

## **EQUILÍBRIO DE FASES ENVOLVENDO XILITOL, ÁGUA, ETILENOGLICOL OU 1,2-PROPILENOGLICOL**

Bruna Eveling Hochscheidt, Dilian Henrique Hagemann, Layse Vitória Barbosa  
Patrícia Gotardo Machado, Alessandro Cazonatto Galvão

<sup>1</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – bolsista PIVIC/UDESC

<sup>2</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Udesc Oeste – bolsista PROBIC/UDESC

<sup>3</sup> Mestranda em Ciência e Tecnologia de Alimentos – PPGCTA – Udesc Oeste – bolsista PROMOP

<sup>4</sup> Orientador, Dep. Eng. Alimentos e Eng. Química – Udesc Oeste – alessandro.galvao@udesc.br

Palavras-chave: solubilidade. xilitol. Glicóis.

Dentre os produtos que podem ser produzidos em uma biorrefinaria, atenção é dada a xilose, um monossacarídeo produzido pela hidrólise da xilana com posterior conversão em xilitol. Tanto a xilose como o xilitol, possuem inúmeras aplicações industriais, com destaque na elaboração de resinas e polímeros. Além disso, o xilitol pode ser utilizado como matéria prima na produção de etilenoglicol, propilenoglicol e butilenoglicol.

O etilenoglicol e o propilenoglicol são substâncias químicas de ampla importância comercial, participante de quase todos os aspectos da vida cotidiana, associados com energia, produtos químicos, automotivos, têxteis, transporte, e tecnologias de fabricação. Atualmente, são produzidos na indústria petroquímica através da transformação de etileno e propileno, derivados do petróleo.

O desenvolvimento de meios reacionais e sistemas de separação que permitem explorar o xilitol como um *building block* (moléculas que funcionam como blocos de construção dos produtos químicos) necessitam de informações de caráter científico. Experimentos de equilíbrio de fases geram informações a respeito da distribuição dos componentes quando coexistem fases em equilíbrio, sob as mesmas condições de temperatura e pressão. Essas informações são fundamentais para o projeto de produtos, processos e equipamentos.

Em virtude da não existência de estudos experimentais sobre a solubilidade do xilitol em glicóis, este trabalho teve por objetivo avaliar a solubilidade do xilitol em soluções líquidas formadas por água + etilenoglicol e água + 1,2 propilenoglicol cobrindo toda a faixa de composição molar da solução com ensaios realizados entre 293,15 K e 323,15 K com intervalos de 5 K. Os resultados de solubilidade foram correlacionados pelo modelo de Jouyban-Acree gerando três parâmetros ajustáveis para cada isotermia.

O estudo do equilíbrio sólido-líquido foi conduzido em células de vidro encamisadas acopladas a um banho termostático. Após a estabilização da temperatura, as misturas foram fortemente agitadas por um período de 3 horas a fim de atingir a saturação do solvente. Após agitação, as células permaneceram sem agitação por um período de 24 horas, para que ocorresse o equilíbrio das fases.

De cada célula em equilíbrio, foram removidas três amostras. A seguir, as alíquotas foram avaliadas em um refratômetro digital de bancada marca ATAGO modelo RX-5000i com incerteza de  $\pm 0.00004$  e ajuste de temperatura. Os valores foram convertidos em resultados de solubilidade, utilizando curvas de calibração previamente construídas.

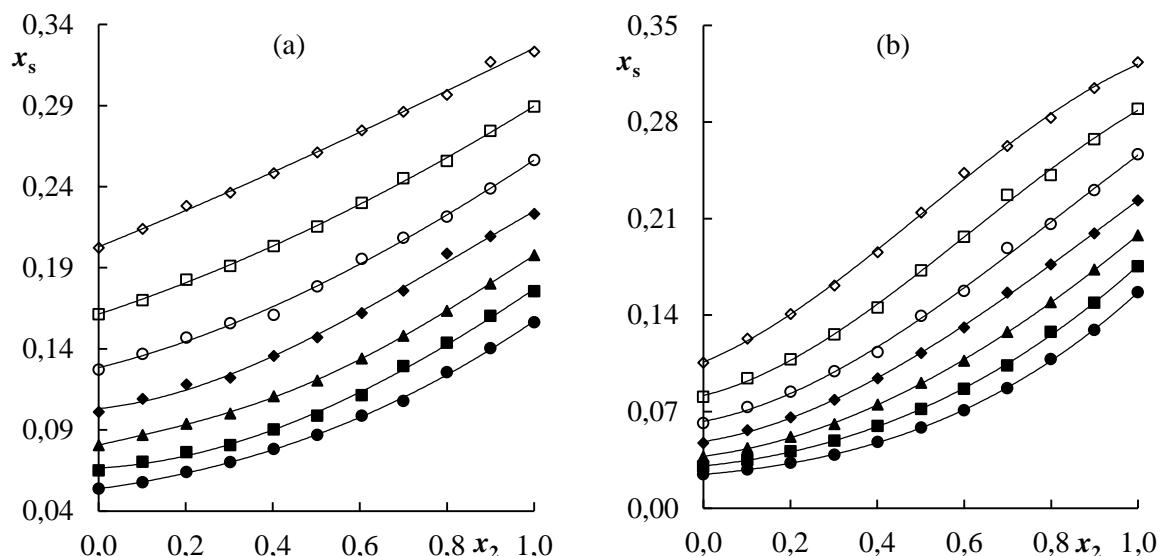
Os resultados experimentais da solubilidade do xilitol na solução ternária, em função da fração molar da solução líquida binária para as temperaturas estudadas estão apresentados na Figura 1. Para todas as concentrações das soluções binárias e para o intervalo de temperatura avaliado constatou-se que existe um aumento da solubilidade com o aumento da temperatura. Este comportamento é atribuído ao processo endotérmico de fusão do xilitol de forma que quanto maior a temperatura mais sólido é solubilizado.

Observou-se que a água tem uma capacidade maior de solubilizar o xilitol seguido respectivamente pelo etilenoglicol e pelo 1,2-propilenoglicol. A fim de ilustrar este comportamento, a 293,15 K a

solubilidade (fração mássica) em água é 0.61030, em etilenoglicol é 0.12214 e em 1,2-propilenoglicol é 0.04767. A 323,15 K a solubilidade em água é 0.80140, em etilenoglicol é 0.38327 e em 1,2-etilenoglicol é 0.19088. Estes valores mostram que para um aumento de 30 K a solubilidade sofre um aumento de 31% em água, 214% em etilenoglicol e 300% em 1,2-propilenoglicol indicando que a solubilidade do xilitol é muito mais dependente da temperatura nos glicóis estudados do que em água.

A solubilização de um sólido por um líquido segue o princípio da afinidade existente entre sólido e solvente de forma que esta afinidade é um reflexo da polaridade dos componentes envolvidos. A molécula do xilitol, uma molécula polar, possui cinco grupos hidroxila que proporcionam interações com outras moléculas polares. A polaridade dos líquidos é melhor representada quando se avalia sua constante dielétrica. A constante dielétrica da água é maior que a do etilenoglicol, que é maior que a do 1,2-propilenoglicol, indicando que a polaridade dos componentes avaliados diminui seguindo a ordem água>etenoglicol>1,2-propilenoglicol e como consequência a solubilidade do xilitol é maior em água seguida respectivamente por etilenoglicol e 1,2-propilenoglicol.

A solubilidade do xilitol em soluções líquidas binárias apresentou valores intermediários em relação a solubilidade nos componentes puros. Este comportamento está associado a diminuição da constante dielétrica da solução devido a adição de um anti-solvente. A mistura de dois componentes, água + etilenoglicol ou água + 1,2-propilenoglicol leva a formação de uma solução com constante dielétrica dependente da composição e como consequência, a solubilização do sólido leva a um valor intermediário de solubilidade.



**Figura 1.** Solubilidade expressa como fração molar ( $x_s$ ) do xilitol em função da fração molar de água ( $x_2$ ) na solução líquida binária (a) água + etilenoglicol e (b) água + 1,2-propilenoglicol a diferentes temperaturas: • 293,15 K; ■ 298,15 K; ▲ 303,15 K; ♦ 308,15 K; ○ 313,15 K; □ 318,15 K; ◇ 323,15 K; linhas contínuas representam o modelo de Jouyban-Acree

O modelo de Jouyban-Acree se mostrou capaz de correlacionar os dados de solubilidade das soluções ternárias avaliadas com valores de desvio relativo médio variando entre 0,35% e 1,19%. Observa-se que apesar da ótima capacidade do modelo em correlacionar os dados experimentais, os parâmetros ajustáveis não apresentam um comportamento confiável em função da temperatura. Essa característica do modelo inviabiliza seu uso para predizer valores de solubilidade em temperaturas diferentes das estudadas.