

# Propriedades volumétricas da mistura binária de acetato de etila e etanol em temperaturas entre T= 298.15 K e T= 313.15 K à p= 0.1 MPa.

Jucelio G. Magalhães\* (PG), Pedro L. O. Volpe (PQ)

\*jucelio@iqm.unicamp.br

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

Palavras Chave: Propriedades Volumétricas, etanol, acetato de etila, pontes de hidrogênio.

## Introdução

Propriedades volumétricas de misturas binárias são propriedades complexas porque 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 posteriores. 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<sup>[1]</sup>.

Determinou-se neste trabalho propriedades volumétricas de acetato de etila + etanol em função da composição, a temperaturas entre T = 298.15 K e T = 313.15 K a 0.1 Mpa. Esses resultados foram utilizados para analisar 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.

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

$$V_m^E = x_1 M_1 (1/\rho - 1/\rho_1) + x_2 M_2 (1/\rho - 1/\rho_2), \quad (2)$$

Na qual  $V_m$  representa o volume de uma solução contendo um mol de acetato de etila+ etanol,  $x_i$ ,  $M_i$  e  $\rho_i$  representam, respectivamente, as frações molares, massas molares e densidades dos componentes 1 (acetato de etila) e 2 (etanol) e  $\rho$  representa a densidade da solução.

Além de  $V_m^E$ , parte do objetivo deste trabalho consiste no cálculo do volume parcial molar à diluição infinita  $V_1^\infty$  e  $V_2^\infty$ . As grandezas parciais molares à diluição infinita são de interesse, uma vez

que, à diluição infinita as interações soluto-soluto desaparecem. Portanto, tais grandezas proporcionam informações a respeito das interações soluto-solvente independentemente do efeito da composição<sup>[2]</sup>.

Para a mistura binária de acetato de etila + etanol os dados de  $V_m^E$  exibem valores positivos em toda faixa de composição (figura 1). Os valores de  $V_m^E$  tornam-se mais positivos com o aumento da temperatura, porém essa variação é pequena. Tais resultados, associados aos dados de  $V_1^\infty$  e  $V_2^\infty$  sugerem que a quebra da estrutura de pontes de hidrogênio entre as moléculas de etanol, e uma menor interação entre os componentes da mistura em relação aos mesmos puros, principalmente devido a efeitos geométricos, são as principais características das interações do sistema estudado .

## Conclusões

Os resultados experimentais evidenciam que os efeitos estruturais (quebra da estrutura de pontes de hidrogênio do etanol), e as interações específicas (formação de uma interação relativamente fraca entre os componentes presentes nas misturas), são os principais responsáveis pelos valores positivos de  $V_m^E$  e de seu comportamento com a temperatura.

## Agradecimentos

Os autores expressam sua gratidão ao Capes, ao CNPQ e à FAPESP pelo suporte financeiro para realização deste trabalho.

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

<sup>2</sup> Wang, C.; Li, H.; Zhu, L. e Han, S. J. *Solution Chem.* 2002, 31, 109.

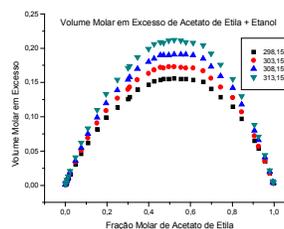


Figura 1:  $V_m^E$  de acetato de etila + etanol à diferentes temperaturas.