

Volume molar excesso de soluções líquidas binárias de (acetoneitrila + aminas) a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica

Samara Storion Bittencourt (PG)¹, Ricardo Belchior Tôrres* (PQ)^{1,2}

1- Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Universitário da FEI, Av. Humberto de Alencar Castelo Branco, 3972, 09850-901, São Bernardo do Campo, SP, Brazil

2-Departamento de Engenharia Química, Centro Universitário da FEI, Av. Humberto de Alencar Castelo Branco, 3972, 09850-901, São Bernardo do Campo, SP, Brazil

E-mail:belchior@fei.edu.br

Palavras Chave: *volume molar excesso, acetoneitrila, aminas*

Introdução

Propriedades volumétricas têm sido um caminho qualitativo e quantitativo para prever a formação de complexos em soluções líquidas binárias. O conhecimento dessas propriedades é de fundamental importância em projetos de engenharia e em subseqüentes operações. Além disso, dados experimentais de propriedades volumétricas são úteis para testar e desenvolver modelos e teorias de soluções. Como uma continuação de um estudo experimental de propriedades excesso contendo acetoneitrila e aminas [1-2], o presente estudo teve como objetivo determinar dados de densidade de soluções líquidas binárias de acetoneitrila + propilamina (PA), ou + dipropilamina (DPA), ou + *n*-butilamina (*n*-BA), ou + *terc*-butilamina (*t*-BA), or + trietilamina (TEA) em toda faixa de composição a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica. A faixa de temperatura estudada foi entre 293,15 e 308,15 K em intervalos de 5 K. Os dados de densidade foram usados para calcular o volume molar excesso (V_m^E) do sistema.

Resultados e Discussão

Os reagentes usados neste trabalho foram acetoneitrila (Merck, pureza $\geq 99,9\%$), propilamina (Acros Organics, pureza $\geq 99\%$), dipropilamina (Acros Organics, pureza 99%), *n*-butilamina (Acros Organics, pureza $99,5\%$), *terc*-butilamina (Acros Organics, pureza 99%), trietilamina (Acros Organics, pureza 99%). O volume molar excesso foi determinado indiretamente através de medidas de densidade dos componentes puros e de suas soluções utilizado um densímetro de oscilação mecânica fabricado pela Anton Paar (Modelo DMA 4500, resolução $1 \times 10^{-5} \text{ g.cm}^{-3}$).

O volume molar excesso pode ser expresso pela seguinte equação:

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

onde x_1 , M_1 , ρ_1 , x_2 , M_2 , ρ_2 , são, respectivamente, as frações molares, as massa molares e as densidades

dos componentes 1 e 2, e ρ é a densidade da solução.

Para todos os sistemas estudados, os valores do volume molar excesso foram negativos em toda faixa de composição e em todas as temperaturas estudadas. A contração do volume molar excesso obedece a seguinte seqüência: *terc*-butilamina > trietilamina > di-*n*-propilamina > *n*-propilamina > *n*-butilamina. Para os sistemas (acetoneitrila + *n*-butilamina), (acetoneitrila + *n*-propilamina) e (acetoneitrila + *t*-butilamina) V_m^E torna-se mais negativo com o aumento da temperatura enquanto que para os sistemas (acetoneitrila + di-*n*-propilamina) e (acetoneitrila + trietilamina) V_m^E torna-se menos negativo quando a temperatura aumenta.

Os resultados experimentais do volume molar excesso foram correlacionados através de um polinômio do tipo Redlich-Kister [3]:

$$V_m^E = x_1(1-x_1) \sum_{j=0}^{j=n} A_j(1-2x_1)^j, \quad (2)$$

Os valores dos parâmetros A_j foram obtidos usando o método dos mínimos quadrados e o desvio padrão, σ , foi determinado através da equação:

$$\sigma = \left[\sum (V_{\text{exp}}^E - V_{\text{teo}}^E)^2 / (N-n) \right]^{1/2}, \quad (3)$$

onde N representa o número de dados experimentais e n é o número de coeficiente A_j da equação 3.

Conclusões

A magnitude do V_m^E é resultado de diferentes efeitos os quais podem ser divididos em físicos, químicos e estruturais. Os resultados no presente trabalho sugerem que, para os sistemas estudados, os efeitos químicos e estruturais devem prevalecer sobre os efeitos físicos.

Agradecimentos

FEI, FAPESP

¹ Tôrres, R. B.; Francesconi, A. Z.; *J. Chem. Thermodyn.* **2002**, *200*, 317.

² Tôrres, R. B.; Francesconi, A. Z.; *J. Mol. Liquids.* **2003**, *103*, 99.

³ Redlich, O.; Kister, T. *Ind. Eng. Chemistry*, **1948**, *40*, 345.