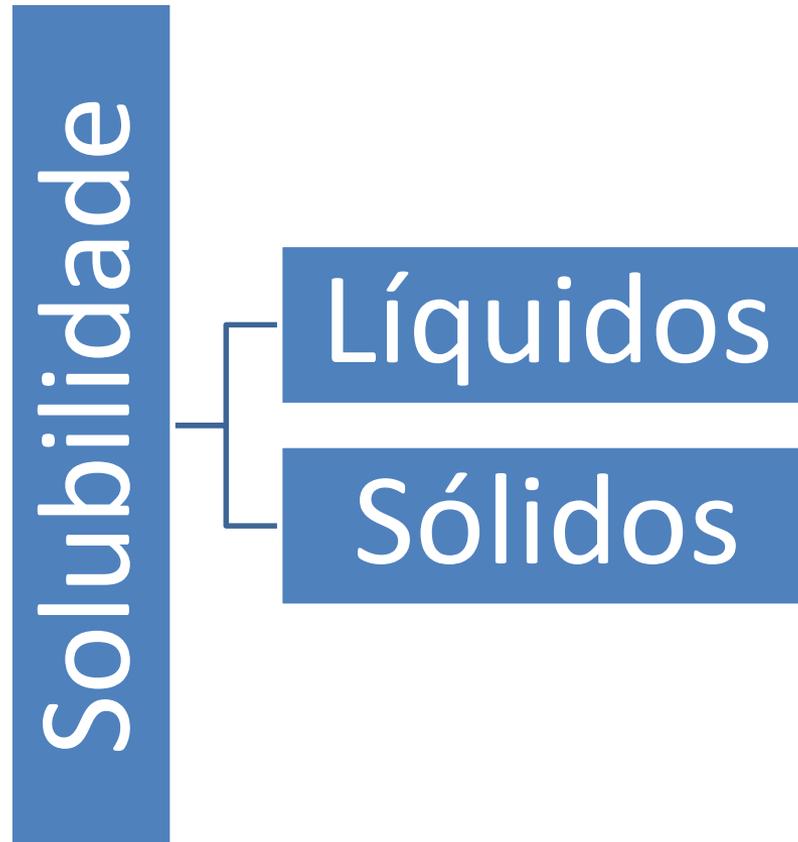


Solubilidade do Hidrogênio Molecular



Solubilidade em Líquidos

- Depende das interações intermoleculares do gás com o líquido.
 - Forças de London
 - Forças entre Dipolos Permanentes
 - Ligações de Hidrogênio

Quantificando as Forças Intermoleculares para Estimar a Solubilidade

- Modelo de Hildebrand - <http://cool.conservation-us.org/coolaic/sg/bpg/annual/v03/bp03-04.html>
- Modelo de Hansen –
 - *Hansen Solubility Parameters: A user's Handbook; CRC Press*
 - *P. Garbelatto. Solventes Industriais. Ed Edgar Blucher*

Solubilidade e Parâmetros de Solubilidade de Hildebrand

- Os parâmetros de solubilidade de Hildebrand (δ_t) permitem estimar a capacidade de um solvente de dissolver uma determinada substância.
- Este parâmetro TERMODINÂMICO é função da energia coesiva (E_{coh}) do líquido ou sólido.

$$\delta_t = \sqrt{\frac{E_{coh}}{V}}$$

Parâmetro de Solubilidade de Hildebrand

- A Energia de Coesão é função da variação de entalpia de volatilização (ΔH_v), desta forma podemos reescrever o parâmetro de solubilidade de Hildebrand como:

$$\delta = [(\Delta H_v - RT)/V_m]^{1/2}$$

V_m é o volume molar.

$$\begin{aligned} 1 \text{ hildebrand} &= 1 \text{ cal}^{1/2} \text{ cm}^{-3/2} = 0.48888 \times \text{MPa}^{1/2} \\ &= 2.4542 \times 10^{-2} (\text{kcal/mol})^{1/2} \text{ \AA}^{-3/2} \end{aligned}$$

Parâmetros de Hildebrand

Solvent	δ	δ (SD) MPa ^{1/2}
1,1,1 Trichloroethane	7,72	15,8
1-bromonaphtalène	10,61	21,7
2,3-butylene carbonate	12,12	24,8
2-ethylbutanol	10,51	21,5
2-ethylhexanol	9,48	19,4
Amyl acetate	8,36	17,1
Cellosolve® acetate	9,34	19,1
Ethyl acetate	8,90	18,2
Acetone	9,63	19,7
Acetonitrile	11,78	24,1
Benzene	9,14	18,7
Butyl Cellosolve®	9,87	20,2
Cellosolve®	10,70	21,9
Chloroform	9,14	18,7
Methylene chloride	9,87	20,2
Cyclohexane	8,21	16,8
Diacetone alcohol	9,78	20
Dibutylphtalate	9,29	19
Diethyl ether	7,38	15,1
Diisobutyl ketone	7,82	16
Dimethyl sulphoxide	12,90	26,4
Dimethylformamide	12,07	24,7
Dimethylphtalate	10,70	21,9
Dioxane	9,92	20,3
Water	23,46	48
Ethyl alcohol	12,71	26
Ethylene carbonate	14,71	30,1
Ethylene dichloride	9,87	20,2
Ethylene glycol	17,06	34,9
Glycerol	17,69	36,2
Methyl alcohol	14,52	29,7
Methylcyclohexane	7,82	16
Methyl ethyl ketone	9,43	19,3
Methylpropionate	8,90	18,2

Prof. Dr. Rodrigo S. Ribeiro, GOMAR

Parâmetros de Solubilidade de Hansen (Extensão do conceito de Hildebrand)

$$\delta^2 = \delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2$$

Forças Intermoleculares do tipo
Dipolo Induzido-Dipolo Induzido

Forças Intermoleculares do tipo
Ligação de Hidroênio

Forças Intermoleculares do tipo
Dipolo Permanente-Dipolo Permanente

Parâmetros de Solventes de Hansen

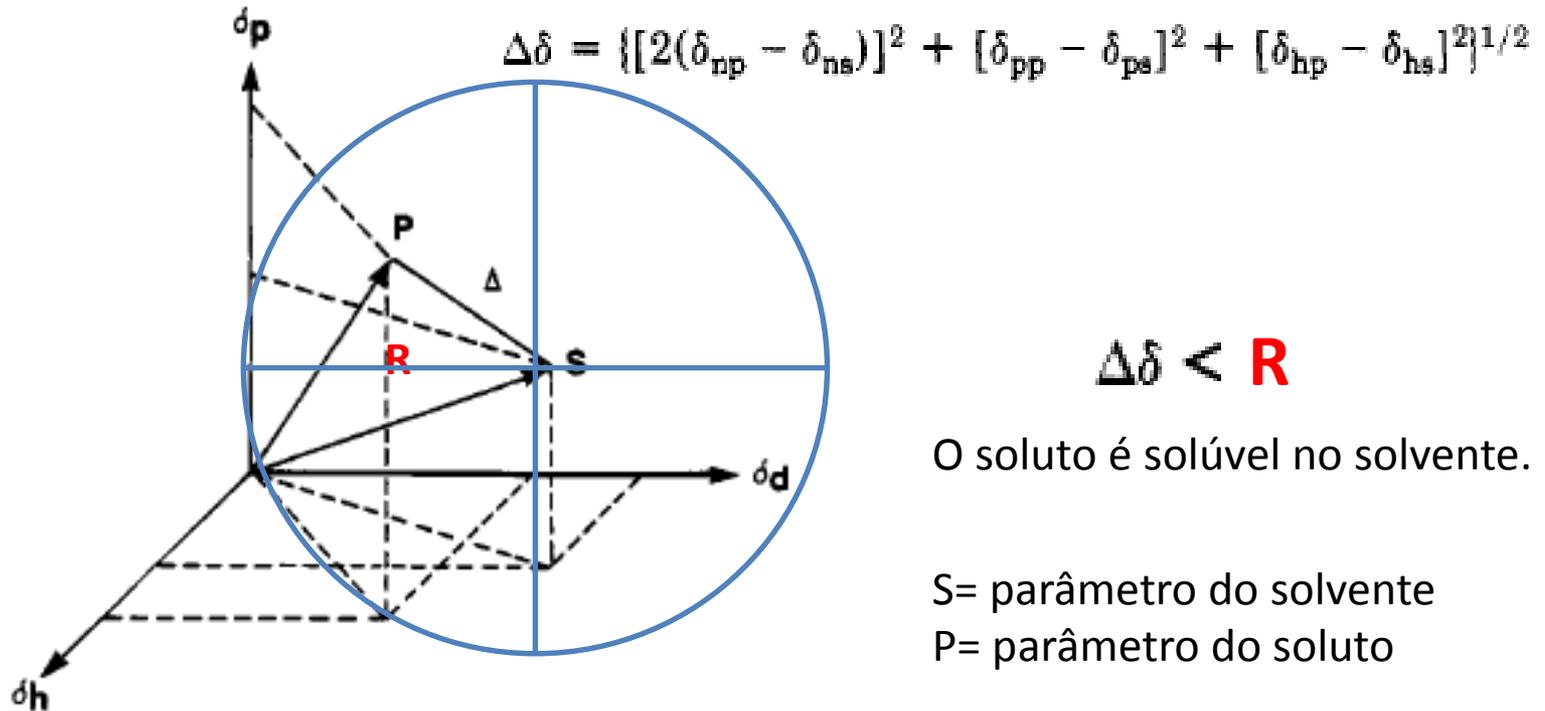
Table I. Solvent Properties

solvent	δ_n	δ_p	δ_h	V_m
butyl carbitol	7.8	3.4	5.2	170.3
acetone	7.6	5.1	3.4	73.0
aniline	9.5	2.5	5.0	90.8
carbon disulfide	10.0	0	0	60.1
cyclohexane	8.2	0	0.1	107.6
nitrobenzene	9.8	4.2	2.0	101.8
diisobutyl ketone	7.8	1.8	2.0	176.0
acetonitrile	7.5	8.8	3.0	52.2
isophorone	8.1	4.0	3.6	149.0
toluene	8.8	0.7	1.0	106.0
chlorobenzene	9.3	2.1	1.0	101.3
bromobenzene	10.0	2.7	2.0	104.6
methylene chloride	8.9	3.1	3.0	63.8
N-methylpyrrolidinone	8.8	6.0	3.5	96.1
butyrolactone	9.3	8.1	3.6	76.2
formic acid	7.0	5.8	8.1	37.6
methyl isobutyl ketone	7.5	3.0	2.0	125.3
propionitrile	7.5	7.0	2.7	70.1
tetrahydrofuran	8.2	2.8	3.9	81.7
heptane	7.5	0	0	144.6
cyclohexanol	8.5	2.0	6.6	103.7
dimethyl sulfoxide	9.0	8.0	5.0	60.0
diacetone alcohol	7.7	4.0	5.3	124.3
2-propanol	7.7	3.0	8.0	76.8
1-octanol	8.3	1.6	5.8	157.7
ethylenediamine	8.1	4.3	8.3	67.3
tetrabromoethane	11.1	2.5	4.0	116.8
propylene carbonate	9.8	8.8	2.0	84.3
methanol	7.4	6.0	10.9	40.3
ethylene glycol	8.3	5.4	12.7	55.6
ethanolamine	8.4	7.6	10.4	59.5
formamide	8.4	12.8	9.3	39.8
dipropylene glycol	7.8	9.9	9.0	130.4
diethylenetriamine	8.2	6.5	7.0	108.0

Ubirajara P. Rodrigues-Filho, GQM/AN/II-
IQSC-USP

Parâmetros de Solubilidade de Hansen

- O espaço 3D definido pelos parâmetros de solubilidade de Hansen (δ_d , δ_p , δ_h) é chamado de esfera de solubilidade com raio R.



Mistura de Solventes

$$\delta(\text{mixture}) = \phi_1\delta_1 + \phi_2\delta_2 + \dots$$

ϕ_i é a fração molar de cada solvente na mistura

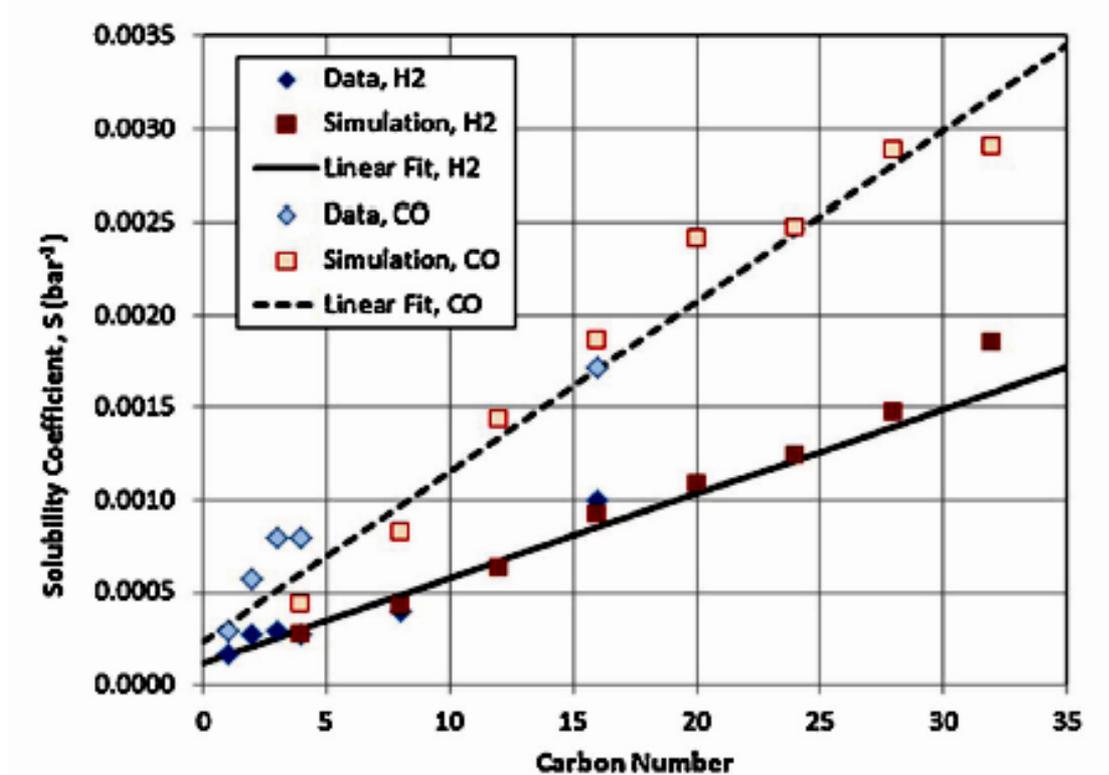
Solubilidade do H₂ em Líquidos

- Água (310,15K)= 0,01636 mL/mL¹
- Etanol (298K)= 0,078 mL/mL
- Azeite (310,15 K)= 0,04310 mL/mL¹

A solubilidade em líquidos é fortemente dependente da permissividade elétrica e polarizabilidade do líquido, quanto menor a permissividade elétrica e maior a polarizabilidade maior a solubilidade.

1- WAYNE A. GERTH, Archives of Biochemistry and Biophysics, 241(1), 187-189, 1985

Solubilidade do H₂ Série Homóloga de Álcoois



Número de Carbonos no Álcool



Solubilidade do H₂ em Sólidos

- O hidrogênio molecular é sorvido (adsorvido e absorvido) em metais formando ligações M-H e eventualmente formando hidretos metálicos. A solubilidade ou capacidade de adsorção varia de com o metal ou liga metálica.