

Novos parâmetros termodinâmicos de interação para um sistema ternário formado por L64 + Eletrólito + H₂O: UNIFAC e NRTL

Leandro Rodrigues de Lemos* (PG), Vivianne Molica Andrade (PG), Aparecida Barbosa Mageste (PG), Raquel Maduro Moreira de Carvalho (PQ) Luis Henrique Mendes da Silva (PQ), Maria do Carmo Hespagnol da Silva *leandro.lemos@ufv.br

¹Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal de Viçosa

Palavras Chave: Sistema Aquoso Bifásico, L64

Introdução

Sistemas aquosos bifásicos (SAB) são uma excelente alternativa aos sistemas líquido-líquido tradicionais, pois oferecem diversas vantagens como: baixo custo, atóxico, baixa tensão interfacial, possibilidade de aplicação em larga escala e curto tempo de separação de fases. Limitações como a dificuldade tanto para o controle de pH quanto para o uso de extratantes hidrofóbicos incentivam a pesquisa para descoberta de novos SAB. Neste trabalho foram construídos SAB formados pelo copolímero L64 ($M_n = 2900 \text{ g mol}^{-1}$) que em solução formam micelas que permite a solubilização de compostos hidrofóbicos, e por uma mistura de sais que formam tampão no pH adequado ($\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KH}_2\text{PO}_4$ para $\text{pH}=7$, e $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KOH}$ para $\text{pH}=12$). Parâmetros como temperatura e composição de eletrólito do sistema foram avaliados. Os modelos UNIFAC e NRTL foram usadas para prever o comportamento de separação de fase dos sistemas estudados.

Resultados e Discussão

A quantificação dos sais foi realizada por condutividade elétrica, enquanto o polímero foi determinado via índice de refração.

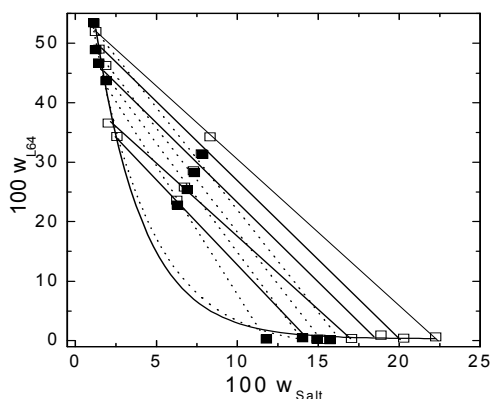


Figura 1. Efeito da temperatura para o diagrama de fase de L64 + $\text{K}_2\text{HPO}_4/\text{KOH}$, $\text{pH} 7$. \circ , 278.15 K; \bullet , 298.15 K.

O diagrama de fase não foi afetado pela temperatura, conforme exemplificado na figura 1, o que mostra uma baixa contribuição entálpica para a separação de fase. A influência da composição de eletrólito na região bifásica é mostrada na figura 2,

onde observamos que o sistema formado por $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KOH}$ tem uma maior capacidade de segregação de fase.

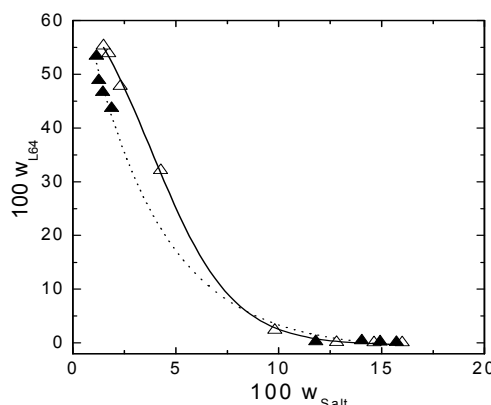


Figura 2. Efeito da composição de eletrólito para o diagrama de fase de L64 a 298.15. Δ , $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KH}_2\text{PO}_4$, \blacktriangle , $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KOH}$

Os dados experimentais de equilíbrio líquido-líquido foram usados para obter os novos parâmetros de energia de interação de NRTL (tabela 1) e parâmetros de interação de grupo de UNIFAC.

Tabela 1. Parâmetros de interação NRTL.

$i-j$	A_{0ij}/K	A_{0ij}/K	A_{1ij}	A_{1ij}	α_{ij}
C-F	-341.3	-170.9	11.20	10.63	0.4289
C-A	4.069	2252	-6.815	20.53	0.4347
C-FH	-46.52	242.0	5.902	5.705	0.2000
F-A	-52.27	8.136	-3.816	8.536	0.4249
A-FH	-1.560	650.5	8.829	-4.388	0.2412

C = L64; F = $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KH}_2\text{PO}_4$; FH = $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KOH}$; A = Água

Os dados mostraram excelentes ajustes aos dois modelos, porém o NRTL representa melhor os sistemas estudados, já que este exibiu um menor desvio médio quadrático global (NRTL = 0,32 e UNIFAC = 0,85).

Conclusões

Novos SAB foram obtidos e seus diagramas de fases foram modelados por NRTL e UNIFAC obtendo-se pela primeira vez os respectivos parâmetros de interação.

Agradecimentos

FAPEMIG, CAPES, CNPq e INCTAA