



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Análise de propriedades de misturas binárias de t-butanol e água por espalhamento de raio X a baixo ângulo (SAXS)
<b>Autor</b>	MARCELO HENRIQUE SCHWADE
<b>Orientador</b>	CILAINE VERONICA TEIXEIRA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

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

Autor: Marcelo Henrique Schwade

Orientadora: Cilaine Verônica Teixeira

## Resumo

Apesar de sua simplicidade, misturas binárias de líquidos podem apresentar propriedades bastante diferenciadas das propriedades originais das substâncias que as compõem (FURLAN, 2017), em especial no que se refere às propriedades termodinâmicas. Em particular, soluções formadas por água e vários álcoois apresentam comportamento anômalo com relação a algumas de suas propriedades termodinâmicas, como calor específico e compressibilidade isotérmica. Entre os álcoois para os quais são observadas essas anomalias está o 2-metil-propan-2-ol, mais conhecido como t-butanol (FURLAN, 2017). Para líquidos, a compressibilidade isotérmica se relaciona com o fator de estrutura para  $\vec{q}$  (vetor transferência de momento) igual a zero, mensurável através de técnicas de espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS) (KOGA, 1984; NISHIKAWA, 1987). A compressibilidade isotérmica, assim como o fator de estrutura da mistura, depende da fração molar do álcool em água. Com o objetivo de determinar a compressibilidade isotérmica da mistura t-butanol/água, por extrapolação a  $q = 0$ , obtivemos as curvas de espalhamento de SAXS para diferentes frações molares de água/t-butanol. A intensidade de espalhamento, para  $q = 0$ , segue a mesma dependência da concentração molar que o fator de estrutura e a compressibilidade isotérmica. Inicialmente, obtivemos essa dependência para frações molares no intervalo de 0,10 a 0,30. Paralelamente, estamos trabalhando na realização de simulações de dinâmica molecular de misturas binárias análogas à mistura água/t-butanol com o intuito de investigar esse sistema por outra via, visando a construção de um modelo físico para descrever as anomalias nas propriedades dessa mistura.