

Caracterização de agrupamentos Anômalos de Metanol em Etanol Usando Raman Espectroscopia

César Mello (PQ)¹, Emiliane G. Ricci (PG)^{1*}, Diórginis Ribeiro (PG)², Eduardo Nassar (PQ)¹, Kátia Ciuffi (PQ)¹, Ronei J. Poppi (PQ)² e Marcos Ferrão (PQ)³

¹, Universidade de Franca, ²IQ-Unicamp, ³UNISC

Universidade de Franca, Av. Dr. Armando Salles Oliveira, 201 Franca-SP, CEP 14404-600.

E-mail: camello@unifran.br

Palavras Chave: análise de componentes, ligações de hidrogênio, Atípicas.

Introdução

O Etanol e o Metanol são os mais simples principais álcoois orgânicos e são considerados miscíveis. Entretanto observou-se através da espectroscopia Raman de baixa resolução Fig.1 e análise de componentes principais (PCA), que em altas e baixas concentrações estes são imiscíveis formando ligações de hidrogênio somente entre si, já em concentrações intermediárias eles foram agrupamentos ligações de hidrogênio entre si. Tal fato não devia ocorrer, pois são álcoois homólogos e próximos. Esses agrupamentos ocorrem devido às ligações de hidrogênio que são atrações intermoleculares intensas e ocorre entre moléculas que apresentam ligações entre: hidrogênio e átomos muito eletronegativos, no caso, o oxigênio. Atuando como uma ligação entre eles.

Resultados e Discussão

Utilizando-se a idéia básica da análise de componentes principais (PCA) observamos nitidamente como mostrado na Fig.2 que em baixas concentrações não há ligações de hidrogênio intramoleculares, ainda que os compostos sejam bem agitados. Neste caso podemos no mínimo supor há formação de clusters de hidrogênio e que as ligações de hidrogênio são preferenciais dependendo das concentrações relativas dos elementos.

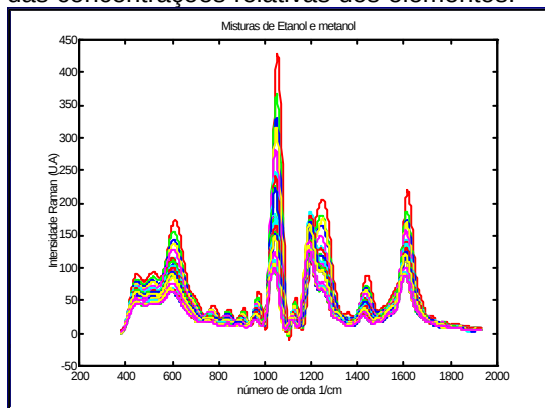


Figura 1. Espectro Raman da mistura Etanol e Metanol em todas as proporções citadas no trabalho

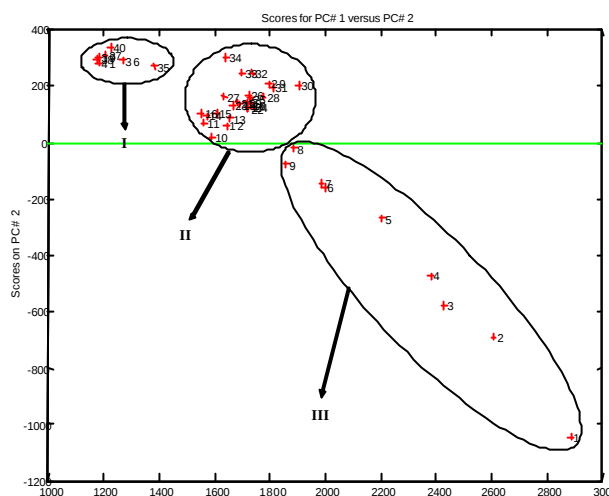


Figura 2. Gráfico PC1 versus PC2

Conclusões

Conforme observado através da Análise de componentes, pode ser observado e interpretado que é possível e provável a formação preferencial de pontes de hidrogênio.

Agradecimentos

À FAPESP, CNPq, CAPES e a Universidade de Franca.

¹ A.Dong Nan Chin, Rober L. DELEON and J. F. Garvey, JACS, 2000, 122, 11887; W. Castleman junior, and Bruce . Kay, J. Phys. Chem, 1985, 89, 4867.