

PROPRIDADES VOLUMÉTRICAS DE SISTEMAS (XILOSE-ÁGUA-LÍQUIDO IÔNICO) A DIFERENTES TEMPERATURAS

Douglas Gonzalez de Oliveira¹, Heloisa Emi Hoga², Ricardo Belchior Torres³
^{1,2,3} Engenharia Química, Fundação Educacional Inaciana Padre Sabóia de Meideiros (FEI)
douglasgoncalvez@gmail.com / belchior@fei.edu.br

Resumo: No presente estudo foram realizadas medidas de densidades de soluções aquosas de 1-butil-3-metilimidazólio sulfato de hidrogênio contendo xilose a diferentes concentrações e temperaturas.

Fazendo uso do formalismo termodinâmico, foram calculadas as seguintes propriedades volumétricas: os volumes molares aparentes da xilose, os volumes molares aparentes à diluição infinita e os volumes de transferência da xilose da água para as soluções contendo líquidos iônicos.

1. Introdução

Líquidos iônicos (ILs) são sais que possuem ponto de fusão abaixo de 100 °C. Muitas dessas espécies químicas se encontram no estado líquido à temperatura ambiente e são denominadas de “Room Temperature Ionic Liquids” (RTILs).^[1]

Os líquidos iônicos têm encontrados aplicações em vários campos dentre eles, na eletroquímica, purificações de proteínas, dissolução de biomassa e estudo em nanociências.^[2] O 1-butil-3-metilimidazólio sulfato de hidrogênio foi o líquido iônico utilizado no experimento.

A D-xilose é o segundo monossacarídeo mais abundante em material lignocelulósico. (Figura 1). Estudos na literatura têm mostrado a possibilidade de obtenção do furfural a partir da xilose em presença de líquidos iônicos.^[3]

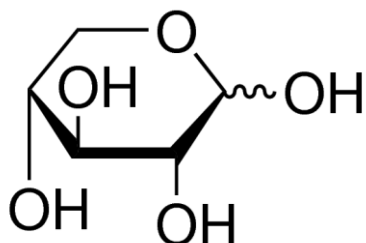


Figura 1 - Estrutura molecular da xilose

Este trabalho possui como objetivo avaliar as variações volumétricas do sistema ternário descrito acima a partir das medidas de densidade do mesmo.

2. Metodologia

As densidades das soluções foram medidas através da técnica de densimetria de oscilação mecânica utilizando um densímetro de oscilação mecânica (Modelo 4500) fabricado pela Anton Paar.

O densímetro foi calibrado com água ultrapura e antes de cada medida o equipamento foi limpo e seco, com etanol e acetona. Além disso, em todas as medidas, certificou-se que não haviam bolhas no capilar do equipamento.

3. Formalismo termodinâmico

Fazendo uso do formalismo termodinâmico, foram calculadas as seguintes propriedades volumétricas: os volumes molares aparentes da xilose, os volumes molares aparentes à diluição infinita e os volumes de transferência da xilose da água para as soluções contendo líquidos iônicos. O comportamento dessas propriedades pode ser útil para entender as possíveis interações intra e intermoleculares existentes entre as espécies químicas presentes no sistema.

O volume molar aparente dos sacarídeos foi calculado usando a equação (1):

$$V_{\phi} = \left(\frac{M}{\rho} \right) - \frac{1000(\rho - \rho_0)}{m\rho\rho_0}, \quad (1)$$

em que M , m , ρ e ρ_0 , representam, respectivamente, a massa molar do sacarídeo, a molalidade da solução de sacarídeo, a densidade da solução de sacarídeo e a densidade da água pura ou da solução de salina. Os volumes parciais molares à diluição infinita foram calculados a partir da extrapolação do volume molar aparente na concentração de $m = 0$. Para isso, o volume molar aparente foi correlacionado através da seguinte relação empírica equação (2):

$$V_{\phi S} = V_{\phi S}^0 + S_V m^{1/2}, \quad (2)$$

na qual $V_{\phi S}^0$ é o volume molar aparente à diluição infinita e S_V é uma constante. Os valores do volume e das constantes foram obtidos pelo método dos mínimos quadrados. Após serem obtidos o volume molar aparente à diluição infinita da solução salina e da água, pode-se calcular o volume de transferência do sacarídeo da água para o sistema da solução salina, pela equação (3):

$$\Delta V_t^0 = V_{\phi S}^0(\text{solução salina}) - V_{\phi S}^0(\text{água}), \quad (3)$$

em que $V_{\phi S}^0$ é o volume molar aparente à diluição infinita.

4. Resultados

Na figura 2 é possível analisar o comportamento do volume molar aparente da xilose com solução salina (LI) $0,05 \text{ mol}\cdot\text{kg}^{-1}$, em função da molalidade da xilose, a diferentes temperaturas e pressão atmosférica: \circ , 283,15 K; \circ , 288,15 K; \circ , 293,15 K; \circ , 298,15 K; \circ , 303,15 K.

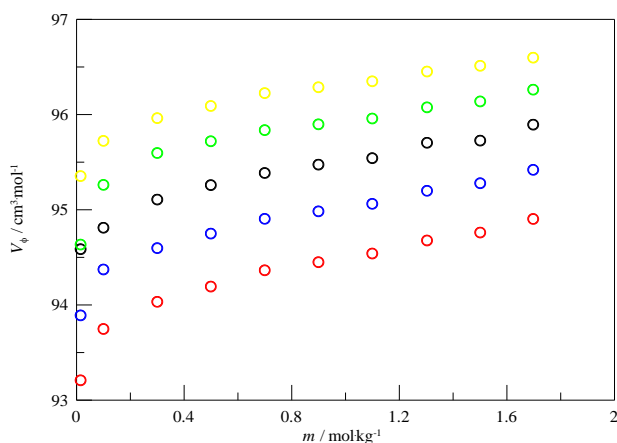


Figura 2 - Volume molar aparente da xilose com solução salina (LI) $0,05 \text{ mol}\cdot\text{kg}^{-1}$.

Na figura 3 é possível visualizar o comportamento do volume molar à diluição infinita da xilose em solução salina (LI) de $0,05 \text{ mol}\cdot\text{kg}^{-1}$, em função da raiz quadrada da molalidade da xilose, a diferentes temperaturas e pressão atmosférica: \circ , 283,15 K; \circ , 288,15 K; \circ , 293,15 K; \circ , 298,15 K; \circ , 303,15 K. As linhas representam a correlação usando a equação (2).

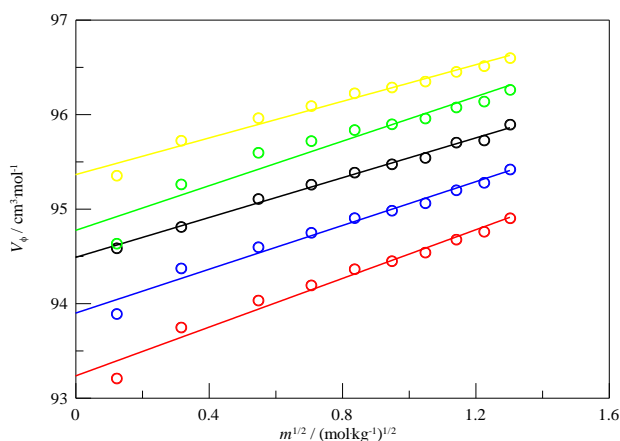


Figura 3 - volume molar à diluição infinita da xilose com solução salina (LI) $0,05 \text{ mol}\cdot\text{kg}^{-1}$.

É possível obter o valor do volume molar aparente à diluição infinita, a partir da equação (3), possibilitando posteriormente, calcular os valores de volume de transferência da xilose para a solução salina, como apresentado na tabela 1.

Tabela 1 - Valores do volume de transferência da xilose da água para a solução salina

T(K)	Volume de Transferência (cm^3/mol)	
-	0,025	0,05
	mol/kg	mol/kg
283,15	0,02	0,04
288,15	-0,05	0,02
293,15	-0,36	-0,02
298,15	-0,34	-0,33
303,15	0	0

5. Conclusões

No estudo foram determinadas as medidas de densidade para a solução salina do sistema ternário contendo água-1-butil-3-metilimidazólio sulfato de hidrogênio-xilose a diferentes temperaturas. Com esses valores, calculou-se o volume molar aparente, o volume molar aparente à diluição infinita e o volume de transferência da xilose da água para o LI.

As densidades apresentaram comportamento praticamente linear, crescente com o aumento da concentração do sacarídeo e decrescente com o aumento da temperatura.

Como é possível observar nas figuras 2 e 3, os volumes molares aparentes e os volumes molares aparentes à diluição infinita apresentaram comportamento crescente com o aumento de temperatura.

Contudo, o comportamento do volume molar de transferência da xilose da água para as soluções salinas não apresentou uma tendência uniforme.

Com o objetivo de entender melhor o comportamento intra e intermolecular do sistema, sugere-se a realização de um estudo espectroscópico.

6. Referências

- [1] GHANEM, O. B.; MUTALIB, M. I. A.; LEVEEQUE, J. M.; GONFA, G.; KAIT, C. F.; EL-HARBAWI, M. [Studies on the Physicochemical Properties of Ionic Liquids Based On 1-Octyl-3-methylimidazolium Amino Acids](#). *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 60, p. 1756–1763, 2015.
- [2] GIERNOTH, R. Task-Specific Ionic Liquids. *Angewandte Chemie International Edition*, v. 49, p. 2834–2839, 2010
- [3] BI, W.; ZHOU, J.; ROW, K. H. Separation of xylose and glucose on different silica-confined ionic liquid stationary phases. *Analytica Chimica Acta.*, v. 677, p. 162–168, 2010.

¹ Aluno de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 11/19 a 10/20.