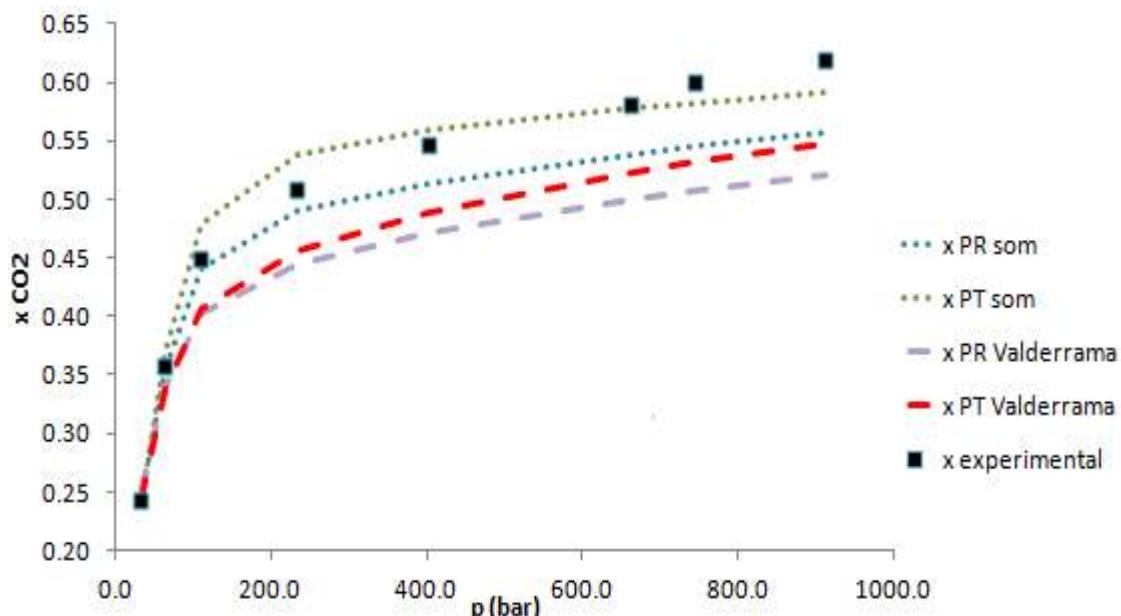


Figura 4.49- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 330 K.

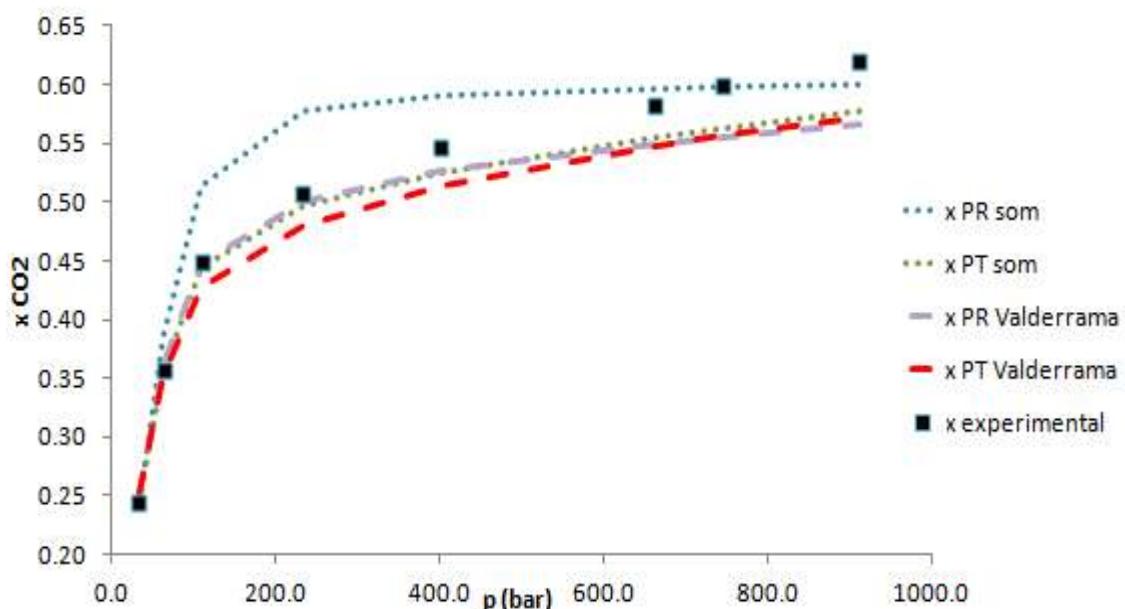


Figura 4.50- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 330 K.

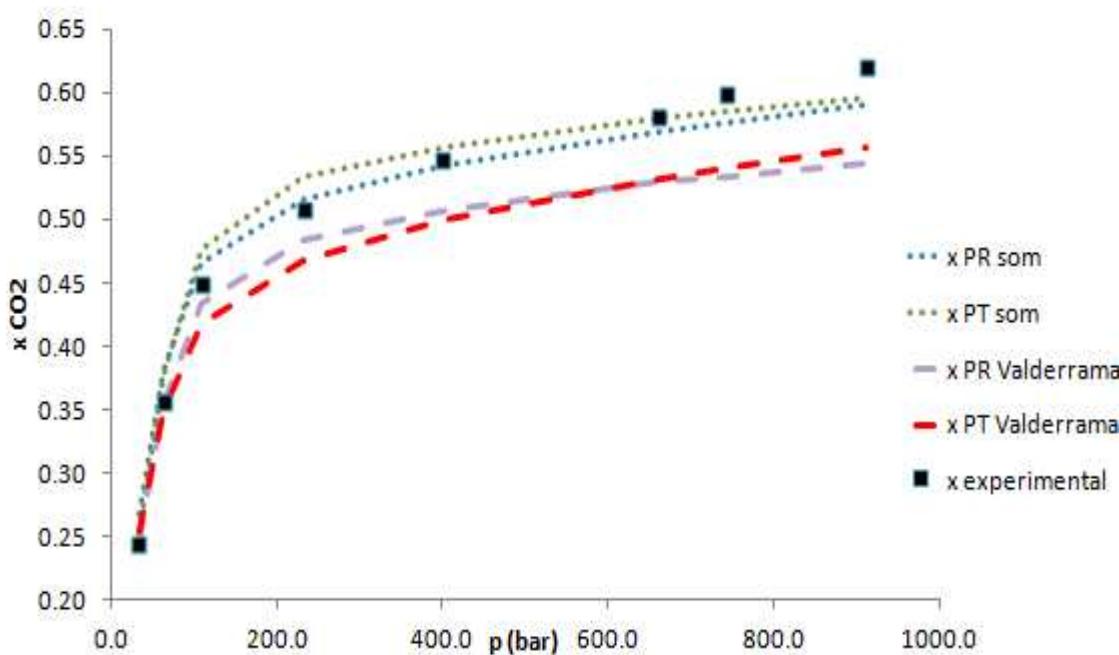


Figura 4.51- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] a 330 K.

Nas Figuras 4.49 a 4.51 mostra-se que as frações molares da fase líquida calculadas por todas as equações de estado e regras de mistura, exceto Panagiotopoulos-Reid com PR, apresentam menores desvios com relação aos dados experimentais na situação em que se utilizaram as propriedades críticas e temperatura normal de ebulição calculadas pelo processo de otimização por algoritmo genético.

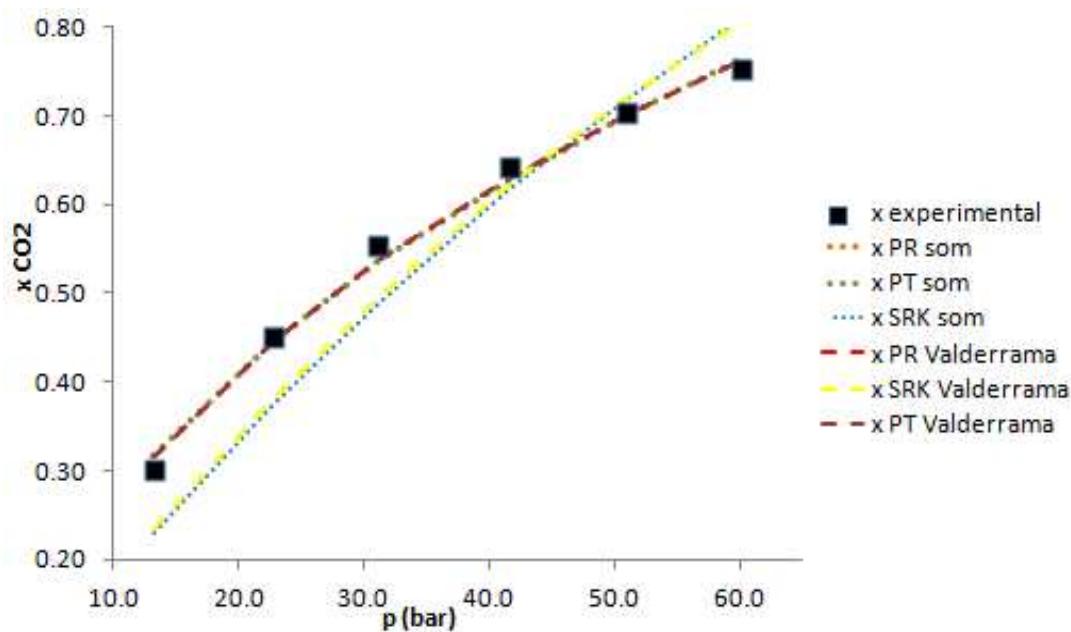


Figura 4.52- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de van der Waals para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] a 298,2 K.

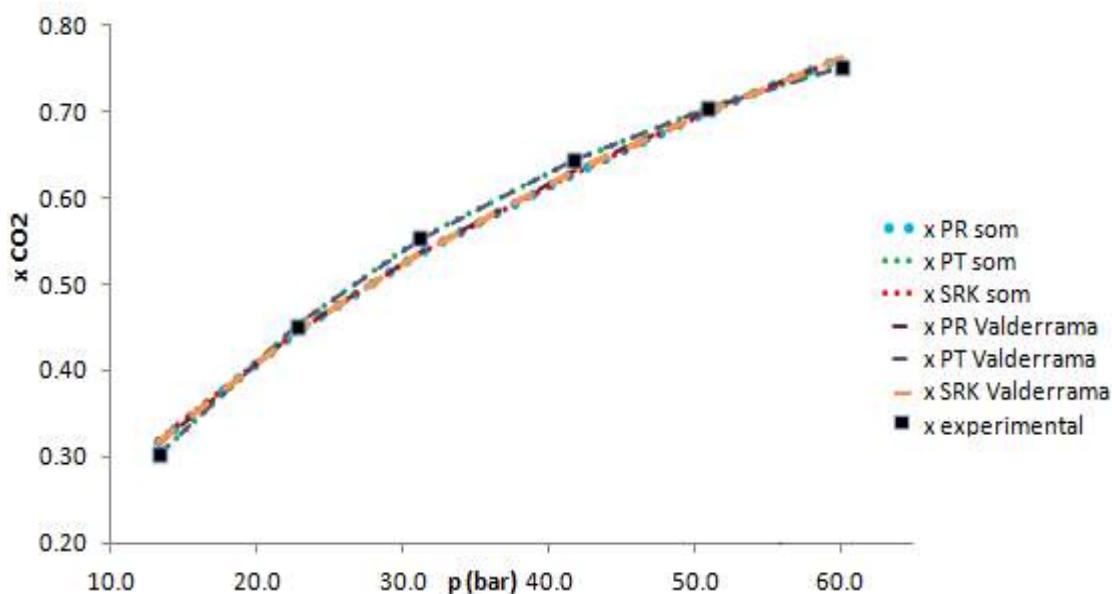


Figura 4.53- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] a 298,2 K.

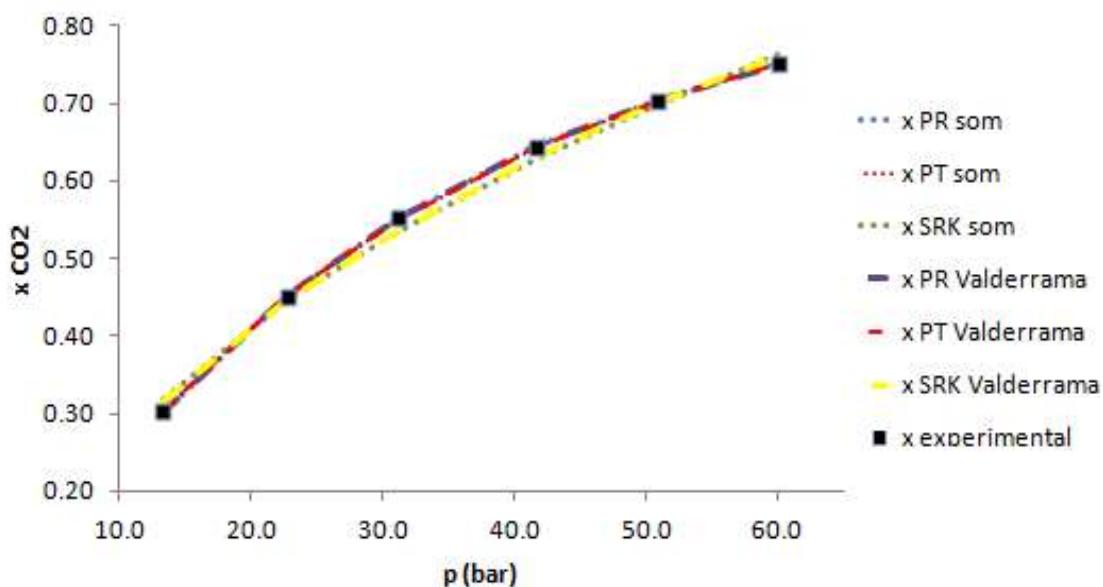


Figura 4.54- Dados de equilíbrio experimentais e calculados com regra de mistura de Adachi-Sugie para a mistura CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] a 298,2 K.

A partir das Figuras 4.52 a 4.54, observa-se que o perfil da composição molar da fase líquida calculada em função da pressão segue a mesma tendência que os dados experimentais para as equações de estado cúbicas e regras de mistura utilizadas. O desvio médio relativo percentual foi inferior a 2,5 % para todos os casos, exceto EDE de Soave-Redlich-Kwong com volume transladado, cujo valor do desvio foi 11 % para a situação em que se utilizaram os valores de  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  calculados pela velocidade do som contra 10 % para as constantes obtidas por Valderrama e Rojas (2009).

Em resumo, para verificar os desvios médios relativos obtidos para a fração molar da fase líquida quando se utilizou na modelagem ELV as propriedades críticas e temperatura normal de ebulação propostas por Valderrama e Rojas (2009) e por este trabalho, elaborou-se as Tabelas 4.7 e 4.8 contendo os resultados para cada equação de estado e regra de mistura utilizadas para os sistemas binários contendo os líquidos iônicos: 1- [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], 2- [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 3- [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], 4- [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 5- [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], 6- [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 7- [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], 8- [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 9- [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], 10- [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 11- [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], 12- [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] e 13- [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

Tabela 4.7- Desvios médios relativos para a fração molar da fase líquida obtida com dados de entrada calculados pela velocidade do som.

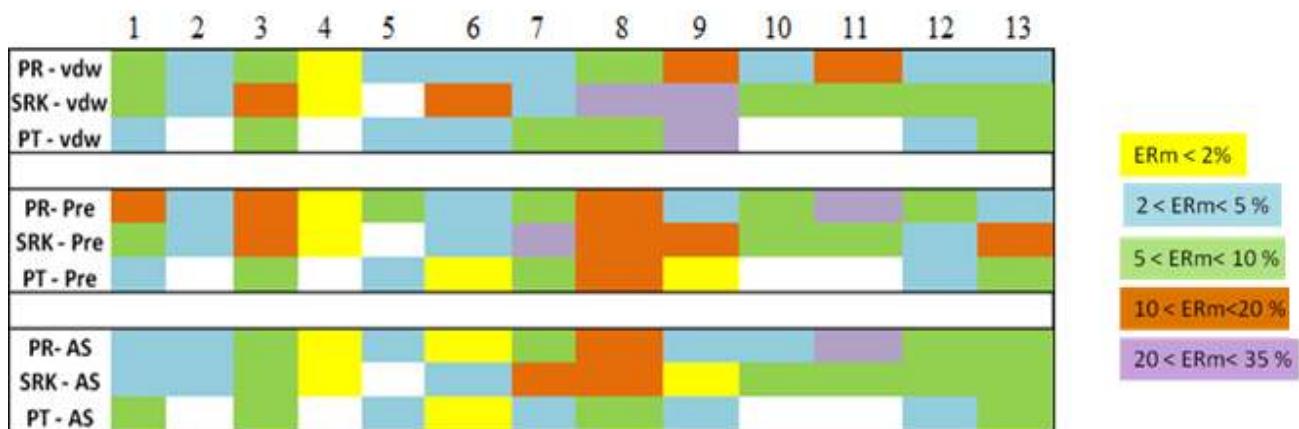
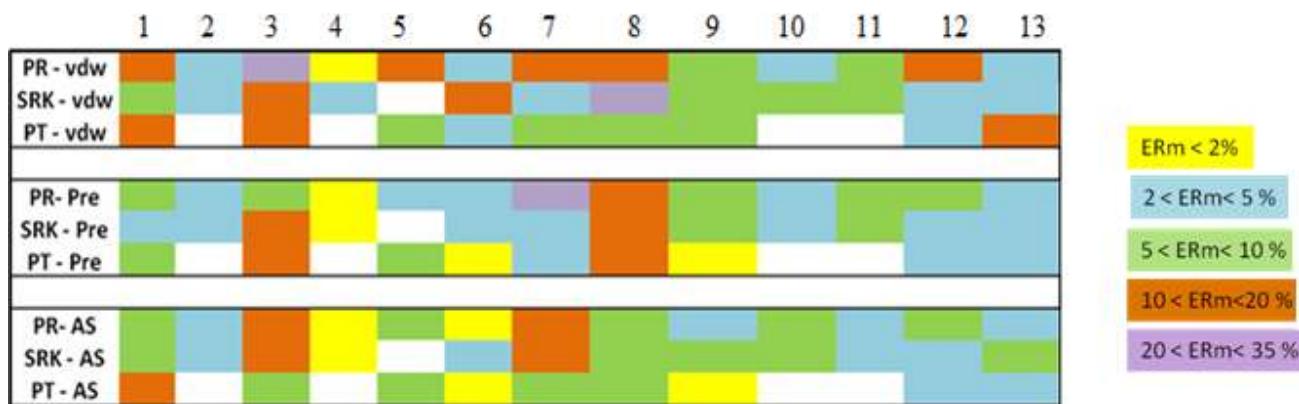


Tabela 4.8- Desvios médios relativos para a fração molar da fase líquida obtida com dados de entrada calculados por Valderrama e Rojas (2009).



A partir das informações contidas nas Tabelas 4.7 e 4.8, observa-se que se obteve um número de casos semelhante em que o desvio médio relativo percentual da fração molar da fase líquida foi inferior a 10 % quando se utilizou os parâmetros estimados por algoritmo genético e por Valderrama e Rojas (2009), um número inferior de casos para o desvio de 10 a 20 % e superior para o desvio de 20 a 35 %, com ambas as faixas calculadas pelos parâmetros resultantes da otimização por velocidade do som.



## CAPÍTULO 5

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Neste trabalho, para o líquido iônico  $[C_2mim][EtSO_4]$ , a temperatura normal de ebulação e temperatura e pressão críticas, que foram obtidas a partir da minimização por algoritmo genético PIKAIA do somatório quadrático dos erros entre a velocidade do som calculada e experimental, apresentaram valores semelhantes aos obtidos por Valderrama e Rojas (2009) e foram utilizadas para a determinação dos termos atrativo e repulsivo de equações de estado cúbicas.

O equilíbrio líquido-vapor de mistura binária contendo esse imidazólio foi melhor predito quando se utilizaram as propriedades termofísicas estimadas a partir desse trabalho, com exceção ao caso em que se utilizou a equação proposta por Panagiotopoulos-Reid na determinação dos parâmetros de mistura dos termos atrativo e repulsivo da EDE de Peng-Robinson.

No caso dos LIIs com o íon  $[NTf_2]^-$ , os valores de temperatura crítica e normal de ebulação resultantes do processo de otimização apresentaram desvios médios inferiores a 6 % com relação aos dados da literatura. O desvio médio entre a fração molar da fase líquida experimental e a calculada no equilíbrio líquido-vapor binário na presença de líquido iônico com esse ânion não sofreu influência das propriedades termofísicas fornecidas para a modelagem no *software PE 2000*.

As temperaturas críticas para os imidazólios com o ânion  $[BF_4]^-$  obtidas pela velocidade do som e por Valderrama e Rojas (2009) foram similares, ao passo que a pressão crítica e a temperatura normal de ebulação diferenciaram-se por mais de 9 %. No entanto, apesar desse desvio, os resultados para o ELV contendo o ânion tetrafluoroborato não apresentaram diferenças significantes nas equações e constantes utilizadas, com exceção da EDE de PT e regra quadrática de mistura de van der Waals aplicadas ao  $[C_6mim][BF_4]$ , cujo desvio foi de 25,3 % contra 6,0 % quando se utilizaram os dados calculados por algoritmo genético e pela literatura, respectivamente.

Os resultados dos parâmetros  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  obtidos pela velocidade do som para os líquidos iônicos contendo o íon  $[PF_6]^-$  apresentaram valores distintos e desvios superiores a 11 % dos valores estimados por Valderrama e Rojas (2009).

O comportamento da fração molar da fase líquida em função da pressão para os sistemas com ânion hexafluorofosfato foi melhor descrito, na maioria dos casos, quando se utilizaram os parâmetros obtidos por algoritmo genético nas equações de estado cúbicas.

Como sugestão para trabalhos futuros, com base nos resultados apresentados nesta Dissertação, tem-se: a utilização de novas regras de mistura na modelagem líquido-vapor e de equações de estado para a determinação da velocidade do som e a determinação experimental de dados referentes à velocidade do som dos líquidos iônicos piridíneos, pirrolidíneos, amônios, fosfônios, triazólios, piridazíneos de modo a ter um maior conjunto de dados que possam ser utilizados na rede neural e, assim, determinar por interpolação as velocidades do som para demais LIs, as respectivas propriedades críticas e os parâmetros atrativos e repulsivos de equações de estado.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAHAM, T. H. (Physio) Logical circuits: the intellectual origins of the McCulloch-Pitts neural networks. **J. Hist. Behav. Sci.**, v. 38, p. 3-25, 2002.
- ADACHI, Y.; SUGIE, H. A new mixing rule – modified conventional mixing rule. **Fluid Phase Equilib.**, v.28, p.103, 1986.
- AHLERS, J.; GMEHLING, J. Development of an universal group contribution equation of state I. Prediction of liquid densities for pure compounds with a volume translated Peng–Robinson equation of state. **Fluid Phase Equilib.**, v. 191, p. 177-188, 2001.
- ALMEIDA, G. S.; AZNAR, M.; SILVA, A. T. Uma nova forma de dependência com a temperatura do termo atrativo de equações de estado cúbicas, RBE, **Cad. Eng. Quim.**, v. 8, p. 95-123, 1991.
- ALVES, Danilo César Rodrigues. Determinação da pressão mínima de miscibilidade de um óleo tendo como fluido de injeção o CO<sub>2</sub>, utilizando os simuladores SPESe MI-PVT. 2006. 126 f. Dissertação (Mestrado) - Unifacs, Salvador, 2006.
- AMBROSE, D. Correlation and estimation of vapor-liquid critical properties. I. Critical temperatures of organic compounds. **NPL. Rep. Chem.** 92, p. 1-35, 1978.
- ANGENENDT, K.; JOHANSSON, P. Ionic liquid based lithium battery electrolytes: charge carriers and interactions derived by density functional theory calculations. **J. Phys. Chem. B**, v. 115, p. 7808-7813, 2011.
- ARCE, Pedro Felipe Castillo. Modelagem do equilíbrio de fases em misturas de dióxido de carbono supercrítico e compostos presentes em produtos naturais. 2002. 203 f. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.
- AZEVEDO, R. G.; ESPERANÇA, J. M. S. S.; VISAK, V. N.; VISAK, Z. P.; GUEDES, H. J. R.; PONTE, M. N.; REBELO, L. P. N. Thermophysical and thermodynamic properties of 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate over na extended pressure range. **J. Chem. Eng. Data**, v. 50, 997-1008, 2005.
- AZNAR, M. Correlation of (liquid + liquid) equilibrium of systems including ionic liquids. **Braz. J. Chem. Eng.**, v. 24, p. 143-149, 2007 .
- BAKER, S. N; BAKER, G. A; KANE, M. A; BRIGHT, F. V. The cybotactic region surrounding fluorescent probes dissolved in 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate: effects of temperature and added carbon dioxide. **J. Phys. Chem. B**, v. 105, p. 9663-9668, 2001.
- BANDRÉS, I.; GINER, B.; GASCÓN, I.; CASTRO, M.; LAFUENTE, C. Physicochemical characterization of n-butyl-3-methylpyridinium dicyanamide ionic liquid. **J. Phys. Chem. B**, v. 112, p. 12461-12467, 2008.
- BELLAN, J. Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. **Prog. Energy Comb. Sci.**, v. 26, p. 329-366, 2000.
- BENEDETTO, R.; GAVIOSO, M.; SPAGNOLO, R.; GRIGIANTE, M.; SCALABRIN, G. Vapor-phase Helmholtz equation for HFC-227ea from speed-of-sound measurements. **Int. J. Thermophys.**, v. 22 (4), p. 1073-1088, 2001.
- BLANCHARD, L. A.; HANCU, D.; BECKMAN, E. J; BRENNECKE, J. F. Green processing using ionic liquids and CO<sub>2</sub>. **Nature**, v. 399 (6731), p. 28-29, 1999.

- BLANCHARD, L. A.; GU, Z.; BRENNECKE, J. F. High-pressure phase behavior of ionic liquid/CO<sub>2</sub> systems. **J. Phys. Chem. B**, v. 105, p. 2437-2444, 2001.
- BOWEN, W.; JERMAN, J. Nonlinear regression using spreadsheets. **Trend Pharm. Sci.**, v. 16, p. 413-417, 1995.
- BRENNECKE, J. F.; MAGINN, E. J. Ionic liquids: innovative fluids for chemical processing. **AIChE J.**, v. 47 (11), p. 2384-2389, 2001.
- BRULE, M. R.; STARLING, K. E. Thermophysical properties of complex systems: applications of multiproperty analysis. **Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.**, v. 23 (4), p. 833-845, 1984.
- CARRIJO, Gustavo Nazareno Dos Anjos. Mapeamento de campo acústico de trandutores de ultra-som utilizando telas de poliuretano. 2008. 65 f. Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.
- CARVALHO, P. J.; ALVAREZ, V. H.; MACHADO, J. J. B.; PAULY, J.; DARIDON, J.; MARRUCHO, I. M.; AZNAR, M.; COUTINHO, J. A. P. High pressure phase behavior of carbon dioxide in 1-alkyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl)imide ionic liquids. **J. Supercrit. Fluids**, v. 48, p. 99-107, 2009.
- CASTRO, Suzana Lima de Campos. Algoritmo genético aplicado a determinação ótima de parâmetros, Universidade Estadual de Campinas, 1994. 85 p. Dissertação (Mestrado).
- CHARBONNEAU, P.; KNAPP, B. A. User's Guide to PIKAIA 1.0, NCAR Technical Note 418+IA (Boulder: Nacional Center for Atmospheric Research), 1996.
- CHIAPPE, C.; PIERACCINI, D. Review commentary, ionic liquids: solvent properties and organic reactivity. **J. Phys. Org. Chem.**, v. 18, p. 275-297, 2005.
- CONSORTI, C. S.; SOUZA, R. F de; DUPONT, J. Líquidos iônicos contendo o cátion dialquilimidazólio: estrutura, propriedades físico-químicas e comportamento em solução. **Quim. Nova**, v. 24 (6), p. 830-837, 2001.
- COSTA, Edmundo Guimarães de Araújo. Propagação de ondas acústicas em ambientes contendo obstáculos usando o método de elementos de contorno. 2008. 92 f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.
- DAVIS, J. H. Task-specific ionic liquids. **Chem. Lett.**, v. 33 (9), p. 1072-1077, 2004.
- DAYTON, T. C.; BEYERLEIN, S. W.; GOODWIN, A. R. H. Determination of densities and heat capacities from speed of sound measurements for 1,1,1,2-tetrafluoroethane. **J. Chem. Thermodyn.**, v. 31, p.847-868, 1999.
- DEMNEH, A. F.; MOOSAVIANA, M. A.; RAHMATIA, M. M.; OMIDKHAHB, M. R.; BAHMANIARA, H. Comparison of the prediction power of 23 generalized equations of state: part I. Saturated thermodynamic properties of 102 pure substances. **Fluid Phase Equilib.**, v. 288, p.67-82, 2010.
- EARLE, M. J., MCCORMAC, P. B., SEDDON, K. R. Regioselective alkylation in ionic liquids. **Chem. Commun.**, p. 2245-2246, 1998.
- ESPERANÇA, J. M. S. S.; VISAK, Z. P.; PLECHKOVA, N. V.; SEDDON, K. R.; GUEDES, H. J. R.; REBELO, L. P. N. Density, speed of sound, and derived thermodynamic properties of ionic liquids over an extended pressure range. 4. [C<sub>3</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] and [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>]. **J. Chem. Eng. Data**, v. 51, p. 2009-2015, 2006.

ESPERANÇA, J. M. S. S.; GUEDES, H. J. R.; LOPES, J. N. C.; REBELO, L. P. N. Pressure-density-temperature (p-p-T) surface of [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>]. **J. Chem. Eng. Data**, v. 53, p. 867-870, 2008.

FERRET, FÉLIX LUIS LOVELL. Accurate description of the critical region by a molecular based equation of state with a crossover treatment. Universidade Autônoma de Barcelona, 2006. 265 p. Tese (Doutorado).

FULLER, J.; CARLIN, R. T.; OSTERYOUNG, R. A. The room temperature ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate: electrochemical couples and physical properties. **J. Electrochem. Soc.**, v. 144, p. 3881-3886, 1997.

GARDAS, R. L.; COUTINHO, J. A. P. Extension of Ye and Shreeve group contribution method for density estimation of ionic liquids in a wide range of temperatures and pressures. **Fluid Phase Equilib.**, v. 263, p. 26-32, 2008.

GARDAS, R. L.; COUTINHO, J. A. P. A group contribution method for heat capacity estimation of ionic liquids. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 47, p. 5751-5757, 2008.

GARDAS, R. L.; FREIRE, M. G.; CARVALHO, P. J.; MARRUCHO, I. M.; FONSECA, I. M. A.; FERREIRA, A. G. M.; COUTINHO, J. A. P. ppT measurements of imidazolium-based ionic liquids. **J. Chem. Eng. Data**, v. 52, p. 1881-1888, 2007.

GARDAS, R. L.; FREIRE, M. G.; CARVALHO, P. J. MARRUCHO, I. M.; FONSECA, I. M. A. FERREIRA, A. G. M.; COUTINHO, J. A. P. High-pressure densities and derived thermodynamic properties of imidazolium-based ionic liquids. **J. Chem. Eng. Data**, v. 52, p. 80-88, 2007.

GE, R.; HARDACRE, C.; JACQUEMIN, J.; NANCARROW, P.; RONEY, D. W. Heat capacities of ionic liquids as a function of temperature at 0.1 MPa. Measurement and prediction. **J. Chem. Eng. Data**, v.53, p. 2148-2153, 2008.

GIERNOTH, R. Ionic liquids with a twist: new routes to liquid salts. **Angew. Chem. Int. Ed.**, v.49, p. 5608-5609, 2010.

GOLDBERG, D. Genetic algorithms in search optimization and machine learning. Massachusetts: Addison-wesley, 1989. 412 p.

GOODWIN, A. R. H; MARSH, K. N; WAKEHAM, W. A. Measurement of the thermodynamic properties of single phases. Amsterdam: Elsevier, 2003. 577 p.

HOLLAND, H. J. Adaptation in natural and artificial systems. Michigan: Ann Arbor, 1975. 384 p.

HUDDLESTON, J. G.; WILLAUER, H. D.; SWATLOSKI, R. P.; VISSER, A. E.; ROGERS, R. D. Room temperature ionic liquids as novel media for “clean” liquid-liquid extraction. **Chem. Commun.** p. 1765-1766, 1998.

HUO, Y.; XIA, S.; YI, S.; MA, P. Measurement and correlation of vapor pressure of benzene and thiophene with [bmim] [PF<sub>6</sub>] and [bmim] [BF<sub>4</sub>] ionic liquids. **Fluid Phase Equilib.**, v. 276, p. 46-52, 2009.

HURLY, J.J. Thermophysical properties of gaseous HBr and BCl<sub>3</sub> from speed-of-sound measurements. **Int. J. Thermophys.**, v. 21, p. 805-829, 2000.

JALOWKA, J. W.; DAUBED, T. E. Group contribution method to predict critical temperature and pressure of hydrocarbons. **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, v. 25, p.139-142, 1986.

JASTORFF, B.; STORMANN, R.; RANKE, J.; MOLTER, K.; STOCK, F.; OBERHEITMANN, B.; HOFFMANN, W.; HOFFMANN, J.; NUCHTER, M.; ONDRUSCHKA, B.; FILSER, J. How

hazardous are ionic liquids? Structure–activity relationships and biological testing as important elements for sustainability evaluation. **Green Chem.**, v. 5, p. 136-142, 2003.

JI, W. R.; LEMPE, D. A. Density improvement of the SRK equation of state. **Fluid Phase Equilib.**, v. 130, p. 49-63, 1997.

JOBACK, K. G.; REID, R. C. Estimation of pure component properties from group contributions. **Chem. Eng. Commun.**, v.57, p. 233, 1983.

KATO, R.; GMEHLING, J. Measurement and correlation of vapor-liquid equilibria of binary systems containing the ionic liquids [emim] [(CF<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N], [bmim] [(CF<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N], [mmim] [(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>] and oxygenated organic compounds respectively water. **Fluid Phase Equilib.**, v. 231, p. 38-43, 2005.

KATO, R.; GMEHLING, J. Systems with ionic liquids: Measurement of VLE and  $\gamma_{\infty}$  data and prediction of their thermodynamic behavior using original UNIFAC, mod. UNIFAC (Do) and COSMO-RS (OI). **J. Chem. Thermodyn.**, v. 37, p. 603-619, 2005.

KIM, Y. S.; CHOI, W. Y.; JANG, J. H.; YOO, K. P.; LEE, C. S. Solubility measurement and prediction of carbon dioxide in ionic liquids. **Fluid Phase Equilib.**, v. 228, p. 439-445, 2005.

KINSLER, L. E; FREY, A R; SANDERS, J. V. Fundamentals of acoustics. New York: John Wiley & Sons, 1982.

KLINCEWICZ, K. M.; REID, R. C. Estimation of critical properties with group contribution methods. **AIChE J.**, v. 30, p. 137-142, 1984.

KNOTTS, T. A.; WILDING, W. V.; OSCARSON, J. L.; ROWLEY, R. L. Use of the DIPPR database for development of QSPR correlations: surface tension. **J. Chem. Eng. Data**, v. 46, p. 1007-1012, 2001.

KONDAGESKI, Jonas Heitor. Calibração de modelo de qualidade da água para rio utilizando algoritmo genético. 2008. 143 f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2008.

KROON, M. C.; SHARIATI, A.; COSTANTINI, M.; SPRONSEN, J. WITKAMP, G. J.; SHELDON, R. A.; PETERS, C. J. High-pressure phase behavior of systems with ionic liquids: Part V. The binary system carbon dioxide + 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate. **J. Chem. Eng. Data** v. 50, p. 173-176, 2005.

LINGUITO, Stephen L. The room temperature ionic-liquid based synthesis and characterization of polyoxomolybdate compounds. 2011. 62 f. Dissertação (Mestrado) - The State University Of New Jersey, New Jersey, 2011.

LUKASIK, R. B.; MATKOWSKA, D.; LUKASIK, E.; TUKASIK, B.; HOFMAN, T. Isothermal vapour-liquid equilibria in the binary and ternary systems consisting of an ionic liquid, 1-propanol and CO<sub>2</sub>. **Fluid Phase Equilib.**, v. 293, p. 168-174, 2010.

LYDERSEN, A. L. Estimation of critical properties of organic compounds. Coll. Eng. Univ. Wisconsin, Engineering Experimental Station, Madison, 1955.

MAGOULAS, K; TASSIOS, D. Thermophysical properties of n-alkanes from C1 to C20 and their prediction for higher ones. **Fluid Phase Equilib.**, v. 56, p. 119-140, 1990.

MAKOWSKA, A.; DYONIZIAK, E.; SIPORSKA, A; SZYDLOWSKI, J. Miscibility of ionic liquids with polyhydric alcohols. **J. Phys. Chem. B**, v.114, p. 2504-2508, 2010.

MELHEM, G. A.; SAINI, R.; GOODWIN, B. M. A Modified Peng Robinson equation of state. **Fluid Phase Equilib.**, v.47, p. 189-237, 1989.

MOLLERUP, J. A note on the excess Gibbs energy models, equations of state and local composition concept. **Fluid Phase Equilib.**, v.7, p.121-138, 1981.

NANNOOLAL, Y.; RAREY, J.; RAMJUGERNATH, D. Estimation of pure component properties. Part 2. Estimation of critical property data by group contribution. **Fluid Phase Equilib.**, v. 252, p. 1-27, 2007.

NELSON, M. M.; ILLINGWORTH, W. T. A practical guide to neural nets. Massachusetts: Addison-Wesley, 1994. 328 p.

NGO, H.L; LeCOMPTE, K.; HARGENS, L.; McEWEN, A. B. Thermal properties of imidazolium ionic liquids. **Thermochim. Acta**, v. 357-358, p. 97-10, 2003.

PANAGIOTOPoulos, A. Z.; REID, R. C. High-pressure phase equilibria in ternary fluid mixtures with a supercritical component. **Am. Chem. Soc. Div. Fuel Chem.**, v. 30 (3), p. 46, 1985.

PAPAICONOMOU, N.; SALMINEN, J.; LEE, J. M.; PRAUSNITZ, J. M. Physicochemical properties of hydrophobic ionic liquids containing 1-octylpyridinium, 1-octyl-2-methylpyridinium, or 1-octyl-4-methylpyridinium cations. **J. Chem. Eng. Data**, v.52, p. 833-840, 2007.

PARTINGTON, J. R. Fundamental Principles and Properties of Gases. UK: Longmans Publishers: Harlow, 1949.

PATEL, N. C.; TEJA, A. S. A new group of state for fluids and fluid mixtures. **Chem. Eng. Sci.**, v.37 (3), p. 463-473, 1982,

PENG, D.Y.; ROBINSON, D. B. A new two-constant equation of state. **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, v. 15, p. 59-64, 1976.

PENELOUX, A.; RAUZY, E.; FREZE, R. A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes. **Fluid Phase Equilib.**, v. 8, p. 7-23, 1982.

Prausnitz J. M. Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria. New Jersey, Prentice-hall Inc, 1969. 523 p.

RANKE, J.; MÖLTER, K.; STOCK, F.; BOTTIN-WEBER, U.; POCZOBUTT, J.; HOFFMANN, J.; ONDRUSCHKA, B.; FILSER, J.; JASTORFF, B. Biological effects of imidazolium ionic liquids with varying chain lengths in acute *Vibrio fischeri* and WST-1 cell viability assays. **Ecotoxicol. Environ. Saf.**, v.58, p. 396–404, 2004.

RANKE, J.; STOLTE, S.; STORMANN, R.; ARNING, J.; JASTORFF, B. Design of sustainable chemical products the example of ionic liquids. **Chem. Rev.**, v.107, p. 2183-2206, 2007.

REBELO, L. P.; CANONGIA, J. N.; ESPERANÇA, J. M.; FILIPE, E. On the critical temperature, normal boiling point, and vapor pressure of ionic liquids. **J. Phys. Chem. B**, v. 109 (13), p. 6040-6043, 2005.

REDLICH, O.; KWONG, J. N. S. On the thermodynamics of solutions V. **Chem. Rev.**, v. 44, p. 233-244, 1949.

REN, W.; SENSENICH, B.; SCURTO, A. M. High-pressure phase equilibria of {carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) + n-alkyl-imidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) amide} ionic liquids. **J. Chem. Thermodyn.**, v.42, p. 305-311, 2010.

RIAzi, M. R.; MANSOORI, G. A. Use of the velocity of sound in predicting the pvt relations. **Fluid Phase Equilib.**, v. 90, p. 251-264, 1993.

RICE, P.; NIKHELI, A. Isothermal vapour-liquid equilibrium data for the systems n-pentane with n-hexane, n-octane and n-decane. **Fluid Phase Equilib.**, v. 107, p. 257-267, 1995.

RODRIGUES, Fábio. Espectroscopia Raman de líquidos iônicos imidazólicos: interações interiônicas, organização estrutural e efeitos de micro-ambiente. 2010. 173 f. Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010.

RUZICKA, V.; DOMALSKI, E. Estimation of the heat capacities of organic liquids as a function of temperature using group additivity.I.hydrocarbon compounds. **J. Phys. Chem. Ref. Data**, v. 22, p. 597-618, 1993.

SAVAGE, P. E.; LI, R.; SANTINI, J. R. Methane to methanol in supercritical water. **J. Supercrit. Fluids**, v. 7 (2), p. 135-144, 1994.

SEDDON, K. R.; STARK, A.; TORRES, M. J. Viscosity and density of 1-alkyl-3methylimidazolium ionic liquids in Clean Solvents: Alternative Media for Chemical Reactions and Processing. **J. Am. Chem. Soc.**, v. 819, p. 34-49, 2002.

SHABANI, M. R.; RIAZI, M. R.; SHABAN, H. I. Use of velocity of sound in predicting thermodynamic properties of dense fluids from cubic equations of state. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 76, p. 281-289, 1998.

SHARIATI, A.; PETERS, C. J. High-pressure phase behavior of systems with ionic liquids Part III. The binary system carbon dioxide + 1-hexyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate. **J. Supercrit. Fluids**, v. 30, p. 139-144, 2004.

SMITH, J. M.; NESS, H. C. Van; ABBOTT, M. M. Introdução a termodinâmica da engenharia química. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2000.

SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. **Chem. Eng. Sci.**, v. 27, p. 1197-1203, 1972.

SPEARS, W. The Role of Mutation and Recombination Evolutionary Algorithms, Universidade George Mason. 1998. 240 p. Tese (Doutorado).

SUDHIR, N. V. K.; AKI, B. R. M.; SAURER, E. M.; BRENNCKE, J. F. High-pressure phase behavior of carbon dioxide with imidazolium based ionic liquids. **J. Phys. Chem. B.**, v. 108, p. 20355-20365, 2004.

TAGUCHI, R.; MACHIDA, H.; SATO, Y.; SMITH, R. L. High-pressure densities of 1-alkyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphates and 1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborates at temperatures from (313 to 473) K and at pressures up to 200 MPa. **J. Chem. Eng. Data**, v. 54, p. 22-27, 2009.

TOCHIGI, K.; OCHI, K.; KOJIMA, K. Prediction of high-pressure vapor-liquid equilibria for systems containing polar substances using cubic-perturbed equation of state and ASOG. Proceeding of the world congress III of Chemical Engineering, Tokyo, 1986, v.2, p.160-163.

TOMÉ, L. I. N.; CARVALHO, P. J.; FREIRE, M. G.; MARRUCHO, I. M.; FONSECA, I. M. A.; FERREIRA, A. G. M.; COUTINHO, J. A. P.; GARDAS, R. L. Measurements and correlation of high-pressure densities of imidazolium- based ionic liquids. **J. Chem. Eng. Data**, v. 53, p. 1914-1921, 2008.

TUNDO, P.; ANASTAS, P.; BLACK, D. StC.; BREEN, J.; COLLINS, T.; MEMOLI, S.; MIYAMOTO, J.; POLYAKOFF, M.; TUMAS, W. Synthetic pathways and processes in green chemistry. Introductory overview. **Pure Appl. Chem.**, v. 72, p. 1207-1228, 2000.

VALDERRAMA, J. O. The state of the cubic equations of state. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 42, p. 1603-1618, 2003.

VALDERRAMA, J. O.; ALVAREZ, V. H. A new group contribution method based on equation of state parameters to evaluate the critical properties of simple and complex molecules. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 84, p. 431-446, 2006.

VALDERRAMA, J. O.; REÁTEGUI, A.; ROJAS, R. Density of ionic liquids using group contribution and artificial neural networks. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 48, p. 3254-3259, 2009.

VALDERRAMA, J. O.; ROJAS, R. E. Critical properties of ionic liquids. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 48, p. 6890-6900, 2009.

VENTURA, S. P. M.; MARQUES, C. S.; ROSATELLA, A. A.; AFONSO, C. A. M.; GONÇALVES, F.; COUTINHO, J. A. P. Toxicity assessment of various ionic liquid families towards *Vibrio fischeri* marine bacteria. **Ecotox. Env. Saf.**, v. 76, p. 162-168, 2012.

van der WAALS, J. D. Over de continuiteit van den gas en Vloeistof Toestand. Leiden, 1873.

WASSERSCHEID, P.; KEIM, W. Ionic liquids - new “solutions” for transition metal catalysis. **Angew. Chem. Int.**, v. 39, p. 3772-3789, 2000.

WELTON, T. Room-temperature ionic liquids. Solvents for synthesis and catalysis. **Chem. Rev.**, v. 99, p. 2071-2083, 1999.

WILKES, J. S. Ionic Liquids in Perspective: The Past with an Eye Toward the Industrial Future in Ionic Liquids: Industrial Applications to Green Chemistry. Washington: R. D. Rogers And K. R. Seddon, 2002. 214 p.

YE, C., LIU, W., CHEN, Y., YU, L. Room-temperature ionic liquids: a novel versatile lubricant. **Chem. Commun.**, p. 2244-2245, 2001.

ZAMARRENÓ, J. M.; VEGA, P. State space neural network. Properties and application. **Int. J. Neural Network**, v. 11, p. 1099-1112, 1998.

NIST- National Institute of Standards and Technology, Disponível em: <[www.nist.gov](http://www.nist.gov)>. Acesso em 13 de maio de 2011a.

VISION2020- Chemical Industry Vision 2020 Technology Partnership, Disponível em: <[www.chemicalvision2020.org](http://www.chemicalvision2020.org)>. Acesso em 12 de abril de 2011a.

*Software Phase Equilibria for Windows v.2.9.9a PE.*



## ANEXO I

Nesta seção serão apresentados os dados de velocidade do som, densidade, razão entre as capacidades caloríficas isobárica e isocórica, fatores de compressibilidade isotérmica e de expansividade térmica dos líquidos iônicos utilizados nessa dissertação.

Tabela I.1- Dados de velocidade do som calculados para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>u<sub>exp</sub> (m/s)</b>								
0,1	1614,4	1603,6	1583,7	1564,5	1546,3	1511,8	1480,5	1451,3
2,5	1621,4	1610,8	1591,0	1571,7	1554,1	1519,6	1488,6	1459,5
5,0	1628,5	1618,0	1598,4	1579,2	1561,7	1527,5	1496,8	1468,1
7,5	1635,5	1625,1	1605,7	1586,7	1569,3	1535,5	1505,0	1476,5
10,0	1642,6	1632,2	1613,0	1594,1	1577,0	1543,4	1513,2	1485,0
15,0	1656,4	1646,3	1627,4	1608,8	1592,0	1559,0	1529,3	1501,7
20,0	1670,1	1660,2	1641,7	1623,3	1606,9	1574,3	1545,2	1518,2
25,0	1683,6	1674,0	1655,7	1637,6	1621,7	1589,6	1561,0	1534,4
30,0	1697,3	1687,5	1669,6	1651,8	1636,1	1604,6	1576,6	1550,4
35,0	1710,5	1701,0	1683,3	1665,8	1650,5	1619,5	1591,9	1566,3

Tabela I.2- Dados de densidade experimental para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

(Fonte: TOMÉ et al., 2008)

p (MPa)	T(K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>								
0,1	1244,3	1240,8	1233,1	1225,7	1218,3	1204,2	1190,1	1176,6
2,5	1245,2	1241,6	1234,0	1226,9	1219,2	1205,3	1191,3	11780,0
5,0	1246,3	1242,7	1235,1	1228,0	1220,4	1206,6	1192,6	1179,3
7,5	1247,4	1243,8	1236,2	1229,2	1221,6	1207,8	1193,9	1180,7
10,0	1248,4	1244,9	1237,3	1230,3	1222,7	1209,0	1195,2	1182,0
15,0	1250,6	1247,0	1239,5	1232,6	1225,0	1211,4	1197,7	1184,6
20,0	1252,7	1249,1	1241,6	1234,8	1227,2	1213,8	1200,2	1187,2
25,0	1254,8	1251,1	1243,7	1237,0	1229,3	1216,1	1202,6	1189,7
30,0	1256,6	1253,2	1245,8	1239,1	1231,5	1218,4	1204,9	1192,2
35,0	1258,70	1255,2	1247,9	1241,2	1233,6	1220,6	1207,3	1194,6

Tabela I.3- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
	$c_p/c_v$							
0,1	1,157	1,157	1,156	1,156	1,155	1,154	1,152	1,150
2,5	1,157	1,157	1,156	1,156	1,155	1,154	1,152	1,150
5,0	1,157	1,157	1,156	1,156	1,155	1,154	1,152	1,151
7,5	1,157	1,156	1,156	1,156	1,155	1,154	1,153	1,151
10,0	1,157	1,156	1,156	1,156	1,155	1,154	1,153	1,152
15,0	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,155	1,154	1,152
20,0	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,155	1,154	1,153
25,0	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,155	1,154
30,0	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,156	1,155
35,0	1,156	1,156	1,156	1,157	1,157	1,157	1,156	1,156

Tabela I.4- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
	$k_k \cdot 10^{10} (\text{Pa}^{-1})$							
0,1	3,567	3,625	3,738	3,852	3,964	4,191	4,416	4,640
2,5	3,533	3,590	3,701	3,813	3,922	4,145	4,364	4,585
5,0	3,499	3,555	3,663	3,773	3,881	4,098	4,313	4,527
7,5	3,466	3,520	3,627	3,734	3,840	4,052	4,262	4,472
10,0	3,433	3,487	3,591	3,697	3,799	4,008	4,213	4,418
15,0	3,370	3,421	3,522	3,623	3,722	3,922	4,118	4,313
20,0	3,309	3,358	3,455	3,553	3,647	3,839	4,027	4,214
25,0	3,250	3,297	3,391	3,485	3,576	3,761	3,941	4,120
30,0	3,193	3,239	3,329	3,420	3,507	3,685	3,858	4,030
35,0	3,139	3,183	3,270	3,358	3,442	3,613	3,779	3,944

Tabela I.5- Dados de expansividade térmica para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
	$k_a \cdot 10^4$ (K <sup>-1</sup> )							
0,1	5,919	5,916	5,905	5,896	5,885	5,866	5,844	5,822
2,5	5,891	5,888	5,877	5,869	5,857	5,839	5,817	5,796
5,0	5,864	5,860	5,850	5,841	5,830	5,812	5,790	5,769
7,5	5,836	5,833	5,822	5,814	5,803	5,785	5,764	5,743
10,0	5,809	5,806	5,796	5,788	5,776	5,759	5,738	5,718
15,0	5,758	5,754	5,744	5,736	5,725	5,708	5,688	5,668
20,0	5,707	5,704	5,694	5,687	5,676	5,660	5,641	5,622
25,0	5,659	5,655	5,646	5,640	5,628	5,614	5,595	5,577
30,0	5,611	5,609	5,600	5,594	5,583	5,569	5,551	5,534
35,0	5,567	5,564	5,556	5,550	5,539	5,526	5,510	5,493

Tabela I.6- Dados de velocidade do som calculados para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
	$u_{exp}$ (m/s)						
0,1	1214,2	1197,2	1179,8	1170,5	1146,6	1136,1	1064,6
1,0	1217,8	1200,5	1182,4	1172,0	1148,6	1137,8	1066,5
2,0	1221,8	1204,0	1185,3	1173,7	1150,6	1139,6	1068,5
3,0	1225,8	1207,7	1188,1	1175,3	1152,6	1141,4	1070,6
4,0	1229,7	1211,2	1191,0	1176,9	1154,6	1143,2	1072,6
5,0	1233,5	1214,7	1193,7	1178,5	1156,6	1144,9	1074,6
7,5	1243,3	1223,6	1200,7	1182,6	1161,6	1149,4	1079,7
10,0	1252,7	1232,1	1207,5	1186,4	1166,4	1153,5	1084,6
15,0	1274,5	1252,2	1223,9	1197,1	1178,9	1164,9	1096,7
20,0	1288,9	1265,1	1233,5	1201,5	1185,1	1170,0	1103,3
25,0	1306,3	1280,8	1246,1	1208,8	1194,2	1177,9	1112,3
30,0	1324,4	1297,5	1259,4	1216,9	1203,9	1186,7	1122,6

Tabela I.7- Dados de densidade experimental para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: GARDAS et al., 2007)

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )						
0,1	1514,9	1503,8	1493,0	1482,4	1472,0	1461,9	1424,0
1,0	1515,6	1504,5	1493,7	1483,1	1472,7	1462,7	1424,9
2,0	1516,3	1505,3	1494,5	1483,9	1473,5	1463,5	1425,9
3,0	1517,0	1506,0	1495,3	1484,7	1474,4	1464,4	1426,8
4,0	1517,7	1506,8	1496,0	1485,5	1475,2	1465,2	1427,8
5,0	1518,5	1507,5	1496,8	1486,3	1476,0	1466,1	1428,8
7,5	1520,3	1509,4	1498,8	1488,3	1478,1	1468,2	1431,2
10,0	1522,1	1511,3	1500,7	1490,4	1480,2	1470,4	1433,6
15,0	1525,7	1515,0	1504,6	1494,4	1484,3	1474,6	1438,5
20,0	1529,3	1518,7	1508,5	1498,4	1488,4	1478,9	1443,3
25,0	1532,9	1522,5	1512,4	1502,4	1492,5	1483,2	1448,1
30,0	1536,6	1526,2	1516,3	1506,5	1496,7	1487,5	1453,0

Tabela I.8- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
	$c_p / c_v$						
0,1	1,163	1,162	1,161	1,162	1,158	1,158	1,149
1,0	1,163	1,162	1,161	1,161	1,158	1,158	1,148
2,0	1,164	1,162	1,161	1,161	1,157	1,157	1,148
3,0	1,164	1,162	1,160	1,160	1,157	1,157	1,148
4,0	1,164	1,162	1,160	1,160	1,157	1,156	1,147
5,0	1,164	1,162	1,160	1,159	1,156	1,156	1,147
7,5	1,164	1,162	1,159	1,158	1,155	1,155	1,146
10,0	1,164	1,162	1,159	1,156	1,154	1,153	1,145
15,0	1,170	1,167	1,163	1,159	1,157	1,157	1,149
20,0	1,162	1,160	1,155	1,150	1,149	1,148	1,141
25,0	1,162	1,159	1,154	1,148	1,147	1,146	1,139
30,0	1,163	1,160	1,154	1,147	1,147	1,145	1,139

Tabela I.9- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
$k_k \cdot 10^{10} (\text{Pa}^{-1})$							
0,1	5,208	5,392	5,586	5,719	5,984	6,137	7,116
1,0	5,176	5,361	5,558	5,699	5,959	6,114	7,085
2,0	5,140	5,326	5,528	5,678	5,933	6,089	7,051
3,0	5,105	5,292	5,497	5,656	5,907	6,064	7,017
4,0	5,070	5,258	5,467	5,635	5,881	6,039	6,984
5,0	5,036	5,224	5,438	5,614	5,855	6,014	6,951
7,5	4,953	5,143	5,366	5,562	5,792	5,954	6,870
10,0	4,872	5,064	5,295	5,512	5,730	5,895	6,791
15,0	4,719	4,914	5,161	5,413	5,611	5,780	6,639
20,0	4,576	4,773	5,034	5,318	5,497	5,671	6,495
25,0	4,442	4,641	4,913	5,228	5,389	5,567	6,358
30,0	4,316	4,516	4,799	5,141	5,285	5,466	6,224

Tabela I.10- Dados de expansividade térmica para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
$k_a \cdot 10^4 (\text{K}^{-1})$							
0,1	6,934	6,934	6,934	6,934	6,934	6,934	6,934
1,0	6,917	6,917	6,917	6,917	6,917	6,917	6,917
2,0	6,895	6,895	6,895	6,895	6,895	6,895	6,895
3,0	6,874	6,874	6,874	6,874	6,874	6,874	6,874
4,0	6,851	6,851	6,851	6,851	6,851	6,851	6,851
5,0	6,828	6,828	6,828	6,828	6,828	6,828	6,828
7,5	6,777	6,777	6,777	6,777	6,777	6,777	6,777
10,0	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720
15,0	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720	6,720
20,0	6,501	6,501	6,501	6,501	6,501	6,501	6,501
25,0	6,396	6,396	6,396	6,396	6,396	6,396	6,396
30,0	6,331	6,331	6,331	6,331	6,331	6,331	6,331

Tabela I.11- Dados de velocidade do som experimental para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	u <sub>exp</sub> (m/s)					
0,1	1557,3	1545,4	1534,5	1524,1	1514,0	1503,2
0,5	1558,5	1546,6	1535,7	1525,3	1515,1	1504,4
1,0	1559,9	1548,0	1537,0	1526,8	1516,8	1506,1
3,0	1564,6	1553,8	1542,8	1532,7	1522,5	1512,1
5,0	1568,6	1559,6	1548,7	1538,5	1528,5	1518,2
10,0	1582,5	1573,5	1562,8	1552,6	1542,9	1532,8
15,0	1596,2	1587,1	1576,5	1566,5	1557,1	1547,4
20,0	1609,4	1600,4	1590,0	1580,2	1570,9	1561,4
25,0	1622,6	1613,6	1603,1	1593,6	1584,4	1575,1
30,0	1635,4	1626,4	1616,1	1606,4	1597,5	1588,7
35,0	1647,9	1639,1	1628,7	1619,2	1610,4	1601,8
40,0	1660,3	1651,5	1641,1	1632,0	1623,2	1614,4

Tabela I.12- Dados de densidade experimental para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	ρ (kg/m <sup>3</sup> )					
0,1	1205,1	1201,5	1198,0	1194,5	1191,0	1187,6
0,5	1205,2	1201,7	1198,2	1194,7	1191,2	1187,8
1,0	1205,5	1201,9	1198,4	1194,9	1191,4	1188,0
3,0	1206,4	1202,8	1199,3	1195,8	1192,4	1188,9
5,0	1207,3	1203,7	1200,2	1196,7	1193,3	1189,9
10,0	1209,5	1206,0	1202,5	1199,0	1195,6	1192,2
15,0	1211,7	1208,2	1204,7	1201,3	1197,8	1194,4
20,0	1213,9	1210,4	1206,9	1203,5	1200,1	1196,7
25,0	1216,0	1212,6	1209,1	1205,7	1202,3	1198,9
30,0	1218,2	1214,7	1211,3	1207,8	1204,5	1201,1
35,0	1220,3	1216,8	1213,4	1210,0	1206,6	1203,3
40,0	1222,4	1218,9	1215,5	1212,1	1208,8	1205,4

Tabela I.13- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	c <sub>p</sub> /c <sub>v</sub>					
0,1	1,158	1,156	1,153	1,150	1,147	1,144
0,5	1,158	1,155	1,153	1,150	1,147	1,144
1,0	1,159	1,155	1,153	1,150	1,147	1,144
3,0	1,158	1,155	1,152	1,150	1,147	1,144
5,0	1,158	1,155	1,152	1,150	1,148	1,144
10,0	1,157	1,155	1,152	1,150	1,147	1,144
15,0	1,157	1,154	1,151	1,149	1,147	1,145
20,0	1,156	1,154	1,152	1,150	1,147	1,145
25,0	1,155	1,153	1,151	1,149	1,147	1,145
30,0	1,155	1,153	1,151	1,149	1,147	1,144
35,0	1,154	1,153	1,151	1,149	1,147	1,144
40,0	1,154	1,152	1,150	1,149	1,147	1,145

Tabela I.14- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	k <sub>k</sub> .10 <sup>10</sup> (Pa <sup>-1</sup> )					
0,1	3,963	4,026	4,086	4,144	4,202	4,264
0,5	3,956	4,019	4,079	4,137	4,195	4,256
1,0	3,948	4,011	4,071	4,128	4,185	4,246
3,0	3,916	3,978	4,037	4,093	4,150	4,209
5,0	3,885	3,945	4,003	4,059	4,114	4,172
10,0	3,809	3,867	3,923	3,977	4,030	4,085
15,0	3,736	3,793	3,847	3,899	3,949	4,001
20,0	3,667	3,722	3,774	3,824	3,873	3,923
25,0	3,600	3,654	3,705	3,753	3,800	3,848
30,0	3,536	3,589	3,638	3,686	3,731	3,776
35,0	3,475	3,526	3,575	3,621	3,665	3,708
40,0	3,416	3,466	3,514	3,558	3,601	3,644

Tabela I.15- Dados de expansividade térmica para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	k <sub>a</sub> .10 <sup>4</sup> (K <sup>-1</sup> )					
0,1	5,940	5,903	5,867	5,829	5,792	5,754
0,5	5,935	5,899	5,862	5,825	5,78	5,749
1,0	5,929	5,893	5,856	5,819	5,781	5,743
3,0	5,881	5,869	5,832	5,796	5,758	5,721
5,0	5,822	5,845	5,809	5,773	5,736	5,699
10,0	5,765	5,788	5,753	5,718	5,682	5,646
15,0	5,710	5,732	5,699	5,665	5,631	5,596
20,0	5,655	5,678	5,646	5,614	5,582	5,549
25,0	5,602	5,626	5,595	5,565	5,534	5,503
30,0	5,551	5,574	5,546	5,518	5,489	5,460
35,0	5,500	5,524	5,498	5,472	5,445	5,417
40,0	5,450	5,476	5,451	5,427	5,402	5,377

Tabela I.16- Dados de velocidade do som experimental para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	u <sub>exp</sub> (m/s)					
0,1	1228,5	1217,5	1206,6	1195,8	1184,5	1173,3
0,5	1230,4	1218,8	1207,9	1197,1	1185,8	1174,6
1,0	1231,9	1220,8	1209,9	1198,6	1187,9	1176,7
3,0	1238,3	1227,4	1216,4	1205,7	1195,1	1183,9
5,0	1245,4	1234,5	1223,5	1212,7	1202,2	1191,0
10,0	1261,7	1250,7	1240,4	1229,7	1219,1	1208,6
15,0	1277,1	1266,8	1256,6	1245,9	1235,8	1225,3
20,0	1292,3	1282,1	1271,8	1261,8	1251,7	1241,7
25,0	1306,9	1296,4	1286,9	1276,7	1267,3	1257,3
30,0	1320,6	1310,8	1301,2	1291,6	1282,1	1272,2
35,0	1334,8	1325,0	1315,2	1305,6	1296,1	1286,7
40,0	1347,6	1338,3	1328,6	1319,5	1310,0	1301,1
45,0	1360,5	1351,0	1341,8	1332,7	1323,6	1314,7
50,0	1373,1	1363,7	1354,3	1345,7	1336,5	1328,1

Tabela I.17- Dados de densidade experimental para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )					
0,1	1434,7	1429,9	1425,2	1420,5	1415,8	1411,2
0,5	1435,0	1430,3	1425,5	1420,8	1416,2	1411,5
1,0	1435,4	1430,7	1425,9	1421,2	1416,6	1411,9
3,0	1437,1	1432,4	1427,6	1422,9	1418,2	1413,6
5,0	1438,9	1434,1	1429,3	1424,6	1419,9	1415,2
10,0	1443,1	1438,3	1433,5	1428,8	1424,1	1419,4
15,0	1447,5	1442,6	1437,8	1433,0	1428,3	1423,5
20,0	1451,8	1446,9	1442,1	1437,3	1432,5	1427,7
25,0	1456,2	1451,3	1446,4	1441,5	1436,7	1432,0
30,0	1460,6	1455,6	1450,7	1445,9	1441,0	1436,2
35,0	1465,0	1460,0	1455,1	1450,2	1445,3	1440,5
40,0	1469,4	1464,4	1459,5	1454,5	1449,6	1444,8
45,0	1473,9	1468,9	1463,9	1458,9	1454,0	1449,1
50,0	1478,4	1473,3	1468,3	1463,3	1458,4	1453,5

Tabela I.18- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	$c_p/c_v$					
0,1	1,141	1,145	1,149	1,154	1,158	1,163
0,5	1,140	1,145	1,150	1,154	1,158	1,163
1,0	1,140	1,145	1,150	1,154	1,157	1,163
3,0	1,140	1,145	1,149	1,154	1,157	1,161
5,0	1,140	1,143	1,148	1,153	1,157	1,161
10,0	1,137	1,143	1,147	1,151	1,155	1,160
15,0	1,136	1,140	1,145	1,150	1,153	1,158
20,0	1,135	1,139	1,143	1,147	1,153	1,156
25,0	1,133	1,138	1,141	1,146	1,150	1,154
30,0	1,132	1,136	1,141	1,145	1,149	1,153
35,0	1,130	1,134	1,139	1,143	1,147	1,152
40,0	1,129	1,133	1,138	1,142	1,146	1,149
45,0	1,128	1,132	1,135	1,140	1,145	1,149
50,0	1,126	1,131	1,135	1,139	1,143	1,148

Tabela I.19- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	k <sub>k</sub> .10 <sup>10</sup> (Pa <sup>-1</sup> )					
0,1	5,270	5,405	5,543	5,684	5,834	5,987
0,5	5,253	5,391	5,529	5,669	5,818	5,971
1,0	5,237	5,371	5,508	5,653	5,796	5,947
3,0	5,174	5,304	5,439	5,576	5,716	5,865
5,0	5,106	5,235	5,367	5,502	5,639	5,785
10,0	4,954	5,077	5,199	5,328	5,459	5,594
15,0	4,813	4,927	5,044	5,167	5,289	5,418
20,0	4,680	4,790	4,902	5,016	5,133	5,253
25,0	4,557	4,663	4,767	4,878	4,986	5,101
30,0	4,442	4,542	4,642	4,745	4,850	4,961
35,0	4,329	4,426	4,524	4,624	4,725	4,829
40,0	4,228	4,319	4,413	4,507	4,606	4,702
45,0	4,131	4,219	4,308	4,399	4,492E	4,586
50,0	4,037	4,123	4,210	4,296	4,387	4,475

Tabela I.20- Dados de expansividade térmica para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	k <sub>a</sub> .10 <sup>4</sup> (K <sup>-1</sup> )					
0,1	6,366	6,475	6,585	6,696	6,808	6,921
0,5	6,356	6,464	6,574	6,684	6,796	6,909
1,0	6,342	6,451	6,560	6,670	6,781	6,893
3,0	6,291	6,397	6,505	6,613	6,722	6,833
5,0	6,240	6,345	6,451	6,558	6,665	6,774
10,0	6,118	6,219	6,322	6,425	6,529	6,634
15,0	6,002	6,100	6,199	6,299	6,400	6,502
20,0	5,892	5,987	6,083	6,180	6,278	6,377
25,0	5,787	5,880	5,973	6,068	6,163	6,259
30,0	5,686	5,777	5,868	5,960	6,053	6,147
35,0	5,589	5,678	5,768	5,858	5,949	6,041
40,0	5,497	5,584	5,671	5,760	5,849	5,939
45,0	5,407	5,493	5,579	5,666	5,754	5,842
50,0	5,321	5,405	5,490	5,576	5,663	5,750

Tabela I.21- Dados de velocidade do som experimental para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>exp</sub> (m/s)</b>						
0,1	1422,1	1410,8	1399,6	1388,9	1378,6	1368,5
0,5	1423,3	1411,8	1400,8	1390,0	1379,7	1369,7
1,0	1424,6	1413,3	1402,2	1391,4	1381,2	1370,9
3,0	1430,0	1418,7	1407,6	1396,9	1386,5	1376,5
5,0	1435,3	1424,0	1413,1	1402,4	1392,0	1382,0
10,0	1448,4	1437,2	1426,3	1415,7	1405,6	1395,5
15,0	1461,2	1450,3	1439,5	1428,9	1418,8	1408,9
20,0	1473,8	1462,8	1452,2	1441,9	1431,7	1421,9
25,0	1486,2	1475,2	1464,7	1454,3	1444,3	1434,7
30,0	1498,4	1487,5	1477,0	1466,7	1456,8	1447,1
35,0	1510,2	1499,4	1489,0	1478,9	1469,0	1459,5
40,0	1521,8	1511,3	1500,9	1490,7	1480,9	1471,4
45,0	1533,2	1522,6	1512,4	1502,6	1492,6	1483,2

Tabela I.22- Dados de densidade experimental para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>						
0,1	1366,0	1361,9	1357,7	1353,6	1349,5	1345,3
0,5	1366,2	1362,1	1358,0	1353,8	1349,7	1345,6
1,0	1366,5	1362,4	1358,3	1354,1	1350,0	1345,9
3,0	1367,7	1363,5	1359,4	1355,3	1351,2	1347,1
5,0	1368,8	1364,7	1360,6	1356,5	1352,4	1348,3
10,0	1371,6	1367,5	1363,4	1359,4	1355,3	1351,3
15,0	1374,3	1370,3	1366,2	1362,2	1358,2	1354,2
20,0	1376,9	1373,0	1369,0	1365,0	1361,1	1357,1
25,0	1379,6	1375,6	1371,7	1367,8	1363,8	1359,9
30,0	1382,2	1378,2	1374,3	1370,5	1366,6	1362,7
35,0	1384,7	1380,8	1377,0	1373,1	1369,2	1365,4
40,0	1387,2	1383,4	1379,5	1375,7	1371,9	1368,1
45,0	1389,6	1385,8	1382,0	1378,3	1374,5	1370,7

Tabela I.23- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>						
0,1	1,154	1,154	1,154	1,152	1,152	1,152
0,5	1,154	1,154	1,153	1,152	1,152	1,152
1,0	1,154	1,153	1,153	1,152	1,152	1,152
3,0	1,154	1,153	1,153	1,152	1,152	1,152
5,0	1,153	1,153	1,153	1,151	1,151	1,151
10,0	1,153	1,153	1,151	1,151	1,151	1,151
15,0	1,152	1,151	1,151	1,150	1,149	1,150
20,0	1,151	1,150	1,149	1,149	1,149	1,149
25,0	1,150	1,150	1,149	1,149	1,149	1,149
30,0	1,149	1,148	1,149	1,147	1,147	1,148
35,0	1,148	1,148	1,147	1,147	1,147	1,146
40,0	1,147	1,147	1,147	1,147	1,146	1,146
45,0	1,147	1,147	1,145	1,145	1,145	1,145

Tabela I.24- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>k<sub>k</sub>.10<sup>10</sup> (Pa<sup>-1</sup>)</b>						
0,1	4,179	4,256	4,335	4,414	4,493	4,573
0,5	4,171	4,249	4,327	4,406	4,485	4,564
1,0	4,162	4,239	4,317	4,396	4,474	4,554
3,0	4,126	4,202	4,279	4,356	4,434	4,512
5,0	4,091	4,166	4,241	4,317	4,394	4,471
10,0	4,006	4,078	4,151	4,224	4,297	4,372
15,0	3,925	3,994	4,064	4,135	4,206	4,277
20,0	3,848	3,915	3,982	4,050	4,119	4,188
25,0	3,774	3,839	3,904	3,970	4,036	4,102
30,0	3,703	3,766	3,829	3,893	3,957	4,021
35,0	3,636	3,697	3,758	3,819	3,881	3,943
40,0	3,572	3,630	3,689	3,749	3,809	3,869
45,0	3,510	3,567	3,624	3,681	3,740	3,798

Tabela I.25- Dados de expansividade térmica para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: AZEVEDO et al., 2005)

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
	k <sub>a</sub> .10 <sup>4</sup> (K <sup>-1</sup> )					
0,1	6,069	6,081	6,093	6,106	6,118	6,130
0,5	6,063	6,075	6,087	6,099	6,112	6,124
1,0	6,055	6,067	6,079	6,091	6,104	6,116
3,0	6,024	6,036	6,048	6,060	6,072	6,084
5,0	5,994	6,006	6,018	6,029	6,041	6,053
10,0	5,921	5,932	5,943	5,955	5,966	5,978
15,0	5,850	5,861	5,872	5,883	5,894	5,904
20,0	5,782	5,792	5,803	5,813	5,823	5,834
25,0	5,716	5,726	5,736	5,746	5,756	5,766
30,0	5,653	5,662	5,672	5,681	5,691	5,700
35,0	5,592	5,601	5,610	5,618	5,627	5,636
40,0	5,533	5,541	5,549	5,558	5,566	5,574
45,0	5,475	5,483	5,491	5,499	5,507	5,515

Tabela I.26- Dados de velocidade do som experimental para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006)

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
	u <sub>exp</sub> (m/s)						
0,1	1232,9	1222,6	1212,3	1202,0	1191,7	1181,4	1160,7
1,83	1238,4	1228,1	1217,8	1207,5	1197,2	1186,9	1166,2
10,02	1264,5	1254,2	1243,9	1233,6	1223,2	1212,9	1192,3
14,98	1280,3	1270,0	1259,7	1249,3	1239,0	1228,7	1208,1
19,75	1295,5	1285,2	1274,8	1264,5	1254,2	1243,9	1223,3
25,86	1314,9	1304,6	1294,3	1284,0	1273,7	1263,4	1242,8
31,48	1332,8	1322,5	1312,2	1301,9	1291,6	1281,3	1260,6
37,77	1352,8	1342,5	1332,2	1321,9	1311,6	1301,3	1280,7

Tabela I.27- Dados de densidade experimental para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006)

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b><math>\rho</math> (kg/m<sup>3</sup>)</b>							
0,1	1404,5	1399,9	1395,3	1390,6	1385,8	1381,5	1371,0
1,83	1405,7	1401,2	1396,6	1391,9	1387,1	1382,7	1372,5
10,02	1411,9	1407,3	1402,7	1398,0	1393,3	1388,9	1379,1
14,98	1415,5	1410,8	1406,3	1401,6	1396,9	1392,6	1382,9
19,75	1418,8	1414,3	1409,7	1405,0	1400,3	1396,0	1386,5
25,86	1422,9	1418,5	1413,8	1409,2	1404,6	1400,2	1391,0
31,48	1426,6	1422,2	1417,6	1413,0	1408,4	1404,1	1395,0
37,77	1430,6	1426,3	1421,7	1417,1	1412,7	1408,3	1399,4

Tabela I.28- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b><math>c_p/c_v</math></b>							
0,1	1,119	1,129	1,139	1,149	1,157	1,168	1,174
1,83	1,120	1,130	1,140	1,149	1,157	1,167	1,173
10,02	1,132	1,138	1,145	1,151	1,156	1,163	1,164
14,98	1,139	1,143	1,148	1,152	1,155	1,160	1,160
19,75	1,144	1,146	1,150	1,153	1,154	1,159	1,157
25,86	1,149	1,150	1,152	1,153	1,153	1,156	1,153
31,48	1,153	1,152	1,152	1,152	1,152	1,153	1,150
37,77	1,154	1,152	1,152	1,151	1,150	1,152	1,149

Tabela I.29- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006)

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b><math>k_k \cdot 10^{10} (\text{Pa}^{-1})</math></b>							
0,1	5,554	5,503	5,450	5,451	5,530	5,527	5,997
1,83	5,485	5,445	5,401	5,408	5,486	5,485	5,940
10,02	5,181	5,190	5,182	5,210	5,290	5,297	5,681
14,98	5,014	5,047	5,058	5,098	5,179	5,189	5,536
19,75	4,864	4,917	4,944	4,995	5,076	5,090	5,404
25,86	4,684	4,761	4,807	4,869	4,950	4,969	5,243
31,48	4,530	4,626	4,687	4,759	4,840	4,862	5,104
37,77	4,370	4,484	4,560	4,642	4,723	4,749	4,958

Tabela I.30- Dados de expansividade térmica para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
 (Fonte: ESPERANÇA et al., 2006)

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
	$k_a \cdot 10^4$ (K <sup>-1</sup> )						
0,1	6,266	6,420	6,573	6,726	6,879	7,032	7,339
1,83	6,260	6,407	6,553	6,699	6,845	6,991	7,284
10,02	6,348	6,436	6,525	6,613	6,702	6,790	6,967
14,98	6,383	6,442	6,502	6,561	6,621	6,680	6,799
19,75	6,390	6,430	6,470	6,510	6,549	6,589	6,669
25,86	6,383	6,401	6,418	6,436	6,454	6,472	6,507
31,48	6,354	6,356	6,358	6,360	6,361	6,363	6,366
37,77	6,268	6,267	6,267	6,266	6,266	6,265	6,265

Tabela I.31- Dados de velocidade do som para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
	$u_{exp}$ (m/s)				
0,1	1555,3	1538,0	1528,9	1502,3	1487,5
10,0	1563,8	1548,2	1538,8	1512,8	1496,0
20,0	1585,0	1570,6	1552,5	1530,0	1509,0
30,0	1600,4	1592,8	1566,3	1547,2	1522,2
40,0	1624,0	1614,6	1582,0	1566,1	1537,3
50,0	1644,4	1637,0	1597,2	1584,3	1551,6

Tabela I.32- Dados de densidade experimental para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].  
 (Fonte: TAGUCHI et al., 2009)

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )				
0,1	1153,4	1135,0	1131,5	1127,0	1121,0
10,0	1147,9	1139,0	1135,1	1131,9	1126,0
20,0	1152,3	1144,0	1139,8	1136,7	1131,0
30,0	1156,7	1149,0	1144,6	1141,5	1136,0
40,0	1161,5	1154,0	1149,5	1146,5	1141,0
50,0	1165,3	1158,0	1154,0	1151,1	1146,0

Tabela I.33- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
	<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>				
0,1	1,155	1,156	1,155	1,151	1,151
10,0	1,149	1,151	1,150	1,146	1,146
20,0	1,143	1,144	1,143	1,140	1,139
30,0	1,138	1,138	1,137	1,135	1,133
40,0	1,136	1,136	1,135	1,133	1,131
50,0	1,134	1,133	1,132	1,131	1,128

Tabela I.34- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
	<b>k<sub>k</sub> .10<sup>10</sup> (Pa<sup>-1</sup>)</b>				
0,1	4,138	4,306	4,368	4,527	4,641
10,0	4,093	4,215	4,279	4,426	4,547
20,0	3,950	4,093	4,162	4,286	4,423
30,0	3,840	3,977	4,050	4,154	4,305
40,0	3,710	3,868	3,944	4,030	4,194
50,0	3,599	3,765	3,844	3,913	4,087

Tabela I.35- Dados de expansividade térmica para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
	<b>k<sub>a</sub> .10<sup>4</sup> (K<sup>-1</sup>)</b>				
0,1	6,022	6,022	6,022	6,022	6,022
10,0	5,881	5,881	5,881	5,881	5,881
20,0	5,695	5,695	5,695	5,695	5,695
30,0	5,527	5,527	5,527	5,527	5,527
40,0	5,424	5,424	5,424	5,424	5,424
50,0	5,309	5,309	5,309	5,309	5,309

Tabela I.36- Dados de velocidade do som para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
<b>u<sub>exp</sub> (m/s)</b>								
0,1	1214,0	1197,3	1180,2	1161,9	1143,7	1125,0	1107,3	1090,7
2,5	1221,8	1205,8	1189,4	1171,6	1154,3	1136,5	1119,0	1103,2
5,03	1230,3	1214,9	1199,4	1182,0	1165,7	1148,8	1131,6	1116,0
10,01	1246,8	1232,5	1218,8	1202,8	1187,8	1171,0	1156,1	1141,5
15,02	1263,1	1250,3	1237,5	1222,8	1209,2	1194,1	1179,8	1165,7
20,01	1279,8	1267,9	1256,6	1242,7	1230,4	1216,0	1202,8	1190,4
25,05	1296,1	1286,1	1275,1	1262,6	1251,7	1238,4	1225,8	1214,4
30,01	1312,2	1302,6	1293,6	1281,9	1272,3	1259,7	1248,2	1237,9
34,99	1327,5	1319,3	1311,7	1300,8	1292,0	1281,2	1270,3	1260,5
40,04	1343,6	1336,8	1329,6	1320,6	1312,6	1301,8	1292,1	1283,3

Tabela I.37- Dados de densidade experimental para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].  
(Fonte: ESPERANÇA et al., 2008)

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>								
0,1	1372,3	1367,9	1363,1	1358,8	1354,2	1350,2	1345,7	1341,0
2,5	1374,1	1369,7	1365,0	1360,7	1356,2	1352,3	1347,8	1343,2
5,03	1376,0	1371,7	1367,0	1362,7	1358,3	1354,5	1350,0	1345,4
10,01	1379,6	1375,3	1370,8	1366,6	1362,3	1358,4	1354,2	1349,7
15,02	1383,1	1378,9	1374,4	1370,3	1366,1	1362,4	1358,2	1353,7
20,01	1386,6	1382,4	1378,0	1373,9	1369,8	1366,1	1362,0	1357,7
25,05	1389,9	1385,9	1381,4	1377,4	1373,4	1369,8	1365,7	1361,5
30,01	1393,2	1389,1	1384,8	1380,8	1376,9	1373,3	1369,3	1365,2
34,99	1396,3	1392,3	1388,1	1384,1	1380,2	1376,8	1372,8	1368,7
40,04	1399,4	1395,5	1391,2	1387,4	1383,5	1380,0	1376,1	1372,1

Tabela I.38- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
	<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>							
0,1	1,114	1,112	1,110	1,107	1,104	1,102	1,099	1,097
2,5	1,112	1,110	1,108	1,106	1,103	1,101	1,098	1,096
5,03	1,111	1,109	1,107	1,105	1,103	1,100	1,098	1,096
10,01	1,109	1,107	1,106	1,104	1,102	1,100	1,098	1,096
15,02	1,107	1,106	1,104	1,102	1,101	1,099	1,097	1,096
20,01	1,106	1,104	1,103	1,102	1,100	1,099	1,097	1,096
25,05	1,105	1,104	1,103	1,102	1,101	1,099	1,098	1,097
30,01	1,104	1,103	1,102	1,101	1,100	1,099	1,098	1,097
34,99	1,103	1,102	1,102	1,101	1,100	1,099	1,098	1,097
40,04	1,103	1,103	1,102	1,102	1,101	1,100	1,100	1,099

Tabela I.39- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
	<b>k<sub>k</sub>.10<sup>10</sup> (Pa<sup>-1</sup>)</b>							
0,1	5,510	5,671	5,845	6,034	6,235	6,447	6,662	6,875
2,5	5,424	5,576	5,739	5,918	6,105	6,304	6,506	6,706
5,03	5,336	5,478	5,632	5,799	5,975	6,161	6,350	6,537
10,01	5,171	5,298	5,432	5,580	5,734	5,899	6,064	6,228
15,02	5,016	5,127	5,246	5,376	5,512	5,656	5,802	5,948
20,01	4,871	4,969	5,073	5,188	5,307	5,435	5,564	5,692
25,05	4,733	4,819	4,911	5,011	5,116	5,229	5,343	5,456
30,01	4,605	4,680	4,760	4,849	4,941	5,041	5,142	5,243
34,99	4,484	4,549	4,619	4,697	4,778	4,866	4,955	5,045
40,04	4,367	4,424	4,484	4,552	4,623	4,702	4,781	4,860

Tabela I.40- Dados de expansividade térmica para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
	<b>k<sub>a</sub> .10<sup>4</sup> (K<sup>-1</sup>)</b>							
0,1	6,605	6,605	6,605	6,605	6,605	6,605	6,605	6,605
2,5	6,510	6,510	6,510	6,510	6,510	6,510	6,510	6,510
5,03	6,423	6,423	6,423	6,423	6,423	6,423	6,423	6,423
10,01	6,275	6,275	6,275	6,275	6,275	6,275	6,275	6,275
15,02	6,138	6,138	6,138	6,138	6,138	6,138	6,138	6,138
20,01	6,020	6,020	6,020	6,020	6,020	6,020	6,020	6,020
25,05	5,922	5,922	5,922	5,922	5,922	5,922	5,922	5,922
30,01	5,821	5,821	5,821	5,821	5,821	5,821	5,821	5,821
34,99	5,725	5,725	5,725	5,725	5,725	5,725	5,725	5,725
40,04	5,664	5,664	5,664	5,664	5,664	5,664	5,664	5,664

Tabela I.41- Dados de velocidade do som para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
	<b>u<sub>exp</sub> (m/s)</b>				
0,1	1410,0	1386,6	1359,2	1330,1	1310,2
1,0	1424,3	1396,1	1366,1	1336,0	1314,5
2,0	1440,1	1406,7	1373,7	1342,6	1319,4
3,0	1455,8	1417,3	1381,2	1349,2	1324,3
4,0	1471,4	1427,6	1388,8	1355,7	1329,2
5,0	1486,9	1438,0	1396,3	1362,2	1334,1
10,0	1562,8	1489,4	1433,6	1394,7	1359,6

Tabela I.42- Dados de densidade experimental para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

(Fonte: GARDAS et al., 2007)

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
	<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>				
0,1	1290,6	1281,5	1272,7	1264,2	1256,1
1,0	1291,1	1282,0	1273,2	1264,8	1256,7
2,0	1291,7	1282,6	1273,9	1265,4	1257,3
3,0	1292,2	1283,1	1274,5	1266,0	1258,0
4,0	1292,7	1283,7	1275,0	1266,6	1258,6
5,0	1293,2	1284,3	1275,6	1267,3	1259,2
10,0	1295,8	1287,0	1278,5	1270,3	1262,0

Tabela I.43- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
	<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>				
0,1	1,158	1,156	1,153	1,149	1,147
1,0	1,160	1,157	1,153	1,149	1,147
2,0	1,162	1,158	1,154	1,149	1,147
3,0	1,164	1,159	1,154	1,150	1,147
4,0	1,167	1,160	1,155	1,150	1,147
5,0	1,169	1,161	1,155	1,150	1,147
10,0	1,181	1,167	1,158	1,152	1,147

Tabela I.44- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
	<b>k<sub>k</sub>.10<sup>10</sup> (Pa<sup>-1</sup>)</b>				
0,1	4,513	4,691	4,902	5,137	5,319
1,0	4,428	4,630	4,853	5,090	5,281
2,0	4,338	4,563	4,799	5,039	5,239
3,0	4,252	4,498	4,747	4,989	5,198
4,0	4,169	4,434	4,695	4,940	5,157
5,0	4,089	4,373	4,645	4,892	5,116
10,0	3,730	4,089	4,408	4,664	4,918

Tabela I.45- Dados de expansividade térmica para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
	<b>k<sub>a</sub>.10<sup>4</sup> (K<sup>-1</sup>)</b>				
0,1	6,383	6,383	6,383	6,383	6,383
1,0	6,358	6,358	6,358	6,358	6,358
2,0	6,335	6,335	6,335	6,335	6,335
3,0	6,311	6,311	6,311	6,311	6,311
4,0	6,286	6,286	6,286	6,286	6,286
5,0	6,263	6,263	6,263	6,263	6,263
10,0	6,161	6,161	6,161	6,161	6,161

Tabela I.46- Dados de velocidade do som para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>exp</sub> (m/s)</b>							
0,1	1583,1	1545,8	1515,0	1509,6	1495,1	1476,8	1462,8
1,0	1588,0	1551,5	1520,7	1515,8	1499,7	1483,3	1467,6
2,0	1593,4	1557,8	1527,0	1522,6	1504,9	1490,4	1472,9
3,0	1598,9	1564,0	1533,2	1529,4	1510,0	1497,6	1478,2
4,0	1604,4	1570,4	1539,6	1536,3	1515,2	1504,8	1483,6
5,0	1609,8	1576,5	1545,7	1543,0	1520,3	1511,8	1488,8
10,0	1636,9	1607,6	1576,7	1576,6	1545,9	1547,1	1515,1

Tabela I.47- Dados de densidade experimental para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

(Fonte: GARDAS et al., 2007)

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>							
0,1	1108,7	1104,0	1100,7	1096,8	1092,9	1089,5	1085,4
1,0	1109,1	1104,5	1101,1	1097,2	1093,4	1090,0	1085,9
2,0	1109,6	1105,0	1101,6	1097,7	1093,9	1090,5	1086,4
3,0	1110,0	1105,5	1102,1	1098,3	1094,4	1091,0	1087,0
4,0	1110,5	1106,0	1102,6	1098,8	1094,9	1091,5	1087,5
5,0	1110,9	1106,6	1103,1	1099,3	1095,4	1092,0	1088,0
10,0	1113,1	1109,1	1105,4	1101,9	1097,9	1094,6	1090,6

Tabela I.48- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>							
0,1	1,166	1,159	1,155	1,155	1,154	1,152	1,151
1,0	1,166	1,159	1,155	1,155	1,154	1,152	1,150
2,0	1,165	1,160	1,155	1,156	1,154	1,152	1,150
3,0	1,165	1,160	1,155	1,156	1,154	1,153	1,150
4,0	1,165	1,160	1,155	1,156	1,154	1,153	1,151
5,0	1,165	1,160	1,156	1,157	1,154	1,154	1,151
10,0	1,165	1,160	1,156	1,157	1,154	1,154	1,151

Tabela I.49- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
$k_k \cdot 10^{10} (\text{Pa}^{-1})$							
0,1	4,195	4,398	4,570	4,623	4,723	4,846	4,954
1,0	4,167	4,365	4,535	4,585	4,692	4,803	4,919
2,0	4,137	4,328	4,497	4,543	4,657	4,756	4,881
3,0	4,107	4,292	4,459	4,501	4,623	4,710	4,844
4,0	4,077	4,257	4,421	4,461	4,590	4,665	4,807
5,0	4,048	4,222	4,385	4,421	4,557	4,621	4,771
10,0	3,908	4,056	4,209	4,232	4,398	4,411	4,598

Tabela I.50- Dados de expansividade térmica para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
$k_a \cdot 10^4 (\text{K}^{-1})$							
0,1	6,300	6,300	6,300	6,300	6,300	6,300	6,300
1,0	6,279	6,279	6,279	6,279	6,279	6,279	6,279
2,0	6,256	6,256	6,256	6,256	6,256	6,256	6,256
3,0	6,234	6,234	6,234	6,234	6,234	6,234	6,234
4,0	6,214	6,214	6,214	6,214	6,214	6,214	6,214
5,0	6,191	6,191	6,191	6,191	6,191	6,191	6,191
10,0	6,094	6,094	6,094	6,094	6,094	6,094	6,094

Tabela I.51- Dados de velocidade do som para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
$u_{\text{exp}} (\text{m/s})$						
0,1	1381,6	1344,8	1300,4	1289,3	1278,4	1246,5
1,0	1389,1	1353,1	1331,6	1309,9	1289,3	1256,2
2,0	1397,9	1362,7	1341,9	1321,3	1301,5	1267,2
3,0	1406,6	1372,1	1352,0	1332,4	1313,6	1278,0
4,0	1415,0	1381,2	1361,8	1343,3	1325,5	1288,6
5,0	1423,5	1390,4	1371,8	1354,3	1337,4	1299,2
10,0	1465,2	1435,7	1420,2	1407,7	1395,4	1351,3

Tabela I.52- Dados de densidade experimental para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].  
 (Fonte: GARDAS et al., 2007)

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )					
0,1	1233,8	1225,3	1217,6	1209,1	1201,0	1193,6
1,0	1234,4	1225,9	1218,2	1209,7	1201,6	1194,3
2,0	1235,0	1226,5	1218,8	1210,3	1202,3	1195,0
3,0	1235,6	1227,1	1219,4	1211,0	1203,0	1195,7
4,0	1236,1	1227,7	1220,0	1211,6	1203,6	1196,3
5,0	1236,7	1228,3	1220,6	1212,2	1204,3	1197,1
10,0	1239,5	1231,1	1223,4	1215,1	1207,4	1200,3

Tabela I.53- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
	$c_p/c_v$					
0,1	1,145	1,141	1,134	1,134	1,134	1,130
1,0	1,146	1,141	1,139	1,137	1,135	1,131
2,0	1,147	1,143	1,141	1,139	1,137	1,132
3,0	1,148	1,144	1,142	1,141	1,139	1,134
4,0	1,149	1,145	1,143	1,142	1,141	1,135
5,0	1,149	1,146	1,144	1,143	1,142	1,136
10,0	1,153	1,150	1,150	1,150	1,150	1,143

Tabela I.54- Dados de compressibilidade isotérmica para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
	$k_k \cdot 10^{10}$ (Pa <sup>-1</sup> )					
0,1	4,864	5,147	5,508	5,643	5,778	6,091
1,0	4,810	5,085	5,275	5,480	5,685	5,999
2,0	4,752	5,017	5,199	5,392	5,584	5,901
3,0	4,696	4,951	5,125	5,306	5,487	5,806
4,0	4,641	4,887	5,053	5,223	5,394	5,713
5,0	4,587	4,824	4,983	5,143	5,303	5,624
10,0	4,334	4,533	4,661	4,776	4,891	5,214

Tabela I.55- Dados de expansividade térmica para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
	$k_a \cdot 10^4$ (K <sup>-1</sup> )					
0,1	6,370	6,370	6,370	6,370	6,370	6,370
1,0	6,345	6,345	6,345	6,345	6,345	6,345
2,0	6,330	6,330	6,330	6,330	6,330	6,330
3,0	6,312	6,312	6,312	6,312	6,312	6,312
4,0	6,287	6,287	6,287	6,287	6,287	6,287
5,0	6,268	6,268	6,268	6,268	6,268	6,268
10,0	6,170	6,170	6,170	6,170	6,170	6,170

Tabela I.56- Dados de velocidade do som para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
	$u_{exp}$ (m/s)					
0,1	1420,4	1413,4	1405,2	1395,5	1383,9	1370,1
1,0	1421,1	1414,2	1405,9	1396,1	1384,4	1370,5
2,0	1421,9	1414,9	1406,6	1396,7	1384,9	1370,7
3,0	1422,5	1415,5	1407,2	1397,2	1385,2	1370,9
4,0	1423,1	1416,1	1407,7	1397,6	1385,5	1370,9
5,0	1423,7	1416,7	1408,2	1398,0	1385,7	1371,0
10,0	1428,5	1421,0	1412,0	1401,2	1388,4	1373,1

Tabela I.57- Dados de densidade para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] (GARDAS & COUTINHO, 2007).

p (MPa)	T(K)					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )					
0,1	1478,3	1473,3	1468,5	1463,6	1458,8	1454,0
1,0	1479,1	1474,1	1469,2	1464,4	1459,5	1454,7
2,0	1479,9	1475,0	1470,1	1465,2	1460,4	1455,6
3,0	1480,8	1475,9	1471,0	1466,1	1461,3	1456,5
4,0	1481,7	1476,8	1471,8	1467,0	1462,1	1457,3
5,0	1482,6	1477,6	1472,7	1467,8	1463,0	1458,2
10,0	1487,0	1482,0	1477,1	1472,2	1467,3	1462,4

Tabela I.58- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>c<sub>p</sub>/c<sub>v</sub></b>						
0,1	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
1,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
2,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
3,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
4,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
5,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129
10,0	1,122	1,124	1,125	1,127	1,128	1,129

Tabela I.59- Dados de velocidade do som para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>]

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>exp</sub>(m/s)</b>					
0,1	1035,6	1009,3	992,9	987,2	991,7
1,0	1039,7	1013,1	996,5	990,8	995,3
2,0	1044,3	1017,5	1000,6	994,7	999,3
3,0	1048,9	1021,8	1004,8	998,8	1003,4
4,0	1053,6	1026,2	1009,0	1002,9	1007,6
5,0	1058,3	1030,7	1013,2	1007,1	1011,9
10,0	1082,6	1054,0	1035,8	1029,4	1034,7

Tabela I.60- Dados de densidade para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>] (GARDAS & COUTINHO, 2007).

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>ρ (kg/m<sup>3</sup>)</b>					
0,1	1322,0	1317,6	1313,2	1308,9	1304,6
1,0	1322,7	1318,3	1313,9	1309,6	1305,3
2,0	1323,5	1319,1	1314,7	1310,4	1306,1
3,0	1324,3	1319,9	1315,5	1311,1	1306,8
4,0	1325,0	1320,6	1316,3	1311,9	1307,6
5,0	1325,8	1321,4	1317,0	1312,7	1308,4
10,0	1329,8	1325,3	1320,9	1316,6	1312,2

Tabela I.61- Dados de razão entre capacidades caloríficas para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
	$c_p/c_v$				
0,1	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
1,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
2,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
3,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
4,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
5,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132
10,0	1,126	1,127	1,129	1,131	1,132

## ANEXO II

As constantes e variáveis de entrada utilizadas no algoritmo genético PIKAIA dessa dissertação estão descritas na Tabela II.1.

Tabela II.1- Valores das variáveis e constantes referentes ao AG PIKAIA.

<b>Constantes</b>	<b>Valor utilizado</b>
Comprimento do indivíduo	3
Número máximo de parâmetros ajustáveis	3
Número máximo da população	100
Número máximo de genes por segmento de cromossomo	5
<b>Variáveis de entrada</b>	
Número de indivíduos da população	100
Número de gerações no qual a solução é evoluída	500
Número de genes retidos na codificação do cromossomo	5
Probabilidade de cruzamento	0,85
Modo de mutação	2
Taxa inicial de mutação	0,005
Mínima taxa de mutação	0,0005
Máxima taxa de mutação	0,25
Plano de reprodução	1
Elitismo	1



## APÊNDICE A

### DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DA VELOCIDADE DO SOM EM TERMOS PVT

A velocidade do som em termos isentrópicos é expressa por:

$$u^2 = -\frac{V^2}{M} \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_S \quad (\text{A. 1})$$

Efetuando-se a derivada total da entropia em termos de temperatura e pressão, tem-se:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T dp \quad (\text{A. 2})$$

Assumindo-se S constante e dividindo-se por dT:

$$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_S = - \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \left( \frac{\partial p}{\partial S} \right)_T \quad (\text{A. 3})$$

A partir da Relação de Maxwell, tem-se:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T = - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (\text{A. 4})$$

Efetuando-se deduções sobre a entalpia e entropia tem termos de temperatura e pressão, chega-se:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = \frac{c_p}{T} \quad (\text{A.5})$$

Portanto,

$$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_S = \frac{c_p}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_p \quad (\text{A.6})$$

Efetuando-se a derivada total da entropia em termos de temperatura e volume molar, tem-se:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V dT + \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T dV \quad (\text{A.7})$$

Assumindo-se S constante e dividindo-se por dT:

$$\left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_S = - \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \left( \frac{\partial V}{\partial S} \right)_T \quad (\text{A.8})$$

A partir da Relação de Maxwell, tem-se:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \quad (\text{A.9})$$

Efetuando-se deduções entre energia interna e entropia em termos de temperatura e volume molar, chega-se:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \frac{c_V}{T} \quad (\text{A.10})$$

Portanto,

$$\left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = - \frac{T}{c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \quad (\text{A.11})$$

O produto triplo entre as variáveis pressão, volume molar e entropia é definido por:

$$\left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_S \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_V \left( \frac{\partial V}{\partial S} \right)_p = -1 \quad (\text{A.12})$$

Assim:

$$\left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_S = - \frac{c_p}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_p \frac{T}{c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \quad (\text{A.13})$$

O produto triplo entre temperatura, pressão e volume molar é definido por:

$$\left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_p \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = -1 \quad (\text{A.14})$$

Portanto,

$$\left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_S = \frac{c_p}{c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad (\text{A. 15})$$

Substituindo-se na equação da velocidade do som, tem-se:

$$u^2 = -\frac{V}{M} \frac{c_p}{c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad (\text{A. 16})$$



## APÊNDICE B

### EXPRESSÃO GERAL PARA CAPACIDADE CALORÍFICA ISOCÓRICA

A partir da equação fundamental da termodinâmica, tem-se:

$$dU = TdS - pdV \quad (\text{B.1})$$

Dividindo-se por  $dT$  e fazendo-se o volume molar uma constante, tem-se:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \quad (\text{B.2})$$

Definindo-se:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = c_V \quad (\text{B.3})$$

Tem-se:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{c_V}{T} \quad (\text{B.4})$$

A partir da derivada total de volume molar em relação a temperatura e pressão, tem-se:

$$dV = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T dp \quad (\text{B.5})$$

Define-se:

$$k_\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \quad (\text{B.6})$$

$$k_k = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \quad (\text{B.7})$$

Tem-se:

$$\frac{dV}{V} = k_\alpha dT - k_k dp \quad (\text{B.8})$$

Se o volume for constante, tem-se:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \frac{k_\alpha}{k_k} \quad (\text{B.9})$$

Efetuando-se a derivada total da entropia em termos de temperatura e volume molar, tem-se:

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV \quad (\text{B.10})$$

A partir da relação de Maxwell, tem-se:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \quad (\text{B.11})$$

Assim,

$$dS = \frac{c_V}{T} dT + \frac{k_\alpha}{k_k} dV \quad (\text{B.12})$$

A partir da equação fundamental da termodinâmica, tem-se:

$$dH = TdS + Vdp \quad (\text{B.13})$$

Dividindo-se por  $dT$  e fazendo-se a pressão constante, tem-se:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \quad (\text{B.14})$$

Definindo-se:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p = c_p \quad (\text{B.15})$$

Tem-se:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = \frac{c_p}{T} \quad (\text{B.16})$$

A partir da relação de Maxwell, tem-se:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \quad (\text{B.17})$$

Efetuando-se a derivada total da entropia em termos de temperatura e pressão, tem-se:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T dp \quad (\text{B.18})$$

Substituindo-se:

$$dS = \frac{c_p}{T} dT - k_\alpha V dp \quad (\text{B.19})$$

Igualando-se as duas expressões de entropia, tem-se:

$$\frac{c_V}{T} dT + \frac{k_\alpha}{k_k} dV = \frac{c_p}{T} dT - k_\alpha V dp \quad (\text{B.20})$$

Rearranjando-se e fazendo-se o volume molar constante, tem-se:

$$c_v = c_p - TV \frac{k_\alpha^2}{k_k} \quad (\text{B.21})$$



## APÊNDICE C

Os parâmetros de interação referentes aos termos atrativo e repulsivo das misturas binárias: pentano / hexano, pentano / octano e pentano / decano em função da composição para a regra de mistura de van der Waals são apresentados nas tabelas que se seguem.

As Tabelas C.1 e C.2 apresentam os resultados quando se utilizou valores de temperatura crítica, pressão crítica e temperatura de ebulição obtidos pelo processo de otimização e dados experimentais para essas propriedades, respectivamente.

Tabela C.1- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termodifísicas obtidas por AG.

Alcano	Equação de estado				
	PR	SRKm	PT		
	$k_{ij}$	$l_{ij}$	$k_{ij}$	$k_{ij}$	$l_{ij}$
hexano	$-2,38 \cdot 10^{-1}$	$-2,86 \cdot 10^{-1}$	$2,67 \cdot 10^{-2}$	$-1,84 \cdot 10^{-1}$	$-2,57 \cdot 10^{-1}$
octano	$-1,21 \cdot 10^{-1}$	$-1,13 \cdot 10^{-3}$	$-1,91 \cdot 10^{-2}$	$-1,13 \cdot 10^{-1}$	$-1,22 \cdot 10^{-1}$
decano	$-1,68 \cdot 10^{-2}$	$-2,44 \cdot 10^{-2}$	$9,68 \cdot 10^{-3}$	$-2,57 \cdot 10^{-2}$	$-3,67 \cdot 10^{-2}$

Tabela C.2- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termodifísicas obtidas na literatura (SMITH, 2000).

Alcano	Equação de estado				
	PR	SRKm	PT		
	$k_{ij}$	$l_{ij}$	$k_{ij}$	$k_{ij}$	$l_{ij}$
hexano	$-2,96 \cdot 10^{-1}$	$-3,62 \cdot 10^{-1}$	$2,95 \cdot 10^{-2}$	$-2,37 \cdot 10^{-1}$	$-3,36 \cdot 10^{-1}$
octano	$-6,82 \cdot 10^{-2}$	$-2,36 \cdot 10^{-2}$	$-4,12 \cdot 10^{-2}$	$-6,82 \cdot 10^{-2}$	$-2,91 \cdot 10^{-2}$
decano	$1,24 \cdot 10^{-1}$	$1,79 \cdot 10^{-1}$	$-2,96 \cdot 10^{-2}$	$1,06 \cdot 10^{-1}$	$1,86 \cdot 10^{-1}$



## APÊNDICE D

As tabelas que se seguem contêm os valores da velocidade do som obtidos com os parâmetros calculados por otimização da função objetivo apresentada pela Equação 3.1 referentes às equações: Redlich-Kwong e Soave-Redlich-Kwong com volume transladado, Peng-Robinson e Patel-Teja para: [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>] e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

Tabela D.1- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>								
0,1	1654,6	1592,9	1469,5	1369,1	1280,7	1142,7	1031,1	943,9
2,5	1675,5	1610,2	1486,3	1387,7	1293,9	1155,9	1043,2	956,2
5,0	1701,6	1634,4	1507,3	1407,3	1311,8	1171,8	1056,6	967,8
7,5	1728,4	1659,3	1528,7	1427,1	1330,1	1186,8	1070,3	980,4
10,0	1753,4	1684,8	1550,7	1447,2	1347,1	1202,1	1084,1	992,4
15,0	1810,6	1735,3	1596,1	1488,2	1383,9	1233,5	1111,5	1017,0
20,0	1868,2	1788,4	1641,5	1530,3	1420,6	1266,1	1139,9	1042,3
25,0	1929,0	1841,6	1689,1	1573,5	1457,1	1298,5	1168,1	1067,5
30,0	1983,9	1900,4	1739,1	1618,0	1496,9	1332,3	1196,1	1093,5
35,0	2051,5	1959,5	1791,5	1663,7	1536,5	1365,8	1226,3	1119,3

Tabela D.2- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>								
0,1	1409,1	1368,2	1284,3	1214,5	1151,7	1051,5	968,1	901,6
2,5	1423,5	1380,3	1296,3	1228,1	1161,6	1061,7	977,7	911,4
5,0	1441,5	1397,2	1311,3	1242,4	1174,9	1073,9	988,2	920,6
7,5	1459,8	1414,5	1326,7	1256,9	1188,5	1085,3	998,8	930,7
10,0	1476,9	1432,1	1342,3	1271,5	1201,1	1097,0	1009,7	940,2
15,0	1515,6	1466,9	1374,4	1301,1	1228,3	1120,8	1031,0	959,7
20,0	1554,3	1503,1	1406,3	1331,3	1255,2	1145,5	1053,0	979,8
25,0	1594,7	1539,1	1439,5	1362,2	1281,9	1170,0	1074,8	999,7
30,0	1630,9	1578,5	1474,0	1393,7	1310,8	1195,4	1096,4	1020,1
35,0	1674,9	1617,7	1510,0	1426,0	1339,4	1220,4	1119,6	1040,4

Tabela D.3- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>								
0,1	2575,9	2430,9	2161,4	1956,6	1787,0	1538,1	1351,0	1211,8
2,5	2622,0	2467,4	2194,1	1990,5	1809,7	1559,1	1369,1	1229,2
5,0	2680,6	2519,3	2235,3	2026,7	1840,8	1584,5	1389,1	1245,8
7,5	2741,7	2573,3	2278,0	2063,6	1872,8	1608,6	1409,6	1263,9
10,0	2799,5	2629,4	2322,1	2101,4	1903,0	1633,4	1430,6	1281,2
15,0	2935,1	2743,1	2415,2	2179,7	1969,0	1684,7	1472,4	1316,7
20,0	3076,4	2866,3	2510,7	2261,8	2035,9	1738,9	1516,3	1353,8
25,0	3231,2	2993,6	2613,3	2348,1	2103,7	1793,6	1560,4	1391,1
30,0	3376,1	3139,3	2723,9	2438,9	2179,0	1851,4	1604,7	1430,0
35,0	3561,7	3291,0	2843,6	2534,6	2255,6	1909,7	1653,2	1469,0

Tabela D.4- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>							
	298,15	303,15	313,15	323,15	333,15	353,15	373,15	393,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>								
0,1	1960,5	1880,5	1724,4	1600,1	1492,9	1329,0	1199,8	1100,7
2,5	1986,8	1901,9	1744,7	1622,1	1508,2	1343,9	1213,2	1113,9
5,0	2019,9	1932,2	1770,2	1645,4	1529,0	1361,9	1227,9	1126,4
7,5	2054,0	1963,4	1796,4	1669,1	1550,4	1378,8	1243,0	1140,1
10,0	2086,0	1995,6	1823,2	1693,1	1570,4	1396,2	1258,3	1153,1
15,0	2159,7	2059,7	1879,2	1742,5	1613,8	1432,0	1288,7	1179,7
20,0	2234,8	2127,8	1935,7	1793,6	1657,3	1469,4	1320,4	1207,4
25,0	2314,9	2196,6	1995,3	1846,4	1700,8	1506,8	1352,0	1235,1
30,0	2387,9	2273,5	2058,5	1901,2	1748,7	1546,0	1383,6	1263,8
35,0	2478,9	2351,5	2125,4	1958,1	1796,7	1585,2	1417,9	1292,4

Tabela D.5- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
<b>u<sub>PR</sub>(m/s)</b>							
0,1	1311,4	1178,6	1071,9	984,3	909,0	846,6	667,9
1,0	1322,4	1187,7	1079,6	990,9	914,8	852,6	672,7
2,0	1333,5	1198,2	1088,4	998,5	921,5	858,5	678,0
3,0	1344,8	1207,6	1097,4	1006,1	929,1	865,3	682,8
4,0	1356,3	1218,3	1105,3	1013,8	935,9	871,4	688,2
5,0	1369,5	1227,9	1114,5	1021,6	942,8	878,3	693,6
7,5	1400,1	1254,5	1138,0	1041,6	961,3	894,8	706,9
10,0	1431,7	1281,8	1160,8	1063,0	980,2	912,4	720,4
15,0	1502,5	1341,3	1213,2	1108,5	1021,3	949,7	750,6
20,0	1570,4	1397,6	1262,4	1151,0	1059,3	984,9	778,0
25,0	1648,4	1463,8	1318,6	1199,4	1102,4	1024,9	808,5
30,0	1737,5	1535,0	1380,3	1253,5	1150,5	1068,1	837,1

Tabela D.6- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
<b>u<sub>SRKm</sub>(m/s)</b>							
0,1	994,9	922,2	861,2	809,4	763,1	724,0	606,4
1,0	1001,2	927,7	866,0	813,6	766,9	728,0	609,9
2,0	1007,4	933,9	871,4	818,4	771,3	732,0	613,6
3,0	1013,8	939,5	877,0	823,2	776,3	736,6	617,1
4,0	1020,2	945,8	881,8	828,1	780,7	740,6	620,9
5,0	1027,6	951,4	887,4	833,0	785,2	745,2	624,8
7,5	1044,6	967,0	901,7	845,5	797,2	756,1	634,2
10,0	1061,9	982,8	915,5	858,9	809,3	767,7	643,8
15,0	1100,9	1017,4	947,3	887,5	835,9	792,5	665,4
20,0	1135,7	1048,2	975,5	912,7	859,4	814,9	684,1
25,0	1175,9	1084,5	1007,9	941,7	886,2	840,4	705,3
30,0	1220,7	1122,9	1043,0	973,8	915,8	867,9	725,2

Tabela D.7- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>							
0,1	1835,5	1596,2	1416,2	1275,7	1160,1	1067,3	815,8
1,0	1855,2	1611,3	1428,3	1285,5	1168,5	1075,6	821,9
2,0	1875,2	1628,8	1442,2	1296,8	1178,1	1083,9	828,6
3,0	1895,6	1644,4	1456,3	1308,3	1189,1	1093,3	834,7
4,0	1916,4	1662,5	1468,8	1319,9	1198,9	1101,8	841,6
5,0	1940,5	1678,6	1483,3	1331,7	1208,9	1111,5	848,5
7,5	1997,3	1723,9	1520,9	1362,1	1235,9	1134,7	865,5
10,0	2056,7	1771,0	1557,9	1395,0	1263,7	1159,6	882,9
15,0	2191,6	1874,8	1643,2	1465,5	1324,3	1212,8	922,0
20,0	2330,0	1978,6	1727,4	1534,0	1382,6	1264,8	958,1
25,0	2493,3	2103,0	1824,9	1613,0	1449,4	1324,1	998,7
30,0	2687,4	2240,7	1934,5	1703,2	1525,1	1389,4	1037,2

Tabela D.8- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15	393,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>							
0,1	1713,1	1512,1	1358,6	1237,5	1136,7	1055,6	833,2
1,0	1729,7	1525,1	1369,0	1246,0	1144,1	1062,9	838,6
2,0	1746,5	1540,1	1381,1	1255,9	1152,5	1070,2	844,6
3,0	1763,6	1553,4	1393,3	1265,9	1162,2	1078,6	850,1
4,0	1781,0	1568,8	1404,1	1276,1	1170,9	1086,1	856,2
5,0	1801,2	1582,6	1416,7	1286,3	1179,7	1094,6	862,4
7,5	1848,5	1621,1	1449,1	1312,8	1203,4	1115,1	877,6
10,0	1897,7	1661,1	1480,9	1341,5	1227,7	1137,1	893,0
15,0	2009,4	1749,1	1554,5	1402,8	1281,1	1184,2	928,2
20,0	2121,7	1835,5	1625,9	1461,7	1331,7	1229,6	960,2
25,0	2253,2	1938,8	1708,5	1529,5	1389,7	1281,5	996,4
30,0	2407,8	2052,3	1800,9	1606,7	1455,4	1338,7	1030,8

Tabela D.9- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub>(m/s)</b>						
0,1	1763,3	1695,7	1633,7	1576,9	1524,8	1476,8
0,5	1767,6	1699,2	1637,4	1580,4	1528,1	1480,0
1,0	1773,6	1704,3	1642,2	1584,9	1532,3	1483,9
3,0	1795,1	1724,8	1660,8	1602,9	1549,3	1499,9
5,0	1817,6	1745,7	1680,3	1621,1	1566,9	1516,1
10,0	1874,9	1799,4	1730,3	1668,0	1610,4	1557,5
15,0	1935,5	1854,9	1781,9	1716,1	1656,6	1600,9
20,0	1998,4	1913,6	1837,0	1767,4	1703,5	1645,5
25,0	2064,4	1974,4	1893,2	1819,7	1752,9	1691,8
30,0	2134,5	2038,8	1952,7	1875,0	1804,3	1739,9
35,0	2207,7	2106,4	2015,0	1932,5	1857,9	1789,9
40,0	2285,6	2176,8	2079,6	1992,9	1913,8	1842,6

Tabela D.10- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	1012,4	993,2	974,8	957,4	940,9	925,3
0,5	1013,9	994,3	976,2	958,7	942,2	926,5
1,0	1016,0	996,1	977,9	960,4	943,8	928,1
3,0	1023,0	1003,2	984,5	967,1	950,3	934,4
5,0	1030,4	1010,4	991,4	973,8	957,1	940,7
10,0	1048,8	1028,5	1008,9	990,7	973,2	956,7
15,0	1067,9	1046,6	1026,4	1007,7	990,3	973,2
20,0	1087,0	1065,3	1044,9	1025,5	1007,0	989,7
25,0	1106,5	1084,1	1063,0	1043,1	1024,3	1006,4
30,0	1126,8	1103,7	1081,8	1061,3	1041,8	1023,4
35,0	1147,1	1123,5	1101,0	1079,8	1059,7	1040,8
40,0	1168,2	1143,4	1120,2	1098,6	1078,0	1058,7

Tabela D.11- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>						
0,1	2100,1	1997,0	1904,2	1820,7	1745,2	1676,7
0,5	2106,6	2002,2	1909,6	1825,7	1749,9	1681,1
1,0	2115,4	2009,7	1916,5	1832,1	1755,8	1686,6
3,0	2147,9	2040,0	1943,7	1857,8	1779,7	1708,8
5,0	2181,8	2070,9	1972,1	1884,0	1804,5	1731,4
10,0	2269,3	2151,2	2045,5	1951,6	1866,5	1789,6
15,0	2362,8	2235,3	2122,2	2022,0	1932,8	1851,0
20,0	2461,6	2325,0	2204,6	2097,5	2001,0	1914,7
25,0	2566,8	2419,6	2290,2	2175,6	2073,3	1981,5
30,0	2680,0	2521,0	2381,7	2258,8	2149,3	2051,5
35,0	2800,4	2629,1	2478,9	2346,7	2229,6	2125,1
40,0	2930,8	2743,7	2581,3	2439,9	2314,3	2203,2

Tabela D.12- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	1018,1	999,1	980,9	963,6	947,3	931,8
0,5	1019,5	1000,2	982,3	964,9	948,6	933,0
1,0	1021,7	1001,9	983,9	966,6	950,1	934,5
3,0	1028,6	1009,0	990,4	973,2	956,5	940,8
5,0	1035,9	1016,0	997,2	979,8	963,3	947,0
10,0	1054,1	1033,9	1014,5	996,5	979,2	962,7
15,0	1072,9	1051,8	1031,8	1013,2	996,0	979,0
20,0	1091,8	1070,3	1050,1	1030,9	1012,5	995,3
25,0	1111,1	1088,9	1068,0	1048,2	1029,6	1011,9
30,0	1131,1	1108,2	1086,5	1066,2	1046,9	1028,7
35,0	1151,1	1127,8	1105,5	1084,5	1064,6	1045,8
40,0	1172,0	1147,5	1124,5	1103,1	1082,6	1063,6

Tabela D.13- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub>(m/s)</b>						
0,1	769,1	743,3	719,2	696,9	675,8	656,0
0,5	771,5	745,9	722,0	699,2	678,1	658,1
1,0	774,9	749,1	725,0	702,1	680,6	660,8
3,0	788,8	762,3	737,2	714,0	691,9	671,0
5,0	802,7	775,1	749,6	725,7	703,0	682,0
10,0	838,7	809,7	782,0	756,4	732,2	709,7
15,0	877,7	845,6	816,2	788,7	762,8	738,7
20,0	919,3	884,6	852,4	822,5	795,3	769,2
25,0	963,0	925,7	890,9	859,0	829,0	801,4
30,0	1010,8	969,7	932,3	897,8	865,5	835,4
35,0	1061,8	1016,9	976,2	938,4	903,8	871,8
40,0	1117,5	1068,2	1023,7	982,6	944,7	909,7
45,0	1177,5	1123,2	1074,0	1029,5	988,8	950,8
50,0	1243,1	1183,6	1129,4	1080,2	1035,7	994,8

Tabela D.14- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	740,7	721,2	702,9	685,8	669,7	654,5
0,5	742,6	723,3	705,1	687,7	671,5	656,2
1,0	745,3	725,8	707,6	690,0	673,5	658,4
3,0	756,3	736,2	717,1	699,5	682,5	666,4
5,0	767,1	746,3	726,9	708,8	691,4	675,2
10,0	795,2	773,5	752,5	733,0	714,5	697,3
15,0	825,6	801,5	779,3	758,5	738,7	720,4
20,0	857,9	831,9	807,7	785,1	764,5	744,6
25,0	891,5	863,8	837,7	813,8	791,0	770,0
30,0	928,1	897,7	870,0	844,1	819,7	796,9
35,0	966,9	933,9	903,9	875,6	849,7	825,6
40,0	1009,0	973,1	940,4	909,9	881,5	855,2
45,0	1053,9	1014,7	978,7	946,0	915,8	887,3
50,0	1099,5	1059,9	1020,7	984,7	951,9	921,5

Tabela D.15- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>						
0,1	1110,8	1064,5	1022,0	983,4	947,8	914,8
0,5	1114,8	1068,6	1026,3	987,0	951,1	917,9
1,0	1120,4	1073,7	1031,1	991,4	954,9	921,8
3,0	1143,4	1094,9	1050,2	1009,6	971,9	936,9
5,0	1166,6	1115,8	1069,9	1027,9	988,8	953,2
10,0	1227,9	1172,9	1122,0	1076,1	1033,7	995,0
15,0	1296,1	1234,1	1178,6	1128,2	1081,8	1039,8
20,0	1371,1	1302,0	1240,0	1184,1	1134,2	1087,8
25,0	1452,8	1376,1	1307,2	1245,8	1189,9	1139,6
30,0	1545,1	1458,0	1381,5	1313,3	1251,4	1195,6
35,0	1647,8	1549,1	1463,0	1386,2	1318,1	1256,9
40,0	1764,7	1651,9	1554,3	1467,9	1391,3	1322,8
45,0	1897,2	1767,2	1655,2	1558,1	1472,6	1396,2
50,0	2040,4	1899,4	1770,4	1659,0	1562,4	1477,2

Tabela D.16- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	736,3	717,3	699,4	682,9	667,3	652,6
0,5	738,2	719,3	701,7	684,7	669,0	654,2
1,0	740,9	721,9	704,1	687,1	671,0	656,4
3,0	751,8	732,3	713,7	696,5	680,0	664,4
5,0	762,7	742,3	723,4	705,8	688,8	673,2
10,0	790,7	769,4	748,9	730,0	711,9	695,1
15,0	821,0	797,4	775,7	755,4	736,0	718,1
20,0	853,2	827,7	804,0	781,8	761,7	742,2
25,0	886,7	859,5	833,9	810,4	788,1	767,6
30,0	923,2	893,3	866,0	840,7	816,7	794,3
35,0	961,8	929,4	899,8	872,0	846,6	822,9
40,0	1003,7	968,3	936,2	906,1	878,2	852,4
45,0	1048,4	1009,7	974,3	942,1	912,3	884,4
50,0	1096,7	1054,8	1016,1	980,6	948,3	918,4

Tabela D.17- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>						
0,1	1537,7	1480,1	1426,6	1376,9	1331,5	1289,4
0,5	1541,9	1483,9	1429,8	1380,4	1334,8	1292,6
1,0	1547,1	1488,2	1434,3	1384,6	1338,8	1296,4
3,0	1568,0	1507,3	1452,8	1402,1	1355,4	1312,2
5,0	1588,6	1527,1	1471,6	1419,3	1371,7	1327,6
10,0	1643,4	1578,4	1518,4	1464,7	1414,5	1368,2
15,0	1699,1	1630,4	1568,5	1510,5	1457,8	1409,7
20,0	1758,1	1685,4	1619,3	1558,8	1503,3	1452,2
25,0	1819,9	1743,6	1672,8	1609,6	1551,0	1497,3
30,0	1884,8	1802,8	1729,3	1661,2	1599,6	1543,5
35,0	1952,8	1866,5	1787,1	1715,7	1651,2	1590,9
40,0	2024,3	1931,8	1849,0	1773,2	1704,3	1641,4
45,0	2100,7	2001,9	1912,3	1832,1	1759,2	1692,7

Tabela D.18- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>						
0,1	846,5	832,1	818,1	804,5	791,7	779,5
0,5	847,8	833,4	819,1	805,7	792,9	780,7
1,0	849,4	834,6	820,6	807,1	794,3	782,1
3,0	855,8	840,6	826,7	813,2	800,3	787,9
5,0	862,0	846,9	832,9	819,0	805,9	793,5
10,0	878,3	862,9	847,8	834,2	820,8	808,0
15,0	894,2	878,3	863,6	848,9	835,2	822,5
20,0	910,5	894,3	878,9	864,2	850,2	836,8
25,0	927,1	910,9	894,7	879,9	865,5	851,8
30,0	944,0	926,9	911,0	895,2	880,5	866,7
35,0	961,0	943,8	926,8	911,0	896,2	881,5
40,0	978,3	960,3	943,6	927,3	911,8	897,1
45,0	996,3	977,8	959,8	943,2	927,3	912,2

Tabela D.19- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>						
0,1	1476,2	1423,2	1373,8	1327,8	1285,7	1246,5
0,5	1480,1	1426,8	1376,8	1331,1	1288,7	1249,5
1,0	1484,9	1430,7	1381,0	1335,0	1292,6	1253,1
3,0	1504,3	1448,5	1398,3	1351,4	1308,1	1267,9
5,0	1523,3	1466,9	1415,8	1367,5	1323,4	1282,5
10,0	1573,9	1514,5	1459,3	1409,8	1363,5	1320,6
15,0	1625,3	1562,6	1505,8	1452,5	1403,9	1359,4
20,0	1679,5	1613,3	1552,8	1497,4	1446,3	1399,1
25,0	1736,1	1666,8	1602,3	1544,5	1490,7	1441,2
30,0	1795,3	1721,1	1654,3	1592,2	1535,7	1484,2
35,0	1857,2	1779,4	1707,4	1642,4	1583,5	1528,3
40,0	1922,0	1838,9	1764,1	1695,3	1632,6	1575,0
45,0	1991,0	1902,6	1821,9	1749,3	1683,0	1622,4

Tabela D.20- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>					
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>						
0,1	852,3	838,1	824,2	810,7	798,0	785,9
0,5	853,6	839,3	825,2	811,9	799,2	787,1
1,0	855,2	840,6	826,7	813,3	800,6	788,5
3,0	861,5	846,5	832,7	819,3	806,5	794,2
5,0	867,6	852,7	838,8	825,0	812,0	799,7
10,0	883,7	868,4	853,5	840,0	826,7	814,1
15,0	899,4	883,7	869,1	854,6	841,0	828,3
20,0	915,5	899,4	884,2	869,6	855,7	842,4
25,0	931,9	915,8	899,8	885,1	870,9	857,3
30,0	948,5	931,6	915,8	900,2	885,6	872,0
35,0	965,4	948,4	931,5	915,8	901,2	886,6
40,0	982,4	964,6	948,1	931,9	916,6	901,9
45,0	1000,2	981,9	964,1	947,6	931,8	916,8

Tabela D.21- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>							
0,1	1005,5	968,6	934,6	900,3	867,4	842,1	775,8
1,83	1020,8	983,5	948,1	913,5	879,9	853,0	787,1
10,02	1105,9	1060,5	1019,4	978,8	940,8	909,5	838,9
14,98	1159,9	1109,0	1064,0	1019,8	979,0	945,3	871,3
19,75	1213,0	1159,3	1108,5	1060,8	1017,0	980,7	903,6
25,86	1283,6	1223,6	1167,3	1114,8	1067,7	1027,4	946,1
31,48	1351,4	1285,3	1223,8	1166,9	1116,1	1072,1	987,1
37,77	1429,4	1357,2	1290,2	1228,2	1173,3	1125,5	1035,8

Tabela D.22- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>							
0,1	860,0	836,8	815,3	793,0	771,3	754,9	708,9
1,83	870,6	847,2	824,7	802,4	780,2	762,7	717,1
10,02	929,0	900,5	874,6	848,3	823,3	802,8	754,3
14,98	965,4	933,7	905,3	876,8	850,0	828,0	777,5
19,75	1000,7	967,5	935,6	905,0	876,5	852,8	800,5
25,86	1046,9	1010,2	975,0	941,7	911,3	885,1	830,5
31,48	1090,4	1050,3	1012,4	976,6	944,1	915,8	859,2
37,77	1139,2	1096,2	1055,5	1017,0	982,4	952,0	893,1

Tabela D.23- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>							
0,1	1467,9	1394,3	1328,7	1265,0	1206,2	1161,0	1051,5
1,83	1495,6	1420,6	1351,7	1287,1	1226,3	1178,2	1068,4
10,02	1654,0	1559,2	1476,4	1397,9	1327,3	1269,7	1148,3
14,98	1759,2	1650,4	1557,4	1470,1	1392,4	1329,4	1199,7
19,75	1866,9	1748,0	1640,6	1544,1	1459,1	1389,7	1251,8
25,86	2016,2	1878,1	1754,6	1644,9	1550,4	1471,5	1322,1
31,48	2167,2	2008,7	1868,9	1745,8	1640,7	1552,4	1391,7
37,77	2352,0	2169,2	2009,4	1869,7	1751,4	1651,9	1476,5

Tabela D.24- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15	333,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>							
0,1	856,3	833,6	812,6	790,8	769,5	753,6	708,6
1,83	866,8	844,0	822,0	800,1	778,4	761,3	716,8
10,02	924,9	897,0	871,5	845,7	821,3	801,3	753,7
14,98	961,2	930,0	902,1	874,1	847,8	826,3	776,7
19,75	996,3	963,7	932,2	902,2	874,1	850,9	799,6
25,86	1042,2	1006,1	971,5	938,6	908,7	883,1	829,4
31,48	1085,5	1046,0	1008,6	973,3	941,3	913,5	857,9
37,77	1134,0	1091,5	1051,4	1013,5	979,4	949,5	891,6

Tabela D.25- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>					
0,1	2068,7	1601,6	1542,2	1464,8	1383,6
10,0	1880,6	1690,2	1613,6	1556,8	1467,0
20,0	2017,8	1814,6	1719,2	1657,2	1559,0
30,0	2179,0	1958,2	1840,9	1772,3	1663,0
40,0	2383,7	2128,3	1989,5	1911,1	1783,3
50,0	2574,2	2284,4	2143,0	2054,2	1920,1

Tabela D.26- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>					
0,1	835,9	754,0	743,6	727,0	711,8
10,0	799,5	773,9	760,4	750,1	734,2
20,0	824,4	800,0	783,8	773,5	757,2
30,0	851,3	827,9	809,1	798,7	781,7
40,0	883,2	858,7	838,3	827,5	808,8
50,0	909,6	884,2	865,6	854,6	837,0

Tabela D.27- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>					
0,1	1634,6	1325,4	1284,9	1230,0	1173,0
10,0	1510,1	1387,8	1335,9	1296,9	1234,9
20,0	1600,1	1473,4	1409,9	1368,4	1301,9
30,0	1702,7	1569,6	1493,4	1448,6	1376,2
40,0	1829,1	1680,6	1593,0	1543,3	1460,5
50,0	1942,1	1779,1	1692,8	1638,1	1553,8

Tabela D.28- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	313,15	318,15	323,15	332,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>					
0,1	845,7	765,2	754,9	738,5	723,4
10,0	809,9	784,6	771,3	761,0	745,2
20,0	834,3	810,1	794,1	783,9	767,7
30,0	860,7	837,4	818,9	808,6	791,7
40,0	892,1	867,7	847,5	836,8	818,2
50,0	918,0	892,8	874,4	863,4	846,0

Tabela D.29- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>								
0,1	961,8	922,3	881,4	848,2	814,3	787,7	758,6	729,6
2,5	982,2	941,9	900,4	866,1	832,2	805,6	775,5	746,5
5,03	1004,6	963,1	921,0	885,6	851,5	825,0	793,9	764,0
10,01	1049,4	1005,5	962,4	925,6	890,3	861,0	830,7	799,7
15,02	1096,0	1050,2	1004,1	966,0	929,4	900,1	867,8	834,7
20,01	1146,0	1096,7	1048,7	1007,8	969,8	938,6	905,1	871,9
25,05	1196,7	1146,8	1093,7	1051,3	1011,9	979,6	943,8	909,4
30,01	1250,8	1195,4	1141,5	1096,0	1055,1	1020,5	983,5	947,9
34,99	1305,3	1247,4	1191,1	1142,2	1098,4	1064,0	1024,4	986,4
40,04	1364,6	1303,8	1241,4	1192,1	1145,0	1106,7	1065,8	1026,4

Tabela D.30- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
	<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>							
0,1	804,8	780,0	753,7	732,2	710,0	692,5	672,9	653,2
2,5	818,1	792,9	766,4	744,4	722,2	704,9	684,8	665,2
5,03	832,6	806,9	780,2	757,6	735,5	718,3	697,6	677,5
10,01	861,4	834,6	807,7	784,5	761,9	743,0	723,2	702,6
15,02	891,0	863,4	835,1	811,4	788,2	769,7	748,8	727,0
20,01	922,4	893,1	864,0	838,9	815,3	795,7	774,3	752,7
25,05	953,8	924,7	892,9	867,3	843,1	823,1	800,5	778,4
30,01	986,7	954,9	923,2	896,0	871,3	850,2	827,1	804,5
34,99	1019,4	986,7	954,1	925,4	899,2	878,6	854,2	830,4
40,04	1054,4	1020,8	985,2	956,8	929,1	906,3	881,5	857,1

Tabela D.31- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
	<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>							
0,1	1364,1	1292,5	1221,2	1164,2	1107,9	1064,0	1017,3	972,0
2,5	1399,5	1325,6	1252,1	1192,6	1135,5	1091,1	1042,5	996,6
5,03	1438,9	1361,7	1286,2	1224,0	1165,8	1120,9	1070,1	1022,2
10,01	1519,4	1435,2	1355,7	1289,5	1227,6	1177,0	1126,2	1075,5
15,02	1605,6	1515,1	1427,7	1357,1	1291,3	1239,4	1184,0	1128,9
20,01	1701,2	1600,7	1506,6	1429,0	1358,9	1302,2	1243,5	1186,7
25,05	1801,5	1695,6	1588,8	1505,7	1430,9	1370,7	1306,5	1246,3
30,01	1912,6	1791,1	1678,7	1586,9	1507,0	1440,8	1372,7	1308,9
34,99	2028,8	1896,8	1775,0	1673,3	1585,3	1517,3	1442,6	1372,9
40,04	2160,0	2015,5	1875,8	1769,4	1671,9	1594,4	1515,0	1441,0

Tabela D.32- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)							
	298,2	303,2	308,2	313,2	318,2	323,2	328,2	333,2
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>								
0,1	801,4	777,0	751,3	730,3	708,6	691,5	672,4	653,3
2,5	814,6	790,0	764,0	742,4	720,7	703,8	684,2	665,1
5,03	829,1	803,8	777,7	755,5	733,9	717,2	697,0	677,4
10,01	857,7	831,4	805,0	782,3	760,2	741,8	722,4	702,3
15,02	887,2	860,1	832,3	809,0	786,4	768,3	747,8	726,5
20,01	918,4	889,7	861,0	836,5	813,3	794,1	773,2	752,1
25,05	949,6	921,0	889,8	864,6	840,9	821,4	799,3	777,6
30,01	982,4	951,1	919,9	893,2	869,0	848,3	825,7	803,5
34,99	1014,8	982,7	950,6	922,4	896,7	876,5	852,6	829,2
40,04	1049,7	1016,6	981,6	953,6	926,4	904,1	879,7	855,8

Tabela D.33- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>					
0,1	1852,3	1652,6	1498,3	1375,8	1279,2
1,0	1868,1	1664,5	1507,8	1385,4	1287,2
2,0	1887,3	1679,2	1521,4	1395,2	1295,5
3,0	1903,9	1691,7	1533,2	1405,0	1305,3
4,0	1920,6	1706,6	1543,2	1415,0	1313,7
5,0	1937,6	1721,8	1555,4	1426,8	1322,2
10,0	2030,2	1794,2	1616,9	1479,8	1364,0

Tabela D.34- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>					
0,1	869,9	829,3	794,0	763,3	737,5
1,0	873,9	832,6	796,9	766,3	740,3
2,0	878,8	836,6	800,9	769,5	743,1
3,0	882,9	840,1	804,4	772,6	746,4
4,0	887,1	844,1	807,3	775,7	749,2
5,0	891,3	848,1	810,8	779,4	752,0
10,0	913,7	867,2	828,4	795,9	765,8

Tabela D.35- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>					
0,1	1680,1	1514,6	1384,2	1279,2	1195,5
1,0	1693,4	1524,8	1392,5	1287,6	1202,6
2,0	1709,5	1537,3	1404,3	1296,2	1210,0
3,0	1723,4	1548,0	1414,5	1304,8	1218,6
4,0	1737,4	1560,7	1423,1	1313,6	1226,0
5,0	1751,6	1573,6	1433,6	1323,9	1233,6
10,0	1828,6	1635,0	1486,6	1370,1	1270,4

Tabela D.36- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>					
0,1	875,7	835,6	800,7	770,2	744,7
1,0	879,7	838,9	803,5	773,2	747,4
2,0	884,5	842,8	807,5	776,3	750,2
3,0	888,6	846,2	810,9	779,4	753,4
4,0	892,8	850,2	813,8	782,5	756,2
5,0	897,0	854,2	817,2	786,2	759,0
10,0	919,1	873,0	834,6	802,4	772,6

Tabela D.37- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

p (MPa)	T (K)						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>							
0,1	1878,8	1747,1	1668,0	1585,2	1510,8	1452,4	1385,9
1,0	1892,0	1760,5	1678,6	1596,4	1521,7	1461,9	1395,1
2,0	1908,8	1775,7	1692,1	1609,1	1532,6	1472,6	1404,4
3,0	1922,5	1791,2	1705,8	1621,9	1543,7	1483,5	1415,7
4,0	1939,9	1807,0	1719,8	1635,0	1555,1	1494,5	1425,3
5,0	1953,9	1822,8	1733,7	1648,1	1566,4	1505,6	1434,9
10,0	2035,0	1905,9	1800,7	1715,9	1626,0	1562,2	1487,0

Tabela D.38- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>							
0,1	706,4	688,1	677,8	666,4	655,2	646,4	634,9
1,0	708,5	690,5	679,8	668,7	657,5	648,5	637,1
2,0	711,2	693,2	682,3	671,2	659,8	651,0	639,3
3,0	713,3	695,9	684,9	673,8	662,1	653,4	641,9
4,0	716,1	698,7	687,5	676,4	664,5	655,9	644,2
5,0	718,2	701,4	690,0	679,0	666,8	658,3	646,3
10,0	730,4	715,0	701,8	691,7	678,8	670,3	658,0

Tabela D.39- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub> (m/s)</b>							
0,1	1347,2	1276,4	1233,6	1187,6	1145,0	1111,2	1071,2
1,0	1354,5	1284,1	1239,8	1194,4	1151,7	1117,2	1077,1
2,0	1363,6	1292,8	1247,7	1202,0	1158,5	1123,9	1083,1
3,0	1371,1	1301,5	1255,7	1209,7	1165,3	1130,8	1090,4
4,0	1380,5	1310,5	1263,8	1217,5	1172,2	1137,7	1096,5
5,0	1388,0	1319,4	1271,9	1225,3	1179,2	1144,6	1102,6
10,0	1431,1	1365,4	1310,1	1265,2	1215,1	1179,5	1135,5

Tabela D.40- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T (K)</b>						
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub> (m/s)</b>							
0,1	719,1	701,1	690,9	679,6	668,6	659,8	648,6
1,0	721,2	703,5	692,9	681,9	670,8	662,0	650,7
2,0	723,8	706,1	695,3	684,4	673,1	664,3	652,8
3,0	725,9	708,7	697,8	686,9	675,4	666,7	655,3
4,0	728,6	711,4	700,4	689,4	677,7	669,2	657,5
5,0	730,7	714,1	702,8	691,9	679,9	671,5	659,7
10,0	742,6	727,4	714,4	704,4	691,6	683,2	671,1

Tabela D.41- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
<b>u<sub>PR</sub> (m/s)</b>						
0,1	1707,0	1530,4	1401,1	1284,4	1191,8	1118,3
1,0	1723,3	1543,7	1415,3	1295,4	1200,3	1126,9
2,0	1740,5	1557,7	1427,3	1305,6	1210,7	1135,9
3,0	1757,9	1571,8	1439,3	1317,5	1221,1	1145,0
4,0	1772,4	1585,9	1451,2	1327,7	1230,0	1152,8
5,0	1790,3	1600,4	1463,5	1338,2	1240,6	1163,3
10,0	1877,8	1671,0	1523,1	1390,7	1289,6	1207,3

Tabela D.42- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
<b>u<sub>SRKm</sub> (m/s)</b>						
0,1	781,0	746,9	719,2	692,2	669,0	649,2
1,0	784,7	750,3	724,0	695,9	672,0	652,3
2,0	788,7	754,0	727,5	699,2	675,6	655,6
3,0	792,6	757,7	730,9	703,0	679,2	659,0
4,0	795,9	761,2	734,3	706,2	682,2	661,8
5,0	799,8	764,9	737,8	709,5	685,8	665,5
10,0	818,6	782,5	754,3	725,7	702,2	681,0

Tabela D.43- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>						
0,1	1483,6	1348,5	1247,3	1154,2	1079,0	1018,5
1,0	1496,2	1359,1	1259,1	1163,4	1086,2	1025,8
2,0	1509,5	1370,3	1268,8	1171,9	1094,9	1033,5
3,0	1522,9	1381,5	1278,6	1181,7	1103,7	1041,3
4,0	1534,0	1392,7	1288,3	1190,2	1111,2	1048,0
5,0	1547,7	1404,1	1298,2	1198,9	1120,2	1056,9
10,0	1614,3	1459,7	1346,3	1242,2	1161,2	1094,2

Tabela D.44- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T(K)</b>					
	303,15	313,15	323,15	333,15	343,15	353,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	787,8	754,1	726,7	700,0	677,1	657,4
1,0	791,5	757,5	731,4	703,7	680,0	660,4
2,0	795,4	761,1	734,9	707,0	683,5	663,7
3,0	799,3	764,7	738,3	710,7	687,1	667,0
4,0	802,5	768,3	741,6	713,8	690,1	669,8
5,0	806,4	771,9	745,1	717,1	693,6	673,4
10,0	824,9	789,2	761,4	733,1	709,8	688,8

Tabela D.45- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T(K)</b>					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub>(m/s)</b>						
0,1	1404,1	1354,1	1308,3	1266,3	1227,5	1191,7
1,0	1414,9	1364,0	1317,5	1274,8	1235,5	1199,2
2,0	1427,1	1375,2	1327,9	1284,4	1244,5	1207,5
3,0	1439,4	1386,6	1338,4	1294,2	1253,5	1216,0
4,0	1452,0	1398,2	1349,1	1304,1	1262,8	1224,6
5,0	1464,8	1410,0	1359,9	1314,2	1272,1	1233,3
10,0	1532,3	1471,7	1416,8	1366,7	1320,9	1278,7

Tabela D.46- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>p (MPa)</b>	<b>T(K)</b>					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	851,8	836,6	822,3	808,7	795,9	783,7
1,0	855,8	840,4	825,9	812,2	799,2	786,9
2,0	860,3	844,7	830,0	816,1	803,0	790,5
3,0	864,8	849,0	834,2	820,1	806,7	794,1
4,0	869,4	853,4	838,3	824,1	810,6	797,7
5,0	874,0	857,8	842,5	828,1	814,4	801,4
10,0	897,8	880,5	864,2	848,7	834,2	820,3

Tabela D.47- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>						
0,1	1404,1	1354,1	1308,3	1266,3	1227,5	1191,7
1,0	1414,9	1364,0	1317,5	1274,8	1235,5	1199,1
2,0	1427,0	1375,2	1327,9	1284,4	1244,4	1207,5
3,0	1439,4	1386,6	1338,4	1294,2	1253,5	1216,0
4,0	1452,0	1398,2	1349,1	1304,1	1262,7	1224,6
5,0	1464,8	1409,9	1359,9	1314,1	1272,1	1233,3
10,0	1532,2	1471,7	1416,8	1366,7	1320,8	1278,7

Tabela D.48- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

p (MPa)	T(K)					
	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>						
0,1	856,9	841,9	827,7	814,2	801,5	789,3
1,0	860,9	845,7	831,3	817,7	804,8	792,5
2,0	865,3	849,9	835,3	821,5	808,4	796,0
3,0	869,8	854,2	839,4	825,4	812,2	799,6
4,0	874,3	858,5	843,5	829,4	815,9	803,2
5,0	878,8	862,8	847,7	833,3	819,7	806,8
10,0	902,4	885,2	869,0	853,7	839,3	825,5

Tabela D.49- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PR para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>PR</sub>(m/s)</b>					
0,1	1212,9	1225,6	1239,9	1254,5	1269,4
1,0	1151,7	1163,1	1176,1	1189,3	1202,8
2,0	1096,4	1106,9	1118,7	1130,8	1143,0
3,0	1046,4	1056,0	1066,8	1077,8	1089,0
4,0	1000,8	1009,6	1019,6	1029,8	1040,1
5,0	959,0	967,2	976,5	985,9	995,4
10,0	920,7	928,3	936,9	945,6	954,4

Tabela D.50- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de SRKm para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>SRKm</sub>(m/s)</b>					
0,1	934,7	942,9	951,2	959,7	968,2
1,0	901,0	908,6	916,3	924,2	932,1
2,0	869,9	877,0	884,2	891,5	898,9
3,0	841,1	847,8	854,5	861,3	868,2
4,0	814,4	820,6	826,9	833,3	839,8
5,0	789,5	795,4	801,3	807,3	813,4
10,0	766,3	771,8	777,4	783,1	788,8

Tabela D.51- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de PT para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>PT</sub>(m/s)</b>					
0,1	1675,6	1567,3	1472,8	1389,6	1315,8
1,0	1697,2	1586,2	1489,5	1404,5	1329,2
2,0	1721,9	1607,7	1508,5	1421,4	1344,4
3,0	1747,1	1629,7	1527,9	1438,7	1359,8
4,0	1773,1	1652,3	1547,8	1456,3	1375,6
5,0	1799,8	1675,5	1568,1	1474,4	1391,7
10,0	1945,4	1800,9	1677,5	1570,8	1477,6

Tabela D.52- Valores de velocidade do som calculados com os parâmetros  $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$  obtidos por AG para EDE de RKm para [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

p (MPa)	T (K)				
	298,15	303,15	308,15	313,15	323,15
<b>u<sub>RKm</sub>(m/s)</b>					
0,1	890,5	860,3	832,5	806,6	782,5
1,0	897,2	866,6	838,3	812,1	787,7
2,0	904,7	873,7	844,9	818,3	793,6
3,0	912,4	880,8	851,6	824,6	799,5
4,0	920,2	888,1	858,4	830,9	805,4
5,0	928,1	895,4	865,3	837,4	811,5
10,0	969,3	933,7	901,0	870,8	842,8



## APÊNDICE E

Os parâmetros de interação referentes aos termos atrativo e repulsivo das misturas: dióxido de carbono / [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>], acetona / [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], acetona / [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], tiofeno / [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], metanol / [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], 1, 1, 1, 2-tetrafluoroetano / [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>], dióxido de carbono / [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] e dióxido de carbono / [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>] em função da composição para a regra de mistura de van der Waals são apresentados e identificados pelo respectivo LI nas tabelas a seguir.

As Tabelas E.1 e E.2 apresentam os resultados quando se utilizou valores de temperatura crítica, pressão crítica e temperatura de ebulação obtidos pelo processo de otimização e dados obtidos por Valderrama e Rojas (2009) para essas propriedades, respectivamente, nas equações de estado cúbicas de Peng-Robinson, Patel-Teja e Soave-Redlich-Kwong com volume transladado.

Tabela E.1- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas por AG.

Líquido Iônico	Equação de estado				
	PR	SRKm	PT		
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	6,05.10 <sup>-2</sup>	6,80.10 <sup>-3</sup>	5,03.10 <sup>-2</sup>	6,87.10 <sup>-2</sup>	2,82.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-8,02.10 <sup>-2</sup>	-5,61.10 <sup>-3</sup>	-7,69.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	3,97.10 <sup>-1</sup>	1,60.10 <sup>-1</sup>	-	3,17.10 <sup>-1</sup>	1,17.10 <sup>-1</sup>
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,85.10 <sup>-1</sup>	2,10.10 <sup>-2</sup>	2,02.10 <sup>-1</sup>	2,67.10 <sup>-1</sup>	1,23.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-7,57.10 <sup>-2</sup>	-1,65.10 <sup>-3</sup>	-7,65.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	2,39.10 <sup>-2</sup>	6,29.10 <sup>-2</sup>	4,93.10 <sup>-3</sup>	8,93.10 <sup>-3</sup>	3,46.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	8,80.10 <sup>-2</sup>	5,40.10 <sup>-2</sup>	5,79.10 <sup>-2</sup>	6,52.10 <sup>-2</sup>	3,94.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	7,15.10 <sup>-1</sup>	3,10.10 <sup>-1</sup>	9,87.10 <sup>-2</sup>	5,93.10 <sup>-1</sup>	3,16.10 <sup>-1</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-4,44.10 <sup>-2</sup>	-3,44.10 <sup>-3</sup>	3,29.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,13.10 <sup>-2</sup>	9,68.10 <sup>-4</sup>	9,39.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,29.10 <sup>-1</sup>	2,02.10 <sup>-3</sup>	1,32.10 <sup>-1</sup>	1,24.10 <sup>-1</sup>	9,68.10 <sup>-4</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	4,65.10 <sup>-2</sup>	3,01.10 <sup>-2</sup>	2,33.10 <sup>-2</sup>	4,45.10 <sup>-2</sup>	3,28.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1,40.10 <sup>-1</sup>	1,86.10 <sup>-2</sup>	1,40.10 <sup>-1</sup>	1,58.10 <sup>-1</sup>	8,35.10 <sup>-2</sup>

Tabela E.2- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de van der Waals e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).

Líquido Iônico	Equação de estado				
	PR	SRKm	PT		
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	-2,2.10 <sup>-2</sup>	6,8.10 <sup>-3</sup>	1,0.10 <sup>-2</sup>	-3,2.10 <sup>-2</sup>	-2, 9.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-8,0.10 <sup>-2</sup>	-5,6.10 <sup>-3</sup>	-7,7.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	4,1.10 <sup>-1</sup>	1,6.10 <sup>-1</sup>	-	3,3.10 <sup>-1</sup>	1,5.10 <sup>-1</sup>
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,8.10 <sup>-1</sup>	2,1.10 <sup>-2</sup>	1,5.10 <sup>-1</sup>	2, 5.10 <sup>-1</sup>	1,7.10 <sup>-1</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-6,8.10 <sup>-2</sup>	-1,7.10 <sup>-3</sup>	-6,0.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	5,9.10 <sup>-2</sup>	6,3.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-2</sup>	3,7.10 <sup>-2</sup>	5,4.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	5,4.10 <sup>-2</sup>	5,4.10 <sup>-2</sup>	5,3.10 <sup>-2</sup>	9,4.10 <sup>-2</sup>	6,4.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,3.10 <sup>-2</sup>	3,1.10 <sup>-1</sup>	6,4.10 <sup>-3</sup>	4,8.10 <sup>-2</sup>	3,8.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-4,5.10 <sup>-2</sup>	-2,3.10 <sup>-3</sup>	-1,8.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	5,3.10 <sup>-2</sup>	7,6.10 <sup>-3</sup>	6,0.10 <sup>-2</sup>	-	-
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,0.10 <sup>-1</sup>	8,1.10 <sup>-2</sup>	8,9.10 <sup>-2</sup>	2,2.10 <sup>-1</sup>	7,4.10 <sup>-4</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	3,5.10 <sup>-2</sup>	2,2.10 <sup>-2</sup>	1,4.10 <sup>-2</sup>	1,2.10 <sup>-2</sup>	2,6.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	9,5.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>	7,3.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-1</sup>	9,5.10 <sup>-2</sup>

As Tabelas E3 e E4 mostram os resultados dos parâmetros de interação dos termos de atração e repulsão das EDEs de PR, SRKm e PT referentes ao equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários com LI para a regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid com o uso de valores de temperatura crítica, pressão crítica e temperatura de ebulação obtidos pelo processo de otimização e dados obtidos por Valderrama e Rojas (2009) para essas propriedades.

Tabela E.3- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid e propriedades termofísicas obtidas por AG.

Líquido Iônico	Equação de estado				
	PR	SRKm	PT		
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	3,1.10 <sup>-2</sup>	-1,0.10 <sup>-2</sup>	-5,9.10 <sup>-2</sup>	5,0.10 <sup>-2</sup>	-9,0.10 <sup>-5</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-9,9.10 <sup>-2</sup>	-1,5.10 <sup>-2</sup>	-1,0.10 <sup>-2</sup>	-6,8.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	2,9.10 <sup>-1</sup>	8,0.10 <sup>-2</sup>	4,6.10 <sup>-3</sup>	-	-
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,8.10 <sup>-1</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	8,5.10 <sup>-4</sup>	2,0.10 <sup>-1</sup>	-1,4.10 <sup>-5</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-9,8.10 <sup>-1</sup>	-4,1.10 <sup>-1</sup>	-6,7.10 <sup>-1</sup>	-7,5.10 <sup>-2</sup>	1,9.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	3,7.10 <sup>-2</sup>	6,4.10 <sup>-2</sup>	8,4.10 <sup>-3</sup>	-8,9.10 <sup>-2</sup>	-4,7.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	6,3.10 <sup>-2</sup>	2,5.10 <sup>-2</sup>	8,4.10 <sup>-4</sup>	-3,9.10 <sup>-2</sup>	-8,4.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,6.10 <sup>-1</sup>	9,8.10 <sup>-2</sup>	3,4.10 <sup>-2</sup>	1,5.10 <sup>-2</sup>	8,1.10 <sup>-4</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-1,7.10 <sup>0</sup>	-6,2.10 <sup>-1</sup>	-1,2.10 <sup>0</sup>	-7,7.10 <sup>-2</sup>	-5,7.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1,6.10 <sup>-1</sup>	1,0.10 <sup>-1</sup>	1,8.10 <sup>-4</sup>	9,8.10 <sup>-2</sup>	6,9.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	3,6.10 <sup>-1</sup>	1,1.10 <sup>-1</sup>	1,8.10 <sup>-1</sup>	1,5.10 <sup>-1</sup>	1,0.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,0.10 <sup>-1</sup>	4,0.10 <sup>-2</sup>	5,3.10 <sup>-2</sup>	-1,2.10 <sup>-1</sup>	-1,6.10 <sup>-1</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1,7.10 <sup>-1</sup>	4,6.10 <sup>-2</sup>	6,0.10 <sup>-3</sup>	2,2.10 <sup>-1</sup>	5,5.10 <sup>-2</sup>

Tabela E.4- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Panagiotopoulos-Reid e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).

Líquido Iônico	Equação de estado							
	PR		SRKm		PT			
	$\delta_{ij}$	$\tau_{ij}$	$v_{ij}$	$\delta_{ij}$	$v_{ij}$	$\delta_{ij}$	$\tau_{ij}$	$v_{ij}$
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	-4,3.10 <sup>0</sup>	-1,1.10 <sup>0</sup>	-4,0.10 <sup>0</sup>	2,0.10 <sup>-2</sup>	5,7.10 <sup>-3</sup>	5,5.10 <sup>-2</sup>	2,9.10 <sup>-2</sup>	1,9.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-2,1.10 <sup>0</sup>	-9,4.10 <sup>-1</sup>	-1,4.10 <sup>0</sup>	-6,8.10 <sup>-2</sup>	1,2.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	2,3.10 <sup>-1</sup>	8,2.10 <sup>-2</sup>	4,7.10 <sup>-3</sup>	-	-	3,0.10 <sup>-1</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	4,5.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,2.10 <sup>-1</sup>	6,8.10 <sup>-2</sup>	8,3.10 <sup>-3</sup>	1,6.10 <sup>-1</sup>	-7,8.10 <sup>-3</sup>	2,2.10 <sup>-1</sup>	1,2.10 <sup>-1</sup>	4,5.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-7,6.10 <sup>-1</sup>	-2,9.10 <sup>-1</sup>	-5,2.10 <sup>-1</sup>	-7,7.10 <sup>-2</sup>	-6,2.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	-1,1.10 <sup>-1</sup>	-1,1.10 <sup>-2</sup>	-1,1.10 <sup>-1</sup>	1,7.10 <sup>-2</sup>	1,5.10 <sup>-3</sup>	1,6.10 <sup>-1</sup>	2,2.10 <sup>-1</sup>	1,6.10 <sup>-5</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,3.10 <sup>-2</sup>	1,4.10 <sup>-2</sup>	-2,5.10 <sup>-3</sup>	2,2.10 <sup>-2</sup>	4,8.10 <sup>-5</sup>	1,1.10 <sup>-1</sup>	3,9.10 <sup>-2</sup>	4,2.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	4,5.10 <sup>-2</sup>	9,9.10 <sup>-3</sup>	7,3.10 <sup>-3</sup>	7,9.10 <sup>-3</sup>	5,5.10 <sup>-4</sup>	-2,4.10 <sup>0</sup>	-7,8.10 <sup>-1</sup>	-2,3.10 <sup>0</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-1,8.10 <sup>0</sup>	-5,8.10 <sup>-1</sup>	-1,3.10 <sup>0</sup>	-6,1.10 <sup>-2</sup>	-3,9.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	-4,6.10 <sup>0</sup>	-1,7.10 <sup>0</sup>	-3,9.10 <sup>0</sup>	7,2.10 <sup>-2</sup>	1,9.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,8.10 <sup>-1</sup>	4,1.10 <sup>-2</sup>	4,6.10 <sup>-2</sup>	7,3.10 <sup>-2</sup>	-1,2.10 <sup>-2</sup>	5,9.10 <sup>-2</sup>	2,1.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,4.10 <sup>-1</sup>	1,9.10 <sup>-2</sup>	-2,0.10 <sup>-2</sup>	-1,2.10 <sup>-1</sup>	-1,4.10 <sup>-1</sup>	3,4.10 <sup>0</sup>	6,2.10 <sup>-1</sup>	3,2.10 <sup>0</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	8,2.10 <sup>-2</sup>	1,0.10 <sup>-2</sup>	-3,8.10 <sup>-4</sup>	6,3.10 <sup>-2</sup>	-3,8.10 <sup>-3</sup>	4,8.10 <sup>-2</sup>	2,0.10 <sup>-2</sup>	2,5.10 <sup>-2</sup>

As Tabelas E5 e E6 apresentam os valores dos parâmetros de interação dos termos atrativo e repulsivo das EDEs de PR, SRKm e PT referentes ao equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários com LI para a regra de mistura de Adachi-Sugie com o uso de valores de temperatura crítica, pressão crítica e temperatura de ebulação obtidos pelo processo de otimização e dados obtidos por Valderrama e Rojas (2009) para essas propriedades.

Tabela E.5- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Adachi-Sugie e propriedades termofísicas obtidas por AG.

Líquido Iônico	Equação de estado							
	PR		SRKm		PT			
	$\lambda_{ij}$	$\zeta_{ij}$	$\sigma_{ij}$	$\lambda_{ij}$	$\sigma_{ij}$	$\lambda_{ij}$	$\zeta_{ij}$	$\sigma_{ij}$
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	2,4.10 <sup>-3</sup>	-3,3.10 <sup>-2</sup>	5,7.10 <sup>-2</sup>	5,4.10 <sup>-2</sup>	6,9.10 <sup>-4</sup>	-2,8.10 <sup>-3</sup>	-4,0.10 <sup>-2</sup>	6,8.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-1,3.10 <sup>0</sup>	-9,5.10 <sup>-1</sup>	7,2.10 <sup>-1</sup>	-7,5.10 <sup>-2</sup>	-6,5.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	4,0.10 <sup>-1</sup>	1,9.10 <sup>-1</sup>	8,7.10 <sup>-4</sup>	-	-	3,3.10 <sup>-1</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	7,2.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,2.10 <sup>-1</sup>	7,8.10 <sup>-3</sup>	1,1.10 <sup>-1</sup>	1,6.10 <sup>-1</sup>	4,2.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-1</sup>	4,6.10 <sup>-3</sup>	8,1.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-6,8.10 <sup>-3</sup>	4,7.10 <sup>-2</sup>	-4,0.10 <sup>-2</sup>	-7,5.10 <sup>-2</sup>	-1,2.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,4.10 <sup>-3</sup>	2,4.10 <sup>-2</sup>	6,9.10 <sup>-4</sup>	6,0.10 <sup>-6</sup>	8,1.10 <sup>-4</sup>	1,8.10 <sup>-3</sup>	4,0.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	6,3.10 <sup>-2</sup>	2,3.10 <sup>-2</sup>	-1,1.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-2</sup>	4,2.10 <sup>-2</sup>	6,0.10 <sup>-2</sup>	4,1.10 <sup>-2</sup>	-2,8.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,3.10 <sup>-1</sup>	8,7.10 <sup>-2</sup>	8,0.10 <sup>-5</sup>	1,0.10 <sup>-1</sup>	1,2.10 <sup>-1</sup>	2,6.10 <sup>-1</sup>	1,2.10 <sup>-1</sup>	-2,9.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-9,0.10 <sup>-4</sup>	2,3.10 <sup>-2</sup>	-2,5.10 <sup>-2</sup>	-4,8.10 <sup>-2</sup>	2,9.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1,8.10 <sup>-1</sup>	9,5.10 <sup>-2</sup>	8,3.10 <sup>-5</sup>	8,5.10 <sup>-2</sup>	1,2.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,9.10 <sup>-1</sup>	4,8.10 <sup>-2</sup>	1,2.10 <sup>-4</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	1,6.10 <sup>-3</sup>	1,3.10 <sup>-1</sup>	2,2.10 <sup>-2</sup>	4,1.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,8.10 <sup>0</sup>	6,1.10 <sup>-1</sup>	-1,4.10 <sup>0</sup>	-4,4.10 <sup>-2</sup>	7,9.10 <sup>-2</sup>	1,7.10 <sup>0</sup>	6,5.10 <sup>-1</sup>	-1,4.10 <sup>0</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1,6.10 <sup>-1</sup>	7,3.10 <sup>-2</sup>	7,5.10 <sup>-4</sup>	1,5.10 <sup>-1</sup>	7,2.10 <sup>-3</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	6,2.10 <sup>-2</sup>	3,7.10 <sup>-3</sup>

Tabela E.6- Parâmetros de interação binária para regra de mistura de Adachi-Sugie e propriedades termofísicas obtidas pela literatura (VALDERRAMA & ROJAS, 2009).

Líquido Iônico	Equação de estado							
	PR		SRKm			PT		
	$\lambda_{ij}$	$\zeta_{ij}$	$\sigma_{ij}$	$\lambda_{ij}$	$\sigma_{ij}$	$\lambda_{ij}$	$\zeta_{ij}$	$\sigma_{ij}$
[C <sub>2</sub> mim][EtSO <sub>4</sub> ]	6,7.10 <sup>-2</sup>	2,8.10 <sup>-2</sup>	9,7.10 <sup>-3</sup>	1,9.10 <sup>-2</sup>	-2,8.10 <sup>-2</sup>	1,6.10 <sup>-1</sup>	7,8.10 <sup>-2</sup>	9,8.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>2</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-1,3.10 <sup>0</sup>	-9,4.10 <sup>-1</sup>	7,3.10 <sup>-1</sup>	-7,4.10 <sup>-2</sup>	-6,0.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	2,8.10 <sup>-1</sup>	7,8.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>	-	-	3,0.10 <sup>-1</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	1,4.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>4</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	2,0.10 <sup>-1</sup>	3,2.10 <sup>-2</sup>	1,2.10 <sup>-2</sup>	1,5.10 <sup>-1</sup>	1,7.10 <sup>-3</sup>	2,5.10 <sup>-1</sup>	1,3.10 <sup>-1</sup>	2,0.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>4</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-8,8.10 <sup>-1</sup>	-5,5.10 <sup>-1</sup>	5,0.10 <sup>-1</sup>	-7,4.10 <sup>-2</sup>	3,1.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>4</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,8.10 <sup>-3</sup>	3,0.10 <sup>-2</sup>	6,2.10 <sup>-3</sup>	1,5.10 <sup>-2</sup>	5,7.10 <sup>-3</sup>	-9,1.10 <sup>-3</sup>	3,9.10 <sup>-2</sup>	2,1.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>5</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	1,7.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-2</sup>	6,9.10 <sup>-3</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>	3,7.10 <sup>-2</sup>	2,6.10 <sup>-2</sup>	2,9.10 <sup>-2</sup>	2,9.10 <sup>-2</sup>
[C <sub>6</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	1,3.10 <sup>-1</sup>	3,3.10 <sup>-2</sup>	2,1.10 <sup>-2</sup>	2,6.10 <sup>-2</sup>	3,3.10 <sup>-2</sup>	1,4.10 <sup>-1</sup>	7,0.10 <sup>-2</sup>	6,4.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>6</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	-1,1.10 <sup>0</sup>	-5,8.10 <sup>-1</sup>	6,6.10 <sup>-1</sup>	-4,2.10 <sup>-2</sup>	1,9.10 <sup>-2</sup>	-	-	-
[C <sub>6</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	-2,6.10 <sup>0</sup>	-1,7.10 <sup>0</sup>	1,9.10 <sup>0</sup>	6,3.10 <sup>-2</sup>	-9,5.10 <sup>-3</sup>	-	-	-
[C <sub>8</sub> mim][BF <sub>4</sub> ]	8,5.10 <sup>-2</sup>	7,4.10 <sup>-3</sup>	3,8.10 <sup>-2</sup>	8,9.10 <sup>-2</sup>	6,5.10 <sup>-3</sup>	4,1.10 <sup>-2</sup>	1,8.10 <sup>-2</sup>	4,8.10 <sup>-3</sup>
[C <sub>8</sub> mim][NTf <sub>2</sub> ]	2,0.10 <sup>0</sup>	5,7.10 <sup>-1</sup>	-1,7.10 <sup>0</sup>	-4,5.10 <sup>-2</sup>	7,1.10 <sup>-2</sup>	1,8.10 <sup>0</sup>	6,2.10 <sup>-1</sup>	-1,6.10 <sup>0</sup>
[C <sub>8</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	7,6.10 <sup>-2</sup>	1,0.10 <sup>-2</sup>	1,0.10 <sup>-3</sup>	6,5.10 <sup>-2</sup>	1,3.10 <sup>-2</sup>	1,1.10 <sup>-1</sup>	6,2.10 <sup>-3</sup>	3,6.10 <sup>-3</sup>

## APÊNDICE F

Os dados experimentais (RICE & NIKHELI, 1994) bem como os resultados obtidos pelo *software PE 2000*, que são referentes ao equilíbrio líquido-vapor dos sistemas binários: pentano / hexano, pentano / octano e pentano / decano com as propriedades termofísicas ( $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$ ) determinadas pelo processo de otimização, estão dispostos nas Tabelas F1, F2 e F3, respectivamente, sendo que o subíndice “1” representa o valor da fração molar para a substância com menor ponto de ebulação presente na mistura binária.

Tabela F.1- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e hexano com propriedades termofísicas calculadas.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,0738	0,2469	0,2580	0,0723	0,2730	0,0856	0,3083	0,0740	0,2815
0,1405	0,3606	0,2880	0,1242	0,3761	0,1292	0,4071	0,1237	0,3830
0,2105	0,4678	0,3250	0,2030	0,4833	0,1865	0,5051	0,1975	0,4874
0,2931	0,5821	0,3606	0,2895	0,5721	0,2457	0,5819	0,2788	0,5730
0,4011	0,7080	0,4240	0,4485	0,7044	0,3623	0,6905	0,4327	0,7002
0,4753	0,7592	0,4740	0,5662	0,7888	0,4653	0,7595	0,5508	0,7824
0,5932	0,8256	0,5260	0,6781	0,8599	0,5830	0,8219	0,6659	0,8532
0,7260	0,9006	0,5930	0,8089	0,9297	0,7482	0,8946	0,8031	0,9251
0,8573	0,9543	0,6321	0,8805	0,9608	0,8487	0,9358	0,8789	0,9582
0,9458	0,9947	0,6820	0,9705	0,9919	0,9773	0,9899	0,9741	0,9923

Tabela F.2- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e octano com propriedades termofísicas calculadas.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,0220	0,3933	0,0570	0,0224	0,2289	0,0263	0,2762	0,0229	0,2452
0,1503	0,8005	0,1400	0,1626	0,7311	0,1599	0,7461	0,1582	0,7348
0,2528	0,9000	0,2580	0,3277	0,8853	0,3175	0,8903	0,3216	0,8859
0,2885	0,9248	0,2980	0,3766	0,9091	0,3648	0,9126	0,3706	0,9093
0,3737	0,9455	0,3950	0,4838	0,9455	0,4699	0,9469	0,4787	0,9453
0,4544	0,9597	0,4720	0,5598	0,9628	0,5460	0,9633	0,5558	0,9625
0,5657	0,9721	0,5830	0,6595	0,9785	0,6475	0,9784	0,6570	0,9783
0,6547	0,9855	0,6770	0,7376	0,9870	0,7286	0,9867	0,7364	0,9868
0,7394	0,9927	0,7720	0,8133	0,9927	0,8083	0,9925	0,8134	0,9926
0,8424	0,9974	0,8640	0,8866	0,9966	0,8859	0,9964	0,8878	0,9965
0,9267	0,9993	0,9520	0,9605	0,9991	0,9640	0,9991	0,9628	0,9991

Tabela F.3- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e decano com propriedades termofísicas calculadas.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,2283	0,9591	0,4960	0,3127	0,9657	0,2831	0,9626	0,3085	0,9660
0,2790	0,9695	0,6117	0,3595	0,9748	0,3439	0,9722	0,3559	0,9750
0,3501	0,9842	0,7550	0,4126	0,9820	0,4153	0,9800	0,4099	0,9820
0,3993	0,9874	0,8853	0,4579	0,9863	0,4768	0,9848	0,4561	0,9863
0,4669	0,9885	1,0335	0,5077	0,9897	0,5433	0,9887	0,5071	0,9897
0,5205	0,9900	1,1406	0,5435	0,9915	0,5894	0,9909	0,5436	0,9915
0,5691	0,9935	1,2410	0,5773	0,9929	0,6312	0,9926	0,5783	0,9929
0,5855	0,9941	1,2773	0,5898	0,9934	0,6461	0,9931	0,5910	0,9934
0,6240	0,9950	1,3570	0,6176	0,9943	0,6782	0,9942	0,6195	0,9943
0,6722	0,9965	1,4641	0,6567	0,9953	0,7205	0,9954	0,6594	0,9953

Os dados experimentais bem como os resultados obtidos pelo *software PE 2000*, que são referentes ao equilíbrio líquido-vapor dos sistemas binários: pentano / hexano, pentano / octano e pentano / decano com as propriedades termofísicas ( $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$ ) coletadas na literatura (SMITH et al., 2000), encontram-se nas Tabelas F4, F5 e F6, respectivamente, sendo que o subíndice “1” representa o valor da fração molar para a substância com menor ponto de ebulação presente na mistura binária.

Tabela F.4- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e hexano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,0738	0,2469	0,2580	0,0722	0,2415	0,0764	0,2690	0,0742	0,2514
0,1405	0,3606	0,2880	0,1285	0,3543	0,1214	0,3743	0,1280	0,3618
0,2105	0,4678	0,3250	0,2096	0,4704	0,1805	0,4788	0,2042	0,4745
0,2931	0,5821	0,3606	0,2955	0,5649	0,2413	0,5607	0,2851	0,5656
0,4011	0,7080	0,4240	0,4512	0,7025	0,3605	0,6764	0,4358	0,6980
0,4753	0,7592	0,4740	0,5669	0,7883	0,4650	0,7498	0,5517	0,7817
0,5932	0,8256	0,5260	0,6779	0,8597	0,5836	0,8158	0,6657	0,8530
0,7260	0,9006	0,5930	0,8084	0,9296	0,7488	0,8922	0,8026	0,9249
0,8573	0,9543	0,6321	0,8802	0,9607	0,8490	0,9348	0,8785	0,9581
0,9458	0,9947	0,6820	0,9704	0,9918	0,9773	0,9899	0,9741	0,9923

Tabela F.5- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e octano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,0220	0,3933	0,0570	0,0234	0,4074	0,0336	0,4517	0,0236	0,4206
0,1503	0,8005	0,1400	0,1200	0,7792	0,1410	0,8008	0,1177	0,7836
0,2528	0,9000	0,2580	0,2759	0,8983	0,2820	0,9097	0,2706	0,8998
0,2885	0,9248	0,2980	0,3293	0,9176	0,3270	0,9269	0,3235	0,9187
0,3737	0,9455	0,3950	0,4519	0,9486	0,4315	0,9538	0,4460	0,9489
0,4544	0,9597	0,4720	0,5397	0,9641	0,5103	0,9671	0,5345	0,9642
0,5657	0,9721	0,5830	0,6518	0,9788	0,6189	0,9798	0,6481	0,9788
0,6547	0,9855	0,6770	0,7361	0,9870	0,7075	0,9870	0,7340	0,9869
0,7394	0,9927	0,7720	0,8149	0,9928	0,7952	0,9923	0,8142	0,9927
0,8424	0,9974	0,8640	0,8884	0,9966	0,8801	0,9962	0,8892	0,9966
0,9267	0,9993	0,9520	0,9611	0,9991	0,9632	0,9990	0,9632	0,9992

Tabela F.6- Valores experimentais e simulados do equilíbrio de fases entre pentano e decano com propriedades termofísicas obtidas na literatura.

$x_1$	$y_1$	$p$	$x_1^{PR}$	$y_1^{PR}$	$x_1^{SRKm}$	$y_1^{SRKm}$	$x_1^{PT}$	$y_1^{PT}$
0,2283	0,9591	0,4960	0,2194	0,9719	0,2165	0,9745	0,2194	0,9719
0,2790	0,9695	0,6117	0,2760	0,9785	0,2693	0,9805	0,2760	0,9785
0,3501	0,9842	0,7550	0,3469	0,9839	0,3352	0,9854	0,3469	0,9839
0,3993	0,9874	0,8853	0,4118	0,9874	0,3955	0,9884	0,4118	0,9874
0,4669	0,9885	1,0335	0,4852	0,9903	0,4646	0,9911	0,4852	0,9903
0,5205	0,9900	1,1406	0,5377	0,9920	0,5148	0,9925	0,5377	0,9920
0,5691	0,9935	1,2410	0,5862	0,9933	0,5622	0,9937	0,5862	0,9933
0,5855	0,9941	1,2773	0,6036	0,9937	0,5793	0,9941	0,6036	0,9937
0,6240	0,9950	1,3570	0,6413	0,9946	0,6171	0,9949	0,6413	0,9946
0,6722	0,9965	1,4641	0,6911	0,9956	0,6679	0,9958	0,6911	0,9956



## APÊNDICE G

Os dados experimentais e os resultados conseguidos pelo *software PE 2000*, que são referentes ao equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários contendo líquidos iônicos com regra de mistura quadrática e as propriedades termofísicas ( $T_c$ ,  $p_c$  e  $T_b$ ) determinadas pelo processo de otimização e obtidas por Valderrama e Rojas (2009), encontram-se nas tabelas que se seguem, sendo que o subíndice “1” na fração molar da fase líquida identifica o componente que se encontra em equilíbrio com o líquido iônico.

**Tabela G.1- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].**

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>PT</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PT</sup>
0,118	14,36	0,1083	0,0992	0,0956	0,0766	0,1008	0,0765
0,186	28,77	0,2015	0,1890	0,1805	0,1583	0,1915	0,1581
0,263	44,07	0,2865	0,2742	0,2598	0,2489	0,2770	0,2488
0,319	56,48	0,3464	0,3359	0,3166	0,3234	0,3386	0,3235
0,383	70	0,4032	0,3958	0,3710	0,4025	0,3978	0,4029
0,433	83,72	0,4524	0,4484	0,4182	0,4768	0,4494	0,4776
0,457	94,61	0,4853	0,4841	0,4499	0,5289	0,4842	0,5302

Tabela G.2- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>x<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,013	0,0114	0,0121		0,0131		0,0120		0,0131	
0,038	0,0348	0,0367		0,0393		0,0364		0,0392	
0,054	0,0483	0,0507		0,0540		0,0503		0,0540	
0,068	0,0607	0,0633		0,0673		0,0629		0,0673	
0,095	0,0851	0,0879		0,0928		0,0874		0,0928	
0,152	0,1488	0,1494		0,1556		0,1488		0,1556	
0,208	0,2166	0,2106		0,2166		0,2100		0,2167	
0,273	0,3011	0,2806		0,2854		0,2803		0,2857	
0,339	0,3981	0,3529		0,3556		0,3530		0,3562	
0,402	0,5026	0,4219		0,4224		0,4224		0,4232	
0,465	0,6186	0,4892		0,4876		0,4901		0,4886	
0,525	0,7428	0,5521		0,5489		0,5534		0,5501	
0,584	0,8787	0,6122		0,6078		0,6137		0,6091	
0,637	1,0146	0,6650		0,6600		0,6666		0,6613	
0,685	1,1473	0,7110		0,7057		0,7126		0,7071	
0,726	1,2722	0,7504		0,7452		0,7519		0,7464	
0,763	1,3875	0,7841		0,7791		0,7855		0,7802	
0,795	1,4916	0,8128		0,8081		0,8141		0,8091	
0,822	1,5837	0,8372		0,8328		0,8383		0,8338	
0,846	1,6629	0,8577		0,8536		0,8587		0,8545	
0,865	1,7307	0,8750		0,8713		0,8759		0,8720	
0,897	1,8374	0,9022		0,8990		0,9029		0,8996	
0,938	1,9692	0,9371		0,9346		0,9375		0,9350	
0,967	2,058	0,9629		0,9609		0,9630		0,9610	
0,984	2,1074	0,9790		0,9772		0,9791		0,9773	
0,993	2,1325	0,9881		0,9863		0,9881		0,9864	
0,997	2,144	0,9926		0,9908		0,9926		0,9908	

Tabela G.3- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>x<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,1022	8,85	0,0871		0,0696		0,1278		0,1890		0,0755		0,1729	
0,1998	18,86	0,1746		0,1442		0,2230		0,2859		0,1552		0,2654	
0,3055	33,32	0,2857		0,2446		0,3219		0,3735		0,2606		0,3499	
0,4005	49,53	0,3940		0,3475		0,4040		0,4395		0,3658		0,4138	
0,4825	70,46	0,5126		0,4631		0,4805		0,4959		0,4794		0,4685	
0,5507	144,4	0,6145		0,5580		0,5473		0,5467		0,5889		0,5208	
0,6017	365,8	0,6353		0,5635		0,5879		0,5884		0,6350		0,5718	

Tabela G.4- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>
0,0560	0,0492	0,0536	0,0551	0,0553	0,0460
0,0890	0,0727	0,0782	0,0803	0,0804	0,0673
0,1460	0,1282	0,1338	0,1367	0,1365	0,1162
0,1960	0,1859	0,1880	0,1913	0,1906	0,1647
0,2410	0,2418	0,2370	0,2404	0,2392	0,2095
0,3400	0,3646	0,3339	0,3366	0,3348	0,3008
0,4220	0,4981	0,4240	0,4258	0,4239	0,3892
0,5040	0,6545	0,5131	0,5139	0,5126	0,4801
0,5750	0,8091	0,5873	0,5872	0,5870	0,5582
0,6380	0,9667	0,6520	0,6513	0,6522	0,6276
0,6930	1,1226	0,7076	0,7065	0,7084	0,6880
0,7410	1,2660	0,7531	0,7517	0,7544	0,7376
0,7830	1,4078	0,7940	0,7925	0,7957	0,7821
0,8190	1,5305	0,8271	0,8255	0,8288	0,8179
0,8480	1,6369	0,8544	0,8528	0,8562	0,8473
0,8650	1,7013	0,8706	0,8690	0,8724	0,8646
0,8720	1,7253	0,8766	0,8750	0,8783	0,8710
0,8920	1,7977	0,8946	0,8931	0,8962	0,8901
0,9070	1,8516	0,9081	0,9066	0,9096	0,9043
0,9090	1,8573	0,9096	0,9080	0,9110	0,9058
0,9220	1,9054	0,9218	0,9203	0,9231	0,9186
0,9340	1,9448	0,9320	0,9305	0,9331	0,9293
0,9410	1,9686	0,9383	0,9368	0,9394	0,9358
0,9430	1,9764	0,9404	0,9389	0,9414	0,9380
0,9500	1,9985	0,9465	0,9450	0,9473	0,9442
0,9550	2,0160	0,9513	0,9498	0,9521	0,9492
0,9730	2,0700	0,9672	0,9657	0,9677	0,9654
0,9900	2,1193	0,9834	0,9818	0,9836	0,9817
0,9960	2,1396	0,9909	0,9892	0,9909	0,9892

Tabela G.5- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>PT</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PT</sup>
0,1997	0,053	0,2100	0,1934	0,1736	0,2365	0,2026	0,2222
0,4001	0,098	0,4172	0,3919	0,3629	0,3974	0,4006	0,3848
0,5997	0,141	0,6604	0,6510	0,6011	0,5642	0,6554	0,5588
0,7501	0,152	0,7473	0,7674	0,6929	0,6186	0,7590	0,6169

Tabela G.6- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,212	7,02	0,2239		0,0972		0,1922		0,1429		0,1001		0,2351	
0,351	14,83	0,3450		0,1974		0,3185		0,2643		0,2029		0,3509	
0,390	17,18	0,3730		0,2260		0,3489		0,2959		0,2322		0,3771	
0,453	21,43	0,4177		0,2760		0,3983		0,3488		0,2832		0,4188	
0,619	38,72	0,5532		0,4583		0,5535		0,5238		0,4677		0,5423	
0,654	44,29	0,5871		0,5104		0,5935		0,5704		0,5198		0,5724	
0,701	52,05	0,6287		0,5780		0,6437		0,6292		0,5869		0,6085	
0,751	80,65	0,7261		0,7704		0,7750		0,7862		0,7684		0,6877	

Tabela G.7- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,071	3,12	0,0913		0,0481		0,1019		0,0619		0,0682		0,0701	
0,085	4,06	0,1070		0,0623		0,1194		0,0803		0,0882		0,0890	
0,103	5,04	0,1211		0,0771		0,1351		0,0992		0,1089		0,1078	
0,119	5,97	0,1328		0,0909		0,1481		0,1171		0,1282		0,1250	
0,131	6,92	0,1435		0,1050		0,1601		0,1352		0,1477		0,1418	
0,147	7,83	0,1527		0,1184		0,1704		0,1524		0,1661		0,1574	
0,158	8,63	0,1602		0,1301		0,1788		0,1674		0,1822		0,1707	
0,163	8,99	0,1634		0,1353		0,1824		0,1741		0,1893		0,1765	

Tabela G.8- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

X <sub>1</sub>	P	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>
0,1360	0,2072	0,1231	0,1056	0,1241	0,1115
0,2320	0,3803	0,2260	0,1935	0,2274	0,2038
0,3060	0,5192	0,3079	0,2638	0,3093	0,2773
0,3730	0,6510	0,3845	0,3304	0,3859	0,3466
0,4220	0,7505	0,4413	0,3807	0,4426	0,3986
0,5290	0,9618	0,5579	0,4878	0,5592	0,5084
0,6130	1,1205	0,6413	0,5688	0,6425	0,5903
0,6850	1,2568	0,7097	0,6396	0,7108	0,6607
0,7490	1,3710	0,7648	0,7003	0,7656	0,7201
0,8030	1,4663	0,8094	0,7527	0,8100	0,7706
0,8470	1,5418	0,8442	0,7962	0,8444	0,8117
0,8600	1,5584	0,8518	0,8062	0,8519	0,8210
0,8790	1,5948	0,8684	0,8284	0,8684	0,8416
0,8870	1,6036	0,8725	0,8340	0,8723	0,8467
0,9020	1,6343	0,8866	0,8538	0,8863	0,8649
0,9120	1,6446	0,8913	0,8606	0,8910	0,8711
0,9200	1,6642	0,9004	0,8740	0,8999	0,8833
0,9340	1,6813	0,9083	0,8861	0,9078	0,8942
0,9520	1,7127	0,9231	0,9096	0,9224	0,9151
0,9670	1,7385	0,9355	0,9303	0,9347	0,9336
0,9780	1,7578	0,9449	0,9465	0,9441	0,9482
0,9860	1,7707	0,9513	0,9575	0,9505	0,9583
0,9920	1,7815	0,9567	0,9666	0,9559	0,9668
0,9960	1,7910	0,9615	0,9742	0,9608	0,9742

Tabela G.9- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

X <sub>1</sub>	P	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>
0,0594	0,8100	0,0703	0,0671	0,0691	0,0752
0,1242	1,3300	0,1159	0,1116	0,1155	0,1240
0,2116	2,2000	0,1933	0,1893	0,1975	0,2071
0,3093	3,0400	0,2705	0,2700	0,2831	0,2903
0,4529	4,2900	0,3948	0,4085	0,4279	0,4244
0,6507	5,7600	0,5816	0,6614	0,6675	0,6281

Tabela G.10- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,197	17,26	0,1840		0,1881		0,1878		0,2782		0,1882		0,1931	
0,319	28,85	0,2930		0,3008		0,2958		0,3646		0,2984		0,3061	
0,417	44,15	0,4223		0,4360		0,4220		0,4444		0,4263		0,4379	
0,507	56,7	0,5183		0,5376		0,5146		0,4925		0,5174		0,5328	
0,589	70,49	0,6153		0,6429		0,6069		0,5318		0,6033		0,6243	
0,658	83,73	0,6947		0,7368		0,6805		0,5569		0,6669		0,6958	
0,708	92,9	0,7141		0,7579		0,6997		0,5662		0,6918		0,7254	

Tabela G.11- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,234	17,93	0,2203		0,2020		0,2838		0,2338		0,2210		0,3094	
0,353	29,51	0,3343		0,3177		0,3938		0,3463		0,3430		0,3970	
0,452	42,06	0,4418		0,4321		0,4883		0,4471		0,4592		0,4656	
0,542	56,54	0,5510		0,5534		0,5783		0,5427		0,5746		0,5246	
0,628	70,33	0,6447		0,6624		0,6507		0,6159		0,6673		0,5658	
0,715	83,98	0,7218		0,7618		0,7063		0,6683		0,7388		0,5931	
0,755	92,67	0,7377		0,7788		0,7211		0,6865		0,7652		0,6027	

Tabela G.12- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,2436	33,0	0,2438		0,2412		0,2524		0,2444	
0,3567	63,2	0,3546		0,3703		0,3400		0,3373	
0,4496	109,9	0,4405		0,4792		0,4020		0,4058	
0,5079	233,5	0,4899		0,5384		0,4440		0,4550	
0,5461	401,1	0,5139		0,5598		0,4712		0,4880	
0,5816	662,1	0,5382		0,5774		0,5000		0,5226	
0,5993	744,5	0,5447		0,5821		0,5076		0,5315	
0,6200	912,1	0,5573		0,5911		0,5216		0,5477	

Tabela G.13- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,3021	13,26	0,3185		0,3184		0,2311		0,3163		0,3166		0,2360	
0,4519	22,74	0,4460		0,4459		0,3748		0,4460		0,4460		0,3816	
0,5529	31,11	0,5346		0,5345		0,4885		0,5361		0,5358		0,4956	
0,6423	41,67	0,6280		0,6279		0,6167		0,6302		0,6299		0,6222	
0,7043	50,96	0,6993		0,6992		0,7181		0,7007		0,7005		0,7196	
0,7516	60,13	0,7629		0,7629		0,8125		0,7615		0,7617		0,8055	

As frações molares da fase líquida experimentais e calculadas em função da pressão para os sistemas binários contendo líquidos iônicos e regra de mistura Adachi-Sugie são apresentadas nas

tabelas a seguir, sendo que o subíndice “1” identifica o componente que se encontra em equilíbrio com o líquido iônico.

Tabela G.14- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,118	14,36	0,0963		0,0973		0,0934		0,1303		0,0850		0,1408	
0,186	28,77	0,1819		0,1851		0,1754		0,2204		0,1706		0,2167	
0,263	44,07	0,2620		0,2684		0,2513		0,2930		0,2599		0,2720	
0,319	56,48	0,3193		0,3287		0,3052		0,3402		0,3292		0,3059	
0,383	70	0,3742		0,3870		0,3566		0,3825		0,3996		0,3349	
0,433	83,72	0,4219		0,4383		0,4008		0,4172		0,4637		0,3580	
0,457	94,61	0,4538		0,4730		0,4302		0,4395		0,5080		0,3724	

Tabela G.15- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,013	0,0114	0,0132		0,0118		0,0129		0,0118	
0,038	0,0348	0,0390		0,0357		0,0383		0,0358	
0,054	0,0483	0,0532		0,0494		0,0523		0,0495	
0,068	0,0607	0,0658		0,0619		0,0648		0,0620	
0,095	0,0851	0,0898		0,0862		0,0886		0,0863	
0,152	0,1488	0,1478		0,1475		0,1461		0,1476	
0,208	0,2166	0,2039		0,2092		0,2020		0,2092	
0,273	0,3011	0,2678		0,2802		0,2658		0,2802	
0,339	0,3981	0,3350		0,3538		0,3330		0,3536	
0,402	0,5026	0,4015		0,4239		0,3995		0,4237	
0,465	0,6186	0,4691		0,4920		0,4674		0,4918	
0,525	0,7428	0,5353		0,5553		0,5339		0,5552	
0,584	0,8787	0,6010		0,6154		0,5999		0,6155	
0,637	1,0146	0,6602		0,6679		0,6594		0,6681	
0,685	1,1473	0,7122		0,7135		0,7117		0,7138	
0,726	1,2722	0,7565		0,7524		0,7562		0,7527	
0,763	1,3875	0,7937		0,7856		0,7936		0,7860	
0,795	1,4916	0,8247		0,8139		0,8247		0,8143	
0,822	1,5837	0,8503		0,8379		0,8504		0,8383	
0,846	1,6629	0,8712		0,8581		0,8713		0,8584	
0,865	1,7307	0,8883		0,8751		0,8884		0,8754	
0,897	1,8374	0,9142		0,9019		0,9144		0,9022	
0,938	1,9692	0,9456		0,9363		0,9458		0,9364	
0,967	2,058	0,9677		0,9617		0,9678		0,9617	
0,984	2,1074	0,9813		0,9776		0,9813		0,9776	
0,993	2,1325	0,9890		0,9865		0,9891		0,9865	
0,997	2,144	0,9930		0,9908		0,9930		0,9909	

Tabela G.16- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>PT</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PT</sup>
0,1022	8,85	0,1286	0,0923	0,1203	0,0905	0,1251	0,1177
0,1998	18,86	0,2234	0,1804	0,2184	0,1714	0,2089	0,2097
0,3055	33,32	0,3222	0,2878	0,3265	0,2637	0,2908	0,3069
0,4005	49,53	0,4045	0,3886	0,4212	0,3439	0,3546	0,3874
0,4825	70,46	0,4810	0,4940	0,5148	0,4190	0,4099	0,4610
0,5507	144,4	0,5380	0,5776	0,5890	0,4839	0,4620	0,5263
0,6017	365,8	0,5460	0,5827	0,5998	0,5188	0,5108	0,5684

Tabela G.17- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>
0,0560	0,0492	0,0523	0,0537	0,0603	0,0594
0,0890	0,0727	0,0765	0,0783	0,0856	0,0853
0,1460	0,1282	0,1318	0,1340	0,1394	0,1413
0,1960	0,1859	0,1861	0,1881	0,1892	0,1936
0,2410	0,2418	0,2356	0,2371	0,2333	0,2398
0,3400	0,3646	0,3335	0,3338	0,3204	0,3293
0,4220	0,4981	0,4244	0,4237	0,4042	0,4130
0,5040	0,6545	0,5137	0,5125	0,4920	0,4978
0,5750	0,8091	0,5875	0,5865	0,5695	0,5708
0,6380	0,9667	0,6515	0,6510	0,6403	0,6365
0,6930	1,1226	0,7064	0,7064	0,7028	0,6945
0,7410	1,2660	0,7514	0,7518	0,7542	0,7428
0,7830	1,4078	0,7920	0,7927	0,7999	0,7868
0,8190	1,5305	0,8248	0,8257	0,8359	0,8223
0,8480	1,6369	0,8522	0,8530	0,8647	0,8518
0,8650	1,7013	0,8684	0,8692	0,8813	0,8691
0,8720	1,7253	0,8744	0,8752	0,8873	0,8755
0,8920	1,7977	0,8926	0,8932	0,9051	0,8948
0,9070	1,8516	0,9063	0,9067	0,9180	0,9091
0,9090	1,8573	0,9077	0,9082	0,9194	0,9106
0,9220	1,9054	0,9201	0,9204	0,9308	0,9235
0,9340	1,9448	0,9306	0,9306	0,9402	0,9343
0,9410	1,9686	0,9370	0,9369	0,9458	0,9409
0,9430	1,9764	0,9391	0,9390	0,9477	0,9431
0,9500	1,9985	0,9453	0,9451	0,9530	0,9494
0,9550	2,0160	0,9503	0,9499	0,9573	0,9545
0,9730	2,0700	0,9666	0,9658	0,9710	0,9711
0,9900	2,1193	0,9832	0,9818	0,9849	0,9881
0,9960	2,1396	0,9908	0,9892	0,9915	0,9960

Tabela G.18- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,1997	0,053	0,1802		0,1506		0,2019		0,2817		0,2186		0,2943	
0,4001	0,098	0,3781		0,3275		0,3893		0,4749		0,4120		0,4654	
0,5997	0,141	0,6419		0,5704		0,6060		0,6795		0,6368		0,6404	
0,7501	0,152	0,7583		0,6771		0,6874		0,7490		0,7149		0,6997	

Tabela G.19- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,212	7,02	0,1524		0,1443		0,2011		0,1673		0,2051		0,1751	
0,351	14,83	0,2782		0,2639		0,3309		0,3053		0,3309		0,3183	
0,390	17,18	0,3107		0,2948		0,3621		0,3409		0,3607		0,3551	
0,453	21,43	0,3649		0,3464		0,4128		0,4002		0,4089		0,4164	
0,619	38,72	0,5438		0,5175		0,5718		0,5962		0,5579		0,6183	
0,654	44,29	0,5919		0,5634		0,6131		0,6489		0,5958		0,6725	
0,701	52,05	0,6534		0,6218		0,6653		0,7168		0,6427		0,7425	
0,751	80,65	0,7557		0,7835		0,8128		0,8362		0,7578		0,8696	

Tabela G.20- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,071	3,12	0,0706		0,0703		0,0703		0,0689		0,0697		0,0697	
0,085	4,06	0,0885		0,0878		0,0881		0,0868		0,0890		0,0872	
0,103	5,04	0,1059		0,1049		0,1055		0,1044		0,1085		0,1042	
0,119	5,97	0,1214		0,1200		0,1210		0,1202		0,1264		0,1194	
0,131	6,92	0,1365		0,1346		0,1361		0,1356		0,1441		0,1340	
0,147	7,83	0,1502		0,1479		0,1497		0,1496		0,1606		0,1473	
0,158	8,63	0,1617		0,1590		0,1613		0,1615		0,1747		0,1585	
0,163	8,99	0,1668		0,1639		0,1663		0,1667		0,1810		0,1633	

Tabela G.21- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,1360	0,2072	0,1244		0,1633		0,1131		0,1131	
0,2320	0,3803	0,2274		0,2686		0,2261		0,2261	
0,3060	0,5192	0,3090		0,3426		0,3220		0,3220	
0,3730	0,6510	0,3851		0,4073		0,4116		0,4115	
0,4220	0,7505	0,4415		0,4537		0,4760		0,4760	
0,5290	0,9618	0,5574		0,5479		0,6000		0,5999	
0,6130	1,1205	0,6404		0,6168		0,6806		0,6805	
0,6850	1,2568	0,7088		0,6762		0,7418		0,7418	
0,7490	1,3710	0,7641		0,7274		0,7882		0,7882	
0,8030	1,4663	0,8089		0,7720		0,8241		0,8241	
0,8470	1,5418	0,8439		0,8097		0,8513		0,8513	
0,8600	1,5584	0,8516		0,8184		0,8573		0,8572	
0,8790	1,5948	0,8684		0,8380		0,8701		0,8700	
0,8870	1,6036	0,8724		0,8429		0,8732		0,8731	
0,9020	1,6343	0,8866		0,8607		0,8840		0,8840	
0,9120	1,6446	0,8914		0,8669		0,8876		0,8876	
0,9200	1,6642	0,9005		0,8790		0,8946		0,8946	
0,9340	1,6813	0,9085		0,8901		0,9008		0,9008	
0,9520	1,7127	0,9234		0,9119		0,9124		0,9124	
0,9670	1,7385	0,9358		0,9314		0,9224		0,9224	
0,9780	1,7578	0,9452		0,9470		0,9302		0,9302	
0,9860	1,7707	0,9515		0,9577		0,9358		0,9358	
0,9920	1,7815	0,9569		0,9666		0,9407		0,9407	
0,9960	1,7910	0,9617		0,9742		0,9452		0,9452	

Tabela G.22- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,0594	0,8100	0,1096		0,0767		0,0602		0,0604	
0,1242	1,3300	0,1648		0,1252		0,1148		0,1151	
0,2116	2,2000	0,2445		0,2066		0,2204		0,2205	
0,3093	3,0400	0,3133		0,2873		0,3225		0,3221	
0,4529	4,2900	0,4111		0,4190		0,4667		0,4655	
0,6507	5,7600	0,5405		0,6414		0,6339		0,6616	

Tabela G.23- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,197	17,26	0,2154		0,1850		0,2070		0,2169		0,1903		0,2124	
0,319	28,85	0,3160		0,2954		0,3167		0,3176		0,2986		0,3200	
0,417	44,15	0,4218		0,4271		0,4399		0,4220		0,4222		0,4365	
0,507	56,7	0,4928		0,5255		0,5277		0,4904		0,5092		0,5161	
0,589	70,49	0,5569		0,6261		0,6135		0,5501		0,5901		0,5890	
0,658	83,73	0,6009		0,7113		0,6804		0,5903		0,6491		0,6418	
0,708	92,9	0,6149		0,7316		0,6990		0,6051		0,6718		0,6625	

Tabela G.24- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,234	17,93	0,2915		0,1986		0,2675		0,2443		0,2380		0,2382	
0,353	29,51	0,4040		0,3094		0,3798		0,3638		0,3456		0,3558	
0,452	42,06	0,5007		0,4174		0,4783		0,4719		0,4403		0,4622	
0,542	56,54	0,5932		0,5299		0,5738		0,5756		0,5291		0,5644	
0,628	70,33	0,6689		0,6272		0,6522		0,6567		0,5967		0,6439	
0,715	83,98	0,7289		0,7070		0,7138		0,7174		0,6450		0,7027	
0,755	92,67	0,7442		0,7226		0,7291		0,7392		0,6619		0,7236	

Tabela G.25- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,2436	33,0	0,2693		0,2536		0,2465		0,2529	
0,3567	63,2	0,3791		0,3746		0,3537		0,3481	
0,4496	109,9	0,4627		0,4724		0,4345		0,4183	
0,5079	233,5	0,5133		0,5284		0,4831		0,4676	
0,5461	401,1	0,5403		0,5533		0,5076		0,4995	
0,5816	662,1	0,5678		0,5763		0,5292		0,5323	
0,5993	744,5	0,5751		0,5824		0,5344		0,5407	
0,6200	912,1	0,5889		0,5939		0,5439		0,5560	

Tabela G.26- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,3021	13,26	0,3021		0,3020		0,3189		0,3023		0,3020		0,3167	
0,4519	22,74	0,4526		0,4528		0,4455		0,4524		0,4530		0,4457	
0,5529	31,11	0,5510		0,5511		0,5339		0,5508		0,5511		0,5355	
0,6423	41,67	0,6434		0,6433		0,6274		0,6435		0,6432		0,6297	
0,7043	50,96	0,7046		0,7044		0,6991		0,7048		0,7044		0,7006	
0,7516	60,13	0,7513		0,7514		0,7634		0,7511		0,7514		0,7619	

Nas tabelas abaixo são apresentadas as frações molares da fase líquida experimentais e calculadas pelo software *PE 2000* em função da pressão para equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários com líquidos iônicos e regra de mistura Panagiotopoulos-Reid.

Tabela G.27- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [EtSO<sub>4</sub>].

<b>x<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,118	14,36	0,0905		0,0991		0,1096		0,1087		0,0952		0,1221	
0,186	28,77	0,1685		0,1888		0,1966		0,1997		0,1821		0,2126	
0,263	44,07	0,2397		0,2739		0,2720		0,2777		0,2649		0,2880	
0,319	56,48	0,2896		0,3355		0,3234		0,3293		0,3249		0,3380	
0,383	70	0,3367		0,3953		0,3708		0,3748		0,3829		0,3836	
0,433	83,72	0,3768		0,4479		0,4107		0,4092		0,4337		0,4215	
0,457	94,61	0,4033		0,4835		0,4368		0,4274		0,4679		0,4461	

Tabela G.28- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>2</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>x<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>x<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,013	0,0114	0,0119		0,0117		0,0129		0,0118	
0,038	0,0348	0,0362		0,0357		0,0383		0,0358	
0,054	0,0483	0,0500		0,0493		0,0523		0,0495	
0,068	0,0607	0,0626		0,0618		0,0648		0,0620	
0,095	0,0851	0,0871		0,0860		0,0885		0,0863	
0,152	0,1488	0,1487		0,1473		0,1460		0,1476	
0,208	0,2166	0,2105		0,2090		0,2019		0,2092	
0,273	0,3011	0,2815		0,2801		0,2657		0,2802	
0,339	0,3981	0,3549		0,3537		0,3329		0,3536	
0,402	0,5026	0,4250		0,4239		0,3995		0,4237	
0,465	0,6186	0,4931		0,4920		0,4673		0,4918	
0,525	0,7428	0,5565		0,5554		0,5338		0,5553	
0,584	0,8787	0,6168		0,6155		0,5998		0,6155	
0,637	1,0146	0,6695		0,6680		0,6594		0,6681	
0,685	1,1473	0,7153		0,7136		0,7117		0,7138	
0,726	1,2722	0,7543		0,7525		0,7562		0,7527	
0,763	1,3875	0,7876		0,7857		0,7936		0,7860	
0,795	1,4916	0,8159		0,8140		0,8247		0,8152	
0,822	1,5837	0,8400		0,8380		0,8504		0,8383	
0,846	1,6629	0,8601		0,8582		0,8713		0,8584	
0,865	1,7307	0,8771		0,8752		0,8884		0,8754	
0,897	1,8374	0,9038		0,9020		0,9144		0,9022	
0,938	1,9692	0,9380		0,9363		0,9458		0,9364	
0,967	2,058	0,9633		0,9617		0,9678		0,9617	
0,984	2,1074	0,9792		0,9776		0,9813		0,9776	
0,993	2,1325	0,9882		0,9865		0,9891		0,9865	
0,997	2,144	0,9926		0,9908		0,9930		0,9909	

Tabela G.29- Valores simulados e experimentais (KROON et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>PT</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PT</sup>
0,1022	8,85	0,1478	0,0703	0,1223	0,1298	0,0706	0,0727
0,1998	18,86	0,2472	0,1457	0,2158	0,2189	0,1459	0,1493
0,3055	33,32	0,3459	0,2472	0,3143	0,3072	0,2465	0,2499
0,4005	49,53	0,4258	0,3514	0,3966	0,3773	0,3476	0,3494
0,4825	70,46	0,4988	0,4689	0,4735	0,4391	0,4568	0,4553
0,5507	144,4	0,5622	0,5659	0,5403	0,4975	0,5609	0,5547
0,6017	365,8	0,6011	0,5716	0,5801	0,5496	0,6044	0,5957

Tabela G.30- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre acetona e [C<sub>4</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1som</sub> <sup>SRKm</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>PR</sup>	X <sub>1V&amp;R</sub> <sup>SRKm</sup>
0,0560	0,0492	0,0581	0,0540	0,0603	0,0553
0,0890	0,0727	0,0831	0,0788	0,0856	0,0804
0,1460	0,1282	0,1374	0,1346	0,1394	0,1364
0,1960	0,1859	0,1885	0,1888	0,1892	0,1903
0,2410	0,2418	0,2340	0,2379	0,2333	0,2388
0,3400	0,3646	0,3238	0,3344	0,3204	0,3342
0,4220	0,4981	0,4098	0,4242	0,4042	0,4231
0,5040	0,6545	0,4986	0,5128	0,4920	0,5116
0,5750	0,8091	0,5759	0,5867	0,5695	0,5860
0,6380	0,9667	0,6454	0,6511	0,6403	0,6511
0,6930	1,1226	0,7062	0,7064	0,7028	0,7073
0,7410	1,2660	0,7559	0,7518	0,7542	0,7533
0,7830	1,4078	0,8001	0,7927	0,7999	0,7946
0,8190	1,5305	0,8350	0,8256	0,8359	0,8277
0,8480	1,6369	0,8632	0,8530	0,8647	0,8551
0,8650	1,7013	0,8796	0,8692	0,8813	0,8712
0,8720	1,7253	0,8855	0,8752	0,8873	0,8772
0,8920	1,7977	0,9032	0,8932	0,9051	0,8951
0,9070	1,8516	0,9162	0,9067	0,9180	0,9084
0,9090	1,8573	0,9176	0,9081	0,9194	0,9098
0,9220	1,9054	0,9291	0,9204	0,9308	0,9219
0,9340	1,9448	0,9386	0,9306	0,9402	0,9319
0,9410	1,9686	0,9443	0,9369	0,9458	0,9381
0,9430	1,9764	0,9462	0,9390	0,9477	0,9402
0,9500	1,9985	0,9517	0,9450	0,9530	0,9461
0,9550	2,0160	0,9561	0,9499	0,9573	0,9508
0,9730	2,0700	0,9702	0,9657	0,9710	0,9663
0,9900	2,1193	0,9846	0,9818	0,9849	0,9821
0,9960	2,1396	0,9913	0,9892	0,9915	0,9893

Tabela G.31- Valores simulados e experimentais (HUO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre tiofeno e [C<sub>4</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PT</b>
0,1997	0,053	0,1917		0,2859		0,1944		0,3135		0,1981		0,1898	
0,4001	0,098	0,3947		0,5052		0,3838		0,4757		0,3785		0,3789	
0,5997	0,141	0,6432		0,7493		0,6133		0,6353		0,6010		0,6261	
0,7501	0,152	0,7341		0,8397		0,7040		0,6868		0,6886		0,7274	

Tabela G.32- Valores simulados e experimentais (CARVALHO et al., 2009) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>5</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PT</b>
0,212	7,02	0,1618		0,1501		0,1430		0,1649		0,1211		0,1414	
0,351	14,83	0,2855		0,2734		0,2623		0,2838		0,2444		0,2613	
0,390	17,18	0,3166		0,3052		0,2932		0,3130		0,2794		0,2925	
0,453	21,43	0,3679		0,3583		0,3448		0,3608		0,3401		0,3448	
0,619	38,72	0,5336		0,5343		0,5154		0,5114		0,5573		0,5183	
0,654	44,29	0,5773		0,5816		0,5609		0,5497		0,6184		0,5647	
0,701	52,05	0,6324		0,6422		0,6188		0,5970		0,6977		0,6232	
0,751	80,65	0,7817		0,8274		0,7763		0,7076		0,8390		0,7782	

Tabela G.33- Valores simulados e experimentais (KIM et al., 2005) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>6</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>som</b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1</sub>V&amp;R</b>	<b>PT</b>
0,071	3,12	0,0704		0,0707		0,0704		0,0659		0,0677		0,0690	
0,085	4,06	0,0884		0,0915		0,0881		0,0849		0,0876		0,0864	
0,103	5,04	0,1059		0,1129		0,1053		0,1043		0,1081		0,1035	
0,119	5,97	0,1216		0,1329		0,1207		0,1223		0,1273		0,1187	
0,131	6,92	0,1367		0,1532		0,1355		0,1403		0,1467		0,1335	
0,147	7,83	0,1506		0,1724		0,1489		0,1573		0,1650		0,1469	
0,158	8,63	0,1622		0,1890		0,1602		0,1720		0,1810		0,1583	
0,163	8,99	0,1673		0,1965		0,1651		0,1785		0,1881		0,1633	

Tabela G.34- Valores simulados e experimentais (KATO & GMEHLING, 2005) do equilíbrio de fases entre metanol e [C<sub>6</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> PR	X <sub>1som</sub> SRKm	X <sub>1V&amp;R</sub> PR	X <sub>1V&amp;R</sub> SRKm
0,1360	0,2072	0,1121	0,1628	0,1498	0,1498
0,2320	0,3803	0,2267	0,2679	0,2547	0,2548
0,3060	0,5192	0,3241	0,3419	0,3310	0,3310
0,3730	0,6510	0,4143	0,4067	0,3989	0,3989
0,4220	0,7505	0,4787	0,4532	0,4480	0,4480
0,5290	0,9618	0,6012	0,5475	0,5480	0,5481
0,6130	1,1205	0,6805	0,6164	0,6210	0,6211
0,6850	1,2568	0,7409	0,6759	0,6834	0,6834
0,7490	1,3710	0,7868	0,7272	0,7363	0,7363
0,8030	1,4663	0,8227	0,7719	0,7817	0,7817
0,8470	1,5418	0,8501	0,8096	0,8192	0,8192
0,8600	1,5584	0,8561	0,8183	0,8278	0,8278
0,8790	1,5948	0,8691	0,8380	0,8469	0,8469
0,8870	1,6036	0,8722	0,8429	0,8516	0,8516
0,9020	1,6343	0,8833	0,8606	0,8686	0,8686
0,9120	1,6446	0,8870	0,8668	0,8744	0,8744
0,9200	1,6642	0,8942	0,8790	0,8859	0,8859
0,9340	1,6813	0,9005	0,8901	0,8962	0,8962
0,9520	1,7127	0,9125	0,9118	0,9163	0,9163
0,9670	1,7385	0,9229	0,9314	0,9342	0,9342
0,9780	1,7578	0,9311	0,9470	0,9485	0,9485
0,9860	1,7707	0,9370	0,9577	0,9584	0,9584
0,9920	1,7815	0,9421	0,9666	0,9669	0,9669
0,9960	1,7910	0,9469	0,9742	0,9742	0,9742

Tabela G.35- Valores simulados e experimentais (REN & SCURTO, 2009) do equilíbrio de fases entre R134a e [C<sub>6</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

X <sub>1</sub>	p	X <sub>1som</sub> PR	X <sub>1som</sub> SRKm	X <sub>1V&amp;R</sub> PR	X <sub>1V&amp;R</sub> SRKm
0,0594	0,8100	0,1243	0,0654	0,0689	0,0689
0,1242	1,3300	0,1845	0,1093	0,1154	0,1154
0,2116	2,2000	0,2699	0,1869	0,1977	0,1977
0,3093	3,0400	0,3429	0,2685	0,2839	0,2839
0,4529	4,2900	0,4469	0,4110	0,4298	0,4298
0,6507	5,7600	0,5901	0,6786	0,6673	0,6673

Tabela G.36- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [BF<sub>4</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,197	17,26	0,2267		0,1746		0,2100		0,2231		0,1984		0,2048	
0,319	28,85	0,3377		0,2814		0,3195		0,3243		0,3112		0,3124	
0,417	44,15	0,4573		0,4109		0,4411		0,4281		0,4400		0,4307	
0,507	56,7	0,5401		0,5085		0,5272		0,4956		0,5310		0,5122	
0,589	70,49	0,6193		0,6079		0,6108		0,5543		0,6164		0,5875	
0,658	83,73	0,6801		0,6900		0,6753		0,5939		0,6800		0,6424	
0,708	92,9	0,6990		0,7100		0,6938		0,6088		0,7050		0,6641	

Tabela G.37- Valores simulados e experimentais (BLANCHARD et al., 2001) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,234	17,93	0,2389		0,1604		0,2764		0,2411		0,2289		0,2312	
0,353	29,51	0,3477		0,2613		0,3831		0,3602		0,3540		0,3512	
0,452	42,06	0,4450		0,3669		0,4743		0,4687		0,4724		0,4624	
0,542	56,54	0,5396		0,4828		0,5603		0,5740		0,5899		0,5710	
0,628	70,33	0,6158		0,5860		0,6280		0,6577		0,6844		0,6569	
0,715	83,98	0,6725		0,6697		0,6777		0,7223		0,7584		0,7218	
0,755	92,67	0,6869		0,6857		0,6915		0,7466		0,7864		0,7452	

Tabela G.38- Valores simulados e experimentais (SHARIATI & PETERS, 2003) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>2</sub>mim] [PF<sub>6</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>
0,2436	33,0	0,2431		0,2463		0,2503		0,2532	
0,3567	63,2	0,3830		0,3557		0,3623		0,3527	
0,4496	109,9	0,5061		0,4407		0,4482		0,4272	
0,5079	233,5	0,5683		0,4935		0,5006		0,4796	
0,5461	401,1	0,5836		0,5225		0,5270		0,5134	
0,5816	662,1	0,5910		0,5524		0,5500		0,5475	
0,5993	744,5	0,5928		0,5603		0,5555		0,5562	
0,6200	912,1	0,5966		0,5753		0,5654		0,5718	

Tabela G.39- Valores simulados e experimentais (SUDHIR et al., 2004) do equilíbrio de fases entre CO<sub>2</sub> e [C<sub>8</sub>mim] [NTf<sub>2</sub>].

<b>X<sub>1</sub></b>	<b>p</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1som</sub></b>	<b>SRKm</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PR</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>PT</b>	<b>X<sub>1V&amp;R</sub></b>	<b>SRKm</b>
0,3021	13,26	0,3172		0,3021		0,3188		0,3165		0,3020		0,3168	
0,4519	22,74	0,4453		0,4529		0,4455		0,4461		0,4530		0,4457	
0,5529	31,11	0,5343		0,5511		0,5338		0,5361		0,5511		0,5355	
0,6423	41,67	0,6280		0,6432		0,6274		0,6302		0,6432		0,6297	
0,7043	50,96	0,6995		0,7044		0,6991		0,7007		0,7044		0,7006	
0,7516	60,13	0,7633		0,7514		0,7633		0,7615		0,7514		0,7619	

## **APÊNDICE H**

### **REDE NEURAL**

A rede neural artificial é um método de inteligência artificial fundamentada pela reprodução da funcionalidade do sistema nervoso biológico através de programação e circuitos digitais.

McCulloch e Pitts, em 1943, mencionaram as primeiras informações sobre a funcionalidade e os princípios envolvidos na neuro-computação a partir de analogias ao cérebro humano, em que unidades simples estão conectadas entre si para formarem redes e executarem ações pela influência complexa entre os dados sem a necessidade de determinar a função que os relaciona (ABRAHAM, 2002).

O neurônio artificial, também denominado por nó e elemento processador, é o membro básico constituinte das redes neurais. Ele apresenta diversas entradas, as quais são relacionadas com o peso de sinais excitatórios ou inibitórios e o conjunto delas definem o estado de ativação, que por sua vez exibe uma resposta pela atuação da função de ativação (ZAMARREÑO & VEGA, 1998).

Estas unidades estão organizadas em camada de entrada, onde os padrões e informações necessárias ao processamento são introduzidos à rede, camada intermediária, onde se realiza os cálculos através de conexões ponderadas e camada de saída, onde o resultado é apresentado.

Tendo em vista a organização da rede neural e as estruturas que a compõe, faz-se necessário entender o funcionamento desta técnica. Primeiramente, é realizada a coleta de dados referentes ao problema, em seguida ocorre a separação em um conjunto de treinamento e um conjunto de testes, que são utilizados na verificação do desempenho do algoritmo.

Alternativamente, pode-se utilizar um conjunto de validação para analisar a eficiência da rede em relação a capacidade de generalização durante a etapa de treinamento a partir da imposição de um critério de parada.

Após a determinação destes conjuntos, eles são geralmente organizados aleatoriamente a fim de prevenir tendências relacionadas com a ordem de apresentação de dados.

De posse dos dados de entrada devidamente organizados, necessita-se definir a topologia da rede, ou seja, o número de camadas, o número de neurônios em cada camada, os parâmetros de treinamento e as funções de ativação.

Estabelecido o algoritmo, inicia-se a etapa de treinamento, que consiste no procedimento iterativo de ajuste dos pesos entre as conexões com o objetivo de melhorar o desempenho de aprendizagem da rede, a qual é verificada na fase de teste (NELSON & ILLINGWORTH, 1994). Caso o erro relativo

médio entre a variável calculada e a conhecida seja pequeno, pode-se utilizar a estrutura construída para a predição da propriedade nas condições de entrada não inseridas durante o treinamento.

A estimativa das velocidades do som necessárias para o cálculo de  $T_b$ ,  $T_c$  e  $p_c$  dos imidazólios:  $[C_2mim]$   $[PF_6]$  e  $[C_8mim]$   $[NTf_2]$  foi realizada a partir da elaboração de uma rede neural artificial do tipo *feed-forward back propagation* com pesos definidos de acordo com o método de Levenberg-Marquardt.

Quanto à topologia, a RNA foi constituída por 10 neurônios na camada de entrada, em que foram definidos a temperatura, pressão e os subgrupos propostos por Knotts et al. (2001), os quais estão listados na Tabela H.1, duas camadas intermediárias compostas por 15 neurônios cada, sendo que as três primeiras camadas apresentam como função de ativação a função tangente hiperbólica e a última linear.

A Figura H.1 apresenta os resultados obtidos pelo *software* Matlab R2010a para a velocidade do som normalizada em função dos dados experimentais utilizados no treinamento da rede referentes aos líquidos iônicos:  $[C_2mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_3mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_4mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_5mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_6mim]$   $[NTf_2]$ ,  $[C_4mim]$   $[PF_6]$ ,  $[C_6mim]$   $[PF_6]$  e  $[C_8mim]$   $[PF_6]$ .

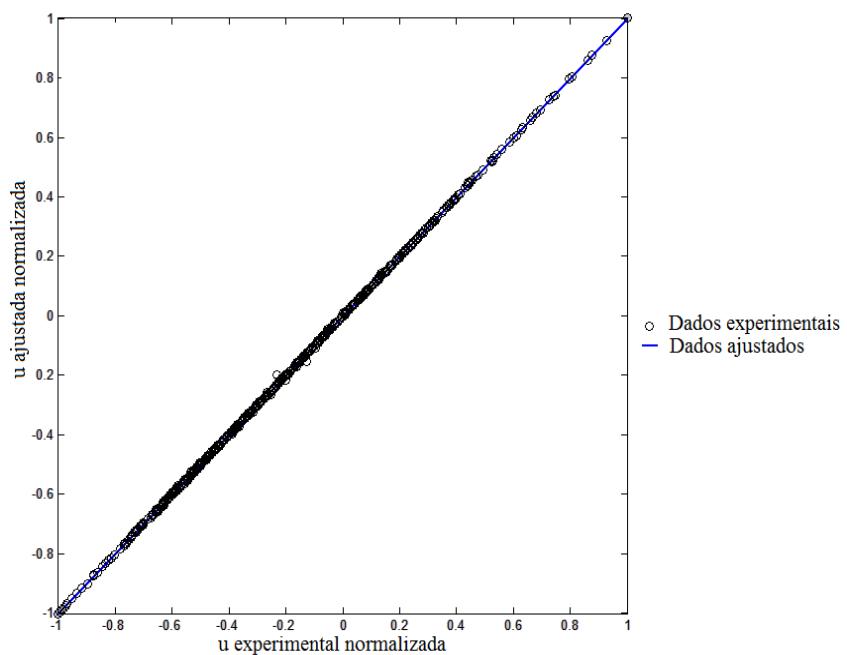


Figura H.1- Dados de velocidade do som calculadas por RNA e experimentais.

A Figura H.1 mostra que os dados de velocidade de som utilizados na etapa de treinamento foram bem ajustados à rede neural utilizada, sendo que o coeficiente de correlação linear foi de 0,9998.

Tabela H.1- Imidazólios com seus respectivos subgrupos de Knotts et al. (2001) e massa molecular utilizados na RNA.

[C <sub>8</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]	[C <sub>6</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]	[C <sub>4</sub> mim] [PF <sub>6</sub> ]	[C <sub>6</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>5</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>4</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>3</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>2</sub> mim] [NTf <sub>2</sub> ]	Líquido Iônico
2	2	2	2	2	2	2	2	A CH <sub>3</sub>
7	5	3	5	4	3	2	1	A >CH <sub>2</sub>
0	0	0	2	2	2	2	2	A >C<
0	0	0	0	0	0	0	0	A >NH
0	0	0	1	1	1	1	1	A >N
2	2	2	2	2	2	2	2	B >N
3	3	3	3	3	3	3	3	C >CH
0	0	0	2	2	2	2	2	A >SO <sub>2</sub>
0	0	0	0	0	0	0	0	D -OH
0	0	0	0	0	0	0	0	A -O-
6	6	6	6	6	6	6	6	-F
1	1	1	0	0	0	0	0	>P
340,3	313,2	284,2	447,4	433,4	419,2	405,3	391,3	M

Os códigos “A”, “B”, “C” e “D” da Tabela H.1 indicam com os subgrupos estão ligados, sendo esses equivalentes a sem anel, com anel, sem anel aromático, álcool primário.