

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ESPECTROSCÓPICAS DO SISTEMA LI + ÁLCOOIS

Robert Lunkez Fernandes¹, Heloisa Emi Hoga², Ricardo Belchior Torres³
^{1,2,3} Centro Universitário FEI

robert.lunkez@live.com, belchior@fei.edu.br

Resumo: Este trabalho tem visa estudar propriedades espectroscópicas e termodinâmicas do sistema líquido binário contendo o líquido iônico (LI) metanoato de *n*-butilamônio + álcoois a diferentes temperaturas. As grandezas excesso estudadas são: o volume molar excesso (V_m^E), o desvio da viscosidade ($\Delta\eta$), a energia de Gibbs de ativação excesso (ΔG^{*E}) e o desvio da compressibilidade isentrópica ($\Delta\kappa_s$).

1. Introdução

Propriedades físico-químicas e termodinâmicas de sistemas são imprescindíveis em projetos industriais e para o desenvolvimento da ciência. As propriedades em excesso quantificam o desvio que o sistema real sofre em comparação ao ideal e este afastamento é oriundo das diferentes interações existentes entre as diferentes espécies presentes na solução[1]. Neste projeto, estas espécies são o líquido iônico + álcoois alifáticos.

Líquidos iônicos possuem ponto de fusão abaixo de 100°C, baixa pressão de vapor e quimicamente estáveis. As mudanças na sua estrutura iônica modificam suas propriedades, possibilitando uma otimização nas suas características sendo chamados também de *designer solvents* [2].

2. Metodologia

Os reagentes utilizados no estudo do sistema binário foram o 1-pentanol (pureza > 99%, SIGMA-ALDRICH) e o metanoato de *n*-butilamônio (pureza > 94%, 0,55% em massa de água). Para as medidas de densidade, velocidade do som e viscosidade, utilizou-se um Analisador de Densidade e Velocidade do Som (Modelo DSA 5000) e um Viscosímetro Stabinger (Modelo SVM 3000), ambos fabricados pela Anton Paar.

A síntese do LI foi realizada pelo método de neutralização ácido-base, utilizando o ácido metanóico (pureza > 99%, MERCK) e a *n*-butilamina (pureza > 99%, MERCK). A caracterização foi comprovada por RMN e FTIR e o teor de água comprovado por Karl Fischer.

3. Resultados

As propriedades excesso foram calculadas usando as equações 1-4 e o comportamento dessas grandezas pode ser observado na Figura 1.

$$V_m^E = x_1 \cdot M_1 \cdot \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_1} \right) + x_2 \cdot M_2 \cdot \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (1)$$

$$\Delta\eta = \eta - (\eta_1 \cdot x_1 + \eta_2 \cdot x_2) \quad (2)$$

$$\Delta G^{*E} = R \cdot T \cdot \left[\ln \left(\frac{\eta \cdot V}{\eta_2 \cdot V_2} \right) - x_1 \cdot \ln \left(\frac{\eta_1 \cdot V_1}{\eta_2 \cdot V_2} \right) \right] \quad (3)$$

$$\Delta\kappa_s = \frac{1}{\rho \cdot u^2} - \left(\frac{1}{\rho_1 \cdot u_1^2} \cdot x_1 + \frac{1}{\rho_2 \cdot u_2^2} \cdot x_2 \right) \quad (4)$$

onde ρ , M , η , u , x e V são a densidade, massa molar, viscosidade, velocidade do som, fração molar e o

volume molar da solução. O subscrito 1 refere-se ao LI e o subscrito 2, ao 1-pentanol. R é a constante universal dos gases e T a temperatura a qual o sistema se encontra

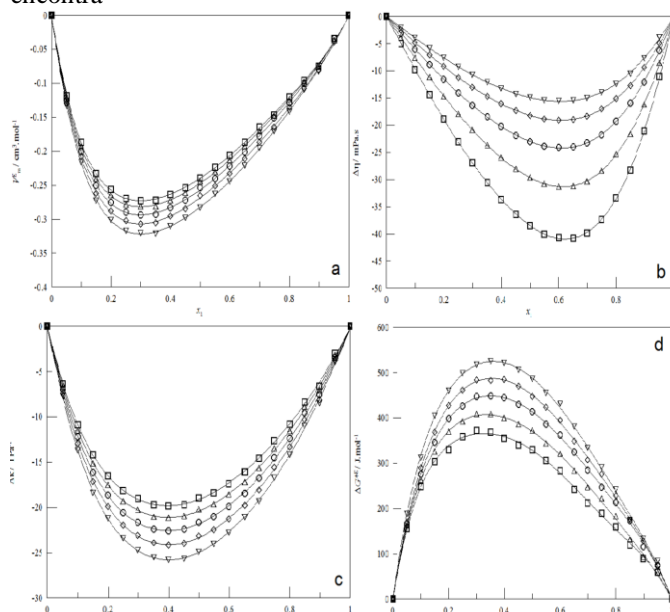


Figura 1. Propriedades em excesso em função de x_1 . $T = 293,15$ (□), 298,15 (△), 303,15 (○), 308,15 (◇) e 313,15 K (▽). a) V_m^E ; b) $\Delta\eta$; c) $\Delta\kappa_s$; d) ΔG^{*E} .

4. Conclusões Parciais

Ao contrário das demais grandezas, a energia de Gibbs de ativação excesso possui valores positivos em toda faixa de composição o que pode ser indicio de predominância de forças dispersivas no sistema. Ou seja, inicialmente, adicionando-se LI ao álcool, não há interações químicas entre ambos até atingir o pico em torno de 40% de LI no sistema, tendendo a idealidade. Para o sistema estudado, as grandezas variam consideravelmente com a temperatura, principalmente a viscosidade. Como uma continuação do trabalho serão estudados os sistemas (metanoato de *n*-butilamônio + etanol), e (metanoato de *n*-butilamônio + 1-butanol).

5. Referências

- [1] TORRES, R.B.; MORANDIM-GIANNETTI, A.A.; OLIVIERI, G.V. 2015 AIChE Annual Meeting: Atlanta, USA, Conference Program, v. único, 2014.
- [2] FRANZOI, A.C. *et al.* Química Nova: Brasil, v. 34, n. 6, p. 1042-1050, 2011.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário da FEI, ao IPEI e ao Instituto de Pesquisa da UNESP.

¹ Aluno 11213187-5 de IC do Centro Universitário FEI (bolsa PBIC). Projeto com vigência de 5/17 a 4/18.