



XXII CONGRESSO
BRASILEIRO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
23 a 26 de Setembro de 2018
Hotel Maksoud Plaza
São Paulo – SP



XVII ENCONTRO BRASILEIRO
SOBRE O ENSINO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
27 a 28 de Setembro de 2018
USP
São Paulo – SP

ESTUDO TERMODINÂMICO DE MISTURAS DE ETANOL E IGEPAL (CO-520 E CO-720): PROPRIEDADES VOLUMÉTRICAS E DE TRANSPORTE

Camila L. Paiva, Regiane S. Pinheiro, Hosiberto B. de Sant'Ana, Filipe X. Feitosa

Grupo de Pesquisa em Termofluidodinâmica Aplicada, Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Bloco 709, 60455-760, Fortaleza - CE, Brasil
E-mail para contato: fxfeitosa@ufc.br

RESUMO – *As propriedades físicas e o comportamento termodinâmico de misturas dos surfactantes e cosurfactantes podem fornecer informações importantes sobre a natureza da interação moleculares presentes. Neste trabalho, dados de densidade e viscosidade dos surfactantes Igepal CO-520, Igepal CO-720, e suas misturas com etanol foram determinados experimentalmente. A partir destes dados, foram calculados volume molar em excesso, desvio de viscosidade e coeficiente de expansão térmica. Os resultados mostraram que as misturas apresentam prevalência de forças atrativas.*

1. INTRODUÇÃO

Compostos ativos superficialmente atraem grande interesse de pesquisadores devido à sua variedade de aplicações industriais (Tripathy *et al.*, 2017). O uso de surfactantes em emulsões tem incentivado alguns segmentos industriais na procura de novos processos de produção de baixo custo e mais eficientes. Os surfactantes não iônicos são compatíveis com todas as outras classes, a saber: catiônicos, aniônicos e anfotéricos, por não neutralizar as cargas (Daltin, 2011). Nesse grupo de surfactantes, destacam-se os alquil-fenóis etoxilados cujas propriedades físico-químicas são fortemente dependentes da temperatura (Daltin, 2011). Em muitos casos de uso, é necessária a adição de um cosurfactante, como o etanol, para estabilizar o sistema termodinamicamente (Resende *et al.*, 2008). Nesse contexto, o objetivo do trabalho é estudar as propriedades termodinâmicas e de transporte, tais como densidade (ρ), viscosidade dinâmica (η) e propriedades derivadas (volume em excesso (V^E), desvio de viscosidade ($\Delta\eta$) e expansão térmica (α)), de misturas (Etanol + Igepal CO-520 e Etanol + Igepal CO-720) para melhor entender o comportamento termodinâmico desses sistemas, bem como os tipos de interações intermoleculares atuantes.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

2.1. Procedimento experimental

Foram preparadas misturas binárias, de massas conhecidas, de etanol (99,5% puro) com



XXII CONGRESSO
BRASILEIRO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
23 a 26 de Setembro de 2018
Hotel Maksoud Plaza
São Paulo - SP



XVII ENCONTRO BRASILEIRO
SOBRE O ENSINO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
27 a 28 de Setembro de 2018
USP
São Paulo - SP

os surfactantes Igepal CO-520 e Igepal CO-720, à pressão atmosférica e em temperaturas $T = (293,15 - 323,15)$ K. Cada mistura foi injetada em um viscodensímetro (Anton Paar SVM 3000), que mediu simultaneamente densidade (ρ) e viscosidade (η).

2.2. Correlação termodinâmica

O volume molar em excesso (V^E) das misturas foi obtido a partir da Equação 1.

$$V^E = \sum x_i M_i (\rho^{-1} - \rho_i^{-1}) \quad (1)$$

onde, x_i , M_i , e ρ_i são, respectivamente, fração molar, massa molar e densidade do componente i e ρ , a densidade da mistura binária. O desvio de viscosidade ($\Delta\eta$) foi obtido pela Equação 2.

$$\Delta\eta = \eta - \sum x_i \eta_i \quad (2)$$

η_i é a viscosidade dinâmica do componente i e η , a viscosidade dinâmica da mistura binária. Os dados de volume molar em excesso (V^E) e desvio de viscosidade ($\Delta\eta$) foram correlacionados pela equação de Redlich-Kister (1948), Equação 3.

$$y = x_1(1 - x_1) \sum_{j=0}^K A_j (1 - 2x_1)^j \quad (3)$$

x_1 é a fração molar e k é o grau de expansão do polinômio. O ajuste do parâmetro da equação Redlich-Kister, A_j , e os desvios padrão, $\sigma(y)$, foram calculados usando a Equação 4.

$$\sigma(y) = \sqrt{\frac{\sum (y_{exp} - y_{aju})^2}{(n-p)}} \quad (4)$$

y_{exp} são os dados experimentais e y_{aju} os dados ajustados; n e p são os números de pontos experimentais e de parâmetros, respectivamente. O coeficiente de expansão térmica foi calculado usando a Equação 5.

$$\alpha = \frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial V_m^E}{\partial T} \right)_{P, x_i} + \sum_{i=1}^2 (\alpha_i x_i V_i) \right] \quad (5)$$

onde α e α_i são os coeficientes de expansão térmica das misturas e dos componentes puros, respectivamente.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Tabela 1 apresenta dados experimentais de densidade (ρ) e viscosidade (η) para a mistura Etanol + Igepal CO-520, em diversos valores de fração molar. A partir destes dados, pode-se observar que os valores de ρ e η diminuíram com o incremento da temperatura e da fração molar, comportamento esperado para uma mistura de líquidos. Vale salientar que resultados semelhantes foram observados para misturas Etanol + Igepal CO-720.

Análise das Figuras 1 e 2 mostram valores negativos de V^E para todas as temperaturas e composições estudadas dos sistemas da Etanol + Igepal CO-720. Estes valores indicam que há predominância de interações fortes entre moléculas diferentes. Por outro lado, para os sistemas Etanol + Igepal CO-520, observa-se valores positivos de V^E para a composição de 0,207. No entanto, valores negativos para V^E são dominantes e contribuem para uma contração do volume.

Tabela 1 – Dados experimentais de densidade e de viscosidade dinâmica para componentes puros (Etanol, Igepal CO-520) e suas respectivas misturas binárias em fração molar (x)

| T (K) | ρ (g·cm ⁻³) | | | | η (mPa·s) | | | | |
|---------------------------|-------------------------------|--------|--------|--------|---------------------------|-------------------------------|--------|--------|--------|
| | 293,15 | 303,15 | 313,15 | 323,15 | 293,15 | 303,15 | 313,15 | 323,15 | |
| X_{etanol} | Etanol + Igepal CO-520 | | | | X_{etanol} | Etanol + Igepal CO-520 | | | |
| 0,000 | 1,0355 | 1,0279 | 1,0205 | 1,0131 | 0,000 | 355,74 | 169,46 | 90,681 | 53,114 |
| 0,107 | 1,0324 | 1,0248 | 1,0173 | 1,0098 | 0,107 | 258,67 | 132,79 | 73,689 | 44,207 |
| 0,207 | 1,0268 | 1,0192 | 1,0117 | 1,0041 | 0,207 | 207,54 | 105,24 | 59,400 | 36,384 |
| 0,301 | 1,0233 | 1,0158 | 1,0084 | 0,9996 | 0,301 | 189,18 | 97,398 | 55,364 | 34,205 |
| 0,399 | 1,0178 | 1,0102 | 1,0026 | 0,9953 | 0,399 | 133,37 | 70,605 | 41,227 | 26,042 |
| 0,501 | 1,0096 | 1,0021 | 0,9945 | 0,9869 | 0,501 | 95,674 | 53,201 | 32,295 | 21,040 |
| 0,600 | 0,9985 | 0,9909 | 0,983 | 0,9752 | 0,600 | 60,891 | 35,322 | 22,244 | 14,909 |
| 0,701 | 0,9821 | 0,9742 | 0,9664 | 0,9585 | 0,701 | 36,211 | 22,423 | 14,792 | 10,299 |
| 0,799 | 0,9561 | 0,9481 | 0,9402 | 0,9308 | 0,799 | 17,445 | 11,722 | 8,2635 | 6,0671 |
| 0,901 | 0,9071 | 0,8990 | 0,8907 | 0,8791 | 0,901 | 6,2950 | 4,6699 | 3,5723 | 2,7975 |
| 1,000 | 0,7907 | 0,7822 | 0,7734 | 0,7601 | 1,000 | 1,2330 | 1,0222 | 0,8542 | 0,7141 |

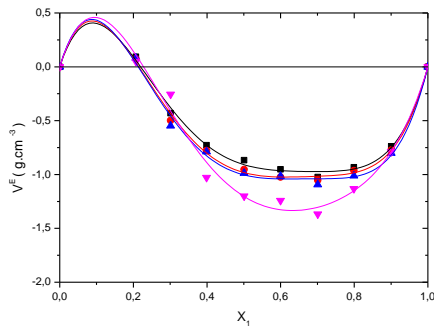


Figura 1 – V^E vs. fração molar para a mistura Etanol + Igepal CO-520 em temperaturas T = (■) 293,15 K; (●) 303,15 K; (▲) 313,15 K; (▼) 323,15 K

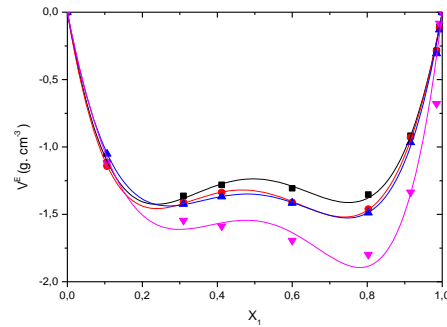


Figura 2 – V^E vs. fração molar para a mistura Etanol + Igepal CO-720 em temperaturas T = (■) 293,15 K; (●) 303,15 K; (▲) 313,15 K; (▼) 323,15 K

Na Figura 3 observa-se um $\Delta\eta$ negativo para todas as temperaturas e composições estudadas, sendo mais pronunciado para o sistema Etanol + Igepal CO-720. Valores negativos de $\Delta\eta$ pode ser interpretado como a ação mais deliberada de forças intermoleculares atrativas (Dubey *et al.*, 2008). Para o sistema com Etanol + Igepal CO-720, faixas de $\Delta\eta$ negativo predominam, exceto para valores de fração molar próximo de 0,2 em que há uma tendência de $\Delta\eta$ positivo; mas um desvio muito negativo para x_1 próximo a 0,7.

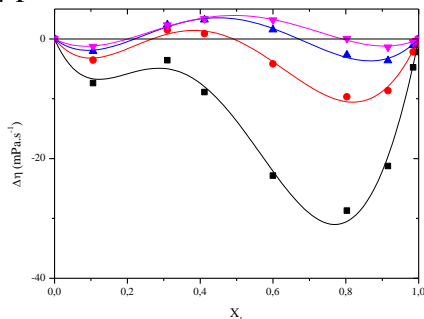


Figura 3 – $\Delta\eta$ vs. fração molar para a mistura Etanol + Igepal CO-520 em temperaturas T = (■) 293,15 K; (●) 303,15 K; (▲) 313,15 K; (▼) 323,15 K.

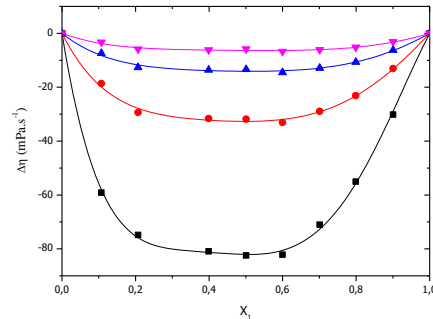


Figura 4 – $\Delta\eta$ vs. fração molar para a mistura Etanol + Igepal CO-720 em temperaturas T = (■) 293,15 K; (●) 303,15 K; (▲) 313,15 K; (▼) 323,15 K.

As Figuras 5 e 6 mostram o comportamento dos sistemas Etanol + Igepal CO-520 e Etanol + Igepal CO-720 para o coeficiente de expansão térmica (α). Este valor mostra a variação do

volume, em relação a temperatura, para uma pressão constante. Percebe-se o aumento do coeficiente de expansão térmica com a temperatura. Este comportamento é esperado, pois o aumento da temperatura de um fluido, provoca um aumento na energia interna de suas moléculas. Com o aumento na energia é verificado um acréscimo do volume molar, e consequentemente, um decréscimo na densidade. Normalmente, o valor esperado para α diminui com o aumento da intensidade das ligações (FERREIRA, 2011).

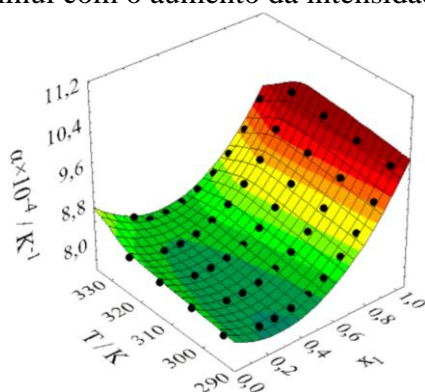


Figura 5 – Coeficiente de expansão térmica (α) versus fração molar e temperatura para a mistura Etanol + Igepal CO-520.

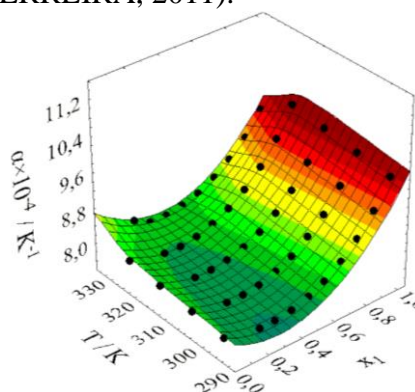


Figura 6 – Coeficiente de expansão térmica (α) versus fração molar e temperatura para a mistura Etanol + Igepal CO-720.

4. CONCLUSÕES

Os sistemas Etanol + Igepal CO-520 e Etanol + Igepal CO-720 comportam-se como sistemas líquidos convencionais, com relação às propriedades densidade de viscosidade. Tendo-se observado uma tendência à contração volumétrica e a predominância de forças de dispersão.

6. REFERÊNCIAS

- DALTIN D., *Tensoativos: química, propriedades e aplicações*. São Paulo: Editora Blucher, 2011.
- DUBEY GP, SHARMA M, DUBEY N, Study of densities, viscosities, and speeds of sound of binary liquid mixtures of butan-1-ol with n-alkanes (C6, C8, and C10) at T = (298.15, 303.15, and 308.15) K. *J. Chem. Thermodyn.*, v. 40, p. 309-320, 2008.
- FERREIRA CEN., *Determinação da densidade de líquidos à base de fosfônio quaternário Trihexil(tetradecil)fosfônio tris(pentafluoroetil) trifluorofosfato*, 2011, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologias, Departamento de Engenharia Química, Universidade de Coimbra.
- REDLICH O, KISTER AT, Algebraic representation of thermodynamics properties and the classification of solutions. *Ind. Eng. Chem.*, v. 40, p.345-348, 1948.
- RESENDE KX, CORRÊA MA, OLIVEIRA AG, SCARPA MV, Effect of cosurfactant on the supramolecular structure and physicochemical properties of non-ionic biocompatible microemulsions, *Braz. J. of Pharm. Sci.*, v. 44, p. 35-42, 2008.
- TRIPATHY D. B., MISHRA A., CLARK J., FARMER T, Synthesis, chemistry, physicochemical properties and industrial applications of amino acid surfactants: A review. *C. R. Chimie*, v. 21, p. 112 - 130, 2018.