

Propriedades volumétricas de misturas binárias de (triclorometano e aminas) em temperaturas entre T= 288.15 K e T= 303.15 K à p= 0.1 MPa.

Jucelio G. Magalhães^{1*} (PG), Pedro L. O. Volpe¹ (PQ), Ricardo B. Tôres^{1,2} (PQ)

*jucelio@iqm.unicamp.br

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, C.P. 6145, 13083-970, Campinas – SP, Brasil

²Departamento de Engenharia Química, Centro Universitário da FEI, 09850-901, São Bernardo do Campo - SP, Brasil

Palavras Chave: Propriedades Volumétricas, triclorometano, aminas, complexo de transferência de carga.

Introdução

As propriedades volumétricas de misturas binárias são propriedades complexas, pois elas dependem não somente de interações soluto-soluto, solvente-solvente e soluto-solvente, mas também de efeitos estruturais resultantes das acomodações intersticiais, devido a diferenças no volume molar e no volume livre entre os componentes presentes na solução. O conhecimento de várias propriedades, incluindo densidades a diferentes temperaturas, é necessário no projeto de engenharia, e para operações subsequentes. Além do mais há interesse em usar dados volumétricos para testar teorias moleculares de solução, ou modelos de solução para ampliar nosso entendimento sobre interações entre componentes^[1].

Determinou-se neste trabalho propriedades volumétricas de triclorometano + n-butilamina (n-BA), ou + s-butilamina (s-BA), ou + dietilamina (DEA) ou + trietilamina (TEA), como uma função da composição, a temperaturas entre T = 288.15 K e T = 303.15 K a 0.1 MPa. Esses resultados foram utilizados para elucidar as interações que ocorrem entre os compostos presentes na mistura.

Resultados e Discussão

As propriedades volumétricas foram determinadas indiretamente, por densitometria de oscilação mecânica, através de medidas de densidade dos componentes puros e das misturas binárias. O volume molar em excesso (V_m^E) foi calculado através da equação 2.

$$V_m^E = V_m - x_1 V_{m1} - x_2 V_{m2}, \quad (1)$$

$$V_m^E = x_1 M_1 (1/r_1 - 1/r_1) + x_2 M_2 (1/r_2 - 1/r_2), \quad (2)$$

Na qual V_m representa o volume de uma solução contendo um mol de (triclorometano + amina), x_i , M_i e r_i representam, respectivamente, as frações molares, massas molares e densidades dos

componentes 1 (triclorometano) e 2 (amina) e r representa a densidade da solução.

Os valores experimentais de V_m^E foram ajustados através de um polinômio do tipo Redlich-Kister^[2].

Além de V_m^E , parte do objetivo deste trabalho consiste no cálculo do volume parcial molar à diluição infinita V_1^8 e V_2^8 . As grandezas parciais molares à diluição infinita são de interesse, uma vez que, à diluição infinita a interação soluto-soluto desaparece. Tais grandezas proporcionam portanto, informações a respeito das interações soluto-solvente independentemente do efeito da composição^[3].

Para todas as temperaturas e sistemas estudados, os valores do V_m^E exibem valores negativos em toda faixa de composição. Os valores do V_m^E seguem a seguinte sequência: trietilamina < dietilamina < s-butilamina < n-butilamina. A dependência do V_m^E com a temperatura é pequena e com o aumento da temperatura V_m^E torna-se mais negativa. O ajuste do polinômio aos dados experimentais foi muito bom, e os dados de V_1^8 e V_2^8 vieram a evidenciar a formação de fortes interações entre os componentes das misturas.

Conclusões

Os resultados experimentais evidenciam que os efeitos estruturais (principalmente a acomodação intersticial das moléculas de triclorometano na rede de pontes de hidrogênio das aminas), e as interações específicas (formação de complexo de transferência de carga entre os componentes presentes nas misturas), são os principais responsáveis pelos valores negativos de V_m^E , e pelo comportamento de V_m^E em relação a T.

Agradecimentos

Os autores expressam sua gratidão ao CNPq e à FAPESP pelo suporte financeiro para a realização deste trabalho.

¹ Astaritas, G.; Savage, D. W. e Bisio, A. Gas Treating with Chemical Solvents, Wiley, New York **1983**.

² Redlich, O. e Kister, A. T., J. C. *Ind. Eng. Chem.* **1948**, 40, 345.

³ Wang, C.; Li, H.; Zhu, L. e Han, S. *J. Solution Chem.* **2002**, 31, 109.