



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA E DESENVOLVIMENTO**  
**REGIONAL**



**DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA SUCROALCOOLEIRA**

ANA BEATRIZ DA SILVA

**SIMULAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO:  
INFLUÊNCIA DO TEOR DO LÍQUIDO IÔNICO [EMIM][BF<sub>4</sub>] EM MISTURA COM  
ETILENOGLICOL SOBRE O DESEMPENHO ENERGÉTICO DO PROCESSO**

João Pessoa  
Setembro/2025

ANA BEATRIZ DA SILVA

SIMULAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO: INFLUÊNCIA DO TEOR DO LÍQUIDO IÔNICO [EMIM][BF<sub>4</sub>] EM MISTURA COM ETILENOGLICOL SOBRE O DESEMPENHO ENERGÉTICO DO PROCESSO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Tecnologia Sucroalcooleira da Universidade Federal da Paraíba como parte dos requisitos para obtenção do título de Tecnólogo em Produção Sucroalcooleira.

Orientadora Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Angela  
Lucínia Urtiga Vasconcelos

João Pessoa  
Setembro/2025

**Catálogo na publicação**  
**Seção de Catalogação e Classificação**

S586s Silva, Ana Beatriz da.

Simulação da destilação extrativa para produção de etanol anidro: influência do teor do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] em mistura com etilenoglicol sobre o desempenho energético do processo / Ana Beatriz da Silva. - João Pessoa, 2025.

40 f. : il.

Orientação: Angela Lucínia Urtiga Vasconcelos.  
TCC (Graduação) - UFPB/CTDR.

1. Etanol anidro. 2. Destilação extrativa. 3. Líquidos iônicos. 4. Etilenoglicol. 5. Simulação. I. Vasconcelos, Angela Lucínia Urtiga. II. Título.

UFPB/CTDR

CDU 661.722

SIMULAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO: INFLUÊNCIA DO TEOR DO LÍQUIDO IÔNICO [EMIM][BF<sub>4</sub>] EM MISTURA COM ETILENOGLICOL SOBRE O DESEMPENHO ENERGÉTICO DO PROCESSO

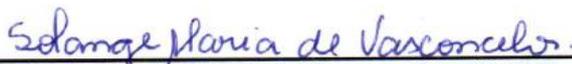
ANA BEATRIZ DA SILVA

TCC aprovado em 26 / 09 / 2025 como requisito para a conclusão do curso de Tecnologia em produção Sucroalcooleira da Universidade Federal da Paraíba.

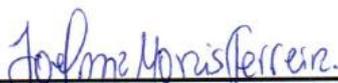
**BANCA EXAMINADORA:**



Profª Drª. Angela Lucinia Urtiga Vasconcelos - (UFPB – Orientador)



Profª Drª. Solange Maria de Vasconcelos - (UFPB – Membro interno)



Profª Drª. Joeline Morais Ferreira - (UFPB – Membro interno)

João Pessoa, 26 de setembro de 2025.

Dedico este trabalho a Deus e à  
minha família, base de todo o  
meu esforço e realização.

## **AGRADECIMENTOS**

Em primeiro lugar, agradeço a Deus, que esteve comigo em cada passo dessa caminhada, me dando força, coragem e serenidade para seguir em frente, mesmo quando os desafios pareciam grandes demais.

Aos meus pais, que sempre foram meu alicerce, agradeço por todo amor, paciência e apoio incondicional. Vocês me ensinaram o valor da dedicação e da persistência, e sem vocês eu não teria chegado até aqui. Ao meu irmão, que sempre esteve ao meu lado, deixo minha gratidão pelo carinho, companheirismo e incentivo em todos os momentos.

Também agradeço de coração a todos os meus professores, que contribuíram para a minha formação e crescimento. Em especial, à professora Angela, que com tanta paciência, calma e dedicação me guiou durante esse processo. Sua confiança e orientação foram fundamentais para que eu conseguisse concluir esse trabalho.

Não poderia deixar de agradecer aos meus colegas e amigos, que estiveram comigo em cada etapa, compartilhando risadas, preocupações e conquistas. A presença de vocês tornou essa jornada muito mais leve e especial.

A todos que, de alguma forma, fizeram parte dessa caminhada, deixo aqui minha gratidão sincera. Cada página deste trabalho é também um pedaço da dedicação e do carinho de todos que fizeram parte da minha jornada.

## RESUMO

O etanol anidro é um produto estratégico para os setores energético e químico, mas sua obtenção em alta pureza é dificultada pela presença do azeótropo etanol-água, que inviabiliza a separação por destilação convencional. Entre as alternativas empregadas, a destilação extrativa se destaca, sobretudo pelo uso de solventes que modificam o equilíbrio líquido-vapor. Nesse contexto, líquidos iônicos vêm sendo estudados como substitutos mais sustentáveis aos solventes tradicionais, como o etilenoglicol (EG). Este trabalho teve como objetivo a simulação e a avaliação da destilação extrativa do sistema etanol-água utilizando como solventes o etilenoglicol (EG) e o líquido iônico 1-etil-3-metilimidazólio tetrafluoroborato ([EMIM][BF<sub>4</sub>]). Para isso, foi desenvolvido no Aspen Plus um fluxograma representando o processo industrial, adotando o modelo termodinâmico NRTL para cálculo de equilíbrio líquido-vapor. Diferentes proporções de [EMIM][BF<sub>4</sub>] e EG foram analisadas, avaliando-se sua influência sobre a pureza do etanol anidro, as cargas térmicas dos refeedores e condensadores, e o consumo específico de energia (SEC). Os resultados mostraram que a pureza do etanol no topo da coluna se manteve na faixa de 0,995 até cerca de 40% de [EMIM][BF<sub>4</sub>], condição considerada ótima. Nessa faixa, observou-se redução máxima da carga total dos refeedores para aproximadamente 63,2 kW e menor valor de SEC, 0,682 kWh/kg, indicando ganhos energéticos relevantes em comparação aos casos com menor quantidade de líquido iônico. Em concentrações mais elevadas, acima de 50% de LI, verificou-se redução da especificação de pureza (queda para ≈0,994) e aumento do consumo energético global, comprometendo a viabilidade do processo. Conclui-se que o uso combinado de EG e [EMIM][BF<sub>4</sub>] pode melhorar a eficiência energética da destilação extrativa, sendo o cenário de 40% de IL e 60% de EG o mais promissor, por aliar menor consumo energético à manutenção da qualidade do produto. O estudo também evidencia o potencial dos líquidos iônicos como solventes alternativos, embora análises econômicas e ambientais adicionais sejam necessárias para validação em escala industrial.

**Palavras-chave:** Etanol anidro, Destilação extrativa, Líquidos iônicos, Etilenoglicol, Simulação.

## ABSTRACT

Anhydrous ethanol is a strategic product for the energy and chemical sectors, but obtaining it in high purity is hampered by the presence of the ethanol-water azeotrope, which makes separation by conventional distillation impossible. Among the alternatives employed, extractive distillation stands out, particularly due to the use of solvents that modify the vapor-liquid equilibrium. In this context, ionic liquids have been studied as more sustainable replacements for traditional solvents, such as ethylene glycol (EG). This work aimed to simulate and evaluate the extractive distillation of the ethanol-water system using ethylene glycol (EG) and the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate ([EMIM][BF<sub>4</sub>]) as solvents. To this end, a flowchart representing the industrial process was developed in Aspen Plus, adopting the NRTL thermodynamic model to calculate vapor-liquid equilibrium. Different proportions of [EMIM][BF<sub>4</sub>] and EG were analyzed, evaluating their influence on anhydrous ethanol purity, reboiler and condenser thermal loads, and specific energy consumption (SEC). The results showed that ethanol purity at the top of the column remained in the range of 0.995 up to approximately 40% [EMIM][BF<sub>4</sub>], a condition considered optimal. In this range, a maximum reduction in the total reboiler load to approximately 63.2 kW and a lower SEC value of 0.682 kWh/kg were observed, indicating significant energy gains compared to cases with a lower amount of ionic liquid. At higher concentrations, above 50% IL, a purity reduction specification (decrease to  $\approx 0.994$ ) and an increase in overall energy consumption were observed, compromising the process viability. It is concluded that the combined use of EG and [EMIM][BF<sub>4</sub>] can improve the energy efficiency of extractive distillation, with the 40% IL and 60% EG scenario being the most promising, as it combines lower energy consumption with maintained product quality. The study also highlights the potential of ionic liquids as alternative entrainers, although additional economic and environmental analyses are needed for industrial-scale validation.

Keywords: Anhydrous ethanol, Extractive distillation, Ionic liquids, Ethylene glycol, Simulation. adicionados

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Componentes do processo produtivo a simulação.....	24
Tabela 2: Especificações das correntes de alimentação do processo .....	27
Tabela 3: Condições operacionais dos equipamentos do processo .....	27
Tabela 4: Vazões mássicas de Etilenoglicol e [EMIM][BF <sub>4</sub> ].....	28

## Lista de Figuras

Figura 1: Fluxograma do processo .....	25
Figura 2: Fração mássica de etanol anidro .....	29
Figura 3: Carga térmica do refeedor da coluna EDC .....	30
Figura 4: Carga térmica do condensador da coluna EDC .....	31
Figura 5: Carga térmica do refeedor da coluna RDC .....	32
Figura 6: Carga térmica do condensador da coluna RDC .....	33
Figura 7: Carga térmica total dos refeedores do processo .....	34
Figura 8: Carga térmica total dos condensadores do processo .....	35
Figura 9: Consumo específico de energia.....	36

## Sumário

1. INTRODUÇÃO .....	12
1.1 OBJETIVOS .....	14
1.1.1 Objetivo Geral.....	14
1.1.2 Objetivos Específicos.....	14
2. REFERENCIAL TEÓRICO .....	15
2.1 Fundamentos da separação azeotrópica etanol-água .....	15
2.1.1 Propriedades físico-químicas do sistema etanol-água .....	15
2.1.2 <i>Limitações da Destilação Simples para Separação Azeotrópica</i> .....	15
2.2 Destilação Extrativa.....	16
2.3 Líquidos iônicos como solventes extrativos alternativos sustentáveis .....	17
2.3.1 <i>Conceito de líquido iônico</i> .....	17
2.3.2 <i>Impactos ambientais dos solventes tradicionais</i> .....	18
2.3.3 <i>Vantagens dos líquidos iônicos como solventes</i> .....	19
2.3.4 Critérios de seleção de solventes .....	20
2.3.5 <i>Líquido Iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]</i> .....	20
2.4 Ferramentas computacionais para simulação de processo.....	21
3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS .....	22
3.1 Pesquisa Bibliográfica .....	22
3.2 Definição dos componentes do processo .....	22
3.3 Escolha dos modelos termodinâmicos adequados .....	22
3.4 Construção do Fluxograma do Processo.....	23
3.5 Definição das condições operacionais dos equipamentos especificações das correntes de alimentação.....	23
4. RESULTADOS E DISCURSÕES .....	24
4.1 Definição dos componentes do processo .....	24
4.1 Escolha do modelo termodinâmico adequado .....	24
4.2 Construção do fluxograma do processo.....	25
4.3 Definição das condições operacionais dos equipamentos e especificação das correntes de alimentação.....	26
4.4 Análise gráfica dos resultados do simulador .....	28
5. CONCLUSÃO .....	38

## 1. INTRODUÇÃO

O etanol é um dos biocombustíveis mais relevantes no contexto energético mundial, utilizado tanto como combustível alternativo quanto como matéria-prima em setores industriais. No Brasil, sua importância é ainda mais expressiva, visto que o país é líder na produção a partir da cana-de-açúcar, uma fonte renovável e de baixo impacto ambiental. Além de contribuir para a matriz energética limpa, o etanol possui competitividade econômica frente a outros combustíveis fósseis e renováveis (Figueroa, 2011; Sousa, 2014).

Entretanto, a obtenção de etanol anidro em elevada pureza enfrenta um obstáculo fundamental: a formação do azeótropo etanol/água, que limita a destilação convencional a concentrações em torno de 95,6% em volume de etanol. Para superar essa limitação, diferentes processos de desidratação têm sido estudados, entre eles a destilação azeotrópica, a adsorção, a pervaporação e a destilação extrativa, sendo esta última a mais consolidada em escala industrial devido à sua flexibilidade e eficiência (Dai *et al.*, 2014; Li *et al.*, 2021).

Na destilação extrativa, adiciona-se um terceiro componente, denominado de solvente (*entrainer*), que altera a volatilidade relativa do sistema, viabilizando a quebra do azeótropo. O etilenoglicol (EG) é tradicionalmente o solvente mais utilizado nesse processo, devido à sua capacidade de favorecer a separação etanol/água. Contudo, o uso exclusivo do EG apresenta desvantagens como alto consumo energético, refletindo em maiores custos operacionais e impactos ambientais (Dai *et al.*, 2014).

Nesse cenário, líquidos iônicos (LIs) vêm se destacando como alternativas promissoras. Essas substâncias apresentam propriedades singulares, como pressão de vapor praticamente nula, estabilidade térmica e estrutural, além da possibilidade de ajuste químico por meio da escolha de cátions e ânions. Tais características permitem um efeito de intensificação do processo, reduzindo perdas de etanol e possibilitando maior seletividade. Adicionalmente, são considerados solventes “verdes”, por não emitirem compostos orgânicos voláteis (Cavalcanti, 2017).

Apesar de suas vantagens, o uso isolado de líquidos iônicos pode ser limitado por fatores como alta viscosidade e custo elevado. Dessa forma, a combinação de EG e LIs tem sido investigada como alternativa capaz de unir a eficiência do solvente convencional à sustentabilidade dos líquidos iônicos. Estudos recentes demonstram que misturas de etilenoglicol com líquidos iônicos, como o [EMIM][BF<sub>4</sub>], podem proporcionar reduções

significativas no consumo específico de energia (SEC) e no custo anual total (TAC) das colunas de destilação, mantendo a elevada pureza do etanol anidro obtido (Dai *et al.*, 2014; Li *et al.*, 2021).

## 1.1 OBJETIVOS

### 1.1.1 Objetivo Geral

Avaliar, por modelagem e simulação, como a variação do teor do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] na mistura com o etilenoglicol influencia no consumo energético e na pureza de etanol anidro obtido pelo processo de destilação extrativa.

### 1.1.2 *Objetivos Específicos*

- Fazer o levantamento, na literatura, dos dados necessários para desenvolver o modelo do processo de destilação extrativa da mistura etanol/água no simulador;
- Construir o modelo do processo de destilação extrativa da mistura etanol/água no simulador;
- Avaliar o efeito da variação do teor do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] na mistura com o etilenoglicol sobre o desempenho energético do processo e pureza do etanol anidro;
- Determinar qual a composição da mistura do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] com etilenoglicol que apresenta o melhor desempenho energético e o menor consumo específico de energia (SEC).

## 2. REFERENCIAL TEÓRICO

### 2.1 Fundamentos da separação azeotrópica etanol-água

#### 2.1.1 *Propriedades físico-químicas do sistema etanol-água*

A mistura etanol-água possui grande importância para a indústria química e energética, sobretudo na produção de biocombustíveis. Essa relevância decorre das propriedades físico-químicas singulares do sistema, que apresenta um azeótropo binário em torno de 95,6% em massa de etanol e 4,4% de água a 1 atm. Esse comportamento limita a concentração máxima de etanol obtida por destilação simples, impossibilitando alcançar o produto anidro apenas por esse processo (Sousa, 2014).

A formação do azeótropo está diretamente associada às propriedades termodinâmicas da mistura. Etanol e água possuem pontos de ebulição relativamente próximos (78,4 °C e 100 °C, respectivamente, a 1 atm), o que favorece o estabelecimento do azeótropo. Além disso, ambos são compostos polares com elevada capacidade de formar ligações de hidrogênio, resultando em uma estrutura fortemente associada no estado líquido. Essas interações intermoleculares reduzem a diferença de volatilidade relativa entre os componentes, tornando a separação convencional menos eficiente (Malik *et al.*, 2023).

Estudos de modelagem confirmam esse comportamento. Malik *et al.* (2023), demonstraram por meio do método COSMO-RS, que o etanol apresenta caráter predominante de aceitador de ligações de hidrogênio (HBA), enquanto a água atua principalmente como doador (HBD). Essa complementaridade explica a forte interação molecular e a estabilidade do azeótropo, dificultando ainda mais sua quebra por destilação simples.

Do ponto de vista estrutural, o sistema etanol-água é altamente polar. Não apenas o etanol e a água, mas também o etilenoglicol, tradicionalmente utilizado como solvente extrativo, compartilham essa natureza polar, o que favorece interações via ligações de hidrogênio e forças eletrostáticas (Malik *et al.*, 2023; Dai *et al.*, 2014). Tais características reforçam a complexidade do sistema e justificam a necessidade de técnicas alternativas, como a destilação extrativa, para a obtenção de etanol anidro em escala industrial.

#### 2.1.2 *Limitações da Destilação Simples para Separação Azeotrópica*

A destilação simples apresenta limitações significativas na separação do sistema etanol-água devido à formação de azeótropos. De acordo com Li (2021, p. 1), “etanol e água são sistemas azeotrópicos, e etanol e metanol são sistemas com pontos de ebulição semelhantes.

Portanto, é de grande importância separar a água e o metanol do etanol para preparar etanol anidro de alta qualidade”. Esse fenômeno decorre da proximidade nos pontos de ebulição dos componentes, o que impossibilita a obtenção de etanol anidro em elevada pureza pela destilação convencional.

Na mesma linha, Malik (2023, p. 2) ressalta que “a separação do etanol da água é um pouco difícil devido à estreita faixa de ebulição do etanol e da água, resultando na formação de azeótropos. Portanto, a separação não é possível por meio de destilação convencional”. O autor acrescenta que, para superar tal limitação, técnicas mais avançadas têm sido empregadas, como o uso de membranas, peneiras moleculares, destilação azeotrópica e, sobretudo, a destilação extrativa, considerada mais eficaz para esse sistema.

Rao (2025, p. 4) também aponta que, para misturas homogêneas com pequenas diferenças de volatilidade relativa ou forte tendência azeotrópica, “a operação de destilação convencional não é viável, e a incapacidade de separar os componentes resulta em resultados ruins”. Além disso, o uso de solventes orgânicos tradicionais como agentes extrativos apresenta desvantagens, pois, devido à sua elevada volatilidade, podem ser arrastados para o topo da coluna, reduzindo a pureza do produto e exigindo maiores taxas de refluxo (Rao, 2025).

Outro ponto relevante é destacado por Zhu *et al.* (2016), ao evidenciar que a purificação do etanol requer níveis de pureza acima de 99,5%. Entretanto, o azeótropo etanol-água se estabelece em 95,5%, tornando a destilação simples incapaz de atender a esse requisito. Nesse sentido, “sua purificação requer o uso de técnicas especiais de separação, tais como membranas, peneiras moleculares, destilação azeotrópica, extração e destilação extrativa” (Zhu *et al.*, 2016, p. 191).

## **2.2 Destilação Extrativa**

A destilação extrativa (DE) é uma alternativa eficiente para superar as limitações da destilação simples na separação de misturas azeotrópicas, como o sistema etanol-água. De acordo com Zhu *et al.* (2016, p. 191), “a destilação extrativa é um dos métodos mais promissores, devido à sua menor demanda energética e elevada seletividade, permitindo alcançar purezas de etanol superiores a 99,5%”. O processo consiste na adição de um solvente, denominado agente extrativo, que modifica a volatilidade relativa dos componentes sem formação de novo azeótropo.

Tradicionalmente, compostos como etilenoglicol e glicerol têm sido empregados como agentes extrativos. Li (2021, p. 4) ressalta que “cada solvente pode fazer o azeótropo

desaparecer, mas o EG tem o melhor efeito na volatilidade relativa sob o mesmo fluxo de alimentação de solvente”. Contudo, o autor alerta que esses solventes apresentam limitações, como volatilidade significativa e alto consumo energético para regeneração.

No contexto brasileiro, Mezencio (2017, p. 45) aponta que “a destilação extrativa com etilenoglicol é amplamente utilizada nas usinas de etanol, mas apresenta alta demanda energética e dificuldades na recuperação do solvente”. Segundo o autor, a busca por solventes alternativos, como os líquidos iônicos, representa “uma oportunidade estratégica para reduzir custos e impactos ambientais na produção de etanol anidro” (Mezencio, 2017, p. 46).

## **2.3 Líquidos iônicos como solventes extrativos alternativos sustentáveis**

### **2.3.1 Conceito de líquido iônico**

Os líquidos iônicos (LIs) são definidos como sais orgânicos líquidos à temperatura ambiente ou próxima dela, compostos por cátions volumosos e ânions orgânicos ou inorgânicos, cuja estrutura impede a formação de redes cristalinas estáveis. Essa característica confere baixas temperaturas de fusão e reduzida pressão de vapor. Figueroa (2017, p. 67) descreve que “um líquido iônico (LI) é um sal composto por um cátion orgânico com pelo menos uma carga deslocada e um ânion inorgânico; sua estrutura evita que se forme uma rede cristalina estável, resultando em solventes líquidos altamente iônicos com temperaturas de fusão inferiores a 100 °C e com insignificante pressão de vapor”.

Além de apresentarem estabilidade química e térmica, os LIs são considerados solventes verdes pela ausência de volatilização. Malik (2023, p. 3) observa que “os líquidos iônicos (LIs) têm sido considerados um ‘solvente verde’ para processos de separação devido às suas propriedades notáveis, como alto ponto de ebulição, baixa pressão de vapor, ampla faixa de líquidos, solubilidade favorável e inflamabilidade insignificante”.

A possibilidade de ajuste de propriedades físico-químicas mediante a combinação de diferentes cátions e ânions amplia sua aplicabilidade. Mezencio (2017, p. 29) destaca que “os LIs podem ser reciclados e reutilizados, o que os torna uma opção mais ecológica em comparação aos compostos orgânicos. Outra vantagem significativa [...] é a capacidade de serem constituídos por diferentes combinações de cátions e ânions, permitindo que suas propriedades extrativas e termofísicas sejam especificamente ajustadas”.

No campo da separação azeotrópica, o uso de líquidos iônicos é associado à alta seletividade e eficiência. Li (2021, p. 5) ressalta que “o etanol pode formar ligações tanto com doadores de ligação de hidrogênio (HBD) quanto com ILs HBA”, evidenciando a capacidade

desses solventes de modificar interações moleculares em misturas polares. Complementarmente, Rao (2025, p. 6) afirma que “os LIs têm sido utilizados como extratantes em processos de destilação extrativa devido ao seu baixo ponto de fusão, propriedades físicas e químicas estáveis e não volatilização”.

### **2.3.2 Impactos ambientais dos solventes tradicionais**

O uso de solventes orgânicos tradicionais, como o etilenoglicol (EG), tem sido amplamente consolidado na destilação extrativa para a separação do azeótropo etanol-água. No entanto, esse método apresenta desafios ambientais e operacionais significativos. De acordo com Dai *et al.* (2014), a grande quantidade de EG empregada no processo exige operações complexas de recuperação e purificação, o que resulta em elevado consumo energético e aumento do custo global. Além disso, a manipulação de grandes volumes desse solvente intensifica o risco de perdas para o meio ambiente, seja por volatilização parcial, vazamentos ou descargas não controladas.

Outro ponto relevante é a toxicidade associada ao etilenoglicol. Apesar de ser eficiente na separação azeotrópica, o EG apresenta riscos à saúde humana e animal, podendo causar efeitos tóxicos se ingerido ou exposto em grandes concentrações (Malik *et al.*, 2023). Esse aspecto gera preocupações adicionais para o seu manuseio e descarte, especialmente em processos de larga escala, onde a probabilidade de exposição aumenta.

Além do EG, outros solventes orgânicos historicamente utilizados em processos de separação, como ciclo-hexano e benzeno, também estão associados a impactos negativos. O ciclo-hexano, por exemplo, é altamente inflamável e volátil, aumentando os riscos de segurança operacional. Já o benzeno, utilizado em alguns processos antigos de destilação azeotrópica, apresenta reconhecida carcinogenicidade, o que levou ao seu banimento em várias aplicações industriais (Rao *et al.*, 2025).

Esses fatores têm impulsionado a busca por alternativas mais sustentáveis. De acordo com Malik *et al.* (2023), a substituição de solventes tradicionais por líquidos iônicos (LIs) se apresenta como uma solução promissora, uma vez que os LIs possuem pressão de vapor praticamente nula, reduzindo perdas por volatilização, além de menor inflamabilidade. Felix *et al.* (2019) reforçam que, além dos benefícios ambientais, a adoção de LIs pode reduzir significativamente o consumo energético do processo, ampliando a eficiência e diminuindo a pegada de carbono.

### 2.3.3 Vantagens dos líquidos iônicos como solventes

Os líquidos iônicos (LIs) têm sido amplamente estudados como alternativas aos solventes tradicionais na destilação extrativa, principalmente por apresentarem um conjunto de propriedades físico-químicas que os tornam altamente atrativos em termos de desempenho e sustentabilidade. Segundo Rao et al. (2025), uma das principais vantagens é a pressão de vapor praticamente nula, o que minimiza perdas por evaporação e reduz emissões de compostos voláteis para a atmosfera, problema comum em processos conduzidos com solventes orgânicos como o etilenoglicol e o ciclo-hexano.

Além disso, os LIs apresentam elevada estabilidade térmica e química, o que permite sua aplicação em processos sob altas temperaturas sem degradação significativa (Malik *et al.*, 2023). Essa característica amplia sua vida útil, reduzindo a necessidade de reposição frequente e, conseqüentemente, diminuindo o impacto ambiental e o custo operacional do processo.

Outro aspecto relevante é a alta seletividade na separação azeotrópica. Estudos de simulação e modelagem molecular mostram que os LIs possuem forte capacidade de interação com moléculas polares, como a água, promovendo alteração da volatilidade relativa do sistema etanol-água. Malik *et al.* (2023) verificaram que, por meio de cálculos COSMO-RS, líquidos iônicos com caráter de aceitadores de ligação de hidrogênio (HBA) apresentam interações intensas com o etanol, facilitando a separação.

Do ponto de vista ambiental e de segurança, os LIs apresentam vantagens adicionais. Diferentemente de solventes como benzeno e ciclo-hexano, eles são não inflamáveis, o que reduz riscos operacionais e melhora as condições de trabalho em plantas industriais (Rao *et al.*, 2025). Esse fator é especialmente importante em processos que envolvem grandes volumes e temperaturas elevadas.

A possibilidade de ajuste estrutural também se destaca entre os benefícios dos LIs. Como são compostos formados por combinações de diferentes cátions e ânions, é possível projetar líquidos iônicos com propriedades específicas para cada sistema de separação. Felix *et al.* (2019) ressaltam que essa “química sob medida” permite a escolha de líquidos iônicos mais seletivos e energeticamente eficientes, ampliando sua aplicabilidade em processos industriais.

Por fim, a utilização de LIs pode contribuir para a redução do consumo energético em destilação extrativa. Dai *et al.* (2014) mostraram que a adição de pequenas quantidades de líquidos iônicos a solventes tradicionais, como o etilenoglicol, reduziu em até 11,5% a carga térmica do processo, evidenciando seu potencial de otimização energética quando aplicados de forma pura ou combinada.

### 2.3.4 Critérios de seleção de solventes

A escolha do solvente adequado é uma etapa fundamental para a eficiência da destilação extrativa, especialmente no caso da separação azeotrópica etanol-água. O primeiro critério a ser considerado é a seletividade, definida como a capacidade do solvente de modificar a volatilidade relativa dos componentes. Rao *et al.* (2025) destacam que o método de equilíbrio líquido-vapor (VLE) é amplamente utilizado para triagem de entrainers, pois permite quantificar diretamente o efeito do solvente na volatilidade relativa da mistura. Dessa forma, quanto maior a seletividade, menor será a quantidade de solvente necessária para romper o azeótropo.

Outro aspecto central é a capacidade de separação, relacionada ao desempenho do solvente frente à sua quantidade de uso. Estudos conduzidos por Dai *et al.* (2014) demonstraram que diferentes solventes podem eliminar o azeótropo etanol-água; contudo, o etilenoglicol apresentou o melhor efeito sobre a volatilidade relativa quando utilizado no mesmo fluxo de alimentação. Esse resultado evidencia que a escolha de um solvente não depende apenas de sua seletividade, mas também de sua capacidade de promover a separação de forma eficiente com menor consumo.

Além disso, critérios ambientais vêm ganhando importância na avaliação de novos solventes, sobretudo a biodegradabilidade e o impacto ambiental. Malik *et al.* (2023) ressaltam que os líquidos iônicos são considerados “solventes verdes” em função de sua baixa pressão de vapor, reduzida inflamabilidade e estabilidade térmica, propriedades que diminuem os riscos ambientais e de segurança. Felix *et al.* (2019) acrescentam que a possibilidade de projetar líquidos iônicos a partir de diferentes combinações de cátions e ânions possibilita a seleção de alternativas mais sustentáveis, sem comprometer o desempenho técnico.

### 2.3.5 Líquido Iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]

O líquido iônico 1-etil-3-metilimidazólio tetrafluoroborato ([EMIM][BF<sub>4</sub>]) tem se destacado como um dos solventes mais promissores no processo de desidratação do etanol por destilação extrativa. Estudos de simulação e otimização demonstram que seu uso possibilita a obtenção de etanol com pureza superior a 99,9%, além de apresentar menor consumo energético quando comparado a solventes convencionais, como glicerol, gasolina e etilenoglicol (Zhu *et al.*, 2016). Essa eficiência decorre de sua maior seletividade em relação à água, o que reduz a razão solvente/alimentação necessária e, conseqüentemente, o custo energético do reboiler.

Outra vantagem do [EMIM][BF<sub>4</sub>] é sua estabilidade térmica e química, associada à baixa volatilidade, características que favorecem a recuperação e o reuso do solvente, diminuindo o impacto econômico e ambiental do processo. A análise econômica conduzida por Zhu *et al.* (2016) mostrou que a aplicação desse líquido iônico pode reduzir em até 29% o custo anual total (TAC) da operação em comparação a alternativas convencionais, reforçando seu potencial para viabilizar processos de purificação de bioetanol em escala industrial.

## 2.4 Ferramentas computacionais para simulação de processo

O uso de ferramentas computacionais tem se mostrado essencial no estudo da separação azeotrópica etanol-água, permitindo avaliar alternativas de solventes de forma mais rápida, econômica e precisa. Softwares de simulação como o Aspen Plus possibilitam a modelagem de colunas de destilação extrativa, estimando parâmetros como consumo energético, razão solvente/alimentação e pureza do etanol obtido. Felix *et al.* (2019) demonstraram, por meio desse software, que o uso do líquido iônico [BMIM][BF<sub>4</sub>] apresentou desempenho superior ao do etilenoglicol, com menor demanda energética e maior seletividade.

Além da simulação de processos completos, métodos termodinâmicos são amplamente utilizados para prever o comportamento do equilíbrio líquido-vapor (ELV). O modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid) tem sido empregado para correlacionar dados experimentais e validar simulações no Aspen Plus, enquanto técnicas baseadas em COSMO-RS (Conductor-like Screening Model for Real Solvents) permitem prever propriedades moleculares e a interação entre líquidos iônicos, etanol e água (Malik *et al.*, 2023). Segundo esses autores, a análise por COSMO-RS mostrou que o etanol atua predominantemente como aceitador de ligações de hidrogênio, enquanto líquidos iônicos da família imidazólica se comportam como fortes doadores, intensificando a separação.

De acordo com Rao *et al.* (2025), o uso de simulações computacionais também possibilita a triagem inicial de líquidos iônicos, reduzindo a necessidade de extensos testes experimentais. Essa abordagem acelera a seleção de entrainers, diminui custos laboratoriais e orienta o desenvolvimento de solventes mais eficientes. Zhu *et al.* (2016), ao avaliar o [EMIM][BF<sub>4</sub>], reforçam que a integração entre simulação e análise econômica é fundamental para determinar a viabilidade do processo, evidenciando que o líquido iônico reduziu em até 29% o custo anual total (TAC) em comparação a solventes convencionais.

### 3. PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

#### 3.1 Pesquisa Bibliográfica

A pesquisa bibliográfica foi realizada com o objetivo de reunir e analisar os principais estudos relacionados à separação azeotrópica do sistema etanol-água, com ênfase na comparação entre solventes tradicionais, como o etilenoglicol, e alternativas sustentáveis, como os líquidos iônicos. Para tanto, foram consultadas bases de dados científicas reconhecidas, incluindo ScienceDirect, Scopus, Web of Science e Google Acadêmico, priorizando artigos que tivessem ligação com o assunto.

#### 3.2 Definição dos componentes do processo

A definição dos componentes do processo foi realizada com base em dados disponíveis na literatura, contemplando etanol, água e os solventes extrativos etilenoglicol (EG) e o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]. No caso do etanol, da água e do etilenoglicol, suas propriedades termodinâmicas já estão incluídas nas bases de dados padrão do Aspen Plus, possibilitando sua inserção direta no modelo. No entanto, para o [EMIM][BF<sub>4</sub>] foi necessária a criação de um componente hipotético, a partir da inserção de propriedades físico-químicas obtidas em publicações recentes.

De acordo com Malik *et al.* (2023), as propriedades fundamentais do [EMIM][BF<sub>4</sub>] incluem massa molecular de 198,02 g/mol, densidade de 1,21 g/cm<sup>3</sup> a 298 K e capacidade calorífica (C<sub>p</sub>) de 2,54 J/g·K. Além disso, outros parâmetros como temperatura crítica (T<sub>c</sub> = 596,2 K), pressão crítica (P<sub>c</sub> = 23,6 bar), volume crítico (V<sub>c</sub> = 540,8 cm<sup>3</sup>/mol) e fator acêntrico ( $\omega = 0,2573$ ), foram obtidos do estudo de Zhu *et al.* (2016) e aplicados no simulador para que fosse possível estimar com maior precisão o comportamento do líquido iônico.

Além das propriedades do líquido iônico, Malik *et al.* (2023) também apresentaram as condições operacionais dos equipamentos adotadas neste estudo de simulação.

Dessa forma, a definição dos componentes contemplou tanto os dados disponíveis nas bases do Aspen Plus quanto as propriedades suplementares publicadas por Malik *et al.* (2023) e Zhu *et al.* (2016), assegurando maior realismo ao modelo e viabilizando análises consistentes da destilação extrativa aplicada ao sistema etanol-água.

#### 3.3 Escolha do modelo termodinâmico adequado

Pesquisou-se na literatura o modelo termodinâmico mais adequado para representar o sistema etanol-água em processos de destilação extrativa. De acordo com Li *et al.* (2021) e Malik *et al.* (2023), o modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid) apresenta desempenho satisfatório na descrição do equilíbrio líquido-vapor de sistemas envolvendo líquidos iônicos, sendo amplamente empregado em estudos de simulação e otimização de colunas extrativas. No ambiente de propriedades do simulador, especificou-se o modelo adotado para o cálculo das propriedades termodinâmicas da mistura. A seleção correta do modelo é fundamental para que a simulação apresente resultados confiáveis e capazes de reproduzir com precisão o comportamento real do processo.

### **3.4 Construção do Fluxograma do Processo**

Após a etapa de definição das propriedades, iniciou-se a construção do fluxograma do processo de destilação extrativa. O simulador utilizado dispõe de uma biblioteca com diferentes modelos de equipamentos comumente empregados em plantas industriais.

Com base em dados da literatura e nos modelos de equipamentos disponíveis na biblioteca do simulador, foi elaborado o fluxograma do processo de separação do sistema etanol-água. Além da disposição sequencial dos equipamentos que compõem o processo, também foram inseridas as correntes de matéria, representando os fluxos de alimentação e saída, responsáveis por conectar as unidades entre si.

### **3.5 Definição das condições operacionais dos equipamentos especificações das correntes de alimentação**

A etapa seguinte da metodologia consistiu em definir as condições operacionais dos equipamentos presentes no fluxograma do processo de destilação extrativa. No simulador, foram atribuídos aos equipamentos parâmetros como pressão, temperatura de operação e configuração de estágios, de acordo com dados obtidos de Malik *et al.* (2023).

As correntes de alimentação do sistema também foram especificadas. Para cada corrente, definiram-se temperatura, pressão, vazão mássica e composição, considerando a mistura etanol-água e os solventes extrativos avaliados, etilenoglicol (EG) e [EMIM][BF<sub>4</sub>].

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 Definição dos componentes do processo

Nesta etapa, foram especificados no simulador todos os componentes químicos envolvidos no processo de destilação extrativa. Como o objetivo deste trabalho é avaliar a separação do sistema etanol-água utilizando solventes extrativos, foi necessário definir no modelo a mistura principal (etanol e água), o solvente tradicional (etilenoglicol) e o líquido iônico selecionado ([EMIM][BF<sub>4</sub>]).

No caso do etanol, da água e do etilenoglicol, as propriedades já estão disponíveis no banco de dados do Aspen Plus e puderam ser incorporadas diretamente à simulação. Entretanto, o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] não consta na base do simulador, exigindo a criação de um componente hipotético, para o qual foram inseridas propriedades fundamentais reportadas na literatura de Malik *et al.* (2023) e Zhu *et al.* (2016), como fórmula molecular, massa molar, densidade, capacidade calorífica, temperatura crítica, pressão crítica, volume crítico e fator acêntrico.

Os componentes químicos definidos e seus respectivos nomes no simulador estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Componentes do processo produtivo adicionados a simulação

<b>Componentes</b>	<b>Nome do componente em inglês</b>	<b>Fórmula</b>	<b>Tipo</b>
Água	Water	H <sub>2</sub> O	Convencional
Etanol	Ethanol	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	Convencional
Etilenoglicol	Ethylene glycol	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	Convencional
[EMIM][BF <sub>4</sub> ]	1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	Convencional

Fonte: Autor 2025

### 4.1 Escolha do modelo termodinâmico adequado

De acordo com Li *et al.* (2021) e Malik *et al.* (2023), a escolha do modelo

termodinâmico é um dos fatores mais importantes para representar adequadamente o sistema etanol-água em processos de destilação extrativa, especialmente quando se empregam solventes como etilenoglicol (EG) e o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]. No simulador Aspen Plus, após a definição dos componentes, foi especificado o modelo adotado para o cálculo das propriedades do processo.

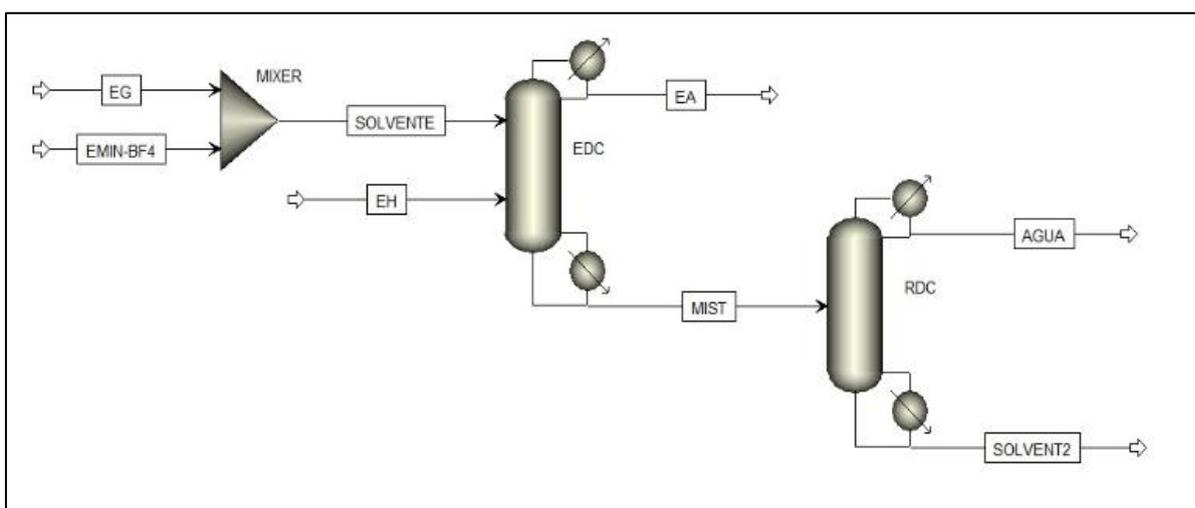
O sistema etanol-água apresenta comportamento não ideal, caracterizado pela formação de azeótropo e por intensas interações intermoleculares. Por essa razão, foi selecionado o modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid), amplamente recomendado por esses autores e em tutoriais de simulação, por representar de forma satisfatória esse tipo de mistura.

Dessa forma, assegura-se que os resultados obtidos na simulação sejam confiáveis e coerentes com o comportamento real do processo.

## 4.2 Construção do fluxograma do processo

Após a especificação das propriedades, iniciou-se a elaboração do fluxograma do processo. O simulador utilizado possui uma biblioteca com diversos modelos de equipamentos industriais, permitindo sua aplicação conforme os dados disponíveis na literatura. Utilizando esses recursos, foi desenvolvido o fluxograma do processo de destilação extrativa do sistema etanol-água. A Figura 1 apresenta o fluxograma desenvolvido no simulador.

Figura 1: Fluxograma do processo



Fonte: Autor 2025

O processo de destilação extrativa representado no fluxograma é constituído por três equipamentos principais: um misturador (MIXER), uma coluna de destilação extrativa (EDC)

e uma coluna de recuperação de solvente (RDC). Inicialmente, as correntes de etilenoglicol (EG) e do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] são misturadas no equipamento MIXER, originando a corrente de solvente. Essa corrente é alimentada na coluna de destilação extrativa (EDC) juntamente com a corrente de etanol hidratado (EH). No topo da coluna EDC, obtém-se a corrente de etanol anidro (EA), enquanto no fundo é formada a corrente denominada MIST, composta majoritariamente por água, solvente e parte do etanol retido.

A corrente MIST segue para a coluna de recuperação de solvente (RDC), onde ocorre a separação dos componentes remanescentes. No topo da RDC é retirada a corrente de água (AGUA), e no fundo é recuperada a mistura de solventes (SOLVENT2). Embora em processos industriais seja comum a recirculação desta corrente para reduzir o consumo de insumos e aumentar a viabilidade econômica, neste trabalho não foi adotada a estratégia de recirculação porque o objetivo principal foi avaliar a influência da variação da composição da mistura de solventes sobre o consumo energético do processo e pureza do etanol anidro.

#### **4.3 Definição das condições operacionais dos equipamentos e especificação das correntes de alimentação**

Nesta etapa, foram determinadas as condições operacionais necessárias para a simulação dos equipamentos que compõem o processo de destilação extrativa. As especificações incluíram parâmetros como número de estágios, vazão de destilado, razão de refluxo, estágios de alimentação e pressão da coluna de destilação, definidos com base em dados obtidos na literatura para o sistema etanol-água utilizando etilenoglicol (EG) e o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>].

As correntes de alimentação também foram configuradas no simulador, abrangendo variáveis fundamentais como temperatura, pressão, vazão mássica e composição. A definição dessas propriedades foi essencial para garantir que o modelo representasse de forma realista o comportamento do processo.

Na Tabela 2 verificamos as especificações das correntes de alimentação.

Tabela 2: Especificações das correntes de alimentação do processo

Especificação	EG	EMIM-BF <sub>4</sub>	EH
<b>Temperatura (°C)</b>	78	78	78
<b>Pressão (atm)</b>	1	1	1
<b>Vazão mássica (kg/h)</b>	Varia do caso 1 ao 11	Varia do caso 1 ao 11	100
<b>Fração mássica:</b>			
<b>Água</b>	0	0	0,068
<b>Etanol</b>	0	0	0,932
<b>Etilenoglicol</b>	1	0	0
<b>[EMIM][BF<sub>4</sub>]</b>	0	1	0

Fonte: Autor 2025

Na tabela 3 verificamos as condições operacionais dos equipamentos do processo.

Tabela 3: Condições operacionais dos equipamentos do processo

Especificação	Coluna Extrativa	Coluna de Retificação
	(EDC)	(RDC)
<b>Número de Estágios</b>	15	6
<b>Vazão de destilado (kg/h)</b>	93,2	6,8
<b>Razão de refluxo (mássica)</b>	1	2
<b>Pressão (atm)</b>	1	0,5
<b>Estágio de alimentação:</b>		
<b>EH</b>	11	-
<b>SOLVENTE</b>	3	-
<b>MIST</b>	-	3

Fonte: Autor 2025

Na Tabela 4 mostra as vazões mássicas de etilenoglicol e [EMIM][BF<sub>4</sub>].

Tabela 4: Vazões mássicas de Etilenoglicol e [EMIM][BF<sub>4</sub>]

Caso	Vazão Etilenoglicol (kg/h)	Vazão [EMIM][BF <sub>4</sub> ] (kg/h)
1	100	0
2	90	10
3	80	20
4	70	30
5	60	40
6	50	50
7	40	60
8	30	70
9	20	80
10	10	90
11	0	100

Fonte: Autor 2025

#### 4.4 Análise gráfica dos resultados do simulador

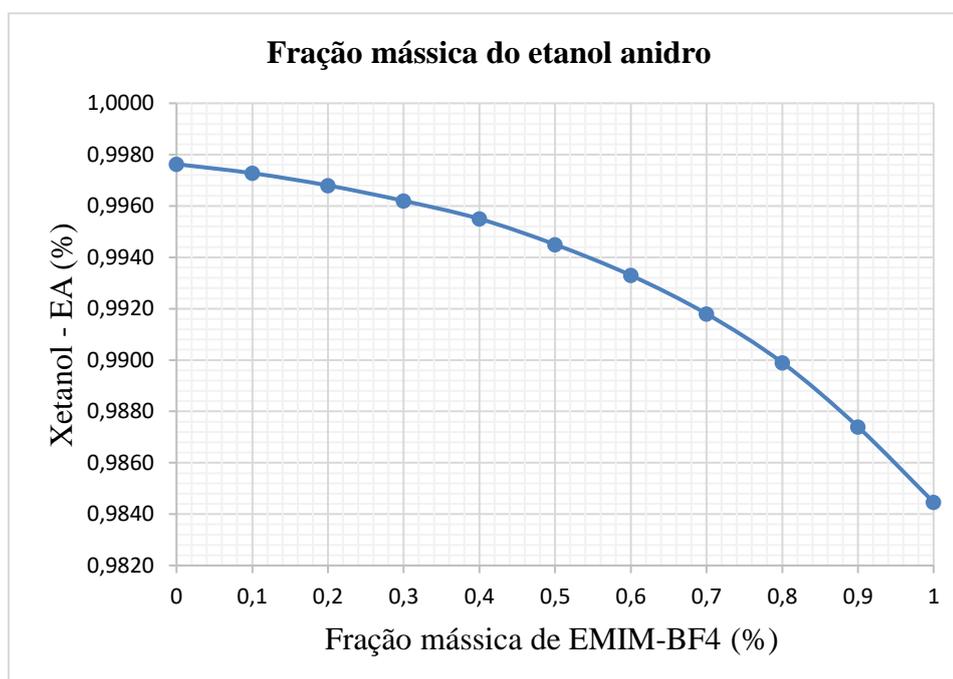
Após a definição das condições operacionais e das correntes de alimentação, foram realizadas simulações do processo de destilação extrativa do sistema etanol-água utilizando como solventes o etilenoglicol (EG) e o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]. Os resultados obtidos foram organizados em gráficos, de modo a facilitar a interpretação do comportamento do sistema em diferentes condições de operação.

As análises contemplam os Casos 1 a 11, nos quais foram variadas as vazões dos solventes, e consequentemente a composição do solvente, de forma a observar seus efeitos sobre parâmetros-chave do processo, como a pureza do etanol na corrente de topo e o consumo energético.

Assim, a seguir são apresentados e discutidos os gráficos que representam os resultados de simulação, com ênfase na influência do teor de [EMIM][BF<sub>4</sub>] em mistura com etilenoglicol sobre o desempenho energético do processo, servindo de base para a avaliação crítica da viabilidade do uso do líquido iônico como alternativa ao solvente convencional.

A Figura 2 apresenta o efeito da variação da fração mássica do [EMIM][BF<sub>4</sub>] sobre a fração mássica do etanol na corrente de destilado EA.

Figura 2:Fração mássica de etanol anidro



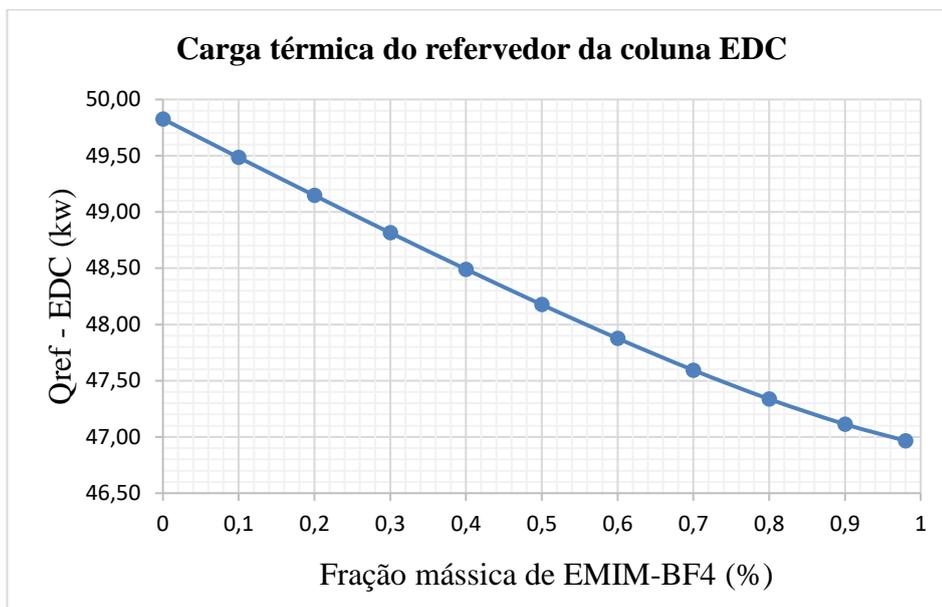
Fonte: Autor 2025

Observa-se na Figura 2 que à medida que a fração mássica do [EMIM][BF<sub>4</sub>] aumenta, a fração mássica do etanol na corrente EA diminui. No início quando não há adição de líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] (0%), a pureza do etanol obtido no topo da coluna mantém-se em torno de 0,998, ou seja, dentro da faixa de especificação de 99,5% de etanol anidro. Essa condição se mantém praticamente estável até o caso 5, quando a fração de líquido iônico atinge aproximadamente 40%, mantendo-se ainda acima de 0,995.

Entretanto, a partir do caso 6, observa-se uma mudança significativa: a pureza do etanol cai abaixo do limite de 0,995, atingindo valores próximos de 0,98 nos últimos casos avaliados (casos 9 a 11). Esse comportamento indica que, embora o aumento do teor de [EMIM][BF<sub>4</sub>] traga benefícios energéticos para o processo, há um comprometimento na qualidade do produto de topo, que deixa de atender à especificação de pureza exigida para o etanol anidro.

Portanto, a análise sugere que a proporção máxima recomendada de [EMIM][BF<sub>4</sub>] é de 40% na mistura com etilenoglicol. Acima desse valor, a pureza do etanol não alcança mais o requisito mínimo de 99,5%, comprometendo a viabilidade da operação. Assim, o ponto ótimo de utilização do líquido iônico deve considerar não apenas a redução no consumo energético, mas também o atendimento ao parâmetro de qualidade do produto final.

Figura 3: Carga térmica do refeedor da coluna EDC



Fonte: Autor 2025

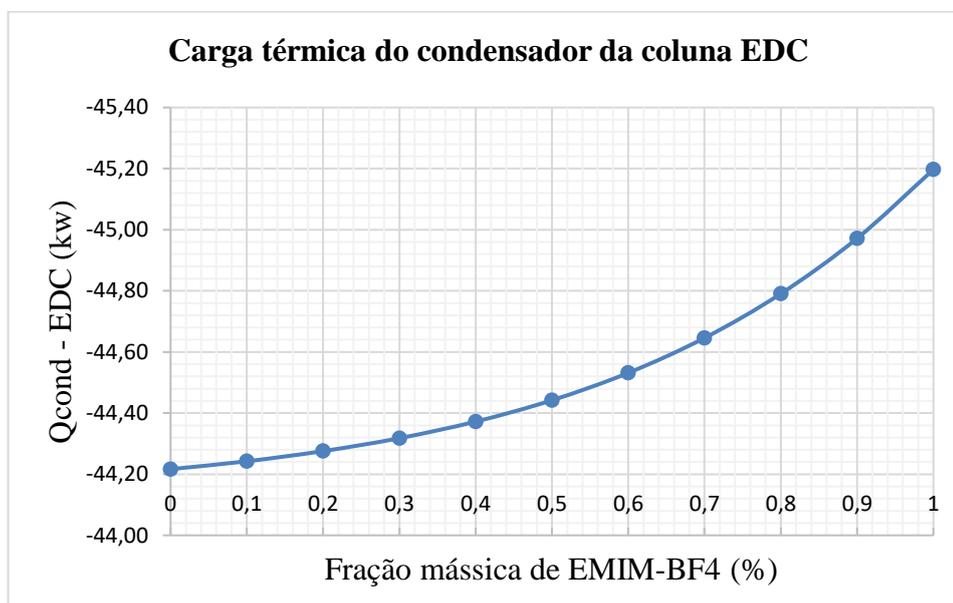
A Figura 3 apresenta a variação da carga térmica do refeedor da coluna de destilação extrativa (EDC) em função da fração mássica do líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>] na mistura com etilenoglicol.

É possível observar uma redução contínua da carga térmica conforme aumenta a proporção de [EMIM][BF<sub>4</sub>]. No ponto inicial (0% de líquido iônico, apenas EG), a carga é de aproximadamente 49,9 kW. À medida que a fração mássica do [EMIM][BF<sub>4</sub>] aumenta, a carga térmica do refeedor diminui, alcançando cerca de 47,0 kW quando a mistura é composta exclusivamente por [EMIM][BF<sub>4</sub>].

Isso mostra que, ao adicionar o líquido iônico ao solvente, o processo passa a gastar menos energia, tornando a operação mais eficiente. No entanto, a partir do Caso 8, mesmo com a redução no consumo, a pureza do etanol no topo da coluna não atinge mais a meta de 99,5%. Como já se verifica através da Figura 2, que apresenta o comportamento da pureza do etanol em função da composição da mistura solvente.

Esse comportamento é consistente com os resultados reportados por Malik *et al.* (2023), que também observaram diminuição da carga térmica e melhora da eficiência energética em faixas intermediárias de concentração de [EMIM][BF<sub>4</sub>], seguida por uma limitação na pureza do etanol em teores mais elevados do líquido iônico. Tal semelhança reforça a confiabilidade do modelo adotado e indica que há uma composição ótima do solvente capaz de equilibrar o consumo energético e a seletividade da separação.

Figura 4: Carga térmica do condensador da coluna EDC

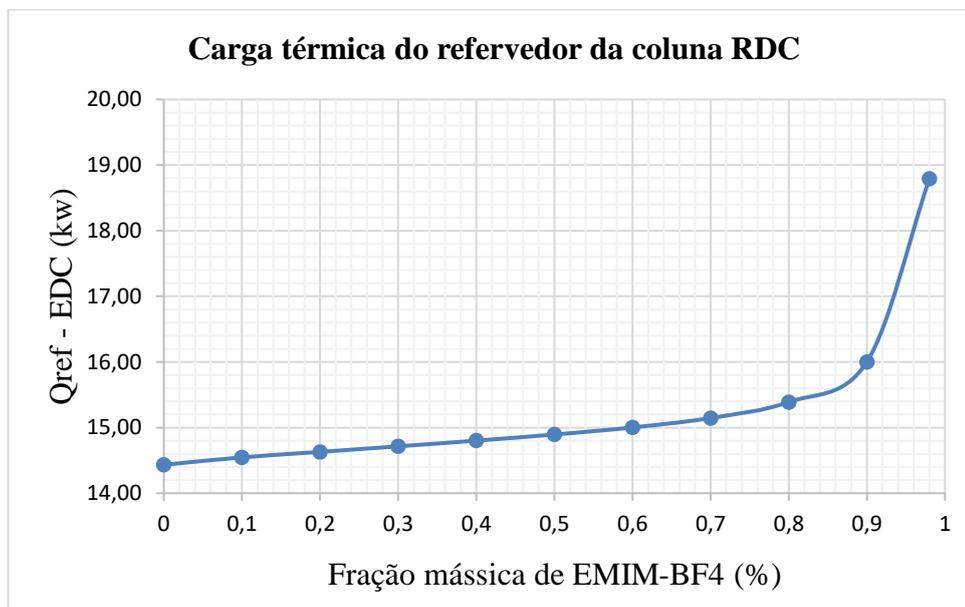


Fonte: Autor 2025

A Figura 4 diferente da Figura 3 mostra que a carga térmica do condensador aumenta conforme aumenta-se a quantidade de [EMIM][BF<sub>4</sub>] na mistura de solventes. No início, sem líquido iônico, o valor fica em torno de -44,2 kW. Quando todo o solvente é formado por [EMIM][BF<sub>4</sub>], esse valor chega a aproximadamente -45,2 kW.

Portanto, significa que o condensador precisa retirar um pouco mais de calor do processo quando há mais [EMIM][BF<sub>4</sub>]. Mesmo assim, esse aumento é pequeno se comparado à economia de energia obtida no refeedor, que é mais significativa.

Figura 5: Carga térmica do refeedor da coluna RDC



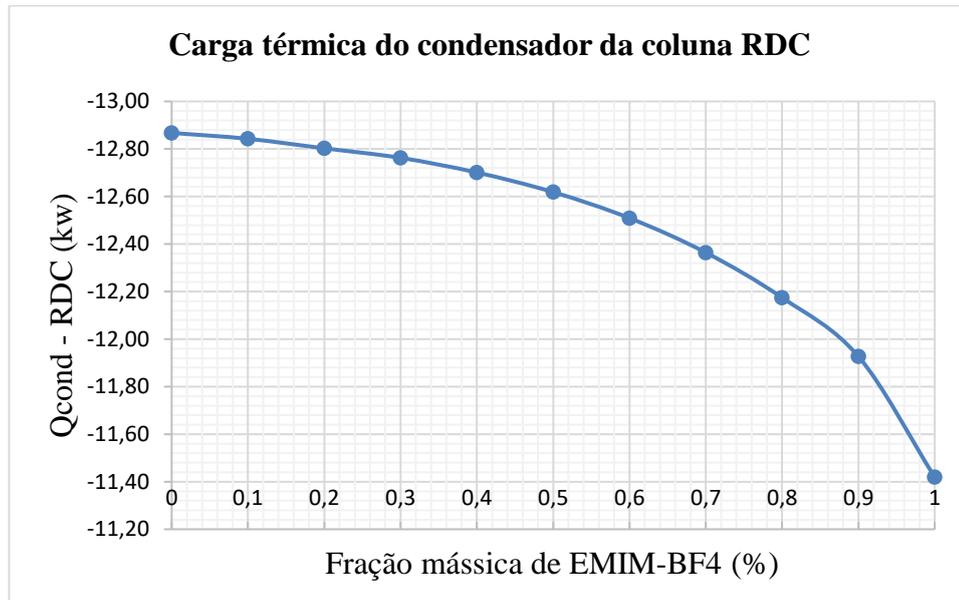
Fonte: Autor 2025

O comportamento mostrado na Figura 5 é diferente do que aconteceu no refeedor da coluna EDC. Aqui, conforme aumenta-se a fração de [EMIM][BF<sub>4</sub>], a carga térmica do refeedor da coluna RDC aumenta em vez de diminuir. No início, sem líquido iônico, o valor é de cerca de 14,4 kW, mas chega a aproximadamente 17,5 kW quando a mistura tem 100% de [EMIM][BF<sub>4</sub>]. O que corresponde a um aumento no consumo energético da ordem de 21,5%.

Na prática, isso significa que o uso de uma maior quantidade de [EMIM][BF<sub>4</sub>] faz o refeedor da RDC gastar mais energia, provavelmente porque o equilíbrio da mistura se altera e a o líquido iônico apresenta uma volatilidade e pressão de vapor muito baixas. Enquanto na EDC o líquido iônico trouxe vantagem, reduzindo o consumo de energia, na RDC o efeito é o contrário: concentrações muito altas acabam prejudicando o processo.

Assim, o resultado mais favorável ocorre até o Caso 4 (40% de IL), faixa em que a operação da coluna de recuperação apresenta menor carga térmica no refeedor sem comprometer a pureza do etanol.

Figura 6: Carga térmica do condensador da coluna RDC

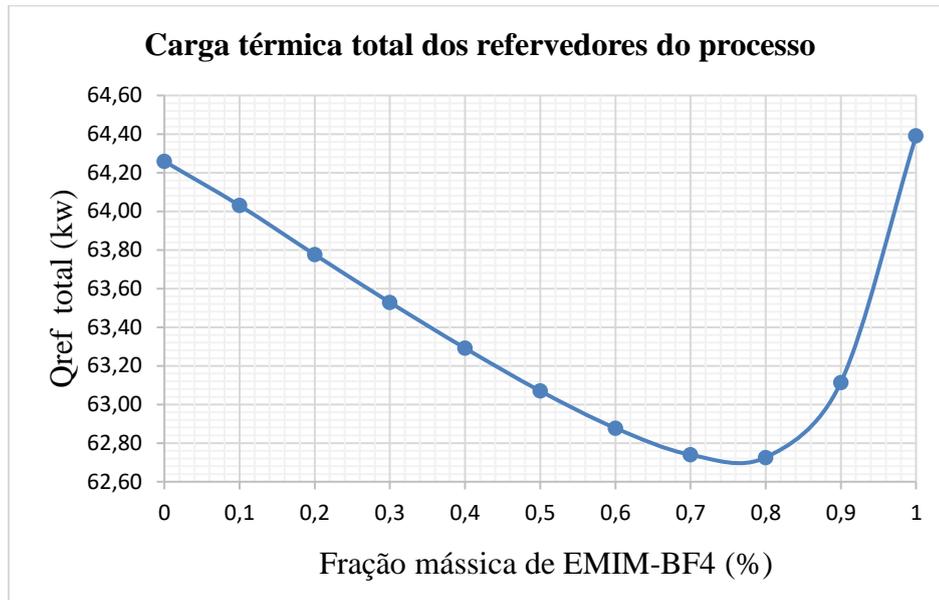


Fonte: Autor 2025

A Figura 6 mostra que a carga térmica do condensador da coluna RDC apresenta uma tendência de redução com o aumento da fração mássica de [EMIM][BF<sub>4</sub>]. No ponto inicial (0% de líquido iônico), o valor é de aproximadamente -12,8 kW, enquanto no caso de 100% de [EMIM][BF<sub>4</sub>] o valor atinge cerca de -11,4 kW, representando uma diminuição de 1,4 kW.

A redução na carga do condensador significa que menos energia precisa ser removida do sistema à medida que aumenta a presença de [EMIM][BF<sub>4</sub>]. Esse comportamento pode ser associado às propriedades físico-químicas do líquido iônico, que alteram o equilíbrio líquido-vapor e reduzem a quantidade de vapor a ser condensado. Do ponto de vista energético, isso parece positivo, pois diminui a carga térmica exigida no condensador.

Figura 7: Carga térmica total dos refervedores do processo



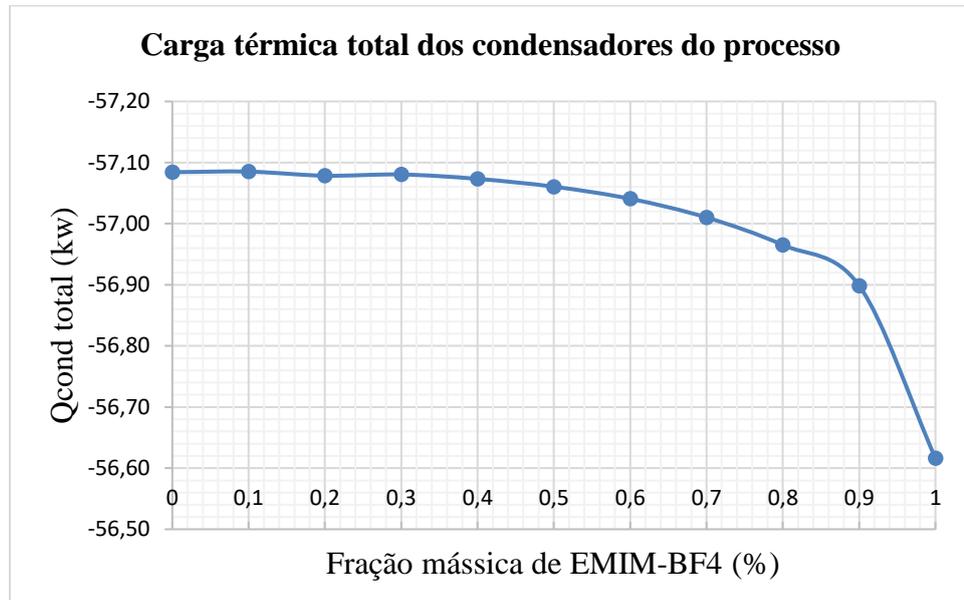
Fonte: Autor 2025

A Figura 7 apresenta o comportamento da carga térmica total dos refervedores à medida que aumenta-se a fração mássica de [EMIM][BF<sub>4</sub>]. Nota-se uma curva em formato de “U”, evidenciando a existência de um ponto ótimo de operação, no qual o processo alcança o menor consumo energético.

No início, sem adição de líquido iônico (0%), a carga total é de aproximadamente 64,3 kW. Com o aumento gradual da fração de [EMIM][BF<sub>4</sub>], observa-se uma redução contínua da carga até atingir o valor mínimo de cerca de 62,7 kW no Caso 2 (80% IL e 20% EG). Essa redução corresponde a uma economia de 1,5 kW em relação ao cenário inicial, o que representa um ganho relevante em eficiência energética.

De forma prática, a utilização de [EMIM][BF<sub>4</sub>] em proporções intermediárias traz vantagem energética para o processo. Porém, concentrações muito elevadas (acima de 80%) eliminam esses ganhos.

Figura 8: Carga térmica total dos condensadores do processo

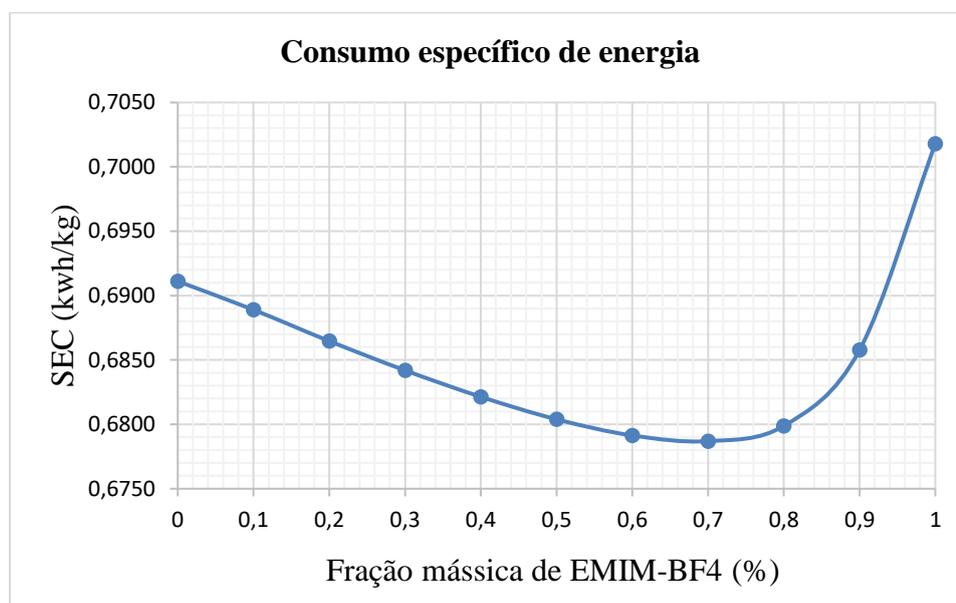


Fonte: Autor 2025

A Figura 8 mostra que a carga total dos condensadores diminui levemente quando aumenta a fração de [EMIM][BF<sub>4</sub>] na mistura. No início, sem líquido iônico, o valor é de cerca de -57,1 kW, e permanece quase estável até aproximadamente 50–60% de IL. A partir daí, a redução fica mais clara, chegando a -56,6 kW no caso de 100% IL.

Indicando que o uso de [EMIM][BF<sub>4</sub>] faz o condensador remover um pouco menos calor, provavelmente porque há menor formação de vapor a ser condensado. O ganho, porém, é pequeno se comparado ao observado nos refervedores.

Figura 9: Consumo específico de energia



Fonte: Autor 2025

A Figura 9 mostra como o consumo específico de energia, varia com a fração mássica de [EMIM][BF<sub>4</sub>] no solvente.

No ponto inicial, sem líquido iônico, o SEC é de aproximadamente 0,691 kWh/kg. À medida que a fração de [EMIM][BF<sub>4</sub>] aumenta, o consumo vai diminuindo de forma gradual, atingindo o valor mínimo em torno de 0,678 kWh/kg entre 60% e 70% de IL (Casos 7 e 8). Esse ponto representa a condição mais eficiente em termos de consumo energético. No entanto, a partir do caso 6 (50% de IL), a pureza do etanol na corrente EA começa a diminuir, conforme verificado na Figura 2, que apresenta a variação da fração mássica de etanol no destilado em função da proporção de [EMIM][BF<sub>4</sub>].

A partir de 80% de IL, observa-se uma inversão da tendência: o SEC passa a crescer rapidamente, chegando a aproximadamente 0,704 kWh/kg quando o solvente é 100% líquido iônico. Esse aumento indica que concentrações muito altas de [EMIM][BF<sub>4</sub>] deixam de ser vantajosas, pois elevam o consumo específico e, além disso, não garantem a pureza mínima do etanol.

Assim o gráfico confirma que o ponto ótimo de operação está entre 40% e 50% de IL, onde o processo apresenta maior eficiência energética. Acima dessa faixa, o aumento do SEC, somado à queda na qualidade do produto, compromete a viabilidade do uso exclusivo do líquido iônico.

Esse comportamento é coerente com os resultados obtidos por Malik *et al.* (2023), que também identificaram faixas ótimas de composição entre 40% de EG e 60% de [EMIM][BF<sub>4</sub>],

nas quais o processo apresentou o melhor equilíbrio entre eficiência energética e seletividade na separação do etanol. Assim, o gráfico confirma que o ponto ótimo de operação está entre 40% e 50% de IL, onde o processo demonstra maior eficiência energética. Acima dessa faixa, o aumento do SEC, somado à queda na qualidade do produto, compromete a viabilidade do uso exclusivo do líquido iônico.

## 5. CONCLUSÃO

A partir do trabalho realizado foi possível realizar a simulação e modelagem de um fluxograma industrial para o processo de destilação extrativa do sistema etanol-água utilizando como solventes o etilenoglicol e o líquido iônico [EMIM][BF<sub>4</sub>]. Por meio dos resultados obtidos, verificou-se que os objetivos de avaliar a influência do líquido iônico sobre a pureza do etanol anidro e o desempenho energético do processo foram alcançados. A produção de etanol anidro em alta concentração se mostrou possível dentro das condições de operação analisadas, sendo que até aproximadamente 40% de [EMIM][BF<sub>4</sub>] em mistura com 60% de etilenoglicol foi possível manter a pureza de topo em torno de 99,5%, atendendo à especificação mínima exigida.

As análises energéticas realizadas evidenciaram que a presença do líquido iônico promoveu ganhos relevantes no desempenho global, com redução da carga térmica total dos refeedores e do consumo específico de energia. Observou-se ainda que, em concentrações moderadas de [EMIM][BF<sub>4</sub>] (40%), o processo apresentou redução máxima da carga total para cerca de 63,3 kW e um consumo específico mínimo de 0,682 kWh/kg, indicando maior eficiência energética do que o caso 1 utilizando somente etilenoglicol como solvente. Entretanto, para teores mais elevados, acima de 50% de líquido iônico, verificou-se a perda da especificação de pureza do etanol (queda para valores próximos de 0,98), acompanhada por aumento no consumo energético global, comprometendo a viabilidade do processo.

A simulação permitiu identificar que o Caso 5, correspondente à condição de 40% de [EMIM][BF<sub>4</sub>] em mistura com 60% de etilenoglicol, apresentou o melhor equilíbrio entre eficiência energética e manutenção da qualidade do produto. Esse cenário se destacou como o mais promissor, oferecendo ganhos energéticos significativos sem comprometer a pureza do etanol anidro, resultando em menores custos operacionais e maior viabilidade do processo.

Além disso, os resultados reforçam a importância da escolha adequada de solventes alternativos na destilação extrativa, mostrando que os líquidos iônicos podem desempenhar um papel relevante como substitutos mais sustentáveis aos solventes tradicionais, como o etilenoglicol. O estudo também evidenciou a utilidade da simulação computacional como ferramenta de apoio, permitindo prever o comportamento termodinâmico do sistema e orientar decisões de projeto antes da aplicação em escala industrial.

Vale destacar que, embora o [EMIM][BF<sub>4</sub>] tenha se mostrado promissor em termos de eficiência energética e desempenho de separação, a análise econômica e ambiental em escala real deve ser aprofundada em trabalhos futuros, uma vez que o custo de síntese e a

disponibilidade comercial dos líquidos iônicos ainda representam desafios.

Por fim, este trabalho contribui para o avanço do conhecimento sobre o uso de líquidos iônicos na separação azeotrópica etanol-água, oferecendo uma base teórica e prática para estudos posteriores e para possíveis aplicações industriais em processos de desidratação de etanol mais eficientes e sustentáveis.

## REFERÊNCIAS

CAVALCANTI, Cláudia Jéssica da Silva. *Estudos de destilação extrativa utilizando solventes menos tóxicos e mais eficientes como etileno glicol e líquidos iônicos*. 2024. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2024.

Disponível em: <https://attena.ufpe.br/bitstream/123456789/48258/1/TESE%20Claudia%20Jessica%20da%20Silva%20Cavalcanti.pdf>. Acesso em: 16 set. 2025.

DAI, C. Y. et al. Extractive distillation with a mixture of organic solvent and ionic liquid as entrainer. *AIChE Journal*, v. 60, n. 4, p. 1406–1419, 2014.

FIGUEROA, Jaiver Efren Jaimes. *Análise e otimização do processo de obtenção de etanol anidro, empregando líquidos iônicos*. 2011. 199 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

FELIX, Lílian da Silva; SILVA, José Izaquiel Santos; VIEIRA, Mariana Martins; MEIRELES, Victória Caroline Veloso; MELO, Edilailsa Januário de. Simulação do uso do líquido iônico 1-butil-3-metilimidazólio tetrafluoroborato para produção de bioetanol anidro com o Aspen Plus. *Blucher Chemical Engineering Proceedings*, v. 1, n. 6, p. 3171–3177, 2019.

LI, Guoxuan; LIU, Shengli; YU, Gangqiang; DAI, Chengna; LEI, Zhigang. Extractive distillation using ionic liquids-based mixed solvents combined with dividing wall column. *Separation and Purification Technology*, v. 269, art. 118713, 2021.

MALIK, A. et al. Screening of ionic liquids as green entrainers for ethanol water separation. *Separation and Purification Technology*, v. 314, p. 123557, 2023.

MALIK, A. et al. Supplementary data – Screening of ionic liquids as green entrainers for ethanol water separation. *Separation and Purification Technology, Supplementary material*, 2023.

MEZENCIO, Pedro Henrique Marques. *Avaliação da desidratação de etanol com deep eutectic solvent (DES) via destilação extrativa*. 2024. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2024.

PLECHKOVA, N. V.; SEDDON, K. R. Applications of ionic liquids in the chemical industry. *Chemical Society Reviews*, v. 37, n. 1, p. 123–150, 2008.

RAO, V. V. et al. Ionic liquids as extractants in extractive distillation: A review of advances. *Separation and Purification Technology*, v. 330, p. 125271, 2025.

RODRIGUES, N. F. S. *Desenvolvimento e aplicação dos líquidos iônicos para a separação de misturas azeotrópicas em processos de destilação extrativa*. [s.l.]: Universidade Federal do Rio de Janeiro, 20XX. Disponível em: <https://pantheon.ufrj.br/bitstream/11422/17527/1/NFSRodrigues.pdf>. Acesso em: 16 set. 2025.

SOUSA, A. M. C. *Simulação do uso do líquido iônico 1-butil-3-metilimidazólio tetrafluoroborato em destilação extrativa para a produção de etanol anidro*. 2014. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2014.

ZHU, Z. et al. Extractive distillation for ethanol dehydration using ionic liquids and organic solvents as entrainers: Experiment and simulation. *Separation and Purification Technology*, v. 162, p. 91–100, 2016.

ZHU, Zhaoyou; RI, Yongsang; LI, Min; JIA, Hui; WANG, Yongkun; WANG, Yinglong. *Destilação extrativa para desidratação de etanol usando líquidos iônicos à base de imidazólio como solventes*. Qingdao University of Science and Technology, Faculdade de Engenharia Química; Kim Il Sung University, Faculdade de Química, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2016.09.018>. Acesso em: 15 set. 2025.