



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2020
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Análise unidimensional de mistura água-álcool
<b>Autor</b>	MARCO ANTÔNIO HABITZREUTER
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

## Análise unidimensional de mistura água-álcool

Marco Antônio Habitzreuter

Orientadora: Marcia Barbosa

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A necessidade do uso da água em praticamente todos os aspectos da vida faz com que a compreensão dela seja fundamental para o progresso social, científico e tecnológico. Muitas das propriedades que tornam este líquido fundamental à vida estão associadas as mais de 70 anomalias que ela apresenta: comportamentos nos quais a água difere dos demais materiais. Se isolada a água é interessante, em misturas ela se torna ainda mais fascinante: sabemos que, ao misturar água e álcool num regime de alta diluição, surge um extremo no calor específico de excesso e na entalpia de excesso, bem como uma variação na temperatura de máxima densidade (TMD). Isso depende da estrutura e do tamanho da cadeia do álcool. Neste sentido, o estudo dessas misturas é de interesse na indústria do bioetanol, farmacêutica, cosméticos, e também para o avanço da ciência básica. Nesse trabalho, buscamos compreender analiticamente e de forma fundamental qual é a estrutura microscópica da mistura de água e álcool que gera as propriedades de excesso desse sistema, estruturantes ou não. Para isso, desenvolvemos um modelo unidimensional de mistura com um potencial tipo *shoulder* para modelar a água, e um van der Waals para o álcool. Utilizando a aproximação quase-química, foi possível calcular expressões analíticas para o volume de excesso e entalpia de excesso da mistura. Também foi possível verificar a presença de anomalia na densidade nesse modelo. A partir disso, variamos parâmetros do potencial para entender como eles afetam as quantidades de excesso e a TMD. Verificamos que a aproximação utilizada força um extremo na concentração 0,5, o que não permite reproduzir quantitativamente os resultados de experimentos na literatura. Na sequência, iremos explorar aproximações mais realistas para compreender melhor esse processo.