

PRÁTICA 4 - DIAGRAMA DE FASES TERNÁRIO

CQ320 - FÍSICO-QUÍMICA EXPERIMENTAL

BANCADA 4

DISCENTES: ADRIEL AZEVEDO; DAVI RAMOS JORGE; LUIZ DEMBICKI, MATEUS DE MATOS LEME; MATHEUS SOARES DE SOUZA CRUZ.

1. INTRODUÇÃO

Para representarmos sistemas ternários, que consistem em três componentes em uma única fase, deve-se construir um diagrama em três dimensões com o intuito de representar de maneira satisfatória a composição dos três componentes envolvidos na mistura.

Uma das melhores representações de um sistema ternário é o triângulo equilátero, onde os vértices do triângulo indicam cada componente. Sendo assim, é possível traçar uma reta perpendicular a qualquer um dos lados do triângulo passando por um dos vértices e dividir essa perpendicular em dez partes (DANIELS, 1962).

A leitura do diagrama ternário é feita da seguinte forma:

- Os pontos localizados nos vértices representam uma composição de 100% da substância que aquele vértice corresponde. Exemplo: um ponto localizado no vértice A, representa uma composição de 100% da substância A.
- As arestas do triângulo representam uma composição de 0% da substância que está no vértice oposto. Exemplo: para a aresta AB a composição da substância C é de 0%.
- Para um ponto localizado no interior do triângulo a composição de uma substância é calculada medindo a distância do ponto até a aresta oposta ao vértice da substância cuja composição deseja descobrir. Exemplo: para o ponto M, a composição de C representa a distância do ponto M até a aresta AB, que corresponde, neste gráfico, a 10%

2. OBJETIVOS

O objetivo deste experimento é construir o diagrama de fases ternário (triângulo equilátero de frações molares de Gibbs e Rozeboom) de um sistema de três componentes – água, acetato de etila e etanol – com base na observação do comportamento da mistura de água e acetato à medida que etanol é adicionado, verificando a ocorrência ou não de solubilização dos dois compostos com diferentes quantidades deles no sistema. Com a obtenção do diagrama, ele poderá ser comparado com a referência da literatura e, dada uma mistura de água e acetato de etila, a quantidade de etanol necessária para a solubilização mútua poderá ser calculada.

3. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

3.1 MATERIAIS

Para a realização desta prática, dispomos dos seguintes materiais disponíveis no laboratório:

Reagentes: Água Destilada, Acetato de Etila, Etanol.

Vidrarias: Tubos de Ensaio, Buretas de 25 mL

Equipamentos: Agitador de Tubos (vórtex)

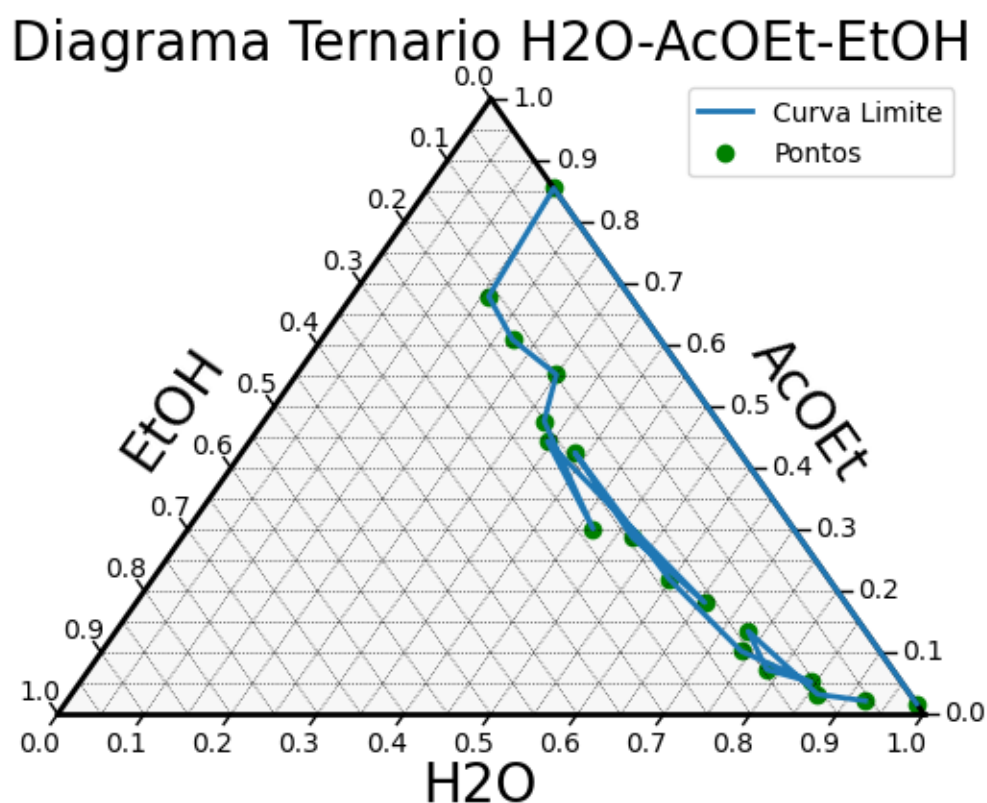
3.2 MÉTODOS

Para este experimento foi verificado a solubilidade e as fases presentes nas misturas de água com acetato de etila e etanol. Assim, em um primeiro momento enumeramos 9 tubos de ensaios, em que cada um teria uma respectiva quantidade de reagente para serem notadas. Nossa bancada ficou responsável pelo preparo das soluções que iam dos tubos enumerados de 9 até o 18, o reagente “variável” era o Etanol, dessa forma era adicionado 0,2 mL deste reagente ao tubo de ensaio, o qual já continha certa quantia de água e acetato de etila. Após a adição do álcool era agitado o tubo e verificada a turbidez, caso o tubo de ensaio não estivesse transparente era feito novamente a adição de Etanol mais a agitação do tubo, assim sucessivamente até as duas

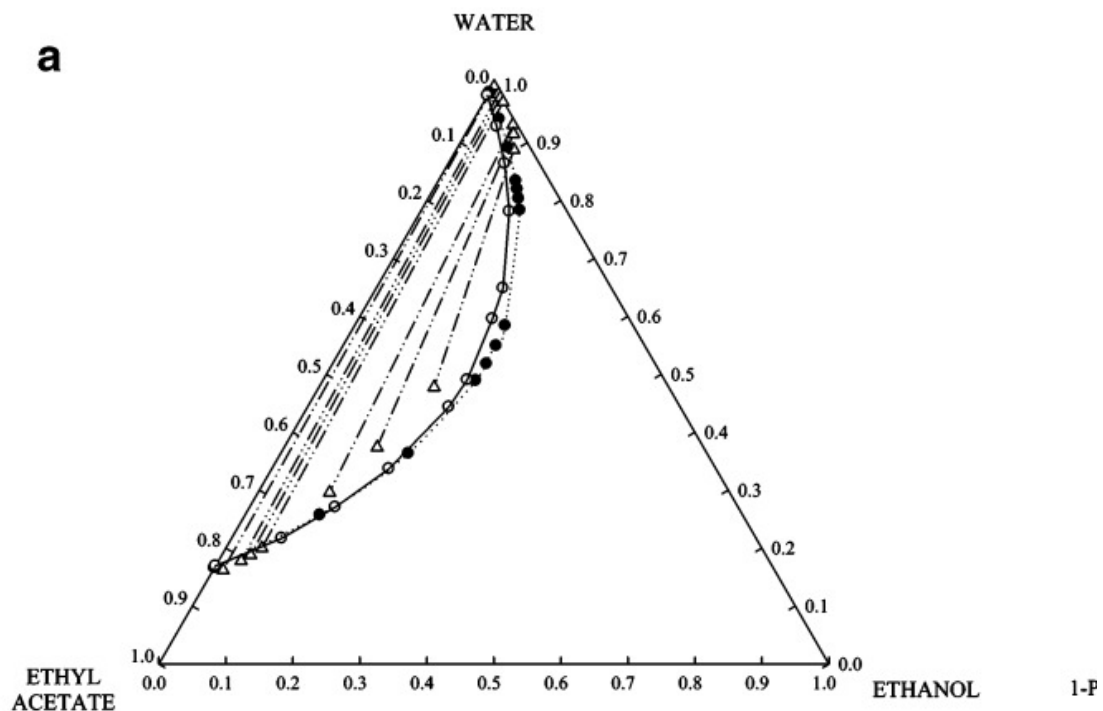
fases presentes desaparecerem. Para os tubos de número 17 e 18, o procedimento foi realizado de forma diferente. Nestes não foram adicionados Etanol, o reagente variável foi respectivamente a Água e o Acetato de Etanol, seguindo a sequência de adição de uma quantidade do reagente variável mais agitação do Tubo até o desaparecimento da turvação.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando um programa em Python foram tratados os dados, obtendo os valores de frações molares, inseridos em um plotter de diagramas ternários, obtendo se o seguinte:



O qual podemos comparar com o do artigo recomendado:



Vemos que existem alguns pontos destoantes, mas que corresponde ao formato geral e pontos.

Para uma mistura 40mL água e 50mL acetato de etila:

Transformando para mols:

$$(40mL \cdot 0.997 \frac{g}{mL}) / (18.01528 \frac{g}{mol}) \approx 2,21mol$$

$$(50mL \cdot 0.897 \frac{g}{mL}) / (88.11 \frac{g}{mol}) \approx 0.509mol$$

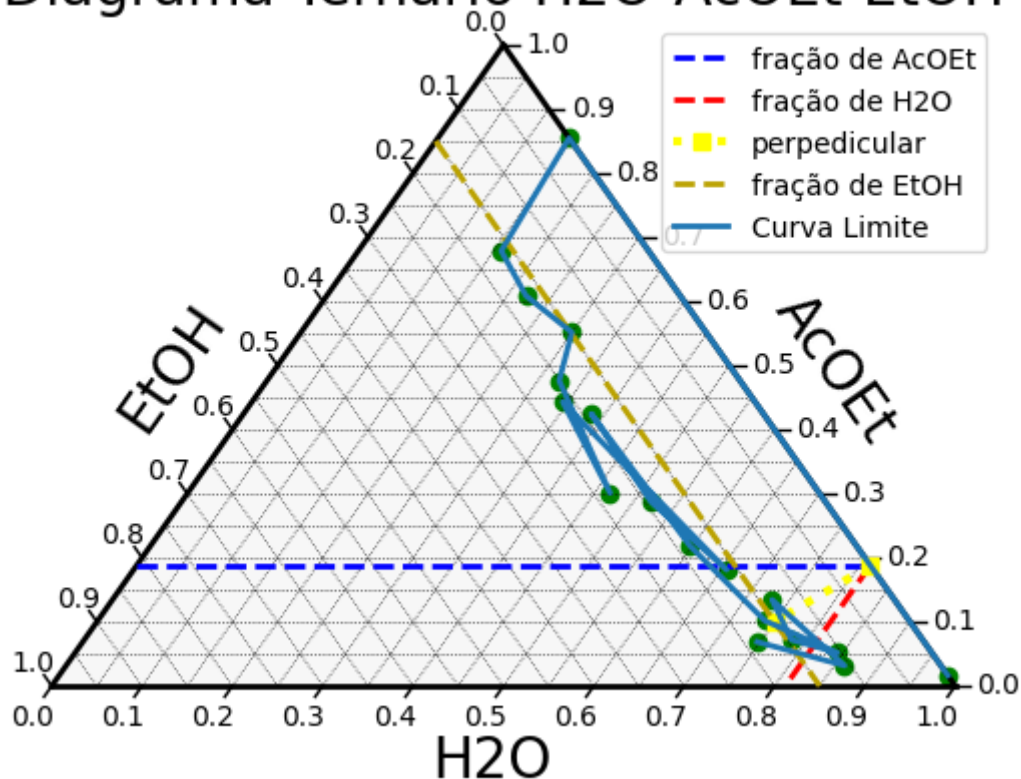
Considerando um sistema dos dois, então temos as frações em torno de 0,8 para água e 0,2 acetato. Com isso traçamos uma perpendicular até o interceptar a curva e desse ponto traçamos a fração de EtOH correspondente, retornando uma mistura de 0,15 EtOH, 0,1 AcOEt, e 0,75 H2O, que podemos relacionar com por exemplo a quantidade de H2O:

$$\frac{2.21mol}{0.75} = 2.95mol$$

$$\rightarrow 2.95 \text{ mol} \cdot 0.15 \approx 0.442 \text{ mol}_{\text{EtOH}}$$

Podemos encontrar $x \sim 0,442$ mol, multiplicamos por 46.07 g/mol e dividimos por 0,789 g/cm³ ofertando 25,8 mL de etanol adicionado.

Diagrama Ternario H2O-AcOEt-EtOH



5. CONCLUSÃO

Por meio das análises experimentais, conclui-se que, o diagrama ternário de fases é uma ferramenta muito útil para a análises de misturas líquido-líquido, por meio dele é possível obter facilmente dados de concentração e solubilidade para os três componentes da mistura.

Além disso, por meio da montagem de um diagrama ternário para os dados obtidos experimentalmente é possível concluir que o procedimento

experimental e o posterior tratamento dos dados foram feitos corretamente, tendo em vista que, o diagrama obtido corresponde ao da literatura, com poucas flutuações experimentais.

Esses pequenos desvios decorrentes do gráfico, ocorrem devido a erros mínimos experimentais decorrentes do preparo das soluções e da aferição do volume.

REFERÊNCIAS

ATKINS, Peter. ATKINS' PHYSICAL CHEMISTRY. 8. ed. [S. l.: s. n.], 2006.

DANIELS, F., et. al., Experimental Physical Chemistry, 6th ed., McGraw-Hill Book Co., San Francisco (1962), p. 121.

RESA, J.M. e GOENAGA, J.M, Liquid-Liquid Equilibrium Diagrams of Ethanol + Water +(Ethyl Acetate or 1-Pentanol) at Several Temperatures J. Chem. Eng. Data 2006, 51, 1300-1305).

ANEXOS

Código: <https://github.com/luizdembicki/Ternario/blob/main/ternario.ipynb>