



Análise de propriedades de misturas binárias de t-butanol e água por espalhamento de raio X a baixo ângulo (SAXS)

Marcelo Henrique Schwade[†]

Orientadora: Cilãine Verônica Teixeira[†]

[†] Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Instituto de Física

marcelo.schwade@ufrgs.br

Introdução

Soluções formadas por água e álcoois são empregadas em diversos âmbitos, como na produção de biocombustíveis e na de fármacos. A presença de álcoois em água, entre eles o t-butanol (2-metil-propan-2-ol), afeta propriedades termodinâmicas como calor específico e compressibilidade isotérmica originais da mesma ^[1]. Para líquidos, a compressibilidade isotérmica χ_T se relaciona com o fator de estrutura S_{NN} para ângulo de espalhamento ($2\theta = 0$) em uma curva de espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS) ^[2]; isso se dá conforme a expressão (1), onde R , T , V e N são a constante dos gases ideais, a temperatura, o volume molecular e o número de partículas, respectivamente.

$$S_{NN}(0) = \frac{RT\chi_T}{V} \quad (1)$$

A compressibilidade isotérmica de uma mistura depende da concentração de seus componentes. Com o objetivo de determinar χ_T para misturas de t-butanol e água e sua dependência com a concentração obtivemos curvas de SAXS para diferentes frações molares de t-butanol. A intensidade de espalhamento $I(q)$, para $q = 0$ ($q = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$), segue a mesma dependência da fração molar que $S_{NN}(q)$ e χ_T . Assim, obtivemos curvas de SAXS para frações molares no intervalo de 0,10 a 0,30.

Desenvolvimento e Resultados Parciais

Inicialmente foram obtidas curvas de SAXS para frações molares entre 0,10 e 0,30 no Laboratório de Cristalografia do IFUSP. As imagens de espalhamento foram obtidas em um detector bidimensional e integradas azimutalmente para obtenção das curvas de intensidade de espalhamento em função de q com o programa *Foxtrot* [©]. A calibração da escala em q foi feita com behenato de prata. As curvas foram corrigidas para o espalhamento do solvente e transmissão, além de reescaladas para escala absoluta, usando como padrão o espalhamento da água.

Traçamos um gráfico das intensidades para $q = 0$, obtidas por extrapolação, em função da fração molar de t-butanol em água, ver figura (1). O comportamento de $I(0)$ segue o esperado ^[2] para quase todas as concentrações, mas difere para 0,10 e 0,14. Essas duas concentrações foram refeitas no instrumento *Xenocs Nano-inXider* [®] instalado no CNANO. Para o tratamento das novas curvas foram desenvolvidos programas em Python.

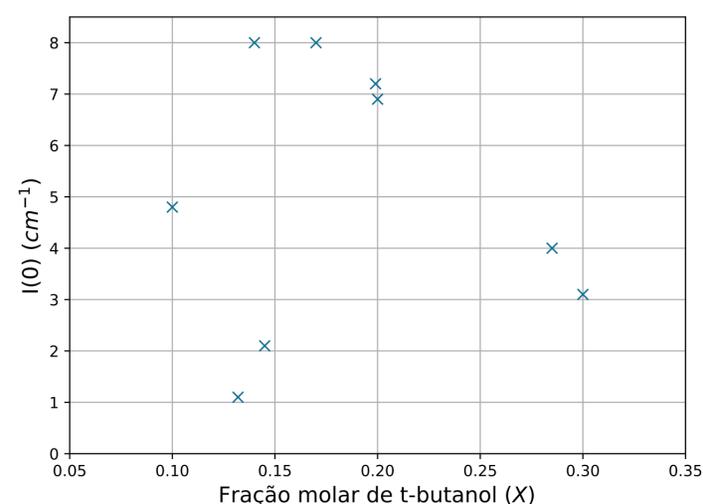


Figura 1 – Intensidade absoluta a $q = 0$ para diversas frações molares

Perspectivas

As próximas etapas consistem na finalização dos *softwares* para tratamento dos dados, extrapolação das novas curvas para $q = 0$, obtenção do fator de estrutura a partir da curva de intensidade de espalhamento, confirmação da dependência de $S_{NN}(0)$ da fração molar de t-butanol e, a partir de $S_{NN}(0)$, obter a compressibilidade isotérmica χ_T e a função distribuição de distâncias, $g(r)$, do sistema para as concentrações medidas. Temos o objetivo de comparar os resultados obtidos experimentalmente com resultados teórico-computacionais de Dinâmica Molecular.

Referências

- FURLAN, A. P.; LOMBA, E.; BARBOSA, M. C. B. Temperature of maximum density and excess properties of short-chain alcohol aqueous solutions: A simplified model simulation study. *The Journal of Chemical Physics*, v. 146, n. 14, p. 144503, 2017.
- KOGA, Y. A saxs study of concentration fluctuations in t-butanol—water system. *Chemical Physics Letters*, v. 111, n. 1, p. 176 – 180, 1984. ISSN 0009-2614.

Agradecimentos

