

A descoberta de micro fases em sistemas homogêneos: O sistema Etanol-Metanol

Cesar Mello (PQ)¹ Emiliane G. Ricci (PG)^{1*}, Diórginis Ribeiro (PG)², Antônio Marangoni (PG)¹, Lucinda Coelho (PG)¹, Ronei J. Poppi (PQ)², Eza Sevéri (PG)¹ e Isao Noda (PQ)³

^{1*}, Universidade de Franca, ²IQ-Unicamp e ³Miami Valley Laboratories, Procter & Gamble.

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

E-mail: emilianericci@unifran.br

Palavras Chave: análise de componentes, espectroscopia de correlação bidimensional, misturas ideais.

Introdução

A espectroscopia de correlação bidimensional é uma técnica que representa graficamente a intensidade da correlação espectral em função de duas variáveis espectrais independentes (i.e. frequência ou comprimento de onda). Ou seja, dois eixos ortogonais de variáveis espectrais independentes definem o plano espectral 2D e a intensidade da correlação espectral é representada ao longo do terceiro eixo.

Resultados e Discussão

Utilizando a Espectroscopia Raman como técnica espectroscópica, foram feitas 61 adições de Metanol em uma cubeta contendo 1,1 mL de Etanol.

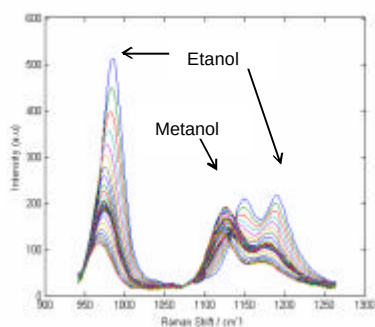


Figura 1: Espectros Raman das misturas Etanol e Metanol

Uma análise das componentes principais (PCA) mostrou que havia quatro componentes diferentes, como mostrado em Figura 2.

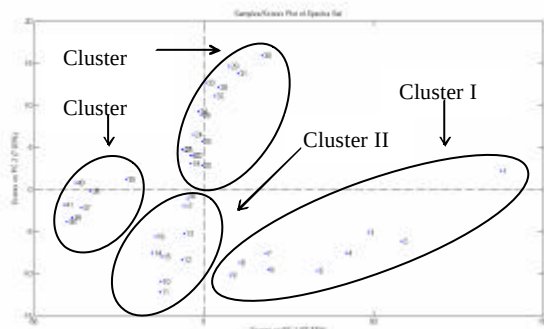


Figura 2: Análise dos componentes principais (PCA) do espectro Raman

Para provar que nós tínhamos pelo menos quatro componentes na mistura, nos usamos a espectroscopia de correlação bidimensional.

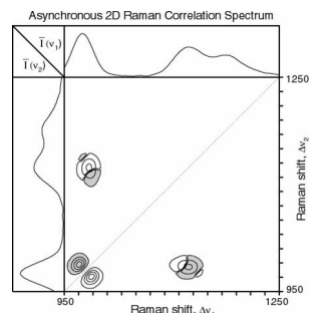


Figura 3: Espectro assíncrono para todo o espectro Raman

Analisando os espectros assíncronos, é possível observar que os picos cruzados possuem a característica de “patched”, incluindo as regiões positivas e negativas com buracos de descontinuidade.

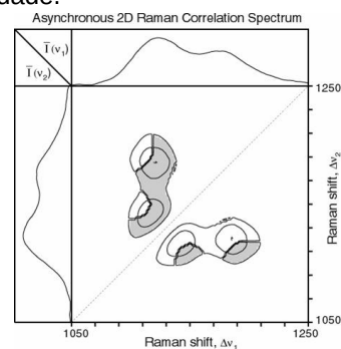


Figura 4: “Patched” observado no espectro assíncrono

Conclusões

Nós demonstramos que de fato a lei de Beer foi violada em sistema ideal, ocorreu um novo fenômeno e nós obtivemos uma mistura aparentemente homogênea no nível macroscópico, mas em nível microscópico, temos uma mistura heterogênea muito complexa.

Agradecimentos

À FAPESP, CNPq, e a Universidade de Franca.

¹ NODA, I. 2-dimensional infrared (2D IR) spectroscopy - Theory and applications, Appl. Spectrosc. 44 (4), 550 – 561, 1990

