



UNIVERSIDADE CATÓLICA DO SALVADOR
ENGENHARIA QUÍMICA

IVANIELE VIEIRA SANTOS

**LEVANTAMENTO EXPERIMENTAL DE DADOS DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO-
LÍQUIDO ATRAVÉS DE UMA METODOLOGIA GRAVIMÉTRICA**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

SALVADOR - BAHIA

2018

IVANIELE VIEIRA SANTOS

**LEVANTAMENTO EXPERIMENTAL DE DADOS DE EQUILÍBRIO
LÍQUIDO-LÍQUIDO ATRAVÉS DE UMA METODOLOGIA
GRAVIMÉTRICA**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado a Universidade Católica do
Salvador – UCSal, como requisito parcial
para obtenção do título de bacharel em
Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Bello Neves
Coorientador: Prof. Me. Wagner Almeida
Mônaco Conceição

SALVADOR - BAHIA

2018

Santos, Ivaniele Vieira.

Levantamento experimental de dados de equilíbrio líquido-líquido através de uma metodologia gravimétrica. / Ivaniele Vieira Santos; Orientação de Sérgio Bello Neves. Salvador: 2018.

41 fls.

Inclui referências: fls. 39 – 41.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) – Universidade Católica do Salvador – Campus de Pituaçu, Salvador - BA.

1. Extração 2. Equilíbrio líquido-líquido. 3. Sistema ternário 4. Densidade 5. Picnometria I. Neves, Sérgio Bello. II. Universidade Católica do Salvador – UCSAL. III. Bacharel em Engenharia Química.



TERMO DE APROVAÇÃO

LEVANTAMENTO EXPERIMENTAL DE DADOS DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO- LÍQUIDO ATRAVÉS DE UMA METODOLOGIA GRAVIMÉTRICA

IVANIELE VIEIRA SANTOS

Este Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) foi apresentado em 18 de dezembro de 2018 como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química. A candidata foi arguida pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof. Dr. Sérgio Bello Neves

Prof. Orientador

Prof. Me. Wagner Almeida Mônaco Conceição

Prof. Co-orientador

Prof. Me. Celso Argolo Xavier Marques

Membro titular

AGRADECIMENTOS

Sou imensamente grata a Deus por ter me abençoado de forma tão grandiosa, mesmo passando por várias provações, me concedeu força e coragem para continuar desenvolvendo esse trabalho.

Expresso minha tamanha gratidão ao meu orientador Sérgio Bello por toda sabedoria e orientação dedicados a mim.

Não tenho palavras para agradecer as minhas meninas Vanessa, Anne e em especial, Natália e Lívia que foram meus anjos da guarda nessa trajetória, assim como Pablo, por toda preocupação e ajuda nos momentos mais difíceis.

Todo amor e gratidão a minha mãe Ana Cláudia e minha vó Carmem, que mesmo distantes fisicamente não me deixaram desistir desse sonho.

Deixo registrado o meu agradecimento a todos da UCSal, em especial ao coordenador e meu coorientador Wagner Mônico por toda disponibilidade e contribuição a este trabalho.

Enfim, agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para a concretização desta etapa.

RESUMO

SANTOS, Ivaniele Vieira. **Levantamento experimental de dados de equilíbrio líquido-líquido através de uma metodologia gravimétrica**. 2018. 41. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Universidade Católica do Salvador. Salvador, 2018.

O estudo do equilíbrio líquido-líquido tem extrema importância para o planejamento e desenvolvimento de projetos, bem como fornecem suporte a análise e seleção das operações unitárias e processos da indústria. O presente trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia para o levantamento de dados de equilíbrio líquido-líquido a partir da densidade de misturas do sistema ternário, água-acetona-clorofórmio. As frações mássicas dos três componentes foram obtidas através do método experimental de extração líquido-líquido, assim como a densidade, a qual foi determinada pelo método gravimétrico da picnometria. Através da modelagem desenvolvida foi possível, a partir dos dados de composições dos componentes, calcular o volume molar de excesso de cada binário, possibilitando prever a densidade da mistura ternária. Do mesmo modo, conseguiu-se quantificar as substâncias presentes na solução através da densidade experimental. Mediante a análise dos resultados obtidos ao longo do trabalho, a modelagem desenvolvida mostrou-se bastante eficaz.

Palavras-chave: Extração. Equilíbrio líquido-líquido. Sistema ternário. Densidade. Picnometria.

ABSTRACT

SANTOS, Ivaniele Vieira. **Levantamento experimental de dados de equilíbrio líquido-líquido através de uma metodologia gravimétrica**. 2018. 41. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Universidade Católica do Salvador. Salvador, 2018.

The study of liquid-liquid equilibrium is extremely important for planning and development of projects, as well as providing support for analysis and selection of unit operations and industry processes. The present work aims to develop a methodology for the data collection of liquid-liquid equilibrium from the density of mixtures of the ternary system, water-acetone-chloroform. The mass fractions of the three components were obtained by the liquid-liquid extraction experimental method, as well as the density, which was determined by the gravimetric method of pycnometry. Through the modeling developed, it was possible to calculate the molar volume of excess of each binary, from the component composition data, to predict the density of the ternary mixture. In the same way, the substances present in the solution could be quantified by the experimental density. Through the analysis of the results obtained throughout the work, the modeling developed proved to be quite effective.

Keywords: Extraction. Liquid-liquid equilibrium. Ternary system. Density. Pycnometry.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3. METODOLOGIA.....	9
3.1. CURVA BINODAL.....	9
3.2. DENSIDADE	9
3.2.1. SISTEMA BINÁRIO.....	10
3.2.2. SISTEMA TERNÁRIO.....	10
3.3. TIE-LINES	10
4. DESENVOLVIMENTO	11
4.1. SISTEMAS BINÁRIOS	11
4.2. CURVA BINODAL.....	17
4.2.1. CURVA BINODAL LADO DO RAFINADO	18
4.2.2. CURVA BINODAL LADO DO EXTRATO	19
4.2.3. COMPLEMENTO DA CURVA BINODAL	20
4.3. DENSIDADE	22
4.3.1. RAFINADO.....	22
4.3.2. EXTRATO.....	24
4.4. TIE-LINES	26
4.4.1. RAFINADO.....	26
4.4.2. EXTRATO.....	26
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	29
6. RECOMENDAÇÕES FUTURAS	30
REFERÊNCIAS	31

1. INTRODUÇÃO

Com o avanço da tecnologia tornou-se fundamental a necessidade de processos de separação adequados para misturas, objetivando o aumento da qualidade do produto final; para isso são necessárias análises de aspectos como: o tipo de mistura, heterogênea ou homogênea, a natureza dos elementos químicos e suas propriedades como densidade, ponto de fusão e ebulição, solubilidade, entre outros. Em misturas líquidas, normalmente, os métodos mais utilizados são a destilação, podendo ser: simples, fracionada, extrativa ou azeotrópica; e a extração líquido-líquido. A determinação do processo a ser utilizado vem mediante a intensos estudos, focando principalmente no critério econômico aliado ao padrão de qualidade adequado e mínimo custo do produto final.

De acordo com Caldas *et al.* (2007), a destilação é um método direto de separação, amplamente utilizado na indústria, onde o agente extrator é o calor fornecido ao processo, o qual dá origem a uma nova fase, o vapor. Já a extração líquido-líquido (ELL) é um método indireto, que envolve a transferência de massa de um componente dissolvido (soluto), entre duas fases líquidas imiscíveis, esta transferência é facilitada pela adição de agentes que favoreçam a separação de fases (solvente) e/ou também pela utilização de reações químicas entre soluto e solvente (PERRY; GREEN, 1997). A extração tende a ser, a princípio, mais cara dentre os métodos de separação e normalmente apresenta-se como uma operação isotérmica.

A extração líquido-líquido, também conhecida como extração por solvente ou partição, é baseada na diferença de solubilidade de dois líquidos imiscíveis. A técnica é bastante utilizada em laboratórios químicos, mas também em diversos ramos da indústria como processamento de alimentos, onde é usada para concentrar componentes de alto valor agregado ou para remover compostos indesejáveis, ou nocivos, presentes em uma matéria-prima (TADINI *et al.*, 2016); processamento de perfume; extração de óleos vegetais; além da purificação de combustíveis fósseis como separação dos compostos sulfurados e hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPA), na indústria petroquímica.

O processo de extração líquido-líquido é apontado como um dos mais adequados quando a mistura apresenta pontos de ebulição muito próximos ou quando as substâncias se degradam a baixas temperaturas. Também é empregado em

sistemas diluídos, onde, para aumentar a eficiência do processo é necessária uma seleção criteriosa do solvente ou uma combinação de solventes a ser utilizado, que proporcione alto coeficiente de distribuição e boa seletividade, controle operacional rígido de temperatura e tempo de residência, modo de extração, podendo ser em contracorrente ou concorrente, além do tipo de extratores: torres de misturas, torres de corrente cruzada, centrífuga ou tanques de agitação (MADHAVAN, 2008). A separação do solvente e do soluto deve ser simples, pois, após a extração, é necessário outro processo de separação, normalmente a destilação, para obter substâncias puras, possibilitando até a reincorporação do solvente ao processo por uma corrente de refluxo.

A extração, assim como todos os processos de separação, apresenta desvantagens como a utilização de grande quantidade de solventes orgânicos, geralmente substâncias tóxicas, cancerígenas e/ou inflamáveis; longo tempo de análise; dificuldade de automação (RODRIGUES *et al.*, 2010).

Os sistemas de extração são caracterizados pelo número de pares parcialmente miscíveis que eles contêm, podendo ser do tipo I, II ou III em sistemas ternários. O tipo I é frequentemente o mais utilizado, onde o solvente (B) é completamente miscível no soluto (C) e o mais imiscível possível com o co-solvente (A). Isso possibilita uma separação completa com apenas alguns estágios, pois o solvente tem uma alta seletividade para um componente e baixa seletividade para o outro (CALDAS *et al.*, 2007). O número de estágios é definido a partir da especificação da pureza do produto de interesse, visando ser o mínimo possível para atender ao critério de projeto, uma vez que, o estudo econômico é um fator de extrema importância, pois quanto mais estágios forem inseridos na planta maior o gasto de energia consumida.

Para a análise da especificação do produto é necessário determinar a composição dos componentes presentes na amostra após o processo de extração, mas como fazer essa determinação de maneira mais viável economicamente? Atualmente, a técnica cromatográfica é a mais utilizada industrialmente e em laboratórios químicos. Esse sistema vem sendo cada vez mais automatizado com o uso de detectores aliados a softwares (LANÇAS, 2009), eliminando erros humanos de manipulação, diminuindo o tempo de assistência do analista durante a análise, evitando o risco de contato com substâncias prejudiciais à saúde, além de aumentar,

significativamente, o número de análises de amostras por tempo (QUEIROZ *et al.*, 2001). Devido ao custo elevado do cromatógrafo, estudiosos buscam técnicas alternativas de mensurar a composição de cada componente presente na mistura, com isso, metodologias são desenvolvidas para que a partir da determinação da densidade seja possível quantificar as substâncias presentes na amostra.

O uso de balanças analíticas e técnicas como a picnometria e densimetria são utilizadas como formas de determinar a densidade. As balanças analíticas apropriadas para a determinação da densidade utilizam o método gravimétrico de empuxo, o qual baseia-se no princípio de Arquimedes, onde um corpo total ou parcialmente imerso em um fluido é sustentado por uma força de empuxo, cuja intensidade é igual ao peso do fluido deslocado pelo corpo (HALLIDAY, 2003), com a adição de um imerso de vidro de volume conhecido.

O densímetro digital, medidor de densidade, consiste em um tubo oscilatório em U de vidro ou metal, configurado para oscilar numa frequência particular. Ao introduzir a amostra, a massa dentro do tubo aumenta, ocorrendo à mudança da frequência de oscilação. Os sensores presentes no tubo se excitam e emitem sinais os quais são transferidos para um sistema computacional que calculam a leitura da densidade. Esta tecnologia apresenta vantagens como medição automática, volumes pequenos de amostras e rapidez no processo, porém tem custo elevado devido à automatização.

A picnometria é um método gravimétrico usado para a determinação da densidade, a partir da massa pesada da amostra e volume determinado através do picnômetro. Esta vidraria é conhecida como pequeno frasco de vidro, com tampa esmerilhada conectada a um termômetro, permitindo a leitura imediata da temperatura da solução. A técnica apresenta-se vantajosa pelo baixo custo devido ao uso de vidrarias de laboratório e balança analítica e pela precisão nos resultados, motivo pelo qual foi escolhida como técnica de obtenção da densidade a partir do levantamento experimental.

Estudos, a partir da obtenção de dados experimentais, os quais dão suporte à seleção de operações unitárias, *scale-up* e o desenvolvimento de regras de predição de propriedades, vêm sendo desenvolvidos largamente devido à importância e grandes interesses de mercado, como a redução de custos de investimentos e operacionais bem como especificações mais rígidas de produtos. Para este propósito

é indispensável a utilização de ferramentas computacionais acopladas a validações de dados experimentais (MACHADO, 2007).

Tendo em vista a importância da extração e a necessidade de análise e quantificação dos componentes em misturas líquidas, o objetivo geral do presente trabalho é desenvolver uma metodologia para levantamento de dados de equilíbrio líquido-líquido a partir da densidade de misturas, para isso como objetivos específicos propõem-se:

- Coletar dados experimentais, frações mássicas e densidade do sistema binário acetona-clorofórmio e do ternário, água-acetona-clorofórmio;
- Determinar o volume molar de excesso, visando prever a não idealidade de misturas binárias;
- Calcular as composições dos componentes presentes na solução, de acordo com a densidade obtida experimentalmente através da modelagem desenvolvida;
- Prever a tendência teórica da densidade da solução, diante das composições experimentais;
- Avaliar comparativamente os dados da literatura com os resultados experimentais.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na extração líquido-líquido, a solução que contém os componentes a serem separados é chamada de alimentação; nela estão presentes o co-solvente também denominado de diluente, componente líquido de maior quantidade e o soluto, componente de interesse. O solvente é adicionado ao processo para extrair o soluto, sendo imiscível ou parcialmente miscível no diluente. A fase rica em solvente é denominada extrato, enquanto a fase rica em diluente é chamada de refinado ou refinado.

Segundo Vlastimil (1991), independentemente do procedimento que for realizado na extração, em batelada manual ou sistema mecanizado ou automatizado, são necessárias três operações fundamentais:

1. A fase aquosa e a fase orgânica, sendo imiscíveis, devem ser dispersas em volumes definidos;
2. As fases devem estar em contato de forma mais eficiente possível, para que possa haver a extração de todo ou da maior parte do soluto;
3. As fases devem estar fisicamente separadas para detecção adequada do componente de interesse.

A solubilidade é definida como a quantidade máxima de soluto que se dissolve em uma determinada quantidade de solvente, em condições de equilíbrio. Ela está diretamente relacionada com a estrutura molecular da substância, onde componentes apolares ou fracamente polares são solúveis em solventes apolares, bem como substâncias polares se dissolvem em solventes polares (MARTINS *et al.* 2013). Existem diversos fatores que influenciam na solubilidade, porém o mais expressivo é a temperatura, que afeta a maioria das substâncias (CHANG, 2013). A solubilidade entre líquidos é conhecida como miscibilidade e dois líquidos são miscíveis quando forem completamente solúveis um no outro em todas as proporções (CARVALHO, 2010).

No processo de extração líquido-líquido, com dados experimentais das composições de equilíbrio de sistemas ternários são construídos diagramas, eles podem ser representados como coordenadas triangulares ou retangulares. Nos diagramas triangulares equiláteros, os vértices equivalem aos componentes puros e os lados demonstram a composição de misturas binárias. O ponto P, no interior do triângulo fornece a composição de um sistema ternário (**Figura 1**), porém não significa

necessariamente que se refere a uma fase homogênea. Para o equilíbrio líquido-líquido, o sistema homogêneo é instável, pois não é possível a coexistência dos três componentes em uma única fase, ocorrendo então a separação do sistema heterogêneo de interesse (MACHADO, 2007).

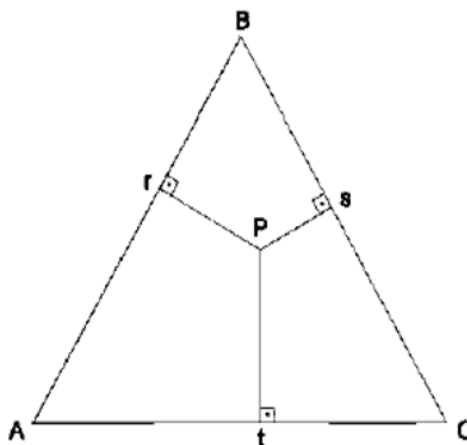


Figura 1. Diagrama triangular equilátero.

Fonte: CALDAS *et al.* (2007).

A **Figura 2** simboliza o diagrama triangular reto também conhecido como diagrama de Hunter-Nash, nele está apresentado a curva de solubilidade ou curva binodal, onde abaixo dela representa-se a zona de imiscibilidade ou miscibilidade parcial dos componentes, formando uma solução heterogênea e acima da curva de solubilidade, a zona de miscibilidade total, sistema homogêneo.

As linhas presentes dentro da curva são conhecidas como tie-lines ou linhas de amarração. Conforme demonstrado pela linha UV na **Figura 2**, elas representam o equilíbrio entre extrato e refinado. Segundo Treybal (1951), a área de heterogeneidade é composta por um número infinito de tie-lines, mas apenas algumas são demonstradas nos diagramas. Estas linhas não são paralelas e normalmente mudam a inclinação com a variação da concentração. Embora este método de representação apresente a vantagem de determinar visualmente as proporções em peso das duas fases da mistura de composição conhecida, possui a desvantagem de requerer dados para todas as faixas de concentrações (OTHMER; TOBIAS, 1942).

O ponto P designado de *plait point* ou ponto crítico é o encontro dos dois ramos da curva de solubilidade, onde, normalmente, a esquerda estão as composições do refinado e a direita, as de extrato, não significando que este seja o ponto de máxima concentração do composto C na curva (CALDAS *et al.*, 2007). No *plait point*, em

equilíbrio, a composição de extrato e refinado é a mesma, resultando em uma extração impossível.

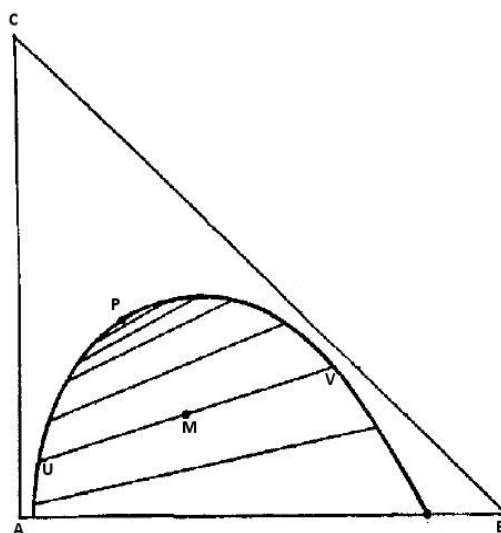


Figura 2. Diagrama de Hunter-Nash

Fonte: CALDAS *et al.* (2007), modificada.

Em comparação com os gases, nos líquidos, as distâncias entre as moléculas são muito pequenas e o efeito das forças intermoleculares são muito grandes, demonstrando que dependem de todos os aspectos das forças que agem entre as moléculas.

A termodinâmica descreve o desvio da idealidade como a diferença entre o comportamento da solução real em relação ao comportamento da solução ideal através das grandezas termodinâmicas em excesso, nas mesmas condições de temperatura, pressão e composição. Diante disso, pode-se afirmar que uma solução ideal apresenta propriedades em excesso igual a zero, enquanto que as soluções reais demonstram valores positivos, significando expansão ou negativos, demonstrando contração do sistema (MAGALHÃES, 2007). No sistema real, este desvio é expresso pelas propriedades termodinâmicas, principalmente pelos coeficientes de atividade, os quais descrevem o equilíbrio de fases e as propriedades excessivas, importantes no estudo das interações moleculares como as que ocorrem entre soluto-soluto, soluto-solvente e solvente-solvente (WISNIAK *et al.*, 2008). Vale ressaltar que propriedades em excesso não tem significado para espécies puras (SMITH *et al.*, 2007).

Segundo Vicente e Tôrres (2014), dentre as grandezas de excesso, o volume molar de excesso é de extrema importância, visto que seu comportamento está associado a efeitos físicos, químicos e estruturais, bem como a relativa facilidade de obtê-lo com rapidez e grande precisão utilizando pequenas quantidades de amostra. O volume molar é definido como o volume ocupado por um mol de uma substância pura. Em misturas de líquidos, no sistema ideal, não há volume em excesso, ou seja, não há contração ou expansão do volume na mistura, pois quando as substâncias apresentam propriedades similares, se comportam praticamente do mesmo jeito que se comportaria se estivesse puro. Diante desses fatores, o volume molar excesso é amplamente aplicado no desenvolvimento de modelos matemáticos.

3. METODOLOGIA

A parte experimental foi desenvolvida no laboratório da Universidade Católica do Salvador - UCSal, onde foram levantados dados da curva binodal, densidade do sistema binário acetona-clorofórmio e da mistura ternária água-acetona-clorofórmio, através da picnometria, bem como valores de densidades para cada uma das fases, extrato e refinado, visando a obtenção das tie-lines.

Através da modelagem desenvolvida foi possível determinar o volume molar de excesso para misturas binárias, objetivando o entendimento prévio do comportamento da solução. Do mesmo modo, calculou-se a densidade de misturas através das frações mássicas obtidas experimentalmente, assim como, dada a densidade, foi possível calcular as composições das substâncias do sistema ternário.

3.1. CURVA BINODAL

O levantamento dos dados da curva binodal subdividiu-se em três partes:

1. Para a curva do refinado adicionou-se massas previamente determinadas de clorofórmio e água, sendo o primeiro em maior quantidade; posteriormente adicionou-se gradativamente acetona até a dissolução do sistema heterogêneo no balão volumétrico, obtendo assim, as frações mássicas de cada componente.
2. Para a curva do lado do extrato procedeu-se da mesma maneira conforme descrito acima, porém adicionou-se maior quantidade de água e algumas gotas de clorofórmio até a massa pré-definida então, adicionou-se acetona até a percepção do desaparecimento das duas fases formadas.
3. Por fim, pontos foram levantados na região do *plait point*, de modo a complementar a curva binodal do sistema.

3.2. DENSIDADE

Inicialmente, para a determinação da densidade dos sistemas binário e ternário foi necessário calibrar o picnômetro. A calibração do volume desta vidraria foi realizada a partir da correlação entre a massa de água, adquirida pela pesagem da

vidraria vazia e posteriormente preenchida com água pura, e a densidade obtida pelo NIST (National Institute of Standards and Technology), mediante a verificação da temperatura do sistema.

O picnômetro utilizado tem volume nominal de 25 ml, ou seja, volume estabelecido pelo fabricante. A fim de assegurar melhor precisão dos resultados de densidade é necessário garantir o preenchimento completo do picnômetro. Diante disso, as soluções foram preparadas com volume de 35 ml, considerando as perdas ao transferir a mistura do balão volumétrico para o picnômetro.

3.2.1. SISTEMA BINÁRIO

Determinou-se previamente cinco composições de misturas acetona-clorofórmio, pesando-as no balão volumétrico e posteriormente transferindo-as para o picnômetro, obtendo as densidades.

3.2.2. SISTEMA TERNÁRIO

Com concentrações previamente determinadas, as massas dos três componentes foram pesadas e transferidas para o picnômetro, conforme descrito anteriormente, para o levantamento da densidade do sistema ternário água-acetona-clorofórmio.

3.3. TIE-LINES

As tie-lines foram obtidas a partir da mistura ternária com diferentes composições, onde foram determinadas, por picnometria, as densidades de cada uma das fases, tanto para o extrato, quanto para o refinado.

4. DESENVOLVIMENTO

4.1. SISTEMAS BINÁRIOS

Para o desenvolvimento da modelagem, a densidade da água pura foi obtida através do NIST considerando a temperatura de 27,5°C e a do clorofórmio calculada a partir da equação (1) do Yaws (1999). No binário acetona-clorofórmio, a densidade da acetona foi calculada a partir da equação (1) em ambas as temperaturas, com os parâmetros fornecido pelo Yaws (1999) conforme mostrados na **Tabela 1**.

$$\rho = a \cdot b^{-\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^n} \quad (1)$$

Tabela 1. Coeficientes de regressão dos compostos químicos.

COMPONENTE	a	b	n	T _c
ACETONA	0,27728	0,2576	0,29903	508,2
CLOROFÓRMIO	0,49807	0,25274	0,28766	536,4

Fonte: Yaws (1999).

Sendo: ρ - Densidade (g/ml); T – Temperatura (K).

Para o sistema binário água-acetona, a densidade da acetona a 25°C foi calculada pela equação (2) com os parâmetros fornecidos pelo Perry e Green (1997), mostrado na **Tabela 2** e para a temperatura de 27,5°C obteve-se pela equação (1).

$$\rho = \rho_{\text{água}} + a \cdot w_s + b \cdot w_s^2 + c \cdot w_s^3 \quad (2)$$

Tabela 2. Parâmetros de regressão da substância.

COMPONENTE	a	b	c
ACETONA	-0,00117	-9E-06	-5,6E-09

Fonte: Perry e Green (1997).

Onde: $\rho_{\text{água}}$ – densidade da água (g/ml); w_s – fração mássica do soluto na solução.

A fim de calcular a densidade e o volume molar de excesso do sistema binário água-acetona, adotou-se uma faixa de frações mássicas de água variando de 0 a 1, convertendo-as em frações molares para a realização dos cálculos.

O estudo foi realizado considerando os sistemas binários água-acetona e acetona-clorofórmio; e a partir do sistema ternário água-acetona-clorofórmio, calculou-se o volume molar de excesso do terceiro binário, água-clorofórmio. Devido aos experimentos do sistema ternário terem sido realizados a temperatura de 27,5°C, houve a necessidade de utilizar uma correlação para o ajuste da densidade, como demonstrado abaixo pelas equações (3) e (4).

$$\rho_{27,5^{\circ}\text{C}} = \rho_{25^{\circ}\text{C}} \cdot K \quad (3)$$

$$K = \left(\frac{\rho_{i,27,5^{\circ}\text{C}}}{\rho_{i,25^{\circ}\text{C}}} - \frac{\rho_{j,27,5^{\circ}\text{C}}}{\rho_{j,25^{\circ}\text{C}}} \right) \cdot x_i + \frac{\rho_{j,27,5^{\circ}\text{C}}}{\rho_{j,25^{\circ}\text{C}}} \quad (4)$$

Onde: k – parâmetro da correlação; $\rho_{i,27,5^{\circ}\text{C}}$ – densidade do primeiro componente do sistema binário na temperatura de 27,5°C; $\rho_{j,25^{\circ}\text{C}}$ – densidade do segundo componente do sistema binário na temperatura a 25°C; x_1 - fração molar do primeiro componente do sistema binário;

De acordo com o estudo de Aminabhavi *et al.* (1990), o volume de excesso real do binário é calculado considerando a diferença entre o volume molar experimental e o volume molar ideal ambos da mistura, como descrito pela equação (5).

$$V_{m,B}^E = \left[\frac{(\sum_{i=1}^2 MM_i x_i)}{\rho} \right] - \sum_{i=1}^2 \left(\frac{MM_i x_i}{\rho_i} \right) \quad (5)$$

Onde: MM_i , x_i e ρ_i representam a massa molecular, fração molar e a densidade do componente i da mistura, respectivamente; ρ refere-se à densidade da mistura binária.

O volume molar de excesso também foi calculado a partir da equação de Redlich-Kister (1948), conforme mostrado (6) e os parâmetros (AB^i) foram gerados a partir da ferramenta de regressão do Excel através das frações molares dos componentes do sistema binário e estão apresentados na **Tabela 3**.

$$V_{m,B}^E = x_1 \cdot x_2 \cdot \sum_{i=0}^n AB^i (x_2 - x_1)^i \quad (6)$$

Tabela 3. Parâmetros da regressão da mistura binária a 27,5°C.

SISTEMA BINÁRIO	PARÂMETROS DA REGRESSÃO			
	AB ⁰	AB ¹	AB ²	AB ³
ÁGUA + ACETONA	-5,85178	1,97112	-0,74231	0,42435
ACETONA + CLOROFÓRMIO	-0,16276	0,85902	0,82680	-0,03424
ÁGUA + CLOROFÓRMIO	6,93696	-31,23518	12,22019	89,45826

Fonte: Própria (2018).

Com os dados experimentais de frações mássicas, convertidos em frações molares, e densidades, os cálculos da mistura binária acetona-clorofórmio foram desenvolvidos utilizando todas as equações descritas acima (1), (3), (4), (5) e (6) e a **Tabela 4** apresenta os resultados obtidos.

Tabela 4. Valores experimentais de fração molar, densidade (ρ) e os volumes molares de excesso ($V_{m,B}^E$) experimental e calculado através da regressão.

FRAÇÃO MOLAR		ρ MIST. EXP. (g/ml)	$V_{m,B}^E$ EXP.	$V_{m,B}^E$ CALC.
ACETONA	CLOROFÓRMIO			
0,1727	0,8273	1,3643	-0,0275	-0,0275
0,3939	0,6061	1,2161	0,0310	0,0310
0,6777	0,3223	1,0184	0,0569	0,0569
0,8634	0,1366	0,8852	-0,0580	-0,0580
0,9520	0,0480	0,8200	-0,1086	-0,1086

Fonte: Própria (2018).

Em comparação com os dados apresentados nos estudos de Akamatsu *et al.* (1987), Segura *et al.* (2003) e Reinders e Minjer (1940) através da **Figura 3**, percebeu-se divergência entre o comportamento das curvas; isso explica-se por que a variação apresentada pelo volume molar de excesso é tão pequena que qualquer interferência ocorrida durante o experimento influencia no resultado final. Erros de

manuseio, perda por evaporação e erro de calibração do picnômetro podem ser listados como fonte de erros associados aos dados obtidos experimentalmente.

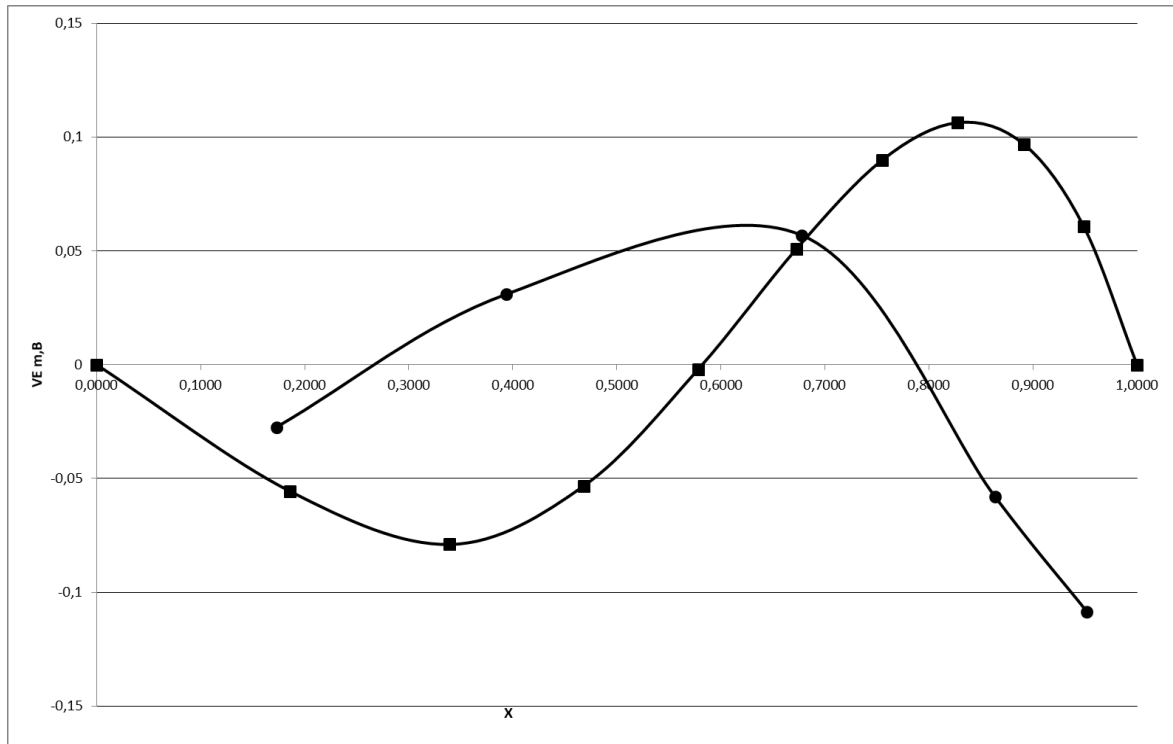


Figura 3. Volume molar de excesso ($V_{m,B}^E$) em função das frações molares de acetona (x) de misturas binárias água-clorofórmio a 27,5°C. Símbolos: (●) Dados experimentais; (■) Akamatsu *et al.* (1987), Segura *et al.* (2003) e Reinders e Minjer (1940).

Fonte: Própria (2018)

Para o estudo do sistema ternário, é plausível escrever a equação do volume molar real de excesso conforme demonstrado na equação (7) abaixo.

$$V_{m,T}^E = \left[\frac{(\sum_{i=1}^3 MM_i x_i)}{\rho} \right] - \sum_{i=1}^3 \left(\frac{MM_i x_i}{\rho_i} \right) \quad (7)$$

Sendo que ρ refere-se à densidade da mistura ternária.

O volume molar de excesso do terceiro binário foi calculado considerando os dados do volume de excesso dos binários que compõem a mistura ternária e o volume molar de excesso do sistema ternário, obtido através da equação anterior (7), conforme apresentado na equação (8).

$$V_{m,T}^E = V_{AB}^E + V_{BC}^E + V_{AC}^E \quad (8)$$

A **Tabela 5** mostra as frações mássicas e as densidades do sistema ternário, água-acetona-clorofórmio, bem como o volume molar real de excesso do ternário e o do binário água-clorofórmio calculado a partir da equação (8). Sendo A – Clorofórmio; B – Água e C – Acetona.

Tabela 5. Dados experimentais de frações mássicas (w), densidade (ρ) e os volumes molares de excesso do sistema ternário ($V_{m,T}^E$) experimental e o $V_{m,B}^E$ água-clorofórmio calculado através da regressão.

w_A	w_B	w_C	ρ EXP. (g/ml)	$V_{m,T}^E$ REAL	$V_{m,B}^E$ CALC.
0,04189	0,35384	0,60427	0,89718	-1,34806	0,11112
0,08695	0,18654	0,72651	0,87339	-1,24729	0,03119
0,18959	0,09458	0,71582	0,89174	-0,86768	0,04630
0,36322	0,06338	0,57339	0,96547	-0,40655	0,23965
0,39957	0,02410	0,57632	0,97005	-0,03692	0,23566
0,41034	0,05008	0,53958	0,98464	-0,14383	0,32886

Fonte: Própria (2018).

A **Figura 3** apresenta os volumes molares de excesso de cada binário em relação as frações molares de acetona para os sistemas acetona-clorofórmio e água-acetona e de água para o sistema água-clorofórmio.

A mistura água-clorofórmio, por ser um sistema imiscível, a curva apresenta-se tracejada no gráfico, representando uma tendência teórica usada para o cálculo da densidade multicomponentes, mas não retrata a realidade. Este binário apresenta elevados valores de volume molar de excesso, demonstrando a grande não idealidade, devido à pouca solubilidade do composto orgânico na água. Por conta disso, o sistema forma duas fases e o clorofórmio por ser mais denso, assume a camada inferior da mistura.

O sistema água-acetona também apresenta não idealidades, devido às interações intermoleculares, dipolo-dipolo e ligação de hidrogênio, ocasionando em desvios negativos dos volumes molares de excesso, significando a contração da solução. Já o sistema acetona-clorofórmio apresenta um comportamento próximo da idealidade, em função de serem ambas as moléculas orgânicas e com uma tendência maior de serem apolares. O valor de volume molar de excesso positivo significa que

houve expansão da solução, enquanto que o valor negativo demonstra uma melhor acomodação das moléculas resultando na contração do sistema.

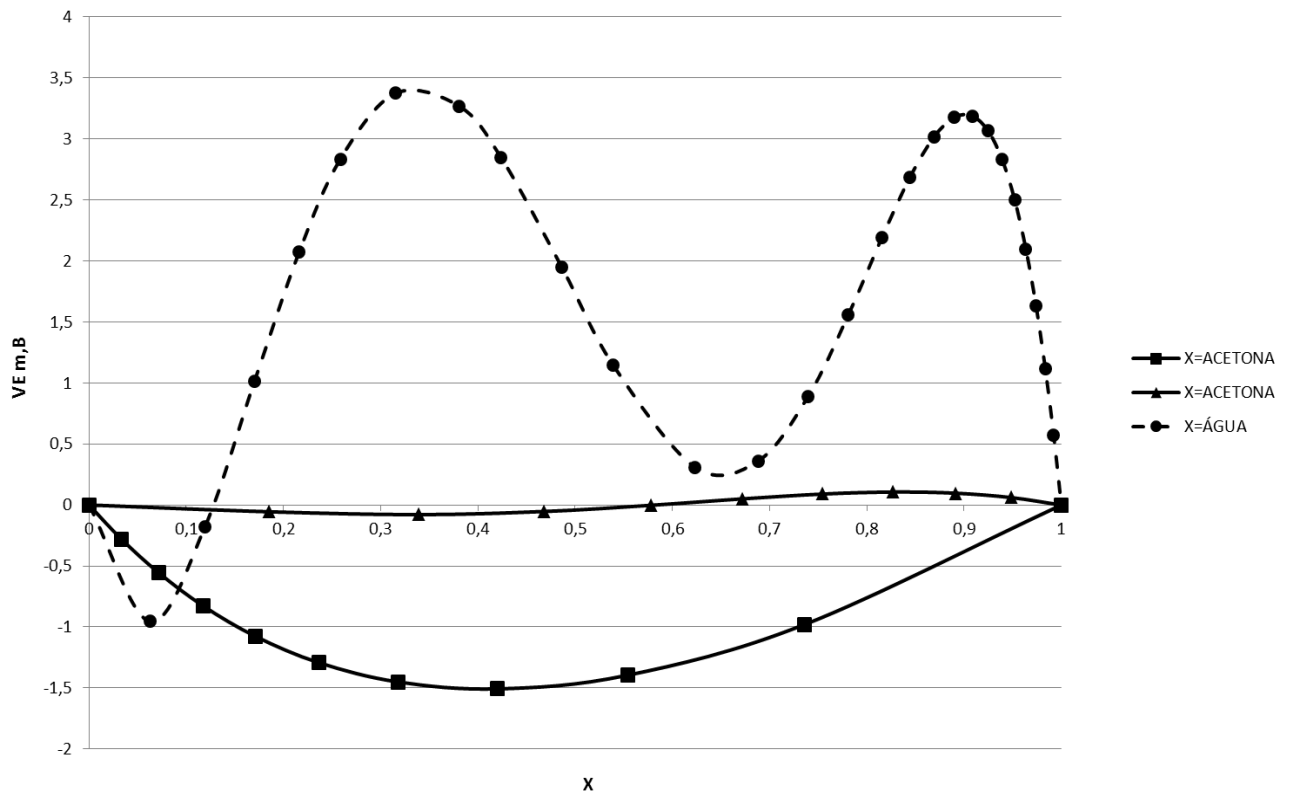


Figura 4. Volume molar de excesso ($V_{m,B}^E$) em função das frações molares (x) de misturas binárias a 27,5°C. Símbolos: (●) Água + Clorofórmio; (▲) Acetona + Clorofórmio; (■) Água + Acetona.

Fonte: Própria (2018).

A diferença média $V_{m,B}^E$ é calculada considerando o quanto o volume molar de excesso real (5) difere do volume molar de excesso (6) utilizando os parâmetros da regressão. Através dessa diferença, mostrada na **Tabela 6**, pode-se analisar se o ajuste foi satisfatório.

Tabela 6. Diferença média dos volumes molares excessivos ($V_{m,B}^E$) da mistura binária a 27,5°C.

SISTEMA BINÁRIO	DIFERENÇA MÉDIA $V_{m,B}^E$
ÁGUA + ACETONA	-0,00008
ACETONA + CLOROFÓRMIO	0,00253
ÁGUA + CLOROFÓRMIO	-0,00884

Fonte: Própria (2018).

4.2. CURVA BINODAL

A fim de construir a curva binodal do sistema, dados de frações mássicas dos componentes da mistura ternária foram levantados experimentalmente, conforme mostrado na **Tabela 7**. Para melhor visualização, estes resultados estão representados graficamente na **Figura 5**.

Tabela 7. Frações mássicas do sistema ternário.

CURVA DE RAFINADO			CURVA DE EXTRATO			COMPLEMENTO		
Acetona	Clorofórmio	Água	Acetona	Clorofórmio	Água	Acetona	Clorofórmio	Água
0,07245	0,91681	0,01075	0,1913	0,0051	0,8036	0,5669	0,3521	0,0810
0,40580	0,57040	0,02380	0,2511	0,0161	0,7328	0,6005	0,2131	0,1864
0,46679	0,49557	0,03764	0,3101	0,0103	0,6796	0,5764	0,1486	0,2750
0,50262	0,44292	0,05446	0,3534	0,0202	0,6264	0,5501	0,0866	0,3632
0,58000	0,33729	0,08271	0,3682	0,0193	0,6125	0,5191	0,0795	0,4015
			0,4664	0,047	0,4866	0,4992	0,0621	0,4387

Fonte: Própria (2018).

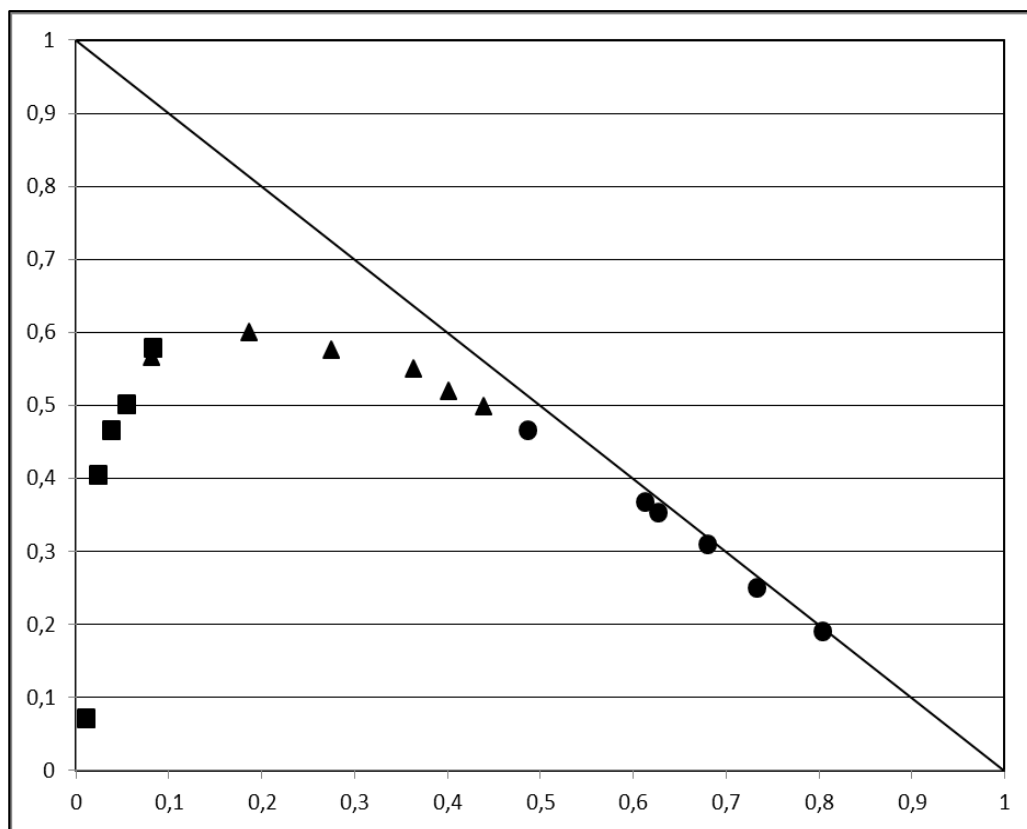


Figura 5. Dados experimentais de frações mássicas dos componentes do sistema ternário água-acetona-clorofórmio. Símbolos: (■) Refinado; (▲) Complemento da curva binodal; (●) Extrato.

Fonte: Própria (2018).

4.2.1. CURVA BINODAL LADO DO RAFINADO

No Lab Fit, software de regressão não linear e ajuste de curvas, foi feita uma regressão das frações mássicas de água (w_B), no eixo das abscissas, e de acetona (w_C), no eixo das ordenadas, para obtenção de uma equação ajustada que calculasse a fração mássica de acetona no refinado. Dentre as equações sugeridas pelo software, a equação (9) apresentou melhor resultado quando comparada as outras. Os parâmetros gerados pelo Lab Fit estão mostrados na **Tabela 8**.

$$w_C = \frac{a+w_B}{b+c \cdot w_B^2} + d \cdot w_B \quad (9)$$

Tabela 8. Parâmetros da regressão advindos do Lab Fit para equação ajustada para o refinado.

PARÂMETROS DA REGRESSÃO			
a	b	c	d
-0,01036	0,01316	58,94049	4,91324

Fonte: Própria (2018).

Para obter a curva binodal do lado do refinado, adotou-se valores de fração mássica da água entre 0,0095 a 0,08 e calculou-se através da equação (9) as frações mássicas de acetona.

Tabela 9. Dados de frações mássicas de água e acetona, respectivamente.

w_B	w_C
0,0095	0
0,01	0,0304
0,015	0,2494
0,02	0,3607
0,025	0,4157
0,03	0,4441
0,035	0,4606
0,04	0,4724
0,0827	0,5802

Fonte: Própria (2018).

4.2.2. CURVA BINODAL LADO DO EXTRATO

Para o extrato, a regressão no Lab Fit, feita a partir das composições molares, apresentou melhores resultados quando comparada com a regressão baseada nas frações mássicas, então decidiu-se calcular as frações molares de acetona a partir da equação ajustada (10) com os parâmetros advindos do software, apresentados na **Tabela 10**.

$$x_C = \frac{1}{a \cdot (b + x_B)^2 + c} + d \cdot \ln(x_B) \quad (10)$$

Tabela 10. Parâmetros da regressão gerados pelo Lab Fit para equação ajustada para o extrato.

PARÂMETROS DA REGRESSÃO			
a	b	c	d
4239,893	-0,84262	55,17991	-0,79021

Fonte: Própria (2018).

Admitiu-se valores de fração molar de água entre 0,75 a 0,94, considerando principalmente o último dado de fração molar de água obtido experimentalmente. A fração molar de acetona foi calculada através da equação ajustada (10), sequencialmente calculou-se a fração mássica de água, através da equação (11) e por fim obteve-se a fração mássica de acetona de acordo com a equação (12).

$$W_B = \frac{MM_B \cdot x_B}{MM_C \cdot x_C + MM_B \cdot x_B + (1 - x_C - x_B) \cdot MM_A} \quad (11)$$

$$W_C = \frac{MM_C \cdot x_C}{MM_C \cdot x_C + MM_B \cdot x_B + (1 - x_C - x_B) \cdot MM_A} \quad (12)$$

Tendo como base os dados de solubilidade do clorofórmio na água advindos de Reinders e Minjer (1947), Perry e Green (1997) e CRC (1985), conforme mostrado na **Tabela 11**, foi feita uma regressão, a qual gerou a equação (13). Através desta equação, calcula-se a fração mássica percentual de clorofórmio na temperatura de 27,5°C e devido a composição da acetona ser nula, obtém-se consequentemente a fração mássica de água.

Tabela 11. Dados de solubilidade do clorofórmio na água advindos da literatura.

T (°C)	%wt CHCl ₃
0	0,98
20	0,82
25	0,80
42	0,71
60	0,75

Fonte: Reinders e Minjer (1947), Perry e Green (1997) e CRC (1985).

$$w_A (\%) = 2,08787 \cdot 10^{-6} T^3 - 7,22634 \cdot 10^{-5} T^2 - 7,01251 \cdot 10^{-3} T + 0,979507 \quad (13)$$

A partir dos cálculos das frações mássicas e molares dos componentes, os resultados obtidos estão apresentados na **Tabela 12**, os quais possibilitaram a construção da curva binodal do lado do extrato em função das frações mássicas de água (w_B), no eixo das abscissas e de acetona (w_C), no eixo das ordenadas.

Tabela 12. Frações molares (x) e frações mássicas (w) do sistema ternário para construção da curva binodal do lado do extrato.

FRAÇÃO MOLAR			FRAÇÃO MÁSSICA		
X _B	X _C	X _A	w _B	w _C	w _A
0,75000	0,23825	0,01175	0,47000	0,48122	0,04877
0,76222	0,22667	0,01111	0,48660	0,46640	0,04700
0,80000	0,19223	0,00777	0,54383	0,42119	0,03498
0,85000	0,14647	0,00353	0,63175	0,35087	0,01737
0,90000	0,09772	0,00228	0,73167	0,25605	0,01227
0,94000	0,05938	0,00062	0,82783	0,16854	0,00362
0,99882	0,00000	0,00118	0,99225	0,00000	0,00775

Fonte: Própria (2018).

4.2.3. COMPLEMENTO DA CURVA BINODAL

A fim de completar o fechamento da curva binodal, decidiu-se desprezar os dados obtidos experimentalmente das extremidades. Considerou-se como primeiro ponto, o último valor de fração mássica do refinado, enquanto que como o último ponto

foi adotado o primeiro valor da fração mássica do lado do extrato. Os valores utilizados para a construção do complemento da curva binodal estão mostrados na **Tabela 13**.

Tabela 13. Pontos experimentais de frações mássicas para complemento da curva binodal.

FRAÇÃO MÁSSICA		
W _C	W _A	W _B
0,5802	0,3371	0,0827
0,6005	0,2131	0,1864
0,5764	0,1486	0,2750
0,5501	0,0866	0,3632
0,5191	0,0795	0,4015
0,4812	0,0488	0,4700

Fonte: Própria (2018).

Com a finalidade de validar a curva binodal construída através da modelagem desenvolvida, realizou-se a comparação da mesma com dados fornecidos pelo Reinders e Minjer (1947). O resultado apresentou-se satisfatório, devido à proximidade do comportamento que as mesmas possuem. A **Figura 6** mostra graficamente esta comparação.

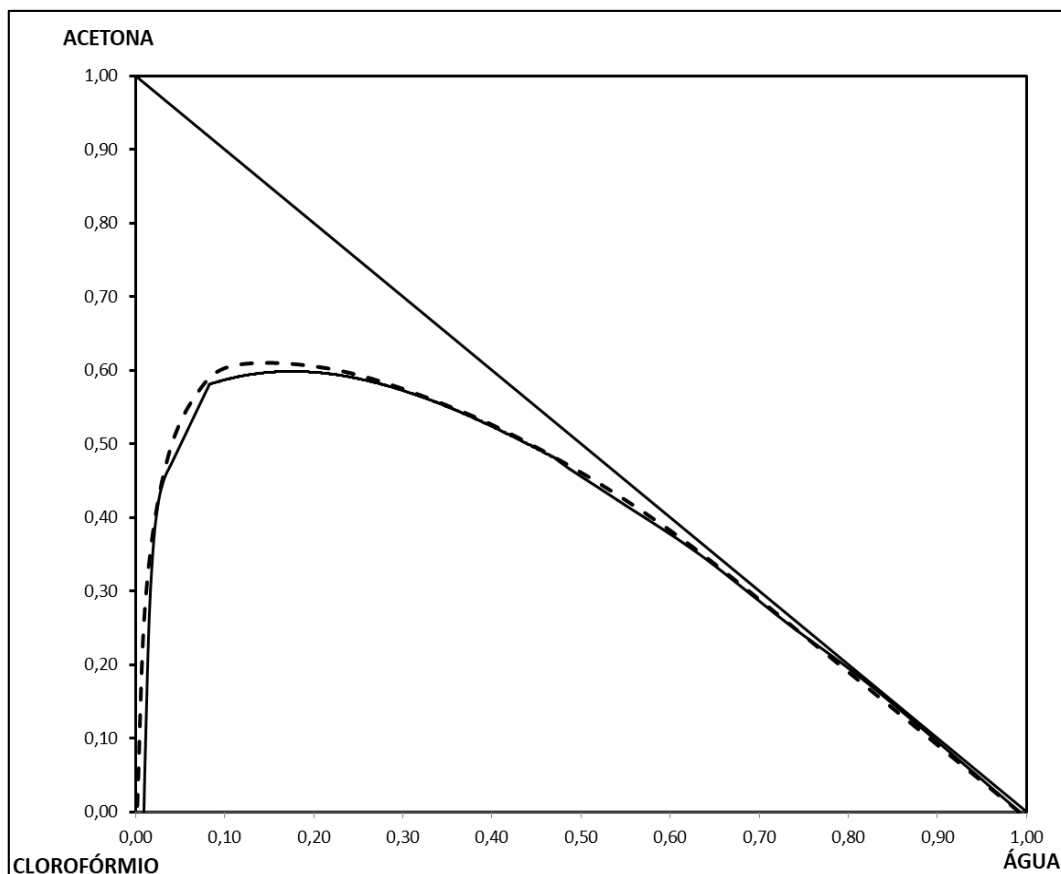


Figura 6. Comparação das curvas binodais para o sistema água-acetona-clorofórmio. (- - -) Reinders e Minjer (1947), a 25°C; (—) Dados experimentais após regressão, a 27,5°C. Concentrações em frações mássicas.

Fonte: Própria (2018).

4.3. DENSIDADE

Para determinar a densidade através da modelagem é necessário calcular as frações mássicas dos componentes, o volume molar de excesso da mistura e a partir de então, calcular a densidade da solução.

4.3.1. RAFINADO

Adotou-se um método numérico para calcular a fração mássica de acetona tanto no refinado, quanto no extrato. Como estimativa inicial, utilizou-se a fração molar de água no refinado no lugar da fração mássica da mesma, na equação ajustada (9), calculando assim, a fração molar de acetona no lugar da fração mássica.

A partir da fração molar de água adotada e o valor inicial da fração molar de acetona calculado através de equação (9) foi possível determinar a fração mássica de água no refinado, conforme a equação (11). Então calculou-se a fração mássica de acetona, através da equação (9), com o valor da fração mássica de água encontrada.

Após a primeira estimativa da fração molar de acetona obtida, esta foi calculada novamente de acordo com a equação (14).

$$x_C = \frac{w_C \cdot (MM_B - MM_B \cdot x_A + MM_A - MM_A \cdot x_B)}{MM_C - MM_C \cdot w_C + MM_B \cdot w_C + w_C \cdot MM_A} \quad (14)$$

A partir de dados de solubilidade da água no clorofórmio, advindos dos estudos de Reinders e Minjer (1947), conforme mostrado na **Tabela 14**, realizou-se uma regressão, a qual originou a equação (15) para determinação da fração mássica de água, na temperatura de 27,5°C.

Tabela 14. Dados de solubilidade da água no clorofórmio advindos da literatura.

T (°C)	%wt H ₂ O
0	0,10
60	0,17

Fonte: Reinders e Minjer (1947).

$$w_B (\%) = 1,16667 \cdot 10^{-3} T + 0,10 \quad (15)$$

Mediante as frações mássicas e molares dos componentes e o volume total da mistura, calculado pelas equações (6) e (8), tanto para o refinado quanto para o extrato, pôde-se calcular a densidade através da equação (16) abaixo.

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^3 MM_i \cdot x_i}{V_m^E + \sum_{i=1}^3 \frac{MM_i \cdot x_i}{\rho_{i,27,5^\circ C}}} \quad (16)$$

No método numérico, o processo é repetido até a obtenção da convergência dos dados.

4.3.2. EXTRATO

As frações molares de acetona foram calculadas a partir da equação ajustada (10). Sequencialmente, calculou-se as frações mássicas de água e acetona de acordo com as equações (11) e (12), respectivamente. O volume molar de excesso foi calculado conforme descrito anteriormente, assim como a densidade.

Para o desenvolvimento da modelagem que permitisse prever a densidade da solução, foi necessário estabelecer previamente uma faixa de densidade (isorho) de 0,90 até 1,40, bem como de fração molar de água, de 0 a 1,0. A partir disso, substituições sucessivas no valor da fração molar de acetona foram feitas até atingir a densidade desejada. A fim de identificar o comportamento das densidades paralelo a variação das frações mássicas de acetona, foi construído um gráfico conforme mostrada na **Figura 7**.

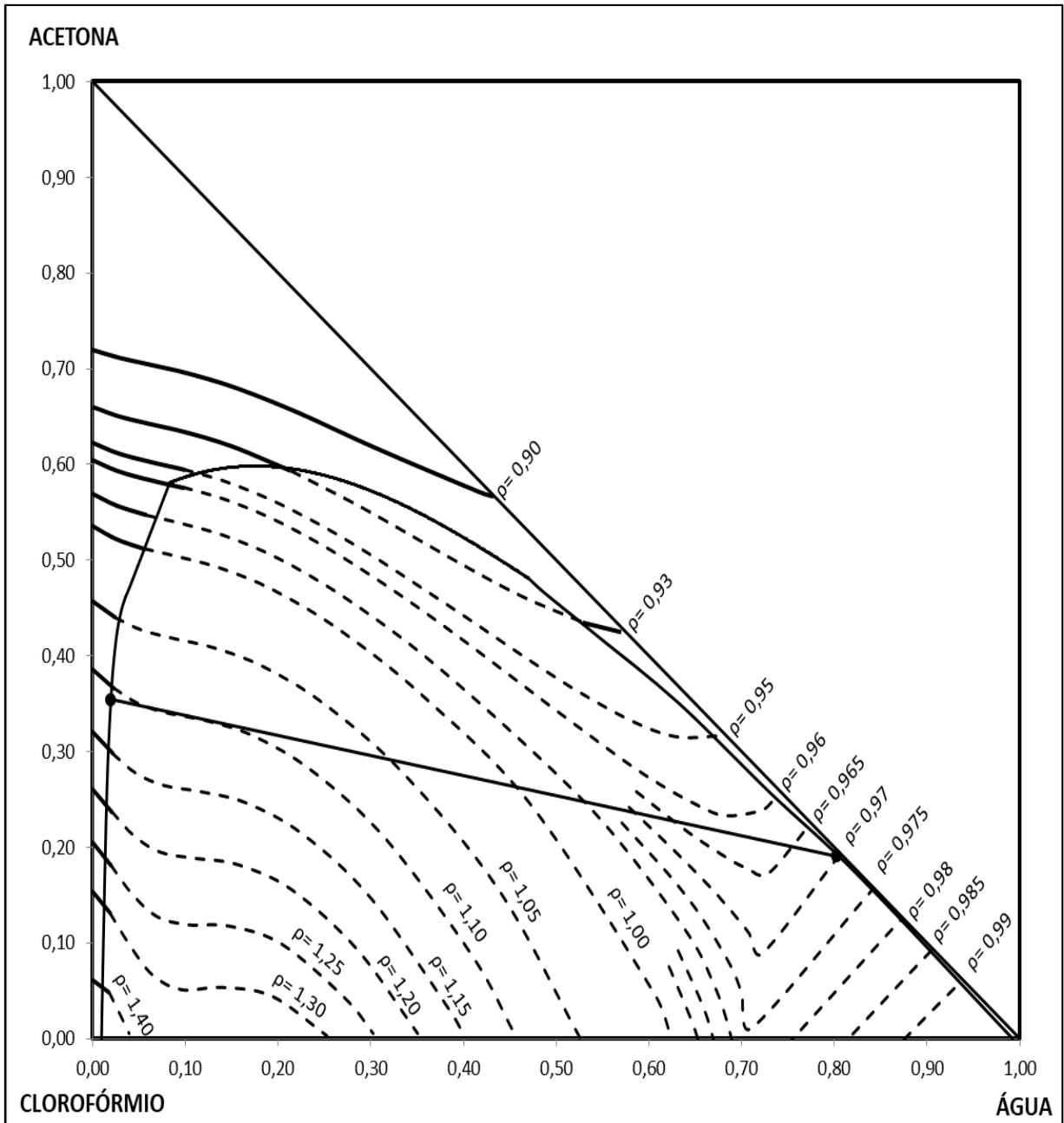


Figura 7. Densidade em função da fração mássica de acetona.

Fonte: Própria (2018).

Acima da curva binodal é representada a zona de miscibilidade total, nela é possível determinar a densidade da mistura homogênea. Enquanto que abaixo da curva, a solução apresenta-se heterogênea, sendo assim, as linhas de densidade são mostradas tracejadas demonstrando uma tendência teórica, pois não necessariamente a densidade média será a média entre as duas densidades, devido as não idealidades de uma mistura com diferentes composições.

O comportamento das isorhos indica que a partir de determinadas composições não é mais possível obter a densidade para uma determinada fase. Através desse diagrama, pode-se visualizar, diante da densidade obtida por picnometria no lado do refinado, a composição de refinado, bem como através da densidade lida do extrato, consegue-se a composição do mesmo, possibilitando a interpolação das densidades. No entanto, os valores reais encontrados experimentalmente para traçar as tie-lines foram resolvidos numericamente através da metodologia desenvolvida.

4.4. TIE-LINES

Os dados experimentais das tie-lines foram obtidos a partir da mistura ternária, onde foram determinadas a densidade de cada uma das fases, tanto extrato quanto refinado.

4.4.1. RAFINADO

O método de convergência para o refinado foi executado conforme descrito anteriormente, onde para obtenção das frações mássicas de acetona e água, utilizou-se as equações (9) e (11), respectivamente; para fração molar de acetona, equação (14); o volume molar de excesso calculou-se pelas equações (6) e (8). Substituições sucessivas no valor da fração molar de água foram feitas até que o valor da densidade coincidissem com o dado obtido experimentalmente.

4.4.2. EXTRATO

Para o extrato estima-se um valor de x_B , calcula-se o x_C com a equação ajustada (10) e posteriormente obtêm-se as frações mássicas de água e acetona de acordo com as equações (11) e (12), respectivamente. Calcula-se o volume molar total de excesso da mistura, equação (8) e por fim, obtêm-se a densidade conforme a equação (16). Altera-se o valor de x_B até que a densidade calculada seja igual ao resultado experimental.

Com a metodologia desenvolvida para as tie-lines, através da densidade e conceitualmente no cruzamento com a linha do extrato ou refinado, determina-se a composição de interesse na fase em questão. A **Figura 7** ilustra uma das tie-lines, já

a **Figura 8** apresenta o conjunto completo dessas linhas de amarrações obtido através dessa metodologia.

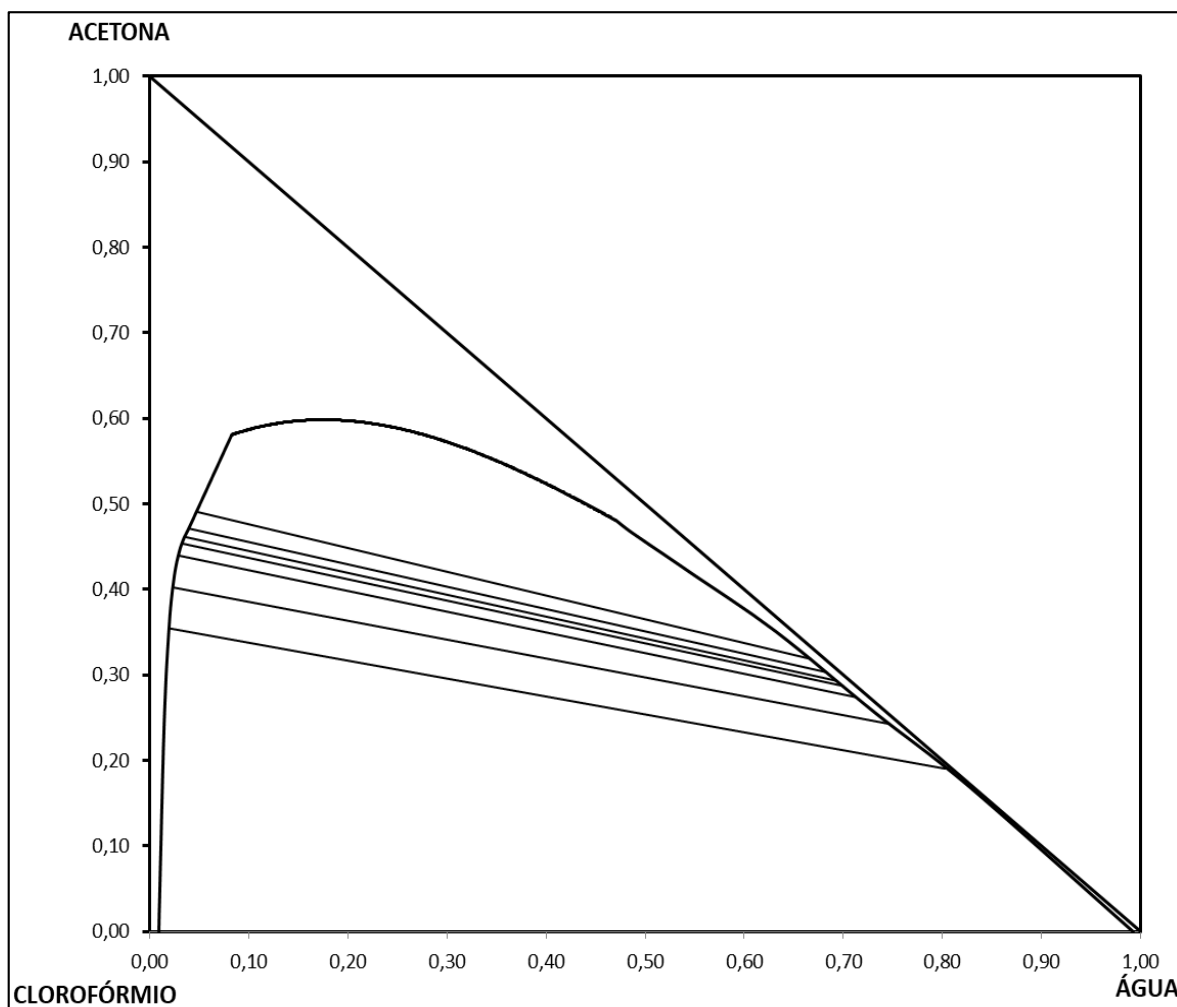


Figura 8. Equilíbrio líquido-líquido para sistema ternário água-acetona-clorofórmio obtidos experimentalmente a 27,5°. Concentrações em frações mássicas.

Fonte: Própria (2018).

A **Figura 9** apresenta o conjunto de tie-lines traçadas a partir da metodologia desenvolvida acrescido das linhas de amarração fornecidas pelo estudo de Reinders e Minjer (1947).

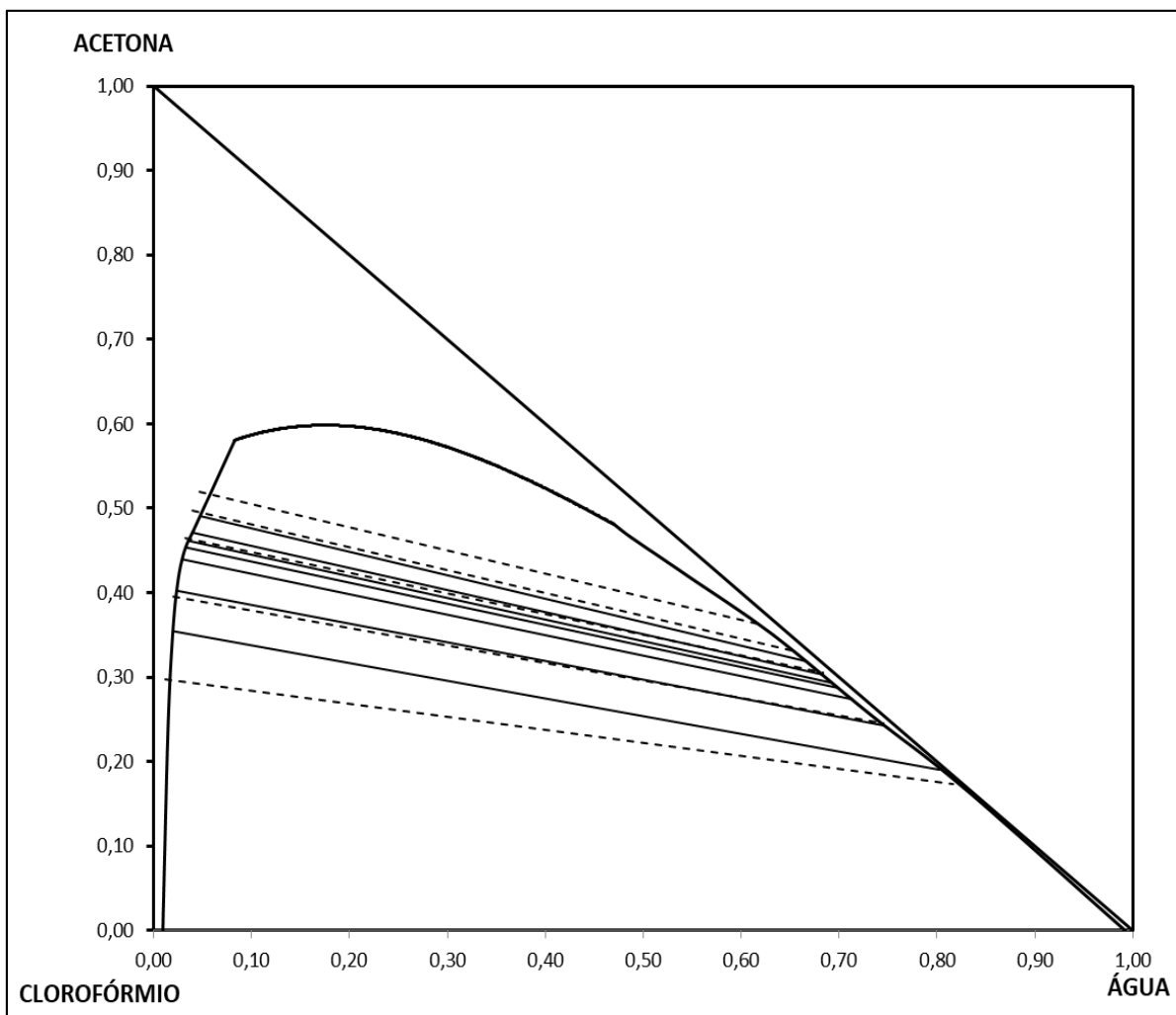


Figura 9. Equilíbrio líquido-líquido para o sistema água-acetona-clorofórmio. (- - -) REINDERS e MINJER (1947), a 25°C; (—) Dados experimentais, a 27,5°C. Concentrações em frações mássicas.

Fonte: Própria (2018).

Através da **Figura 9** é possível analisar a coerência no comportamento das tie-lines obtidas experimentalmente quando comparadas com os resultados de equilíbrio líquido-líquido da literatura, ficando evidente a eficácia da modelagem desenvolvida mediante a análise dos resultados obtidos ao longo do presente trabalho.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através dos resultados obtidos, conclui-se que foi possível determinar a composição do sistema ternário a partir da densidade experimental mediante a metodologia desenvolvida.

A parte experimental foi executada com sucesso, pois possibilitou o desenvolvimento de uma regressão que gerou resultados satisfatórios quando comparados a dados obtidos da literatura.

Com a modelagem desenvolvida foi possível determinar os volumes molares de excesso, os quais permitiram analisar que o binário água-acetona sofreu contração, enquanto que o sistema acetona-clorofórmio, por ser miscível, apresentou baixos valores de volume molar de excesso, ficando próximo da idealidade. Devido a imiscibilidade do binário água-clorofórmio, a curva apresenta-se apenas como uma tendência teórica, não sendo possível afirmar o comportamento do mesmo.

Desenvolvido a partir da metodologia, o diagrama de isorho possibilita, a partir de densidades fornecidas, uma leitura de composições de equilíbrio do extrato e do refinado, bem como o inverso, conhecendo as composições dos componentes da mistura é possível determinar a densidade de ambas as fases.

O presente trabalho foi realizado com sucesso, atingindo os objetivos descritos de forma satisfatória. Pretendeu-se contribuir de alguma forma com a comunidade científica, apresentando a possibilidade de obtenção de dados de equilíbrio líquido-líquido através de uma metodologia gravimétrica, neste caso, a picnometria.

6. RECOMENDAÇÕES FUTURAS

Após o término do presente trabalho, considerando os resultados e discussões apresentadas, algumas sugestões para trabalhos futuros foram listadas:

- Levantar os dados experimentais nas mesmas condições de temperatura, a fim de evitar variação no valor da densidade da solução.
- Aplicar esta metodologia para outros sistemas ternários.
- Analisar comparativamente os resultados obtidos através da metodologia desenvolvida com a cromatografia.

REFERÊNCIAS

AKAMATSU, Y.; OGAWA, H.; MURAKAMI, S. **Molar excess enthalpies, molar excess volumes and molar isentropic compressions of mixtures of 2-propanone with heptane, benzene and trichloromethane at 298.15 K.** *Thermochimica Acta*, 113, p. 141–150, 1987.

AMINABHAVI, T.M.; JOSHI, S.S.; BALUNDGI, R.H.; SHUKLA, S.S. **Densities and viscosities of binary and ternary liquid mixtures at 25 °C.** *Canadian Journal of Chemistry*, 69 (6), p. 1028–1032, 1991.

CALDAS, J.N.; LACERDA, A.I.; VELOSO E.; PASCHOAL, L.C.M. **Internos de Torres, Pratos e Recheios**, 2 ed. Rio de Janeiro: Interciência, Petrobrás: 2007.

CARVALHO, F. **Química Geral**. vol. 1, Santa Teresa, IFES, 2010.

CHANG, R.; GOLDSBY, K. A. **Química**. 11 ed. Porto Alegre: McGraw Hill Bookman, 2013.

CRC Handbook of chemistry and physics (CRC handbook). Edited by R.C. WEST, M.J. ASTLE, W.H. BEYER. CRC Press, Inc. Boca Raton, Florida, 1985.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; KRANE, K.S. **Física**. v. 2, 5ª ed. Rio de Janeiro: LTC Ltda, 2003.

LANÇAS, F.M. **A cromatografia líquida moderna e a espectrometria de massa: finalmente “compatíveis”?** *Scientia Chromatographica*. São Carlos, v. 1, n. 2, 2009.

MACHADO, A. B. **Estudos do processo de extração líquido-líquido para a purificação do ácido acrílico**. Dissertação de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 2007.

MADHAVAN, R. **Optimize Liquid-Liquid extraction**. Cheresources - Chemical and process engineering resources, 2008. Disponível em <<http://www.cheresources.com/content/articles/separation-technology/optimize-liquid-liquid-extraction>>. Acesso em: 25 out. 2018.

MAGALHÃES, J.G. **Estudo Experimental do Volume Molar em Excesso de Soluções Líquidas Binárias Contendo Clorofórmio e Aminas a Diferentes Temperaturas e à Pressão Atmosférica**. Dissertação de Mestrado, IQ/UNICAMP, Campinas, 2007.

MARTINS, C. R.; SILVA, L. A.; ANDRADE, J. B. **Solubilidade das substâncias orgânicas**. *Quim. Nova*, Salvador, vol.36, n. 8, p. 1248-1255, 2013.

NIST - NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. **Isothermal properties for water**. Disponível em: <https://webbook.nist.gov/cgi/fluid.cgi?t=28&plow=1&phigh=2&pinc=&applet=on&digits=5&id=c7732185&action=load&type=isotherm&tunit=c&punit=atm&dunit=g%2fml&hunit=kj%2fmol&wunit=m%2fs&visunit=upa*s&stunit=n%2fm&refstate=def>. Acesso em: 14 out. 2018.

OTHMER, D., TOBIAS, P. **Liquid-Liquid Extraction Data** - The Line Correlation. *Industrial & Engineering Chemistry*, 34 (6), p. 693–696, 1942.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 7th. ed., New York, McGraw-Hill Book Co., p. 165, 1997.

QUEIROZ, S.C.N.; COLLINS, C.H.; JARDIM, I.C.S.F. **Métodos de extração e/ou concentração de compostos encontrados em fluidos biológicos para posterior determinação cromatográfica**. *Quím. Nova*, Campinas, v. 24, n. 1, p. 68-76, 2001.

REDLICH, O.; KISTER, A. T. **Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions**. *Industrial & Engineering Chemistry*, 40 (2), p. 345–348, 1948.

REINDERS, W.; MINJER, C. H de. **Vapour-liquid equilibria in ternary systems: II. The system acetone-chloroform-benzene**. *Recueil Des Travaux Chimiques Des Pays-Bas*, 59(4), p. 369–391, 1940.

REINDERS, W.; MINJER, C. H de. **Vapour-liquid equilibria in ternary systems. VI. The system water-acetone-chloroform**. *Recueil Des Travaux Chimiques Des Pays-Bas*, 66 (9), p. 573–604, 1947.

RODRIGUES, G.D.; SILVA L.H.M.; SILVA, M do C. H. **Alternativas verdes para o preparo de amostra e determinação de poluentes fenólicos em água**. *Quim. Nova*, Viçosa, v. 33, n. 6, p. 1370-1378, 2010.

SEGURA, H.; MEJÍA, A.; REICH, R.; WISNIAK, J.; LORAS, S. **Isobaric Vapor-Liquid Equilibria and Densities for the Binary Systems Oxolane + Ethyl 1,1-Dimethylethyl Ether, Oxolane + 2-Propanol and Propan-2-One + Trichloromethane**. *Physics and Chemistry of Liquids*, 41(3), p. 283–301, 2003.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**, 7a Ed., LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 2007.

TADINI, C.C.; TELIS, V.R.N.; MEIRELLES, A.J.A.; FILHO, P.A.P. **Operações Unitárias na Indústria de Alimentos**. vol. 2, Rio de Janeiro, LTC Editora/Grupo GEN, 2016.

TREYBAL, R.E. **Liquid Extraction**. McGraw-Hill, New York, p. 13-18, 1951.

VICENTE, V.B.; TÔRRES, R.B. **Volume molar excesso de soluções líquidas binárias de glicerol + álcoois a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica**. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 20, 2014, Florianópolis, Anais, Florianópolis: Cobeq, 2015. p. 16013 - 16020.

VLASTIMIL, K. **Liquid-liquid extraction flow-injection analysis**. *Critical Reviews in Analytical Chemistry Department of Analytical Chemistry, Masaryk University, CS-61137, Brno, Czechoslovakia*, p. 477-577, 1991.

YAWS, C.L. **Chemical Properties Handbook: Physical, Thermodynamics, Environmental Transport, Safety and Health Related Properties for Organic and Inorganic Chemical**. 1th. ed., New York: McGraw-Hill, p. 193-195, 1999.

WISNIAK, J.; CORTEZ, G.; PERALTA, R. D.; INFANTE, R.; ELIZALDE, L. E.; AMARO, T. A.; GARCÍA, O.; SOTO, H. **Density, excess volume, and excess coefficient of thermal expansion of the binary systems of dimethyl carbonate with butyl methacrylate, allyl methacrylate, styrene, and vinyl acetate at T=(293.15, 303.15, and 313.15)K.** The Journal of Chemical Thermodynamics, 40(12), p. 1671–1683, 2008.