



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Análise da estruturação em misturas de água e terc-butanol por espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS)
Autor	MARCELO HENRIQUE SCHWADE
Orientador	CILAINE VERONICA TEIXEIRA

Análise da estruturação em misturas de água e terc-butanol por espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS)

Autor: Marcelo Henrique Schwade

Orientadora: Cilâine Verônica Teixeira

Instituto de Física – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Misturas de água com outras substâncias apresentam propriedades físicas que se distinguem da água pura. Apesar da aparente simplicidade dessas misturas, o comportamento e as propriedades de algumas destas ainda não são perfeitamente compreendidos e esse é o caso de misturas de água e terc-butanol. Essas misturas apresentam comportamentos anômalos e não monotônicos (com relação à concentração de álcool) em propriedades como o calor específico, a temperatura de máxima densidade (TMD) e a compressibilidade isotérmica. Visando estudar a estrutura nanoscópica dessa mistura, obtivemos curvas de espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS) de soluções de terc-butanol e água com fração molar de álcool variando entre 0,1 e 0,3. A partir dessas curvas experimentais determinamos valores para a intensidade a ângulo de espalhamento zero ($I(2\theta = 0) = I_0$) e para o raio de giração (R_g) das estruturas observadas nas misturas. Os valores de intensidade expressam concordância com os resultados descritos na literatura e os valores de R_g indicam que há presença de estruturação (formação de agregados moleculares) na mistura. Através de um modelo simples, baseado nas frações de água e álcool que formam agregados, encontramos um conjunto de soluções de densidade numérica e composição molecular dos agregados que são capazes de descrever os valores de I_0 experimentais. Os próximos passos consistem em explorar a viabilidade física do conjunto de soluções obtidas através da comparação com outras informações que podem ser obtidas das curvas de SAXS e também da análise da correspondência das soluções com modelos de estrutura que têm sido propostos para essas misturas.