

Determinação, pelo modelo NRTL, de novos parâmetros de interação e de coeficientes de atividade de sistemas ternários PEO-H₂O-Na₂S₂O₃

Igor José Boggione Santos* (PG), Raquel Moreira Maduro de Carvalho (PQ), Maria do Carmo Hespagnol da Silva (PQ), Luis Henrique Mendes da Silva (PQ). *igor.santos@ufv.br

Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular, DEQ, Universidade Federal de Viçosa.

Palavras Chave: Sistema aquoso bifásico, diagrama de fase PEO 1500.

Introdução

Tem-se aumentado o interesse pelos estudos dos Sistemas aquosos bifásicos (SABs) por esta técnica proporcionar separações e purificações de biomateriais, metais e pigmentos, com vantagens iguais ou superiores às técnicas convencionais de extração líquido-líquido. Informações sobre parâmetros de interações intermoleculares e a contribuição da não idealidade para o comportamento termodinâmico destes sistemas é essencial para o desenvolvimento, design, simulação, otimização e operação dos processos de separação. Neste trabalho, foram determinados os parâmetros de interação entre os componentes bem como seus coeficientes de atividade para sistema ternário PEO 1500, água e tiosulfato de sódio em três temperaturas. Além disso, determinou-se a densidade e o índice de refração das fases.

Resultados e Discussão

A quantificação dos componentes (sal e polímero) foi realizada via condutividade e índice de refração, a densidade das fases foi obtida pelo densímetro vibratório e os parâmetros de interação pelo software FORTRAN código WTML-LLE. A figura 1 demonstra a região bifásica do SAB PEO 1500 + tiosulfato de sódio + água em três temperaturas.

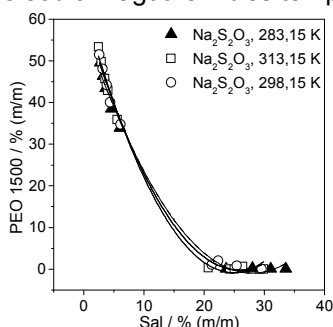


Figura 1. Efeito da temperatura no diagrama de fase do SAB PEO + tiosulfato de sódio + água nas temperaturas de 283,15; 298,15 e 313,15 K.

Verificou-se que a temperatura não interfere na região bifásica do SAB PEO 1500 + tiosulfato de sódio, indicando que a segregação de fase é entropicamente dirigida, uma vez que a elevação da temperatura aumenta a entropia configuracional dos componentes e a entropia conformacional do polímero¹. Esta variação da entropia conformacional

34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

ocasiona o envelhecimento da macromolécula, diminuindo o número de sítios ativos disponíveis para as interações com os íons do sal e as moléculas de água. Por este motivo é que se observou o acréscimo na concentração de PEO e diminuição na concentração de água na fase superior à medida que se elevou a temperatura. A tabela 1 apresenta os parâmetros NRTL estimados.

Tabela 1. Parâmetros NRTL estimados.

<i>i-j</i>	A_{0ij} (K)	A_{0ij} (K)	A_{1ij} (K)	A_{1ij} (K)	α_{ij}
PEO-Na ₂ S ₂ O ₃	-5767,6	454,48	20,680	2,5392	0,37876
PEO-H ₂ O	50,960	24611,0	-5,7134	-42,768	0,44827
Na ₂ S ₂ O ₃ -H ₂ O	-1442,7	3619,4	$-0,79233 \times 10^{-2}$	-2,4357	0,46603

Estes parâmetros de interação energética são importantes para prever equilíbrio de fases de sistemas para os quais não há dados disponíveis. A qualidade destes parâmetros pode ser dada através dos desvios médios calculados dos sistemas em estudo.

Tabela 2. Coeficientes de atividade estimados a 298,15 K.

CLA	Fase Superior			Fase Inferior		
	$\gamma_{PEO} (10^{-50})$	$\gamma_S (10^{-15})$	γ_W	$\gamma_{PEO} (10^{-47})$	$\gamma_S (10^{-16})$	γ_W
1	0,4501	0,3239	0,9995	0,0890	0,5539	1
2	0,4850	0,3396	0,9995	0,1051	0,5434	1
3	0,5466	0,3654	0,9994	0,1377	0,5291	1,001
4	0,6345	0,3999	0,9993	0,1920	0,5159	1,001
5	0,6871	0,4201	0,9992	0,2269	0,5110	1

Os coeficientes de atividades dão informações importantes sobre a interação entre as diferentes moléculas e representam a não idealidade do componente na mistura.

Conclusões

Foi realizado a modelagem do sistema ternário PEO 1500 + tiosulfato de sódio + água e os parâmetros termodinâmico de interação e não idealidade foram obtidos.

Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG, CAPES, INCTAA,

¹ Da Silva, L, H, M.; Loh, W.; *Quim. Nova*, 2006, 29, 1345-1351,