

EQUILÍBRIO DE FASES ENVOLVENDO ÁCIDO SALICÍLICO E SOLUÇÕES LÍQUIDAS BINÁRIAS DE ÁGUA + METANOL E ÁGUA + ETANOL NA FAIXA DE TEMPERATURA DE 283,15 K A 323,15 K¹

Agatha Bruna Monteiro Brejola², Alessandro Cazonatto Galvão³, Amanda Miotto⁴, Henrique Ismael Schwerz⁴, Matheus Venzon Gomes⁴, Guilherme Augusto Mariane⁴, Raquel Bordignon⁴, Igor Gabriel Kaiser⁴

¹ Vinculado ao projeto “Estudo experimental, modelagem e simulação da solubilidade de compostos de interesse para a transformação da biomassa”

² Acadêmica do Curso de Engenharia Química – CEO – Bolsista PROBIC/UDESC

³ Orientador, Departamento de Eng. Alimentos e Eng. Química – CEO – alessandro.galvao@udesc.br

⁴ Acadêmico(a) do Curso de Engenharia Química – CEO.

O ácido salicílico, conhecido também como ácido orto-hidroxibenzoico ou ácido 2-hidroxibenzoico, um composto de ácido fenólico, é um metabólito da salicina, um dos mais antigos analgésicos derivados da casca do salgueiro utilizado pela primeira vez em 400 a.C. O composto é amplamente utilizado como intermediário para a produção de muitos compostos industriais, tendo uma participação fundamental na produção de cosméticos e fármacos.

Por ter propriedades queratolíticas o ácido salicílico é um agente esfoliante que rompe as pontes de queratina, facilitando a remoção de células mortas da epiderme. Além disso, tem também uma ação antimicrobiana proporcionando um efeito utilizado no tratamento de erupções na pele. Ainda, o ácido salicílico inibe a enzima ciclooxigenase, reduzindo a produção de prostaglandinas, efeito que caracteriza o material como um anti-inflamatório.

O ácido salicílico (C₇H₆O₃) é um monohidroxibenzoico, formado por um anel benzênico, um grupo hidroxila e um grupo carboxílico. Devido a sua estrutura, a molécula apresenta uma solubilidade limitada em água. Sua característica hidrofóbica complica sua produção e purificação encorajando estudos de sua solubilidade em outros solventes e soluções.

A solubilidade é a quantidade máxima que uma substância pode dissolver-se em um líquido. Na solubilidade o caráter polar ou apolar de uma substância tem uma grande influência, pois, devido a polaridade, estas substâncias podem ser mais ou menos solúveis. Dessa forma substâncias polares tendem a se dissolver em líquidos polares e substâncias apolares em líquidos apolares.

A capacidade de um material em se solubilizar em diferentes solventes é uma característica largamente explorada no desenvolvimento de processos de separação e purificação. Em linhas gerais, a solubilidade é função da temperatura, da polaridade do solvente, e da constante dielétrica de uma solução. O aumento ou diminuição da solubilidade, devido a manipulação deste comportamento evidencia a força motriz de um processo de separação por cristalização.

Sendo assim, fundamentado na importância do ácido salicílico, e no desenvolvimento de técnicas de separação por cristalização desta molécula, o presente trabalho teve como objetivo avaliar o equilíbrio de fases sólido-líquido do ácido salicílico em soluções líquidas binárias formadas por água/metanol e água/etanol, cobrindo toda a faixa de fração molar da solução líquida binária a diferentes temperaturas.

O experimento foi conduzido no Laboratório ApTher - Termofísica Aplicada da UDESC no município de Pinhalzinho. O estudo de equilíbrio sólido-líquido foi conduzido em condições de

pressão atmosférica, em células de vidro acopladas a um banho termostático com circulação e controle de temperatura de 283,15 K a 323,15 K, com intervalos de 10 K.

As células foram preenchidas com a solução líquida binária formada por água/metanol e água/etanol em faixas de 0,0 a 1,0 de composição molar e posteriormente adicionou-se uma quantidade de ácido salicílico em excesso, previamente seco em estufa e reservado em um dessecador afim de garantir o controle de umidade.

Em seguida, as células foram submetidas a agitação magnética no período de 3 horas para maximizar a transferência de massa entre o solvente e o soluto. Passado esse período, o sistema foi colocado em repouso por 5 horas para que ocorresse a separação e equilíbrio das fases.

A amostragem da fase líquida em equilíbrio com a fase sólida foi feita em triplicata retirando alíquotas de 3 ml. As amostras, com massas determinadas em balança analítica, foram conduzidas a secagem em estufa a 353,15 K por um período de 24 horas, garantindo a evaporação completa do solvente. Após a secagem as amostras foram mantidas em dessecador até atingir a temperatura ambiente.

A massa de ácido salicílico dissolvida na amostra foi determinada em balança analítica e a solubilidade foi calculada em concordância com a Equação (1) em que x_{AS} representa a fração molar de ácido salicílico na solução líquida ternária, w_{AS} é a fração mássica de ácido salicílico na solução líquida ternária, x_A e x_{OH} são a fração molar de água e álcool na solução líquida binária respectivamente e, por fim, M_{AS} , M_A e M_{OH} representam as massas molares de ácido salicílico, água e álcool respectivamente.

$$x_{AS} = \frac{\left(\frac{w_{AS}}{M_{AS}}\right)}{\left(\frac{w_{AS}}{M_{AS}}\right) + \left(\frac{1-w_{AS}}{M_A}\right)x_A + \left(\frac{1-w_{AS}}{M_{OH}}\right)x_{OH}} \quad (1)$$

Os resultados da solubilidade do ácido salicílico nas soluções líquidas binárias estudadas estão apresentados na Figura 1.

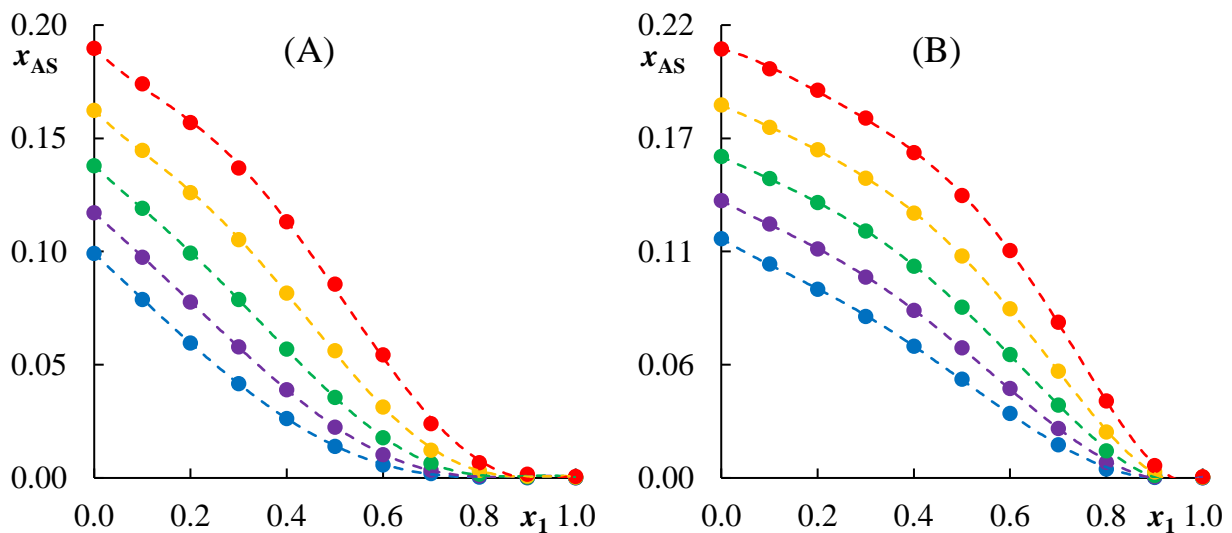


Figura 1. Solubilidade do ácido salicílico (x_{AS}) em função da fração molar de água (x_1) na solução líquida binária formada por (A) água (1) + metanol (2) e por (B) água (1) + etanol (2): ● 283,15 K; ● 293,15 K; ● 303,15 K; ● 313,15 K; ● 323,15 K

Como pode ser observado, a solubilidade do ácido salicílico ($C_7H_6O_3$) em ambas as soluções apresentou comportamento diretamente proporcional com a temperatura, ou seja, quanto maior a temperatura da solução maior a solubilidade do ácido salicílico. Esse comportamento foi observado para todas as soluções estudadas. O aumento da solubilidade com o aumento da temperatura indica que a entalpia de fusão do ácido salicílico tem importante contribuição no processo de solubilização, visto que o efeito térmico é endotérmico.

Os valores de solubilidade observados seguem a seguinte ordem etanol > metanol > água. Além disso, a adição de água em ambos os álcoois leva a uma diminuição da solubilidade. Esse comportamento mostra um efeito inversamente proporcional com a constante dielétrica dos componentes puros e das soluções. A constante dielétrica apresenta a seguinte ordem água > metanol > etanol e conforme a composição de água aumenta na solução observa-se um aumento da constante dielétrica.

Mesmo tendo um grupo carboxílico e um grupo hidroxila podendo formar ligações de hidrogênio com a água, o anel aromático do ácido salicílico é relativamente hidrofóbico, ou seja, apolar, o que dificulta a interação molecular do ácido salicílico com a água. Essa característica apolar do ácido salicílico indica que a molécula terá maior interação com uma solução que apresente menores valores de constante dielétrica.

Palavras chave: Solubilidade. Ácido salicílico. Interação molecular.