

# Propriedades Viscosimétricas de Sistemas Líquidos Binários Contendo Acetonitrila + C7-C8 Álcoois

João Vitor Mateika de Castro<sup>1</sup>, Heloisa Emi Hoga<sup>2</sup>, Ricardo Belchior Torres<sup>3</sup>  
<sup>1,2,3</sup> Engenharia Química, Fundação Educacional Inaciana Pe. Sabóia de Medeiros  
jvimca@gmail.com<sup>1</sup>; belchior@fei.edu.br<sup>3</sup>

**Resumo:** Nesse estudo determinaram-se dados experimentais de viscosidade e densidade de sistemas líquidos binários contendo acetonitrila + heptan-1-ol, ou + octan-1-ol, em toda a faixa de composição, nas temperaturas {288,15 - 308,15} K e à pressão atmosférica. Esses resultados foram utilizados para calcular o desvio da viscosidade ( $\Delta\eta$ ) e a energia de Gibbs de ativação excesso ( $\Delta G^{*E}$ ), os quais foram correlacionados com um polinômio de Redlich-Kister. Ainda como parte do estudo, modelos empíricos foram utilizados para correlacionar a viscosidade.

## 1. Introdução

Dados experimentais de viscosidade e, conseqüentemente, de propriedades derivadas dela são importantes para entender teorias do estado líquido, bem como o comportamento interativo das moléculas que compõem um sistema. Além disso, viscosidade de líquidos é muito importante para fixar condições de processos e operação e para determinar grupos adimensionais importantes, como o número de Reynolds e número de Prandtl.

Acetonitrila, álcoois e suas soluções binárias têm encontrados aplicações como solventes em muitos processos [6]. Entretanto, dados experimentais de viscosidade de sistemas líquidos contendo (acetonitrila + álcoois) são escassos na literatura.

## 2. Metodologia

Os valores da viscosidade e da densidade foram medidos utilizando um Viscosímetro Stabinger da Anton Paar (Modelo SVM 3000). Os reagentes utilizados (acetonitrila, heptan-1-ol e octan-1-ol) foram de alto grau de pureza, acima de 99% em massa.

## 3. Formalismo termodinâmico

O desvio da viscosidade foi calculado pela seguinte equação:

$$\Delta\eta = \eta - (x_1\eta_1 + x_2\eta_2), \quad (1)$$

em que  $\eta_1$  e  $\eta_2$  são as viscosidades dos componentes puros e da solução, respectivamente, e  $x_i$  é a composição de cada componente.

A energia de Gibbs de ativação excesso foi determinada fazendo uso da equação:

$$\Delta G^{*E} = RT \left[ \ln \left( \frac{\eta^V}{\eta_2 V_2} \right) - x_1 \ln \left( \frac{\eta_1 V_1}{\eta_2 V_2} \right) \right], \quad (2)$$

na qual  $R$  é a constante universal dos gases,  $T$  é a temperatura absoluta e  $V$ ,  $V_1$  e  $V_2$  representam os volumes molares da solução e dos componentes puros, respectivamente.

Um polinômio do tipo Redlich-Kister [2] foi utilizado para ajustar os valores das grandezas determinadas, conforme a Equação 3:

$$Y_m^E = x_2(1-x_2) \sum_{j=0}^n A_j(1-2x_2)^j, \quad (3)$$

em que  $Y$  é  $\Delta\eta$  ou  $\Delta G^{*E}$ .

Os modelos para correlação dos dados experimentais de viscosidades estão descritos a seguir.

Grunberg e Nissan [3] propuseram a seguinte expressão:

$$\ln \eta = x_1 \ln \eta_1 + x_2 \ln \eta_2 + x_1 x_2 G_{12}, \quad (5)$$

na qual  $G_{12}$  é um parâmetro de interação, o qual representa a força de interação entre as moléculas dos componentes na mistura, e é um parâmetro de interação.

Hind et. al. [4] propuseram a seguinte expressão:

$$\eta = x_1^2 \eta_1 + x_2^2 \eta_2 + 2x_1 x_2 H_{12}, \quad (6)$$

em que  $H_{12}$  é um parâmetro de interação.

Katti e Chaudhari [5] derivaram a seguinte equação:

$$\ln(\eta^V) = x_1 \ln(\eta_1 V_1) + x_2 \ln(\eta_2 V_2) + \frac{x_1 x_2 W_{12}}{RT}, \quad (7)$$

na qual  $W_{12}$  é um termo de interação, e  $V_i$  e  $V$  são os volumes molares dos componentes puros e da solução, respectivamente.

Heric e Brewer [6] apresentaram a seguinte equação para a viscosidade:

$$\ln(\eta) = x_1 \ln \eta_1 + x_2 \ln \eta_2 + x_1 \ln M_1 + x_2 \ln M_2 - \ln(x_1 M_1 + x_2 M_2) + x_1 x_2 \Delta_{12}, \quad (8)$$

em que  $\Delta_{12}$  é um termo de interação e  $M_i$  é a massa molar do componente puro.

Van der Wyk [7] propôs a seguinte relação:

$$\ln(\eta) = x_1^2 \ln \left( \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_{12}^2} \right) + 2x_1 \ln \left( \frac{\eta_{12}}{\eta_2} \right) + \ln(\eta_2), \quad (9)$$

sendo  $\eta_{12}$  um parâmetro de interação, e os outros símbolos representados tendo os mesmos significados físicos das equações anteriores.

## 4. Resultados e discussões

Com os dados de viscosidade obtidos, construíram-se curvas que demonstram o comportamento da grandeza ao longo da composição (Figura 1).

A partir das equações demonstradas determinaram-se o desvio da viscosidade (Figura 2) e a energia de Gibbs de ativação excesso (Figura 3), em toda faixa de composição, a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica. Essas grandezas foram correlacionadas pelo polinômio de Redlich-Kister [2].

A fim de exemplificação, as figuras demonstram o comportamento do sistema {acetonitrila + heptan-1-ol}, que são semelhantes a o {acetonitrila + octan-1-ol}.

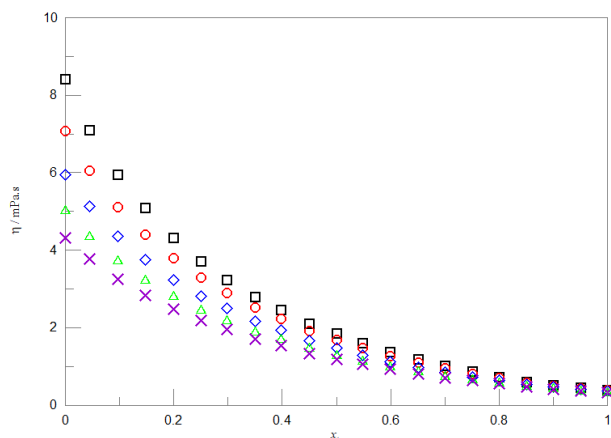


Figura 1 - Viscosidade, em função da composição, para o sistema  $\{x_1$  acetonitrila +  $(1-x_1)$  heptan-1-ol} a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica:  $\square$  288,15 K,  $\circ$  293,15 K,  $\diamond$  297,15 K,  $\triangle$  303,15 K,  $\times$  308,15 K.

A partir da Figura 1 é possível observar que os dados experimentais apresentaram um bom delineamento, validando o método experimental.

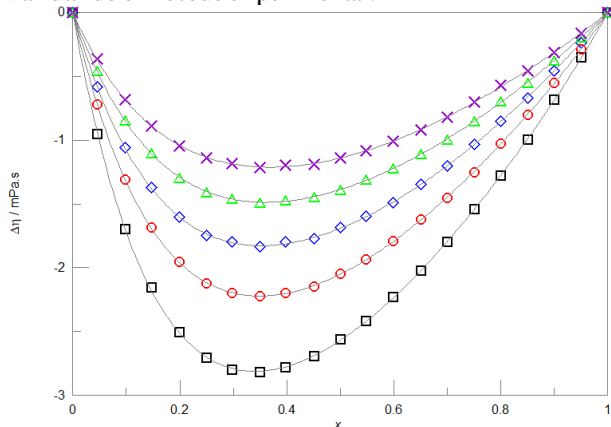


Figura 2 - Desvio da viscosidade, em função da composição, para o sistema  $\{x_1$  acetonitrila +  $(1-x_1)$  heptan-1-ol} a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica:  $\square$  288,15 K,  $\circ$  293,15 K,  $\diamond$  297,15 K,  $\triangle$  303,15 K,  $\times$  308,15 K. As linhas sólidas representam a correlação pela equação de Redlich-Kister.

A figura 2 mostra um bom ajuste do desvio da viscosidade com o polinômio de Redlich-Kister. Além disso, demonstra que o sistema estudado apresenta um desvio negativo da idealidade, que diminui com o aumento da temperatura. A literatura indica que esse comportamento pode estar associado a forças de dispersão entre as moléculas do sistema [8].

A Figura 3 mostra que a energia de Gibbs ativação excessiva apresenta majoritariamente um desvio positivo, o qual pode ser resultado de predominância de forças de dispersão.

Como parte integrante do estudo, correlacionaram-se os dados de viscosidade às equações propostas e foi analisada a variação da viscosidade com a composição.

Como resultado, os modelos de Grunberg-Nissan [3], Katti e Chaudhari [5], Heric-Brewer [6], Van der Wyk [7] apresentaram um bom ajuste aos dados

experimentais, com exceção do modelo proposto por Hindd-McLaughling [4].

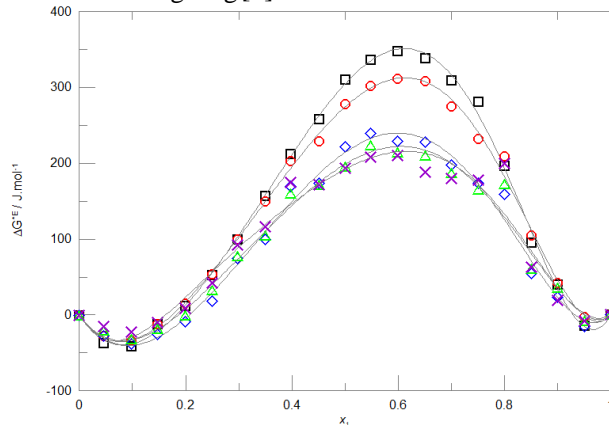


Figura 3 – Energia de Gibbs de ativação excessiva, em função da composição, para o sistema  $\{x_1$  acetonitrila +  $(1-x_1)$  heptan-1-ol} a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica:  $\square$  288,15 K,  $\circ$  293,15 K,  $\diamond$  298,15 K,  $\triangle$  303,15 K,  $\times$  308,15 K.

## 5. Conclusões

A partir dos dados analisados, pode-se perceber que os sistemas estudados apresentam de forças de dispersão.

Quase todos os modelos de viscosidade demonstraram uma boa representação dos dados experimentais, com exceção daquela proposto por Hindd-McLaughling.

## 6. Referências

- [1] J. Barthel, et al., Topics in Current Chemistry; Springer: New York, 1983; Vol. III, p 33.
- [2] O. Redlich, A. T. Kister, Algebraic representation of thermodynamic properties and the classification of solutions. Industrial and Engineering Chemistry, **40** (1948) 345-348.
- [3] L. Grunberg, A. H. Nissan, Mixture law for viscosity. Nature, **164** (1949) 799-800.
- [4] R. K. Hind, E. McLaughlin, A. R. Ubbelohde, Structure and viscosity of liquids – camphor + pyrene mixtures. Transactions of the Faraday Society, **56** (1960) 328-330.
- [5] P. K. Katti, M. M. Chaudhari, Viscosities of binary mixtures of benzyl acetate with dioxane, aniline, and *m*-cresol. The Journal of Chemical & Engineering Data, **9** (1964) 4432-443.
- [6] E. L. Heric, J. G. Brewer, Viscosity of some binary liquid nonelectrolyte mixtures. The Journal of Chemical & Engineering Data, **12** (1967) 574-583.
- [7] A. J. A. van der Wyk, The viscosity of binary mixtures, Nature, **138** (1936) 845.
- [8] FORT, R. J.; MOORE, W. R. Viscosities of Binary Liquid Mixtures. RSC, 1965.

## Agradecimentos

À FEI pelo auxílio financeiro e por toda a infraestrutura necessária para a realização do Projeto.

<sup>1</sup> Aluno de IC do Centro Universitário FEI (PBIC da FEI). Projeto com vigência de 08/19 a 07/20.