

DENSIDAD Y TENSIÓN SUPERFICIAL DE LOS SISTEMAS BINARIOS TOLUENO + HEPTANOATO DE METILO Y TOLUENO + OCTANOATO DE METILO

Adrián Cid, Lelia Mussari, Mirtha Orozco, Salvador Canzonieri, Alejandra Mariano¹.

Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional del Comahue. Buenos Aires 1400. (8300) Neuquén. ¹CONICET-CCT Patagonia Norte
alejandra.mariano@fain.uncom.edu.ar

Introducción

Se midió experimentalmente la densidad y la tensión superficial de los sistemas binarios tolueno (1) + heptanoato de metilo (2) y tolueno (1) + octanoato de metilo (2) en todo el rango de composiciones a 288,15 K, 298,15 K y 308,15 K, y a presión atmosférica. A partir de los datos experimentales se calculó, el volumen molar de exceso y la desviación de la tensión superficial. Estas magnitudes derivadas fueron ajustadas con la ecuación polinomial de Redlich-Kister [1]. Adicionalmente, se aplicó de la isoterma de Gibbs utilizando el modelo de contribución de grupos UNIFAC modificado [2] para evaluar los coeficientes de actividad de los componentes.

Materiales y métodos

Las sustancias empleadas fueron tolueno (99,8%) suministrado por Sigma-Aldrich, heptanoato de metilo (99,0%) y octanoato de metilo (99,0%) de la firma Fluka. Las densidades fueron determinadas con un densímetro y analizador de pulsos ultrasónicos Anton Paar DSA 5000 automáticamente termostatzado con una precisión de $\pm 1 \cdot 10^{-02}$ K. La incertidumbre en la medición de la densidad es de $\pm 1 \cdot 10^{-5}$ g.cm⁻³. Las tensiones superficiales se midieron con un tensiómetro de volumen de gota LAUDA TVT 2, con una precisión de $\pm 1 \cdot 10^{-02}$ mN.m⁻¹. El mismo fue termostatzado con un criostato LAUDA y la temperatura fue controlada mediante un termómetro digital con una incertidumbre de $\pm 1 \cdot 10^{-02}$ K.

Resultados y discusión

Con los datos experimentales de densidad y tensión superficial, se calculó el volumen molar de exceso, V^E , y la desviación de la tensión superficial, $\Delta\sigma$, a partir de las ecuaciones (1) y (2):

$$V^E = \frac{M}{\rho} - \sum_{i=1}^2 x_i \frac{M_i}{\rho_i} \quad (1)$$

Siendo M la masa molar y ρ la densidad de la mezcla; en tanto que x_i , M_i , y ρ_i refieren a la fracción molar, la masa molar y la densidad del componente i, respectivamente.

$$\Delta\sigma = \sigma - \sum_{i=1}^2 x_i \sigma_i \quad (2)$$

Donde σ es la tensión superficial de la mezcla; en tanto que x_i , y σ_i refieren a la fracción molar y la tensión superficial del componente i, respectivamente.

Los valores de ρ , σ , V^E y $\Delta\sigma$ fueron ajustados con la ecuación polinomial de Redlich-Kister [1]:

$$Q = x_1 * Q_1 + x_2 * Q_2 + x_1 x_2 \sum_{k=0}^n A_k (2x_1 - 1)^k \quad (3)$$

Donde Q_1 y Q_2 representan la propiedad del componente puro y A_k son los coeficientes de ajuste, dados en la tabla 1:

Tabla 1. Coeficientes A_k de la ecuación de Redlich-Kister (3) y desviación estándar, s .

	Tolueno + heptanoato de metilo				Tolueno + octanoato de metilo			
	ρ g·cm ⁻³	V^E cm ³ ·mol ⁻¹	σ mN·m ⁻¹	$\Delta\sigma$ mN·m ⁻¹	ρ g·cm ⁻³	V^E cm ³ ·mol ⁻¹	σ mN·m ⁻¹	$\Delta\sigma$ mN·m ⁻¹
288,15 K								
a_0	0,00889	-0,482	-0,97	-0,96	0,00795	-0,459	-0,92	-0,91
a_1	0,00223	-0,043	-0,85	-0,89	0,00253	-0,073	-0,02	-0,01
a_2	0,00109	-0,100	-	-	0,00045	-	-	-
s	0,00001	0,002	0,04	0,04	0,00002	0,004	0,04	0,04
298,15 K								
a_0	0,00906	-0,503	-0,79	-0,89	0,00840	-0,489	-1,05	-1,06
a_1	0,00235	-0,058	-1,35	-1,35	0,00271	-0,086	-0,25	-0,27
a_2	0,00114	-0,104	-0,08	-	0,00048	-	-	-
s	0,00001	0,002	0,05	0,05	0,00002	0,004	0,03	0,03
308,15 K								
a_0	0,00917	-0,516	-0,29	-0,30	0,00885	-0,522	-0,56	-0,56
a_1	0,00241	-0,066	-0,92	-0,93	0,00287	-0,096	-0,05	0,07
a_2	0,00105	-0,088	-	-	0,00053	-	-	-
s	0,00001	0,002	0,03	0,03	0,00002	0,003	0,02	0,02

Las figuras 1 y 2 muestran V^E y σ , junto con el ajuste realizado con la ecuación polinomial de Redlich-Kister, para todo el rango de temperaturas y composiciones.

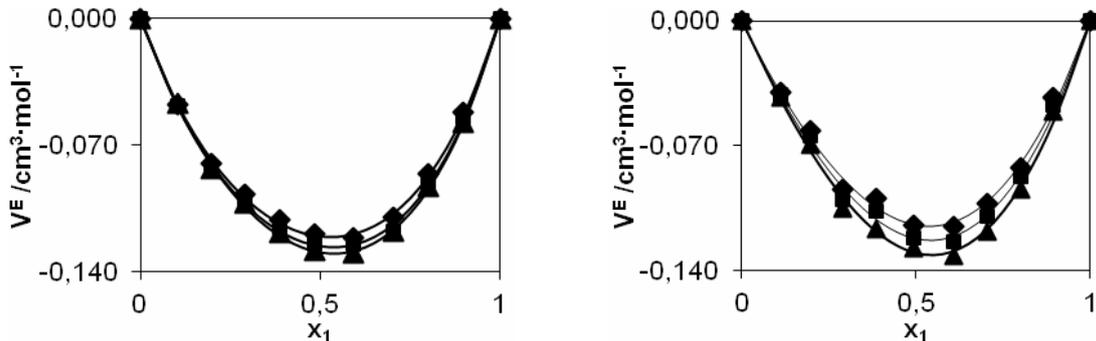


Figura 1. V^E de los sistemas binarios tolueno (1) + heptanoato de metilo (2) y tolueno (1) + octanoato de metilo (2) a: (♦) 288,15 K, (■) 298,15 K y (▲) 308,15 K. La línea continua representa el ajuste realizado con la ecuación de Redlich-Kister [1].

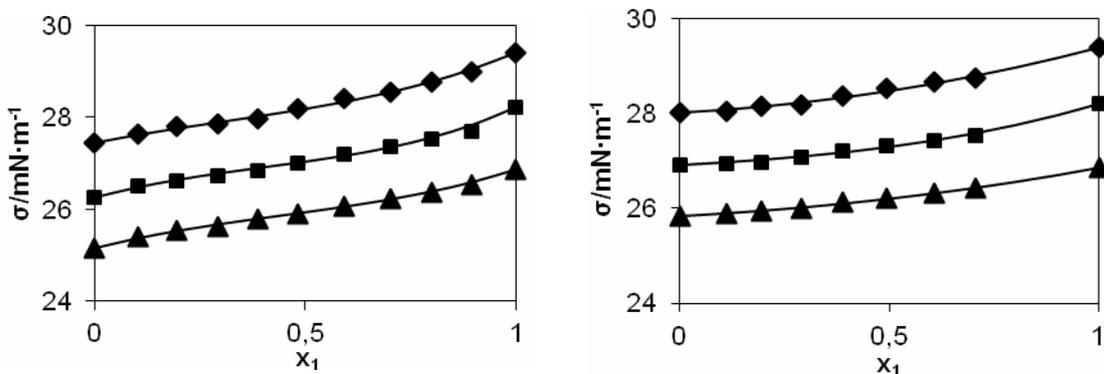


Figura 2. σ de los sistemas binarios tolueno (1) + heptanoato de metilo (2) y tolueno (1) + octanoato de metilo (2) a: (♦) 288,15 K, (■) 298,15 K y (▲) 308,15 K. La línea continua representa el ajuste realizado con la ecuación de Redlich-Kister [1].

En la figura 1, se observa que los valores de volumen de exceso son negativos los sistemas estudiados y a todas las temperaturas, lo que indica que las interacciones entre moléculas diferentes son mayores que las existentes entre moléculas iguales, dando lugar a una contracción del volumen.

De la figura 2 se observa que la tensión superficial de los sistemas estudiados aumenta a medida que aumenta la cadena R del éster RCOOR'. Un aumento en la temperatura produce una marcada disminución en la tensión superficial de las mezclas y los componentes puros.

En la figura 3 se representó la adsorción relativa del componente 2 (éster) respecto al componente 1 (tolueno), por aplicación de la isoterma de Gibbs, utilizando el modelo de contribución de grupos UNIFAC modificado para evaluar los coeficientes de actividad de los componentes. Los valores positivos de la concentración superficial de exceso, $\Gamma_{2(1)}$, indican que la tensión superficial, σ , disminuye a medida que aumenta la concentración del componente 2. Los valores positivos de $\Gamma_{2(1)}$, muestran que hay una mayor acumulación de las moléculas del éster en la superficie de la disolución.

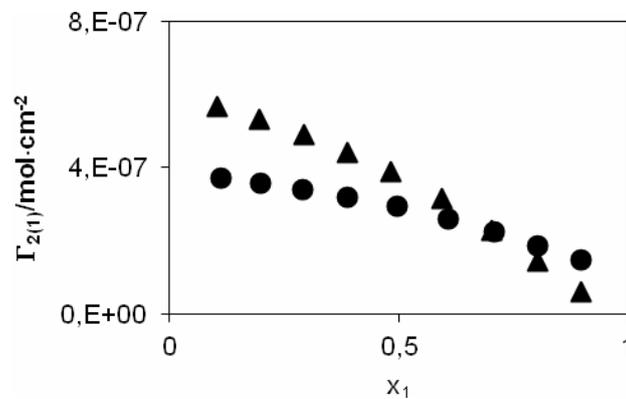


Figura.3. Adsorción relativa del componente 2 respecto al componente 1, $\Gamma_{2(1)}$, en función de la fracción molar del componente 1, x_1 , para los sistemas tolueno (1) + heptanoato de metilo (2) (▲) y tolueno (1) + octanoato de metilo (2) (●), a 298,15 K.

Referencias

- [1] Redlich, O.; Kister, A. *Ind. Eng. Chem.* 1948, 40 (2), 345-348.
- [2] Gmehling J., Li J., Schiller M. *Ind. Eng. Chem. Res.* 32, 178-193 (1993).