



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Análise de misturas de água e terc-butanol por espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS)
Autor	MARCELO HENRIQUE SCHWADE
Orientador	CILAINE VERONICA TEIXEIRA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Análise de misturas de água e terc-butanol por
espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS)

Autor: Marcelo Henrique Schwade

Orientadora: Cilãine Verônica Teixeira

Coorientadora: Marcia C. B. Barbosa

Misturas formadas por álcoois e água podem apresentar propriedades peculiares em relação às propriedades individuais dessas substâncias. Particularmente, misturas de terc-butanol em água vêm chamando atenção há vários anos pela presença de comportamentos anômalos acentuados em muitas de suas propriedades termodinâmicas. Neste trabalho utilizamos medidas de espalhamento de raios X a baixo ângulo, SAXS, em escala absoluta, para investigar misturas de água e terc-butanol. Foram estudadas misturas com frações molares do álcool (X) entre 0,1 e 0,3 à temperatura de $(27,0 \pm 0,1)^\circ\text{C}$. Foram determinados a intensidade a ângulo de espalhamento zero ($I(0)$) e o raio de giração das partículas espalhadoras (R_g). Encontramos um máximo em $I(0)$ para a fração molar 0,14, que associamos a um aumento na formação de agregações moleculares na mistura. Nossos resultados para o raio de giração indicaram um máximo no tamanho dos aglomerados para a fração molar 0,14 e uma queda no tamanho dos agregados para frações maiores. Utilizando um modelo desenvolvido por D'Arrigo e Teixeira (1990), avaliamos as possíveis composições dos agregados capazes de reproduzir nossos resultados de $I(0)$. Concluimos que a composição, em termos do número de moléculas, que melhor descreve os resultados para o nosso conjunto de amostras é a de agregados ricos em água. Mostramos ainda que esse resultado é compatível com o modelo de clatratos de Iwasaki e Fujiyama (1977) em termos da proporção entre moléculas de água e terc-butanol nos agregados. Por fim, avaliamos que a diminuição no tamanho das agregações para frações de álcool maiores pode estar relacionada à menor disponibilidade de água na mistura para formação dos agregados, e uma conseqüente quebra destes em agregações menores. Esse fenômeno implicaria em uma redução das flutuações na mistura, explicando a queda nos valores de $I(0)$.