

ESTUDO EXPERIMENTAL, MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLUBILIDADE DE COMPOSTOS DE INTERESSE PARA A TRANSFORMAÇÃO DA BIOMASSA

Dionatan Felipe Hackenhaar Coleti¹, Fernanda Sebem Donatti¹, Layze Vitoria Barbosa², João Victor Thomas Feyh², Alessandro Cazonatto Galvão³.

¹ Acadêmico do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PROBIC/UDESC

² Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – Bolsista PIVIC/UDESC

³ Orientador, Dep. Eng. Alimentos e Eng. Química – Udesc Oeste – alessandro.galvao@udesc.br

O xilitol é um adoçante natural presente nas fibras de muitos vegetais, é conhecido por possuir uma capacidade de adoçar mais que a sacarose, com menos calorias e pode ser metabolizado pelo corpo humano na ausência de insulina. É uma molécula muito importante para a indústria química, devido a sua ampla aplicabilidade que vai desde usos farmacêuticos, alimentícios e odontológicos até produção de biocombustíveis e produtos químicos como o etilenoglicol e 1,2-propilenoglicol.

Na obtenção do xilitol são envolvidas quatro etapas básicas: obtenção da xilose por hidrólise ácida; purificação do hidrolisado; hidrogenação catalítica da xilose e purificação do xilitol. Para que o produto possua um valor superior é fundamental conter informação sobre a quantidade de sólido que pode ser solubilizado por um líquido. Estudo sobre a solubilidade de sólidos em função da temperatura e da concentração da solução possibilitam conhecer as condições de saturação. Com isso pode-se desenvolver equipamentos e processos que auxilia na otimização do rendimento em conversões e separações.

A partir de ensaios experimentais, modelos matemáticos estão sendo bastante utilizados para avaliar e desenvolver teoria de soluções, para a implantação em processos industriais e simulações. Este trabalho tem como objetivo a avaliação da solubilidade do xilitol em soluções líquidas binárias formadas por *N,N*-dimetilformamida (DMF) e etilenoglicol ou 1,2-propilenoglicol, cobrindo toda faixa de frações molares da solução, entre 293,15 K e 323,15 K com intervalos de 10 K.

O equilíbrio sólido-líquido foi realizado em células de vidro encamisadas acopladas a um banho termostático com circulação e controle de temperatura. Adicionou-se quantidades conhecidas de soluto e solvente dentro das células. Após estabilização da temperatura, a solução ficou em agitação constante por 3 horas e posterior repouso de 24 horas para decantação da fase sólida. As amostras da fase líquida da mistura foram avaliadas por refratometria, através de um refratômetro de bancada ATAGO, modelo RX-5000i, com incerteza de $\pm 0,00004$, e convertidas em resultados de solubilidade por meio de curvas de calibração previamente determinadas. Os ensaios foram realizados sob pressão atmosférica com amostragens e leituras em triplicata.

Para saber se a metodologia utilizada é satisfatória para equilíbrio sólido-líquido, realizou-se uma pesquisa na literatura e comparado a disposição dos pontos experimentais, concluindo que a metodologia apresenta um comportamento esperado para o equilíbrio sólido-líquido.

Os resultados da solubilidade do xilitol nas soluções compostas por DMF + etilenoglicol e DMF + 1,2-propilenoglicol em diferentes temperaturas, são apresentados na Figura 1. Como pode ser observado, a solubilidade do xilitol aumenta com a temperatura para todas as soluções binárias. Que pode ser explicada pela fusão endotérmica do xilitol.

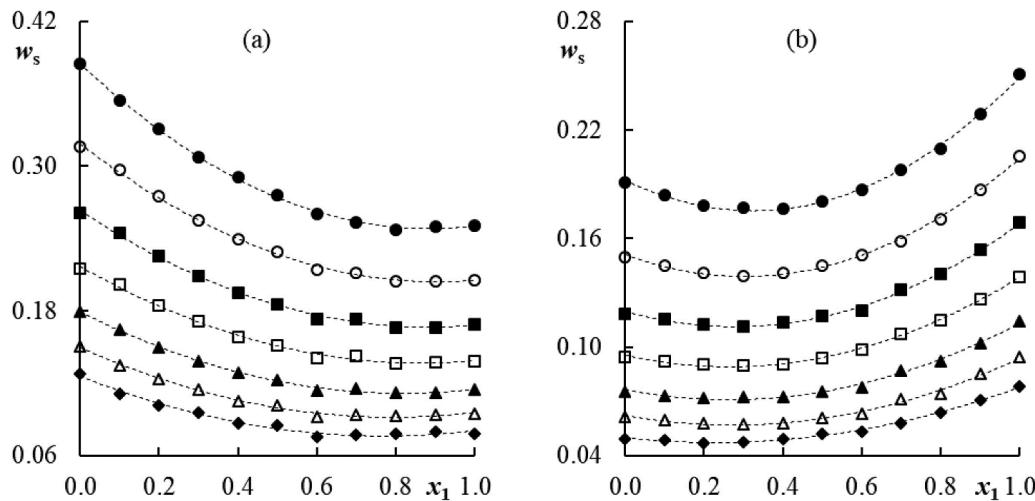


Figura 1. Solubilidade (w_s) do xilitol em soluções formadas por (a) DMF (1) + etilenoglicol (2) e (b) DMF (1) + 1,2-propilenoglicol (2) em função da composição líquida binária (x_1): \blacklozenge 293,15 K, \triangle 298,15 K, \blacktriangle 303,15 K, \square 308,15 K, \blacksquare 313,15 K, \circ 318,15 K, \bullet 323 K, as linhas tracejadas indicam a tendência dos dados.

Além do aumento da temperatura, o equilíbrio de fase de um sólido em um líquido depende da afinidade entre eles. Sabe-se que o xilitol é um sólido polar, logo tende a ter maior solubilidade em líquidos polares. A polaridade de um líquido pode ser apresentada pela constante dielétrica, assim quanto maior a constante maior a capacidade de dissolver sólidos polares. Nos líquidos estudados, o etilenoglicol apresenta maior constante dielétrica, seguido pelo DMF e por fim o 1,2-propilenoglicol. Portanto a solubilidade do xilitol é maior no etilenoglicol, seguida pelo DMF e 1,2-propilenoglicol, respectivamente.

A solubilidade do xilitol em soluções binárias, quando adicionado DMF no etilenoglicol causou diminuição da solubilidade até uma determinada concentração. Após este valor, observa-se que a solubilidade tem um comportamento constante ou ligeiramente superior, possivelmente indicando a existência de um ponto de mínimo a uma concentração de DMF de 77 mol% a 91 mol% dependendo da temperatura.

Quando avaliado a solução formada por 1,2-propilenoglicol com adição de DMF, tem-se um aumento na solubilidade na região concentrada em DMF e diminuição na região concentrada no glicol. Também observado um ponto de mínimo na concentração de DMF entre 23 mol% e 32 mol%, dependendo também da temperatura.

O ponto de mínimo na solução de DMF + etilenoglicol e o ponto de mínimo na solução de DMF + 1,2-propilenoglicol podem estar associados a formação de aglomerados nas soluções. O etilenoglicol e o 1,2-propilenoglicol exibem interações de hidrogênio competitivo. O DMF que se associa fracamente possui um átomo de O que pode formar ligações de hidrogênio com outras moléculas. Sendo assim, o DMF aumenta a formação de clusters de diol, logo, as moléculas de xilitol interagem preferencialmente com o DMF.

Estudo de equilíbrio sólido-líquido são extrema importância no desenvolvimento de meios reacionais e processos de separação. A solubilidade do xilitol em componentes puros teve relação proporcional com a constante dielétrica do solvente. Foi observada uma dependência da solubilidade com a temperatura e com a composição da solução binária.

Palavras-chaves: Equilíbrio sólido-líquido. Xilitol. Solubilidade