

CENTRO UNIVERSITÁRIO DA FEI

MARIANA NEGRESIOLO LIBÓRIO

**ESTUDO TERMODINÂMICO E ESPECTROSCÓPICO DE SISTEMAS LÍQUIDOS
BINÁRIOS CONTENDO (DIETIL MALONATO + ÁLCOOIS) A DIFERENTES
TEMPERATURAS E PRESSÃO ATMOSFÉRICA**

São Bernardo do Campo
2015

MARIANA NEGRESIOLO LIBÓRIO

**ESTUDO TERMODINÂMICO E ESPECTROSCÓPICO DE SISTEMAS LÍQUIDOS
BINÁRIOS CONTENDO (DIETIL MALONATO + ÁLCOOIS) A DIFERENTES
TEMPERATURAS E PRESSÃO ATMOSFÉRICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Centro Universitário da FEI como parte dos requisitos necessário à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica – Sistemas de Mobilidade, orientada pelo Prof. Dr. Ricardo Belchior Torres.

São Bernardo do Campo
2015

Libório, Mariana Negresiole.

Estudo termodinâmico e espectroscópico de sistemas líquidos binários contendo (dietil malonato álcoois) a diferentes temperaturas e pressão atmosférica / Mariana Negresiole Libório. São Bernardo do Campo, 2015.

205 f. : il.

Dissertação - Centro Universitário da FEI.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Belchior Torres.

1. Grandezas excesso. 2. Espectroscopia FTIR e RMN. 3. Dietil malonato. 4. Álcoois. I. Torres, Ricardo Belchior, orient. II. Título.

CDU 66.02



Centro Universitário da **FEI**

APRESENTAÇÃO DE DISSERTAÇÃO ATA DA BANCA JULGADORA

PGM-10

Programa de Mestrado de Engenharia Mecânica

Aluno: Mariana Negresiole Libório

Matrícula: 213123-3

Título do Trabalho: Estudo termodinâmico e espectroscópico de sistemas líquidos binários contendo (dietil malonato + álcoois) a diferentes temperaturas e pressão atmosférica.

Área de Concentração: Sistemas da Mobilidade

ORIGINAL ASSINADA

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Belchior Tôrres

Data da realização da defesa: 26/02/2015

A Banca Julgadora abaixo-assinada atribuiu ao aluno o seguinte:

APROVADO

REPROVADO

São Bernardo do Campo, 26 de Fevereiro de 2015.

MEMBROS DA BANCA JULGADORA

Prof. Dr. Ricardo Belchior Tôrres

Ass.: _____

Prof. Dr. Artur Zaghini Francesconi

Ass.: _____

Prof. Dr. Marcelo Martins Seckler

Ass.: _____

VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO

**ENDOSSO DO ORIENTADOR APÓS A INCLUSÃO DAS
RECOMENDAÇÕES DA BANCA EXAMINADORA**

Aprovação do Coordenador do Programa de Pós-graduação

Prof. Dr. Agenor de Toledo Fleury

Dedico este trabalho a
meus pais, irmãos e avós.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, meus sinceros agradecimentos a Deus por iluminar minha vida e me ajudar a vencer as dificuldades que surgem dia após dia.

A minha família, não só pelo apoio que me concedem diariamente, mas pelo amor e carinho sempre presentes.

Ao professor Ricardo Belchior Tôrres pela oportunidade, confiança, paciência e ensinamentos ao longo deste trabalho. Também à professora Andréia de Araujo Morandim Gannetti pela contribuição e ensinamentos.

A todos os funcionários e técnicos da FEI, principalmente os do Centro de Laboratórios Químicos, que auxiliaram e colaboraram nesta pesquisa. Com destaque para Mario e Marcos, com quem tive maior interface durante o trabalho experimental.

A CAPES, por me conceder a bolsa auxílio PROSUP, possibilitando meu desenvolvimento profissional.

E finalmente aos meus amigos Feianos pela motivação ao longo dos anos e pelas singelas contribuições, quaisquer que sejam.

*Measure, what is measurable,
And make measurable what is not so.*
Galileo Galilei (1569-1642)

RESUMO

Projetos e operações de processos industriais químicos envolvendo transferências de calor e massa requerem o conhecimento de propriedades volumétricas e de transporte de misturas líquidas multicomponentes envolvidas, tais como densidade e viscosidade. Ademais, as grandezas derivadas destas propriedades proporcionam informações, tanto para o entendimento de interações moleculares e efeitos estruturais, quanto para o desenvolvimento de modelos e teorias de solução. No presente estudo, medidas experimentais de densidade, velocidade do som e viscosidade de soluções líquidas binárias contendo {dietil malonato (+ metanol, ou + etanol, ou + 1-propanol, ou + 1-butanol, ou + 1-pentanol)} foram determinadas em toda faixa de composição, à pressão atmosférica e nas temperaturas de $T = (288,15; 293,15; 298,15; 303,15 \text{ e } 308,15)$ K. A densidade e a velocidade do som foram determinadas utilizando um analisador de densidade e velocidade do som fabricado pela Anton Paar (Modelo DSA 5000 M), enquanto a viscosidade foi medida através de um viscosímetro Stabinger (Modelo SVM 3000/ G2) também fabricado pela Anton Paar. Os resultados experimentais foram usados para calcular o volume molar excesso, o desvio da compressibilidade isentrópica e o desvio da viscosidade. Os valores positivos e negativos destas propriedades foram explicados com base em efeitos estruturais, químicos ou físicos. O polinômio de Redlich-Kister foi utilizado para correlacionar as grandezas excesso e outras propriedades volumétricas foram calculadas. Com o objetivo de identificar as possíveis interações intermoleculares presentes nos sistemas estudados, um estudo espectroscópico no Infravermelho por Transformada de Fourier (FT-IR) e de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) foi realizado utilizando um espectrômetro de Infravermelho da Thermo Scientific (Modelo Nicolet 6700) e um espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear da Burkert (Modelo Avance III 600 HD).

Palavras-chave: Grandezas excesso. Espectroscopia FTIR e RMN. Dietil malonato. Álcoois.

ABSTRACT

Designs and operations of chemical process involving heat transfer and mass transfer require the knowledge of volumetric and transport properties of multicomponent liquid mixtures, such as density and viscosity. In addition, the derived functions of these properties provide information as much for understanding molecular interactions and structural effects as for developing solution models and theories. In this study, experimental measurements of density, speed of sound and viscosity of binary mixtures of (diethyl malonate + methanol, or + ethanol, or + 1-propanol, or + 1-butanol, or + 1-pentanol) were determined in the temperature range $T = (288.15, 293.15, 298.15, 303.15 \text{ and } 308.15)$ K and atmospheric pressure, over the entire composition range. The densities and speed of sounds data were determined by using an density and speed of sound velocity meter analyzer manufactured by Anton Paar (Model DSA 5000 M), whereas the viscosity were measured by using a viscosimeter Stabinger (Model SVM 3000/ G2) manufactured by Anton Paar. These results were used to calculate the excess molar volume, isentropic compressibility deviation and viscosity deviation. The negative and positive values of these excess properties were explained on the basis of structural, chemical or physical effects. The Redlich-Kister polynomial was used to fit these properties and other volumetric properties were calculated. In order to support the formation of intermolecular interactions, an spectroscopic study in Fourier Transform Infrared (FT-IR) and in a Nuclear Magnetic Resonance (NMR), took place by using Thermo Scientific Nicolet 6700 FT-IR and Burker Avance III 600 HD NMR.

Key words: Excess properties. FTIR and NMR spectroscopy study. Diethyl malonate. Alcohols.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades físico-químicas dos reagentes.	25
Tabela 2 - Frequências e intensidades de campos em que núcleos de ^1H e ^{13}C têm suas ressonâncias nucleares.	47
Tabela 3 - Densidade dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.	51
Tabela 4 - Velocidade do som dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.	52
Tabela 5 - Viscosidade dinâmica dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.	53
Tabela 6 - Coeficientes A_j e B para o volume molar excesso a diferentes temperaturas.	63
Tabela 7 - Coeficientes A_j e B para o desvio da compressibilidade isentrópica a diferentes temperaturas.	64
Tabela 8 - Coeficientes A_j e B para o desvio da viscosidade a diferentes temperaturas.	65
Tabela 9 - Volume parcial molar e parcial molar excesso à diluição infinita do DEM nos álcoois à diferentes temperaturas e pressão atmosférica.	81
Tabela 10 - Volume parcial molar e parcial molar excesso à diluição infinita dos álcoois em DEM à diferentes temperaturas e pressão atmosférica.	82
Tabela 11 - Absorções de deformação axial O-H observadas.	86
Tabela 12 - Absorbância relativa aos picos de absorção citados na Tabela 11.	87
Tabela 13 - Deslocamentos químicos de RMN – ^{13}C do grupamento carbonila ($>\text{C}=\text{O}$) nos sistemas (dietil malonato + álcoois).	100

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Fórmula estrutural do dietil malonato.....	22
Figura 2 - Densímetro DSA 5000 M – Anton Paar.	43
Figura 3 - Viscosímetro SVM 3000/ G2 – Anton Paar.	44
Figura 4 - Esquema de espectrômetro FT-IR.	45
Figura 5 - Espectrômetro Nicolet 6700 - Thermo Scientific – acompanhado do software OMNIC.	46
Figura 6 - Espectrômetro Avance III 600 HD – Burker.	48
Figura 7 - Elementos básicos do espectrômetro de ressonância magnética nuclear.	49
Figura 8 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.....	54
Figura 9 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.....	54
Figura 10 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.	55
Figura 11 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.	55
Figura 12 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.	56
Figura 13 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.....	57
Figura 14 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.....	57

- Figura 15 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 58
- Figura 16 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 58
- Figura 17 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 59
- Figura 18 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 60
- Figura 19 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 60
- Figura 20 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 61
- Figura 21 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K..... 61
- Figura 22 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 67
- Figura 23 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 67
- Figura 24 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes

temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 68

Figura 25 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 68

Figura 26 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 69

Figura 27 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister. 70

Figura 28 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister. 70

Figura 29 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister. 71

Figura 30 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister. 71

Figura 31 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister. 72

Figura 32 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 73

- Figura 33 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 74
- Figura 34 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister..... 74
- Figura 35 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○288,15K; △293,15K; ■298,15K; ◇303,15K; ●308,15K; (—) Redlich-Kister..... 75
- Figura 36 - Volume molar excesso (a), desvio da compressibilidade isentrópica (b) e desvio da viscosidade (c) em função da fração molar do componente 1 a 298,15 K e pressão atmosférica: ●, {dietil malonato (1) + metanol (2)}; ▲, {dietil malonato (1) + etanol (2)}; □, {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)}; ◆, {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)}; ⊙, {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)}; (—) Redlich-Kister..... 76
- Figura 37 - Volume molar excesso em função da temperatura à composição equimolar e pressão atmosférica: ●, {dietil malonato (1) + metanol (2)}; ▲, {dietil malonato (1) + etanol (2)}; □, {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)}; ◆, {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)}; ⊙, {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)}; (—) ajuste linear..... 78
- Figura 38 - Espectro FT-IR do metanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + metanol): $x_{DEM} = 0,1$ (vermelho); $x_{DEM} = 0,2$ (verde); $x_{DEM} = 0,3$ (azul escuro); $x_{DEM} = 0,4$ (amarelo); $x_{DEM} = 0,5$ (marrom); $x_{DEM} = 0,6$ (laranja); $x_{DEM} = 0,7$ (rosa); $x_{DEM} = 0,8$ (azul claro); $x_{DEM} = 0,9$ (verde musgo)..... 84
- Figura 39 - Espectro FT-IR do etanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + etanol): $x_{DEM} = 0,1$ (vermelho); $x_{DEM} = 0,2$ (verde); $x_{DEM} = 0,3$ (azul escuro); $x_{DEM} = 0,4$ (amarelo); $x_{DEM} = 0,5$ (marrom); $x_{DEM} = 0,6$ (laranja); $x_{DEM} = 0,7$ (rosa); $x_{DEM} = 0,8$ (azul claro); $x_{DEM} = 0,9$ (verde musgo)..... 84
- Figura 40 - Espectro FT-IR do 1-propanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-propanol): $x_{DEM} = 0,1$ (vermelho); $x_{DEM} = 0,2$ (verde);

$x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo). 85

Figura 41 - Espectro FT-IR do 1-butanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-butanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo). 85

Figura 42 - Espectro FT-IR do 1-pentanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-pentanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo). 86

Figura 43 - Espectro de RMN – ^1H do metanol puro. 89

Figura 44 - Espectro de RMN – ^{13}C do metanol puro. 90

Figura 45 - Espectro de RMN – ^1H do etanol puro. 90

Figura 46 - Espectro de RMN – ^{13}C do etanol puro. 91

Figura 47 - Espectro de RMN – ^1H do 1-propanol puro. 91

Figura 48 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-propanol puro. 92

Figura 49 - Espectro de RMN – ^1H do 1-butanol puro. 92

Figura 50 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-butanol puro. 93

Figura 51 - Espectro de RMN – ^1H do 1-pentanol puro. 93

Figura 52 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-pentanol puro. 94

Figura 53 - Espectro de RMN – ^1H do dietil malonato puro. 94

Figura 54 - Espectro de RMN – ^{13}C do dietil malonato puro. 95

Figura 55 - Espectro de RMN – ^{13}C do metanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + metanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta). 96

Figura 56 - Espectro de RMN – ^{13}C do etanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + etanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta). 97

Figura 57 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-propanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-propanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$

(bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta). 97

Figura 58 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-butanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-butanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta). 98

Figura 59 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-pentanol (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-pentanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta). 98

LISTA DE SÍMBOLOS

α, β	Expansividade térmica / K^{-1}
δ	Deslocamento químico / ppm; Derivada
η	Viscosidade dinâmica / $mPa \cdot s$
κ	Compressibilidade isentrópica / TPa^{-1}
μ	Potencial químico / $J \cdot mol^{-1}$
ν	Número de onda / cm^{-1}
ρ	Densidade / $g \cdot cm^{-3}$
σ	Desvio padrão / $cm^3 \cdot mol^{-1}$, TPa^{-1} ou $mPa \cdot s$
A	Energia de Helmholtz / J; Absorbância
A_j	Coefficientes de Redlich-Kister / $cm^3 \cdot mol^{-1}$, TPa^{-1} ou $mPa \cdot s$
B	Coefficiente da equação modificada de Redlich-Kister
C_p	Capacidade calorífica / $J \cdot K^{-1}$
G	Energia de Gibbs / J
H	Entalpia / J
I	Energia radiante transmitida / J
I_0	Energia radiante incidente / J
M	Grandeza extensiva qualquer; Massa molar / $g \cdot mol^{-1}$
m	Massa / g
N	Número de dados experimentais para cálculo de desvio padrão.
n	Número de coeficientes da equação de Redlich-Kister; Número de mols; Índice de refração
P	Pressão / MPa
R	Constante do gas ideal / $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
S	Entropia / $J \cdot K^{-1}$
T	Temperatura / K
U	Energia interna / J
u	Velocidade do som / $m \cdot s^{-1}$
V	Volume / cm^3
x	Fração molar
Y	Grandeza qualquer ajustada por Redlich-Kister

Sobrescrito

— Grandeza parcial

E	Grandeza excesso
Ideal	Grandeza ideal
o	Propriedade componente puro

Subscrito

1	Propriedade do componente 1
2	Propriedade do componente 2
ϕ	Grandeza aparente
j	Componente j
i	Componente i
m	Grandeza molar

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	19
1.1 Relevância do tema.....	19
1.2 Objetivos.....	20
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1 Dietil malonato.....	22
2.2 Álcoois.....	23
2.2.1 Metanol	23
2.2.2 Etanol	23
2.2.3 1-Propanol	24
2.2.4 1-Butanol.....	24
2.2.5 1-Pentanol	24
2.3 Propriedades físico químicas dos reagentes	25
2.4 Estudo de propriedades volumétricas, viscosimétricas e acústicas de sistemas contendo ésteres	25
2.5 Estudos de grandezas excesso contendo dietil malonato.....	28
2.6 Estudos abrangendo grandezas excesso e análise espectroscópica	30
3 FORMALISMO TERMODINÂMICO	33
3.1 Funções excesso.....	33
3.1.1 Volume molar excesso	35
3.1.2 Desvio da compressibilidade isentrópica	35
3.1.3 Desvio da viscosidade	36
3.2 Volumes parciais molares	36
3.3 Volume molar e parcial molar excesso em soluções diluídas	38
3.3.1 Volume molar aparente	39
4 MATERIAIS E MÉTODOS	41
4.1 Metodologia.....	41
4.2 Reagentes.....	42
4.3 Equipamentos	42
4.3.1 DSA 5000 M	43
4.3.2 SVM 3000/ G2	44
4.3.3 Thermo Scientific Nicolet 6700 FT-IR	44
4.3.4 Espectrômetro Avance III 600 HD	46

4.4 Procedimento experimental.....	49
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	51
6 CONCLUSÕES.....	102
REFERÊNCIAS	104
APÊNDICE A – CROMATOGRAMAS E ESPECTROS.....	110
APÊNDICE B – RESULTADOS EXPERIMENTAIS.....	116
APÊNDICE C – SISTEMA TESTE	167
APÊNDICE D – CÁLCULO DE INCERTEZAS.....	174

INTRODUÇÃO

Esta seção contempla a relevância do tema abordado no presente estudo e seus respectivos objetivos.

1.1 Relevância do tema

Propriedades excesso são grandezas termodinâmicas que descrevem o excesso (positivo ou negativo) de uma função termodinâmica de solução em relação a uma solução ideal. Define-se uma solução ideal como aquela que segue o comportamento da Lei de Raoult. Portanto, as funções excesso expressam a extensão para a qual uma solução real se desvia da idealidade.

A mistura de diferentes compostos dá origem a soluções que, geralmente, não se comportam idealmente. Esse desvio da idealidade é expresso por grandezas termodinâmicas, particularmente, coeficientes de atividade e propriedades excesso. Os coeficientes de atividade são importantes no estudo de equilíbrios de fase, enquanto as propriedades termodinâmicas excesso são úteis na compreensão de interações e arranjos moleculares que ocorrem entre soluto-soluto, soluto-solvente e solvente-solvente (WISNIAK et al., 2008).

Sistemas binários representam uma classe importante de soluções e o comportamento de suas propriedades termodinâmicas é de difícil compreensão, o que exige estudos aprofundados dessas propriedades.

Dados experimentais de densidade e viscosidade são indispensáveis nos cálculos de Engenharia Química que envolvem transferência de calor e massa e mecânica dos fluidos. Conseqüentemente, o conhecimento dessas propriedades é de extrema importância para projetos e operações de processos industriais químicos.

O avanço tecnológico nos dispositivos eletrônicos propiciou a obtenção de medidas de densidade altamente precisas utilizando pequenas quantidades de amostras. O formalismo termodinâmico permite o cálculo do volume molar excesso através das medidas de densidade, tornando-o uma função termodinâmica de grande interesse no desenvolvimento e teste de modelos e teorias de soluções, uma vez que, juntamente com outras propriedades de mistura, fornecem informações valiosas na análise das possíveis interações moleculares e na compreensão de efeitos estruturais.

Similarmente, propriedades acústicas, como velocidade do som e compressibilidade isentrópica, são úteis para entender o tipo e a natureza das interações presentes entre os

componentes da mistura. Além disso, dados de propriedades acústicas têm sido usados para testar e desenvolver equações de estado.

A espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR) é um método bem sucedido para verificar a estrutura molecular e os efeitos associativos entre moléculas. A formação de complexos em misturas binárias pode ser interpretada em termos de ligação de hidrogênio e suas respectivas frequências de deformação axial no FT-IR. A associação inter ou intramolecular pode ser investigada pela análise do deslocamento, largura e intensidade das bandas do grupamento –OH (BHALODIA; SHARMA, 2014).

A ressonância magnética nuclear (RMN) é outro método espectroscópico de absorção, semelhante à espectroscopia de infravermelho. A combinação de tais métodos é, muitas vezes, suficiente para determinar a estrutura de uma molécula desconhecida. Segundo Kinart, Kinart e Maj (2008), o espectro RMN de uma molécula não fornece somente sua “impressão digital”, mas permite obter conclusões detalhadas quanto a estruturas isométricas, influência de um solvente e formação de ligações de hidrogênio inter e intramoleculares.

Dietil malonato é um importante composto orgânico utilizado na síntese das vitaminas B₁ e B₆, inúmeros fármacos, agroquímicos e na indústria de aromas e fragrâncias (BALUJA et al., 2005). Um levantamento bibliográfico comprovou que, embora existam muitos trabalhos publicados para sistemas binários, poucos dados de propriedades excessos são disponíveis para sistemas contendo dietil malonato.

Na literatura são encontrados diversos estudos envolvendo propriedades físico-químicas, e de suas grandezas termodinâmicas derivadas, de soluções contendo álcoois. O estudo dessas espécies químicas é de grande interesse, tanto pelo ponto de vista teórico quanto pelo experimental, uma vez que se encontram grandes aplicações industriais para tais espécies (GONZALEZ–SALGADO et al., 2006).

1.2 Objetivos

O presente estudo teve como objetivo a determinação experimental da densidade, viscosidade e velocidade do som de sistemas líquidos binários contendo {dietil malonato (DEM) + metanol, ou + etanol, ou + 1-propanol, ou + 1-butanol, ou + 1-pentanol} em toda faixa de composição, a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.

Os dados de densidade e velocidade do som foram determinados fazendo uso de um analisador de densidade e velocidade do som (Modelo DSA 5000 M) e os valores de viscosidade foram medidos através de um viscosímetro rotacional Stabinger (Modelo SVM

3000/ G2), ambos fabricados pela Anton Paar. As temperaturas estudadas foram: 288,15K; 293,15K; 298,15K; 303,15K e 308,15K. Os dados experimentais foram usados para calcular o volume molar excesso, o desvio da viscosidade e o desvio da compressibilidade isentrópica, os quais foram correlacionados usando um polinômio de Redlich-Kister. Fez-se uso do formalismo termodinâmico para calcular outras propriedades volumétricas, dentre elas, os volumes parciais molares, os volumes parciais molares excesso e os respectivos volumes parciais molares à diluição infinita, e os volumes molares aparentes de cada componente.

O trabalho apresentou ainda um estudo espectroscópico de Infravermelho por Transformada de Fourier (FT-IR) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) dos sistemas binários com o objetivo de complementar os dados termodinâmicos, proporcionando assim, um melhor entendimento quanto ao comportamento estrutural e intermolecular das espécies químicas presentes nos sistemas estudados. Realizou-se então uma análise dos espectros FT-IR, em toda faixa de composição à temperatura e pressão atmosféricas, cujas medidas foram realizadas utilizando um espectrômetro FT-IR da Thermo Scientific (Modelo Nicolet 6700). O estudo foi finalizado com uma análise dos espectros de RMN, hidrogênio-1 e carbono-13, dos sistemas binários em toda faixa de composição, à pressão atmosférica e à temperatura de 22°C. Estas medidas foram determinadas utilizando um espectrômetro da Burker (Modelo Avance III 600 HD).

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica do presente trabalho apresenta, primeiramente, um breve resumo sobre os componentes envolvidos no estudo e sua importância comercial. Em seguida, estudos científicos encontrados da literatura envolvendo densidade, viscosidade e velocidade do som, e de suas grandezas excessivo derivadas, sobretudo, volume molar excessivo, desvio da compressibilidade isentrópica e desvio da viscosidade. Finalmente, são apresentados estudos de propriedades excessivo envolvendo o composto dietil malonato e estudos combinados de grandezas excessivo com análise espectroscópica.

2.1 Dietil malonato

Dietil malonato [CAS No. 105-53-3] ou DEM, cuja fórmula molecular é $C_7H_{12}O_4$, é um dos mais importantes malonatos – compostos derivados do ácido malônico. Trata-se de um líquido incolor, fracamente solúvel em água, mas miscível em dietil éter e álcoois (ULLMANN'S, v. 22, 2011).

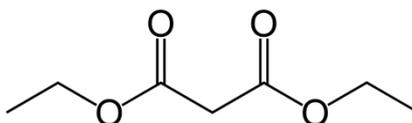


Figura 1 - Fórmula estrutural do dietil malonato.
Fonte: Autor.

Segundo Rathnam, Mohite e Kumar (2012), dietil malonato é produzido pela reação entre ácido monocloroacético com monóxido de carbono em presença de metanol. Ullmann's (2011) informa que a reação é catalisada por dicobalto octa carbonilo, sendo conduzida a $100^{\circ}C$, 18 bar e pH 5,7.

Este composto é utilizado para sintetizar barbituratos e vitaminas B_1 e B_6 devido à sua típica estrutura com dois grupamentos carbonila adjacentes, como é possível verificar na figura 1. Na indústria farmacêutica, o DEM é usado na síntese de fármacos, como por exemplo, a cloroquina. Pode ser aplicado também na indústria agroquímica (pesticidas), em tintas e em aromatizantes (RATHNAM; MOHITE; KUMAR, 2012).

2.2 Álcoois

Os álcoois estudados foram aqueles de cadeia curta com no máximo cinco carbonos, isto é, metanol, etanol, 1-propanol, 1-butanol e 1-pentanol.

2.2.1 Metanol

Metanol [CAS No. 67-56-1], ou álcool metílico como também é denominado, é um composto químico com fórmula molecular CH_3OH e uma das mais importantes matérias primas mundiais. Trata-se de um composto incolor, miscível em água, álcoois, ésteres e muitos compostos orgânicos, mas é pouco solúvel em óleos e gorduras (ULLMANN'S, v. 23, 2011).

Ullmann's (2011, v. 23, p. 39) ressalta que *“Aproximadamente 70% do metanol produzido mundialmente é destinado a sínteses químicas: em ordem de importância, formaldeídos, metil terc-butil éter (MTBE), ácido acético, metil metacrilato e dimetil tereftalato. Apenas uma pequena porção é utilizada na produção de energia, apesar de seu grande potencial neste uso.”*

O baixo ponto de fusão e a miscibilidade em água permitem ao metanol sua utilização em sistemas de refrigeração, seja na sua forma pura ou em misturas com água e glicóis. Este álcool também pode ser utilizado como anticongelante em circuitos de aquecimento e resfriamento. Suas aplicações ainda incluem ação como agente absorvedor em depurador de gás e proteção de gasodutos contra formação de hidratos gasosos a baixas temperaturas. Finalmente, sua utilização como solvente é limitada, mas sua adição em blendas é frequente (ULLMANN'S, v. 23, 2011).

2.2.2 Etanol

Etanol [CAS No. 64-14-5], também conhecido como álcool etílico, é um composto orgânico de fórmula molecular $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Na sua forma pura (álcool absoluto) é um líquido incolor. É miscível em água e também em éter, acetona, benzeno e outros solventes orgânicos (ULLMANN'S, v. 13, 2011).

O álcool etílico possui diversas aplicações, como por exemplo: bebidas alcoólicas, solvente, matéria prima em sínteses químicas e combustível automotivo. Na maioria dos países, o etanol produzido por fermentação é destinado para bebidas e especialidades

químicas, enquanto o produzido por síntese é utilizado em propósitos industriais. Entretanto, em países como Brasil e Índia, também utilizam etanol de fermentação como combustível alternativo (ULLMANN'S, v. 13, 2011).

2.2.3 1-Propanol

1-Propanol [CAS No. 71-23-8] é um composto límpido, incolor, com ligeiro odor semelhante ao do etanol. Sua fórmula molecular é C_3H_7OH . Este álcool é completamente miscível em água e solúvel em uma variedade de solventes orgânicos, tais como: éteres, ésteres, ácidos, cetonas e outros álcoois (ULLMANN'S, v. 30, 2011).

Ullmann's (2011, v. 30, p. 249) afirma que *“Como solvente, 1-propanol é usado principalmente em tintas de impressão, pintura, cosméticos, pesticidas e inseticidas.”* Também cita que *“1-propanol é utilizado comercialmente na produção de éteres glicólicos.”*

2.2.4 1-Butanol

1-Butanol ou *n*-butanol [CAS No. 71-36-3], cuja fórmula molecular é C_4H_9OH , é um líquido incolor de odor característico, completamente miscível em solventes orgânicos comuns (ULLMANN'S, v. 06, 2011).

1-butanol é usado principalmente no segmento de vernizes. Também é utilizado no controle de viscosidade e no melhoramento das propriedades de escoamento dos vernizes, tintas, colas e resinas. Nos Estados Unidos, bem como na Alemanha e na Bélgica, *n*-butanol é aplicado na produção de butilaminas. Este álcool também possui diversas aplicações na indústria de plásticos e têxteis e pode ser usado como banho de coagulação para fiação de fibras acrílicas e no tingimento das fibras de poli (álcool vinílico) (ULLMANN'S, v. 06, 2011).

2.2.5 1-Pentanol

1-Pentanol [CAS No. 71-41-0], também conhecido por álcool *n*-amílico, possui fórmula molecular $C_5H_{11}OH$ e é um líquido incolor de odor característico, miscível em uma vasta gama de solventes orgânicos (ULLMANN'S, v. 26, 2011).

O álcool *n*-amílico é usado particularmente como solvente, agente de extração, material de partida para aditivos lubrificantes (zinco dipentil ditiofosfato) e auxiliar em

flotação. Outra importante aplicação industrial deste álcool é na síntese de materiais de partida para produção de cristais líquidos, corantes, aromatizantes e catalisadores especiais. Finalmente, o 1-pentanol também é utilizado em várias sínteses na indústria farmacêutica e na produção de diversos ésteres (ULLMANN'S, v. 26, 2011).

2.3 Propriedades físico químicas dos reagentes

A tabela 1 a seguir apresenta algumas propriedades físico-químicas encontradas na literatura dos compostos em estudos. São elas: ponto de fusão (PF), ponto de ebulição (PE), ponto de fulgor, momento dipolar e índice de refração a 20°C (n^{20}).

Tabela 1 - Propriedades físico-químicas dos reagentes.

Composto	PF (°C)	PE (°C)	Ponto de Fulgor (°C)	Momento Dipolar (C.m)	n^{20}
DEM ^a		199	90		1,413-1,414
Metanol ^b	-97,68	64,7	12,2	$5,6706 \cdot 10^{-30}$	1,32840
Etanol ^c	-114,15	78,39	13		1,36048
1-Propanol ^d	-126,1	97,15	15		1,3837*
1-Butanol ^e	-89,3	117,7			1,3991
1-Pentanol ^f	-78,5	137,8	50		1,4099

Fonte: ^aULLMANN'S, v. 22, 2011; ^b ULLMANN'S, v. 23, 2011; ^c ULLMANN'S, v. 13, 2011; ^d ULLMANN'S, v. 30, 2011; ^e ULLMANN'S, v. 06, 2011; ^f ULLMANN'S, v. 26, 2011.

* Índice de refração a 25°C.

2.4 Estudo de propriedades volumétricas, viscosimétricas e acústicas de sistemas contendo ésteres

Sastry e Valand (1997) determinaram a viscosidade de doze sistemas binários contendo metil acrilato, etil acrilato e butil acrilato + 1-heptanol, ou + 1-octanol, ou + 1-decanol, ou + 1-dodecanol, nas temperaturas de 298,15 K e 308,15 K. O desvio da viscosidade ($\Delta\eta$) foi calculado e correlacionado com um polinômio de Redlich-Kister. Os dados de $\Delta\eta$ foram negativos em toda faixa de composição e tornaram-se mais negativos com o aumento da cadeia carbônica do álcool. O aumento na temperatura proporcionou uma diminuição na magnitude de $\Delta\eta$.

Nikam, Mahale e Hasan (1998) estudaram a viscosidade e a densidade, a $T = (298,15; 303,15 \text{ e } 308,15) \text{ K}$, de soluções binárias de (acetato de etila + 1-pentanol, ou + 1-hexanol, ou

+ 3,5,5-trimetilhexan-1-ol, ou + 1-heptanol, ou + 1-octanol, ou + 1-decanol). A partir desses resultados, os valores do volume molar excesso (V_m^E) e desvio da viscosidade ($\Delta\eta$) foram calculados e correlacionados segundo um polinômio de Redlich-Kister. Os valores de $\Delta\eta$ foram negativos para toda a faixa de composição, enquanto os de V_m^E foram positivos, o que pode ser atribuído à predominância da quebra da estrutura dos álcoois quando a solução é formada.

Sastry et al. (1999) determinaram a viscosidade e a velocidade do som para 15 sistemas binários de ésteres (metil- ou etil- propanoato, ou + butanoato) + hidrocarbonetos (*n*-heptano, benzeno, clorobenzeno e 1,1,2,2-tetracloroetano) nas temperaturas de 308,15 K e 318,15 K. As viscosidades foram correlacionadas por diferentes equações, enquanto a velocidade do som foi correlacionada pela teoria do comprimento livre (LTC, em inglês) e pela teoria do fator de colisão (CFT, em inglês). A compressibilidade isentrópica excesso (κ_S^E) foi calculada, a partir da compressibilidade isentrópica ideal, a qual depende das frações volumétricas, dos volumes molares e das capacidades caloríficas dos componentes puros. Os resultados de κ_S^E foram correlacionados por uma equação de Redlich-Kister. Os sistemas compostos por éster + *n*-heptano apresentam valores positivos de κ_S^E , enquanto os demais sistemas apresentaram valores negativos. Isto pode ser indício da predominância de possíveis rupturas na estrutura do éster para o sistema contendo *n*-heptano e preponderância de interações específicas entre as diferentes espécies químicas presentes nos demais sistemas.

Segundo Fort e Moore (1965), κ_S^E apresenta valores positivos quando há rupturas na estrutura dos componentes presentes nos sistemas, e tendem a ficar menos positivos com o aumento das forças de interação entre os componentes.

Sastry et al. (1999) obtiveram dados de densidade e permissividade relativa de sistemas contendo ésteres (metil- ou etil- propanoato, ou + butanoato) + hidrocarbonetos (*n*-heptano, benzeno, clorobenzeno e 1,1,2,2-tetracloroetano) nas temperaturas de 308,15 K e 318,15 K. O volume molar excesso foi calculado a partir dos dados de densidade e correlacionado por um polinômio de Redlich-Kister. Os valores do V_m^E foram positivos para toda a faixa de composição e nas duas temperaturas estudadas para o sistema contendo *n*-heptano. Comparando com outros estudos contendo este hidrocarboneto com metil metacrilato (MMA) ou com etil metacrilato (EMA), observou-se valores mais baixos de V_m^E nos sistemas com ésteres acrílicos, indicando a existência de um melhor empacotamento e um elevado grau de alinhamento dos dipolos existentes.

Indraswati et al. (2001) determinaram a densidade e viscosidade de soluções binárias de quatro compostos flavorizantes (benzil acetato, 2-etilhexil acetato, benzaldeído, pentil acetato) com 1-butanol e 1-pentanol em toda faixa de composição, a quatro diferentes temperaturas $T = (293,15; 303,15; 313,15 \text{ e } 323,15)$ K e à pressão atmosférica. Os resultados experimentais foram usados para calcular o volume molar excesso e o desvio da viscosidade, os quais foram correlacionados usando uma equação de Redlich-Kister. Os autores justificaram os valores positivos de V_m^E como consequência da quebra das ligações de hidrogênio das moléculas dos álcoois pelo composto flavorizante. Os valores do V_m^E diminuíram com o aumento da temperatura. O desvio da viscosidade apresentou valores negativos, tornando-se menos negativos com a temperatura. Foi observado também que o tamanho da molécula de álcool influencia o comportamento do $\Delta\eta$, diminuindo de valor com o aumento da cadeia do álcool.

Romano et al. (2003) determinaram a densidade e viscosidade dos sistemas binários contendo {dimetil carbonato (DMC) + etanol, ou + 1-propanol, ou + 1-pentanol, ou + 1-octanol}, a $T = (288,15; 293,15; 303,15 \text{ e } 308,15)$ K e pressão atmosférica, em toda a faixa de composição. O volume molar excesso e o desvio da viscosidade foram calculados a partir desses resultados. Os autores determinaram também a entalpia molar excesso (H_m^E) a $T = 303,15$ K. Todas as grandezas excesso foram correlacionadas usando uma equação de Redlich-Kister. Os autores observaram que para uma dada temperatura, ambos os valores de H_m^E e V_m^E aumentaram com o aumento do número de átomos de carbono nas moléculas do álcool. Os valores positivos dessas grandezas indicam a preponderância de efeitos endotérmicos e expansivos associados à ruptura de interações intramoleculares em relação aos efeitos exotérmicos e as contrações volumétricas associadas a novas interações intermoleculares entre as diferentes espécies presentes na solução. Uma análise nos dados do desvio da viscosidade mostrou que para todos os sistemas estudados, os valores foram negativos para toda a faixa de composição e diminuíram em valores absolutos com a temperatura. O sinal do $\Delta\eta$ está de acordo com as conclusões de Fort e Moore (1962), que concluíram que tal comportamento está presente em sistemas onde forças de dispersão são predominantes.

Resa et al. (2004) apresentaram dados experimentais de densidade, índice de refração e velocidade do som de sistemas binários contendo isopropil acetato + (tolueno, etilbenzeno, *p*-xileno, mesitileno, isopropilbenzeno, butilbenzeno, isobutilbenzeno ou *t*-butilbenzeno) a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica. Esses resultados foram usados para calcular o desvio da

compressibilidade isentrópica, desvio do índice de refração e o volume molar excesso. Um polinômio do tipo Redlich-Kister foi utilizado para correlacionar essas grandezas. Os sistemas contendo tolueno, etilbenzeno, *p*-xileno e *t*-butilbenzeno exibiram valores negativos de V_m^E , enquanto o sistema contendo isopropilbenzeno apresentou uma tendência sigmoideal (com contração na região diluída de éster). Para os demais sistemas, os valores de V_m^E apresentaram valores positivos.

Resa et al. (2005) determinaram a velocidade do som, densidade e índice de refração, para dois sistemas binários (dietil carbonato + metanol, ou + vinil acetato), a 298,15 K e pressão atmosférica, em toda faixa de composição. As propriedades derivadas, a partir dos dados experimentais, foram calculadas e ajustadas utilizando um polinômio de Redlich-Kister. Foram analisados ainda os dados de equilíbrio líquido vapor (ELV) dos sistemas a $p = 101,3$ kPa. Os coeficientes de atividade foram então correlacionados usando os modelos de Margulles, Van Laar, UNIQUAC, NRTL e Wilson.

2.5 Estudos de grandezas excesso contendo dietil malonato

Monson, Otin e Losa (1981) estudaram a entalpia molar excesso para o sistema (dietil malonato + *n*-hexano) a 303,15 K. Os dados de H_m^E foram positivos em toda faixa de composição e correlacionados por uma equação polinomial de Redlich-Kister.

Baluja et al. (2005) determinaram a densidade, viscosidade, índice de refração e velocidade do som de soluções binárias contendo (dietil malonato + 1,4-dioxana, ou + dimetilformamida, ou + tetrahydrofurano, ou + hexano) a $T = 308,15$ K. Os resultados experimentais foram usados para calcular várias grandezas, dentre elas: a compressibilidade isentrópica, o volume molar excesso, a energia de Gibbs de ativação excesso e o desvio da viscosidade.

Oswal et al. (2005) determinaram a densidade, velocidade do som, compressibilidade isentrópica e viscosidade das soluções binárias de dietil malonato + tetraclorometano, ou + triclorometano, a $T = 303,15$ K. A partir dos dados experimentais foram calculadas as seguintes grandezas excesso: volume molar excesso (V_m^E), compressibilidade isentrópica excesso (κ_S^E), desvio da viscosidade ($\Delta\eta$) e energia de Gibbs de ativação excesso (ΔG_m^{E*}). O sistema contendo tetraclorometano apresentou valores negativos para κ_S^E , $\Delta\eta$ e ΔG_m^{E*} ,

enquanto V_m^E apresentou um comportamento sigmoidal. Para (dietil malonato + triclorometano), V_m^E , $\Delta\eta$ e ΔG_m^{E*} foram negativos enquanto κ_S^E foi positivo.

Wang, Gao e Yan (2010a) utilizaram um microcalorímetro para determinar a entalpia molar excesso de cinco sistemas binários (dietil malonato + 1-butanol, ou + 2-metil-1-propanol, ou + 1-pentanol, ou + *n*-heptano, ou + acetato de etila) a $T = (288,2; 298,2; 313,2; 328,2; 338,2; \text{ e } 348,2)$ K e pressão de $p = 101,3$ kPa. Os dados de H_m^E foram correlacionados por um polinômio de Redlich-Kister e usados para testar os modelos de composição local NRTL e UNIQUAC. Os valores positivos desta grandeza para as soluções contendo dietil malonato + (1-butanol, ou 2-metil-1-propanol ou 1-pentanol) indicam que os processos de misturas são endotérmicos e que o dietil malonato possivelmente não interage facilmente com os álcoois para formar ligações de hidrogênio intermoleculares. O sistema contendo *n*-heptano apresentou valores levemente positivos, enquanto que o sistema com acetato de etila, os valores negativos muito pequenos indicam que esse sistema comporta-se quase como uma solução ideal. Os autores observaram ainda um aumento nos valores de H_m^E com o aumento da temperatura e também com o aumento do número de átomos de carbonos na estrutura do álcool.

Wang, Gao e Yan (2010b) também determinaram a entalpia molar excesso para as soluções binárias contendo {dietil malonato (DEM) + metanol, ou + etanol, ou + 1-propanol, ou + 2-propanol} a $T = (288,2; 298,2; 313,2 \text{ e } 328,2)$ K e pressão $p = 101,3$ kPa. Todos os sistemas apresentaram valores de H_m^E positivos. Os autores concluíram que o aumento de H_m^E com a temperatura pode ser resultado da redução de ligações de hidrogênio entre o DEM e o álcool presente na solução.

Rathman, Mohite e Kumar (2012) determinaram a densidade, viscosidade e índice de refração de soluções binárias contendo dietil malonato com cetonas (acetofenona, ciclopentanona, ciclohexanona e 3-pentanona) a $T = (303,15; 308,15 \text{ e } 313,15)$ K e em toda faixa de composição. O volume molar excesso, o desvio da viscosidade, a energia de Gibbs de ativação excesso e o desvio da refração molar foram calculados, a partir dos dados experimentais, e ajustados através de uma equação polinomial de Redlich-Kister. Os valores de V_m^E foram positivos para os sistemas contendo acetofenona e ciclopentanona e negativo para o sistema contendo 3-pentanona. Para o sistema com ciclohexanona, V_m^E apresentou um comportamento sigmoidal, com valores negativos a baixas concentrações do éster e positivos na região concentrada. Os valores do $\Delta\eta$ foram positivos para os primeiros sistemas contendo

acetofenona e ciclopentanona, e negativos para os demais. Os valores de $\Delta\eta$ aumentaram com o aumento da temperatura para o sistema contendo 3-pentanona e diminuíram para os outros sistemas. Para os sistemas (DEM + acetofenona, ou + ciclopentanona, ou + 3-pentanona), os valores de G_m^E foram positivos em toda faixa de concentração, enquanto o sistema contendo ciclohexanona apresentou valores negativos.

2.6 Estudos abrangendo grandezas excesso e análise espectroscópica

Zhang et al. (2008) estudaram a densidade e o volume molar excesso do sistema etileno glicol (EG) + água a $T = (308,15; 313,15; 318,15; 323,15)$ K. Os valores do V_m^E foram negativos em toda faixa de concentração e em todas as temperaturas estudadas. Espectros infravermelho (FT-IR) e ultravioleta (UV) foram determinados para várias concentrações de EG com o objetivo de verificar as possíveis ligações de hidrogênio entre as diferentes espécies presentes nas soluções. As mudanças de frequência no espectro FT-IR e nas bandas de absorção UV foram interpretadas como formação de ligações de hidrogênio entre as moléculas de água com os grupamentos hidroxila do EG. Os espectros apontaram a possível formação de um anel hexatômico entre um grupamento hidroxila da molécula de álcool e duas moléculas de água no sistema álcool-água.

Kinart, Kinart e Maj (2008) realizaram experimentos de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN-H) para soluções binárias de (sulfolano + etileno glicol, ou + dietileno glicol, ou + trietileno glicol, ou + tetraetileno glicol), em toda faixa de composição, a $T = 303,15$ K e à pressão atmosférica. Os dados experimentais foram utilizados para calcular o desvio do deslocamento químico através do princípio da adição e o resultado foi correlacionado através de um polinômio de Redlich-Kister. Todos os sistemas apresentaram um comportamento sigmoide, sugerindo um rompimento das estruturas autoassociativas dos glicóis com a adição de sulfolano.

Mehta et al. (2009) determinaram a densidade, velocidade do som e viscosidade dos sistemas binários de *n*-metil-2-pirrolidona com isômeros do butanodiol (1,2-butanodiol, 1,3-butanodiol, 1,4-butanodiol e 2,3-butanodiol), em toda faixa de composição, a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica. Os autores também realizaram estudos espectroscópicos com espectros FT-IR e RMN à temperatura ambiente. Os resultados experimentais foram usados para calcular o volume molar excesso, a compressibilidade isentrópica excesso, o desvio da viscosidade e a energia de Gibbs de ativação excesso, os quais foram correlacionados usando

uma equação de Redlich-Kister. Os valores do V_m^E foram negativos para os sistemas contendo 1,2-butanodiol e 1,4-butanodiol, enquanto para os demais sistemas o comportamento da curva foi sigmoide. Os autores observaram que os espectros de FT-IR apresentaram deslocamentos de banda em números de onda equivalentes ao grupamento hidroxila do butanodiol e ao grupamento $-CO$ do outro composto, indicando interações entre as diferentes moléculas presentes nas soluções. Os deslocamentos químicos excesso (δ^E) foram calculados do mesmo modo que as grandezas excesso e ajustados pelo mesmo polinômio. Comparações entre as medidas de RMN e do volume molar excesso indicam que os valores máximos e mínimos de δ^E e V_m^E estão posicionados aproximadamente na mesma fração molar.

Visak et al. (2011) determinou a densidade de sistemas binários contendo (piridina ou nicotina) em polietileno glicol (PEG 200 ou PEG 400) a diferentes temperaturas $\{T = (288,15 \text{ e } 333,15) \text{ K}\}$. Os dados foram utilizados para calcular o volume molar excesso o qual foi correlacionado através de polinômio de Redlich-Kister. V_m^E foi negativo para todos os sistemas estudados, porém, tornou-se mais negativo com a temperatura para os sistemas com piridina, ocorrendo efeito oposto para os sistemas com nicotina. Segundo os autores, os resultados sugerem a existência de uma forte interação entre os componentes. Os estudos espectroscópicos de infravermelho realizados mostraram que, para ambos os polímeros, a posição da banda de deformação axial de O-H (máxima absorção em $\sim 3360 \text{ cm}^{-1}$) dos grupamentos hidroxila terminais está relacionada as ligações de hidrogênio presentes.

Chaudhary et al. (2012) determinaram as propriedades termofísicas (densidade, velocidade do som e condutividade específica) do líquido iônico (1-butil-3-metilimidazólio hexafluorofosfato) e de suas soluções binárias com Triton X-45 e Triton X-100, em toda faixa de composições e a $T = (293,15-323,15) \text{ K}$. O volume molar excesso, desvio da compressibilidade isentrópica, volume parcial molar excesso, desvio da compressibilidade isentrópica parcial e desvio da condutividade específica foram calculados a partir dos resultados experimentais. Todas essas grandezas foram negativas. Os resultados experimentais das grandezas excesso sugerem fortes interações entre as diferentes espécies presentes nas soluções. Um estudo espectroscópico de FT-IR e também de ressonância magnética nuclear (RMN) indicaram possíveis interações entre o grupamento $=C-H$ dos três componentes com o grupamento $>C=C$ do líquido iônico.

Kumar, Ashokan e Askar Ali (2013) determinaram dados de velocidade do som, densidade, viscosidade dinâmica de sistemas ternários contendo {fenol, três aldeídos aromáticos distintos (benzaldeído, cinamaldeído e salicilaldeído) e *n*-hexano}, a $T = 303,15 \text{ K}$

e à pressão atmosférica. Os valores das grandezas excesso calculados a partir dessas medidas foram negativos sugerindo fortes interações intermoleculares. Os resultados experimentais dos espectros ultravioletas visíveis realizados para os três sistemas mostraram que há um deslocamento na frequência de absorção comparando o espectro do elemento puro (fenol) com os espectros das soluções.

Seguindo a mesma linha de pesquisa, Santhi et al. (2013) realizaram o estudo ultrassônico e espectroscópico para sistemas ternários contendo {aldeídos aromáticos (benzaldeído, cinamaldeído e salicilaldeído), anilina e *n*-hexano}, a $T = 303,15\text{K}$ e pressão atmosférica. Devido à polaridade da anilina, o complexo formado entre os componentes presentes nas soluções absorve em um comprimento de onda menor do que aqueles dos componentes puros.

Spasojevic et al. (2014) determinaram dados de densidade, índice de refração e viscosidade de sistemas contendo {1-amino-2-propanol (MIPA) + 1-butanol, ou + 2-butanol}, em toda faixa de composição e a diferentes temperaturas ($T = 288,15 - 333,15\text{ K}$). O volume molar excesso, desvio do índice de refração, desvio da viscosidade e energia de Gibbs de ativação excesso foram calculados a partir dos dados experimentais e correlacionados através de um polinômio de Redlich-Kister. Os valores das grandezas excesso foram negativos, com exceção do V_m^E para a mistura (MIPA + 2-butanol), que apresentou um comportamento sigmoidal. Os valores negativos da G_m^E sugerem a predominância de forças de dispersão, enquanto os valores de V_m^E apontam indícios da presença de interações químicas entre as diferentes moléculas presentes nas soluções. Os estudos de espectroscopia de infravermelho (FT-IR) mostraram que não houve deslocamento da banda de $-\text{OH}$ o que comprovou a inexistência de novas ligações intermoleculares entre as diferentes moléculas através de ligações de hidrogênio.

Bhalodia e Sharma (2014) determinaram a densidade e o índice de refração de soluções binárias de (β -pineno com orto, ou + meta, ou + *p*-cresol), em toda a faixa de composição, a $T = (303,15; 308,15 \text{ e } 313,15)\text{ K}$. A partir desses dados experimentais, foram calculados o volume molar excesso, o desvio do índice de refração e o desvio da refração molar. Essas grandezas foram correlacionadas através de uma equação de Redlich-Kister. Os valores do V_m^E foram positivos para os três sistemas, enquanto as outras duas grandezas apresentaram valores negativos. Um estudo espectroscópico de FT-IR também foi realizado e os resultados mostraram um deslocamento da banda do grupamento $-\text{OH}$ indicando interações específicas entre β -pineno e os cresóis.

FORMALISMO TERMODINÂMICO

A seguir será apresentado o formalismo termodinâmico de acordo com o trabalho de Tôres (1998).

3.1 Funções excesso

Funções excesso são grandezas termodinâmicas de soluções as quais descrevem o excesso (positivo ou negativo) de uma função termodinâmica quando comparadas a uma solução ideal (ou diluída ideal) nas mesmas condições de temperatura, pressão e composição. Desta forma, para uma solução ideal todas as funções excesso são nulas.

Este termo foi introduzido por Scatchard e Hemer (1935), em referência à energia livre de mistura, embora o conceito tenha sido anteriormente utilizado por Scatchard (1931). Scatchard (1937) e Scatchard e Raymond (1938) estabeleceram a definição de função excesso como descrita acima.

O conceito de função excesso é aplicável às propriedades extensivas e intensivas, molares e parciais molares de soluções.

Seja M uma grandeza extensiva de um sistema com m componentes, a função excesso é definida pela equação (1).

$$M^E(T, P, n_1 \dots) = M(T, P, n_1 \dots) - M^{\text{Ideal}}(T, P, n_1 \dots) \quad (1)$$

Ex.: V^E , H^E , G^E .

Do mesmo modo, a equação (2) estende a definição para as grandezas molares.

$$M_m^E(T, P, x_1 \dots) = M_m(T, P, x_1 \dots) - M_m^{\text{Ideal}}(T, P, x_1 \dots) \quad (2)$$

Ex.: V_m^E , H_m^E , G_m^E .

Analogamente, a equação (3) define as grandezas parciais molares excesso.

$$\bar{M}_i^E(T, P, x_1 \dots) = \bar{M}_i(T, P, x_1 \dots) - \bar{M}_i^{\text{Ideal}}(T, P, x_1 \dots) \quad (3)$$

O formalismo termodinâmico apresenta para grande parte das grandezas excesso, relações análogas às funções termodinâmicas usuais. Alguns exemplos estão citados nas equações (4), (5), (6), (7) e (8) a seguir.

$$H = U + PV \quad H^E = U^E + PV^E \quad (4)$$

$$G = H - TS \quad G^E = H^E - TS^E \quad (5)$$

$$A = U - TS \qquad A^E = U^E - TS^E \qquad (6)$$

$$C_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{P,x} \qquad C_P^E = \left(\frac{\partial H^E}{\partial T} \right)_{P,x} \qquad (7)$$

$$\left[\frac{\partial \left(\frac{\mu_i}{T} \right)}{\partial T} \right]_{P,x} = - \frac{\bar{H}_i}{T^2} \qquad \left[\frac{\partial \left(\frac{\mu_i^E}{T} \right)}{\partial T} \right]_{P,x} = - \frac{\bar{H}_i^E}{T^2} \qquad (8)$$

A analogia em termos de função excesso aplicada para as propriedades extensivas não é aplicável para algumas propriedades intensivas. Um exemplo pode ser observado para o coeficiente de expansão térmica (β), cuja definição é dada pela equação (9).

$$\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,x} \qquad (9)$$

Na sua forma ideal:

$$\beta^{\text{Ideal}} = \frac{1}{V^{\text{Ideal}}} \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} \qquad (10)$$

Aplicando a definição de função excesso, tem-se:

$$\beta^E = \beta - \beta^{\text{Ideal}} \qquad (11)$$

Logo,

$$\beta^E = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,x} - \frac{1}{V^{\text{Ideal}}} \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} \qquad (12)$$

ou,

$$\beta^E = \frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,x} - \frac{V}{V^{\text{Ideal}}} \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} \right] \qquad (13)$$

Por definição:

$$V = V^E + V^{\text{Ideal}} \qquad (14)$$

Substituindo a equação anterior na equação (13), obtém-se:

$$\beta^E = \frac{1}{V} \left\{ \left[\frac{\partial (V^E + V^{\text{Ideal}})}{\partial T} \right]_{P,x} - \frac{V^E + V^{\text{Ideal}}}{V^{\text{Ideal}}} \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} \right\} \qquad (15)$$

$$\beta^E = \frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial V^E}{\partial T} \right)_{P,x} + \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} - \frac{V^E}{V^{\text{Ideal}}} \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} - \left(\frac{\partial V^{\text{Ideal}}}{\partial T} \right)_{P,x} \right] \qquad (16)$$

Conclui-se que:

$$\beta^E = \frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial V^E}{\partial T} \right)_{P,x} - V^E \beta^{\text{Ideal}} \right] \neq \frac{1}{V^E} \left(\frac{\partial V^E}{\partial T} \right)_{P,x} \quad (17)$$

3.1.1 Volume molar excesso

O volume excesso foi expresso na equação (14) e a aplicação para a sua correspondente molar para uma solução binária constituída pelos componentes 1 e 2, resulta em:

$$V_m^E = V_m - x_1 V_1^o - x_2 V_2^o. \quad (18)$$

Reescrevendo a equação acima em termos de densidade, obtém-se:

$$V_m^E = \frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho} - x_1 \frac{M_1}{\rho_1} - x_2 \frac{M_2}{\rho_2} \quad (19)$$

ou,

$$V_m^E = x_1 M_1 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_1} \right) + x_2 M_2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_2} \right), \quad (20)$$

onde ρ é a densidade da solução, e x_1 , x_2 , M_1 , M_2 , ρ_1 e ρ_2 representam a fração molar, a massa molar e a densidade dos componentes puros 1 e 2, respectivamente.

3.1.2 Desvio da compressibilidade isentrópica

A compressibilidade consiste na capacidade de mudança de volume de um fluido quando sujeito a uma variação de pressão. Desta forma, para um processo a entropia constante, a compressibilidade isentrópica (κ) pode ser calculada pela equação (21).

$$\kappa = -V^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_s. \quad (21)$$

Um processo de compressão térmica a entropia constante é realizado quando ocorre compressão extremamente rápida. Por este motivo é possível calcular a compressibilidade isentrópica fazendo uso da velocidade do som. Em termos de densidade e velocidade do som, a equação (21) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\kappa = \frac{1}{\rho u^2}, \quad (22)$$

onde ρ e u são a densidade e a velocidade do som, respectivamente.

O desvio da compressibilidade isentrópica ($\Delta\kappa$) pode ser calculado através da equação (23).

$$\Delta\kappa = \kappa - (x_1\kappa_1 + x_2\kappa_2) , \quad (23)$$

sendo κ a compressibilidade isentrópica da solução, e κ_1 e κ_2 as compressibilidades isentrópicas dos componentes puros 1 e 2, respectivamente.

3.1.3 Desvio da viscosidade

O desvio da viscosidade ($\Delta\eta$) foi calculado de acordo com a equação (24).

$$\Delta\eta = \eta - (x_1\eta_1 + x_2\eta_2) , \quad (24)$$

onde η é a viscosidade da mistura e η_1 e η_2 são, respectivamente, as viscosidades dos componentes puros 1 e 2.

3.2 Volumes parciais molares

O postulado de estado diz que, se especificarmos duas propriedades intensivas para qualquer substância pura, fixamos o estado de um sistema com uma única fase. Para propriedades extensivas, faz-se necessário especificar adicionalmente o número de mols ou uma grandeza análoga que especifique o tamanho do sistema (KORETSKY, 2007).

Segundo Koretsky, as grandezas parciais molares podem ser vistas como a contribuição específica de dada substância para a propriedade da solução.

O formalismo termodinâmico permite o cálculo dessas grandezas a partir de grandezas molares aparentes ou a partir de grandezas molares de solução.

Define-se o volume molar de uma solução binária através da equação (25).

$$V_m = \frac{V}{n_1 + n_2} , \quad (25)$$

onde V é o volume da solução e, n_1 e n_2 são os números de mols dos componentes 1 e 2, respectivamente.

O volume parcial molar do componente 1 em uma solução binária, constituída dos componentes 1 e 2 pode ser expresso como (GUGGENHEIM, 1967):

$$\bar{V}_1 = \left(\frac{\partial V}{\partial n_1} \right)_{T,P,n_j \neq 1} \quad (26)$$

Pela definição acima, uma propriedade parcial molar sempre é definida a temperatura e pressão constantes. Também é constante o número de mols dos outros j componentes presentes na solução (26).

Derivando-se a equação (25) em relação ao componente 1, obtém-se:

$$\left(\frac{\partial V_m}{\partial n_1}\right)_{T,P,n_2} = \frac{(n_1 + n_2) \left(\frac{\partial V}{\partial n_1}\right)_{T,P,n_2} - V}{(n_1 + n_2)^2}. \quad (27)$$

Contudo, também pela equação (25):

$$V = V_m (n_1 + n_2). \quad (28)$$

Logo,

$$\left(\frac{\partial V_m}{\partial n_1}\right)_{T,P,n_2} = \frac{\bar{V}_1}{(n_1 + n_2)} - \frac{V_m}{(n_1 + n_2)} \quad (29)$$

A fração molar é definida pela equação a seguir.

$$x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad (30)$$

Assim,

$$\left(\frac{\partial x_1}{\partial n_1}\right)_{T,P,n_2} = \frac{n_2}{(n_1 + n_2)^2} \quad (31)$$

Aplicando-se a técnica de derivação em cadeia, a equação (29) pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial V_m}{\partial x_1}\right)_{P,T} \left(\frac{\partial x_1}{\partial n_1}\right)_{T,P,n_2} = \frac{\bar{V}_1}{(n_1 + n_2)} - \frac{V_m}{(n_1 + n_2)} = \left(\frac{\partial V_m}{\partial x_1}\right)_{T,P} \frac{n_2}{(n_1 + n_2)^2} \quad (32)$$

Multiplicando a equação (32) por $(n_1 + n_2)$, a equação (33) é obtida.

$$\bar{V}_1 - V_m = \left(\frac{\partial V_m}{\partial x_1}\right)_{T,P} \left(\frac{n_2}{n_1 + n_2}\right) \quad (33)$$

Portanto, é possível expressar o volume parcial molar para o componente 1 pela equação seguinte.

$$\bar{V}_1 = V_m + x_2 \left(\frac{\partial V_m}{\partial x_1}\right)_{T,P} \quad (34)$$

Analogamente, para o componente 2 o volume parcial molar é expresso por:

$$\bar{V}_2 = V_m + x_1 \left(\frac{\partial V_m}{\partial x_2} \right)_{T,P} \quad (35)$$

3.2.1 Volumes parciais molares excesso

Os volumes parciais molares excesso representam a diferença entre o volume parcial molar e o volume molar do componente puro, portanto, para os componentes 1 e 2:

$$\bar{V}_1^E = \bar{V}_1 - V_1^o \quad (36)$$

e

$$\bar{V}_2^E = \bar{V}_2 - V_2^o \quad (37)$$

onde V_1^o e V_2^o são os volumes molares dos componentes puros 1 e 2, respectivamente.

Estas grandezas, porém, podem ser calculadas a partir das equações (34) e (35), em termos de função excesso, sendo representadas, respectivamente, pelas equações (38) e (39).

$$\bar{V}_1^E = V_m^E + (1 - x_1) \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1} \right)_{T,P} \quad (38)$$

$$\bar{V}_2^E = V_m^E + (1 - x_2) \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} \right)_{T,P} \quad (39)$$

Combinando as equações (36), (37), (38) e (39), obtém-se uma equação, em termos da fração molar do componente 2 (x_2), para o volume parcial molar de cada componente da mistura.

$$\bar{V}_1 = V_m^E + V_1^o - x_2 \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} \right)_{T,P} \quad (40)$$

$$\bar{V}_2 = V_m^E + V_2^o + (1 - x_2) \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} \right)_{T,P} \quad (41)$$

3.3 Volume molar e parcial molar excesso em soluções diluídas

É de grande interesse o estudo do volume molar e parcial molar excesso em soluções diluídas, uma vez que nessas soluções as moléculas do soluto estão essencialmente isoladas umas das outras e, portanto, as principais interações presentes são soluto-solvente e solvente-

solvente. Os valores das funções parciais molares excesso à diluição infinita são uma importante fonte de informação acerca das possíveis interações soluto-solvente.

3.3.1 Volume molar aparente

O volume molar aparente (V_ϕ) é uma grandeza relacionada ao volume parcial molar. Apesar da pouca utilidade termodinâmica, essa grandeza pode ser utilizada como alternativa para determinar o volume parcial molar.

Pelo teorema de Euler, sabe-se que:

$$M = \sum_{i=1}^{i=m} n_i \bar{M}_i, \quad (42)$$

onde M é uma grandeza extensiva e \bar{M}_i a grandeza parcial molar correspondente.

A relação entre M e M_{ϕ_j} , a grandeza molar aparente do componente j , (ACREE, 1984) é dada por:

$$M = n_j M_{\phi_j} + \sum_{i=1; i \neq j}^{i=m} n_i M_i^o, \quad (43)$$

onde M_i^o é a grandeza molar do componente puro i .

Sendo assim,

$$M_{\phi_j} = \frac{M - \sum_{i=1; i \neq j}^{i=m} n_i M_i^o}{n_j}. \quad (44)$$

Derivando-se a equação (44) com respeito a n_j , a seguinte relação entre a grandeza parcial molar \bar{M}_j e a grandeza molar aparente M_{ϕ_j} , é obtida e descrita abaixo.

$$\left(\frac{\partial M}{\partial n_j} \right)_{T,P,n_i \neq n_j} = \bar{M}_j = M_{\phi_j} + n_j \left(\frac{\partial M_{\phi_j}}{\partial n_j} \right)_{T,P,n_i \neq n_j} \quad (45)$$

Percebe-se então que,

$$\lim_{n_j \rightarrow 0} M_{\phi_j} = \bar{M}_j. \quad (46)$$

Conclui-se que, à diluição infinita, a grandeza parcial molar e a grandeza molar aparente são idênticas.

É possível escrever a relação existente entre uma grandeza molar aparente e uma grandeza molar excesso. Tomando-se como exemplo o volume molar aparente de uma solução binária constituída pelos componentes 1 e 2, dada a equação (44), tem-se:

$$V_{\phi_1} = \frac{V_m - x_2 V_2^o}{x_1}, \quad (47)$$

onde V_m é o volume molar da solução, x_1 a fração molar do componente 1, x_2 a fração molar do componente 2, e V_2^o o volume molar do componente 2 puro.

De forma semelhante, obtém-se para o componente 2:

$$V_{\phi_2} = \frac{V_m - x_1 V_1^o}{x_2} \quad (48)$$

De acordo com a equação (42):

$$V_m = x_1 \bar{V}_1 + x_2 \bar{V}_2. \quad (49)$$

A substituição da equação (49) na equação (47), leva à obtenção da equação (50).

$$V_{\phi_1} = \frac{x_1 \bar{V}_1 + x_2 \bar{V}_2 - x_2 V_2^o}{x_1} \quad (50)$$

Entretanto, fazendo uso da equação (14), a equação (51) é obtida.

$$V_m^E = x_1 \bar{V}_1 + x_2 \bar{V}_2 - x_1 V_1^o - x_2 V_2^o \quad (51)$$

Combinando-se a equação acima com a equação (50), obtém-se:

$$V_{\phi_1} = \frac{V_m^E + x_1 V_1^o}{x_1} \quad (52)$$

Analogamente, para o componente 2 é possível obter:

$$V_{\phi_2} = \frac{V_m^E + x_2 V_2^o}{x_2} \quad (53)$$

MATERIAIS E MÉTODOS

Nesta seção serão apresentadas as metodologias e procedimentos experimentais realizados, bem como os reagentes utilizados no presente estudo. As análises foram realizadas no Centro de Laboratórios Químicos (CLQ) do Centro Universitário da FEI em São Bernardo do Campo, com exceção da ressonância magnética nuclear (RMN) que foi efetuada no Instituto de Química da UNESP, campus de Araraquara.

4.1 Metodologia

As densidades e velocidades de propagação do som dos componentes puros e das soluções binárias foram determinadas utilizando-se um analisador de densidade e velocidade do som fabricado pela Anton Paar (Modelo DSA 5000 M), o qual foi devidamente calibrado com água e ar. Este equipamento apresenta uma resolução de $1 \times 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, compreendendo uma faixa de densidade de $0\text{-}3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. As medidas de velocidade do som apresentam uma resolução de $0,01 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, em uma faixa entre $1000\text{-}2000 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. A determinação da densidade e velocidade do som é realizada em um único ciclo. A presença de dois termopares Pt 100 juntamente com dispositivos Peltier fornece uma termostatização extremamente precisa das amostras. A faixa de temperatura, sem a necessidade de um banho externo, varia entre 0 e 70°C , com resolução de $0,001^\circ\text{C}$.

As viscosidades dos componentes puros e das soluções foram determinadas fazendo uso de um viscosímetro Stabinger fabricado pela Anton Paar (Modelo SVM 3000/ G2), o qual foi calibrado com os óleos padrões estabelecidos pelo fabricante: S3, N7.5, N26 e N415. Conforme informado pela Anton Paar, o equipamento trabalha em uma faixa de viscosidade dinâmica de $0,2\text{-}10.000 \text{ mPa} \cdot \text{s}$, com uma reprodutibilidade de $0,35\%$ dos valores experimentais. As medidas de viscosidade apresentam uma resolução de $1 \times 10^{-4} \text{ mPa} \cdot \text{s}$. A temperatura na célula de medição é controlada através de um dispositivo Peltier, permitindo também a realização das medidas sem a necessidade de banho externo. A faixa de temperatura varia entre 15 e 105°C , com resolução de $0,02^\circ\text{C}$.

Foram realizadas medidas para testar as metodologias acima citadas com o sistema teste (acetonitrila + etanol), e os resultados foram comparados com estudos disponíveis na literatura. Os resultados obtidos estão apresentados no Apêndice C.

Os espectros FT-IR das soluções binárias e dos componentes puros foram obtidos através do uso do espectrômetro da Thermo Scientific (Modelo Nicolet 6700), que abrange

uma faixa de número de onda entre 4000-400 cm^{-1} . O aparelho apresenta resolução óptica de 0,09 cm^{-1} e precisão no número de onda equivalente a 0,01 cm^{-1} . As análises foram realizadas à temperatura ambiente.

Foram gerados os espectros RMN de hidrogênio-1 e carbono-13 para os componentes puros e as soluções binárias adotando-se um espectrômetro da Burker (Modelo Avance III 600 HD), cuja frequência de operação e campo magnético aplicado são, respectivamente, 600 MHz e 14,1 Tesla. A sonda necessária para tais análises é a TCI CRYO H-C/N-D05-Z, que opera na faixa de 0 a 80°C. Todos os experimentos foram realizados a 22°C, sendo esta temperatura fixa e continuamente corrigida. O espectrômetro é equipado com o sistema Samplexpress, possuindo trocador automático para 60 amostras.

4.2 Reagentes

De acordo com as especificações descritas nos rótulos das embalagens, os reagentes usados neste trabalho apresentavam os seguintes teores de pureza: dietil malonato (Sigma Aldrich, pureza > 99,0 %), metanol (Merck, pureza > 99,0 %), etanol (Merck, pureza > 99,0 %), 1-propanol (Merck, pureza > 99,5 %), 1-butanol (Merck, pureza > 99,5 %), 1-pentanol (Sigma Aldrich, pureza > 99,0 %).

As purezas foram comprovadas através de análise qualitativa em cromatografia gasosa realizada pelo Centro de Pesquisas Químicas (CPQ), apresentando as seguintes porcentagens de área: dietil malonato (99,67 %), metanol (100 %), etanol (100 %), 1-propanol (99,92 %), 1-butanol (99,86 %), 1-pentanol (99,86 %). Sendo assim, todos os reagentes foram utilizados sem purificações adicionais. Os cromatogramas encontram-se no Apêndice A.

Um comparativo entre os valores experimentais de densidade, velocidade do som e viscosidade dos componentes puros e os valores disponíveis na literatura pode ser visto na próxima seção.

4.3 Equipamentos

O densímetro de oscilação mecânica DSA 5000 M e o viscosímetro rotacional SVM 3000/ G2 estão localizados no Laboratório de Combustíveis (LACOM), sala G0-16 do CLQ. O espectrômetro de FT-IR Nicolet 6700 encontra-se em uma sala anexa ao laboratório citado. O espectrômetro de RMN Avance III 600 HD situa-se no Laboratório II do Instituto de Química da UNESP e é operado pelo Dr. Nivaldo Boralle.

4.3.1 DSA 5000 M

O DSA 5000 M determina simultaneamente duas propriedades físicas independentes usando uma mesma amostra. O equipamento, ilustrado na figura 2, é equipado com uma célula de densidade e uma célula de velocidade do som, combinando o princípio de um tubo oscilador e uma medida de velocidade do som altamente precisa. Ambas as células são controladas termicamente por um dispositivo Peltier, que permite uma rápida variação das medidas com a temperatura.

O princípio de funcionamento de um tubo de oscilação mecânica consiste na introdução de uma amostra em um tubo de vidro de boro silicato em forma de U que é eletronicamente excitado para vibrar em sua frequência característica. Essa frequência muda de acordo com a densidade da amostra. Por meio da determinação precisa da frequência característica, é possível determinar o período de oscilação do tubo oscilador e a partir desses valores, calcula-se a densidade através de uma equação matemática.

A célula de medição da velocidade do som é delimitada por um transmissor ultrassônico em uma extremidade e por um receptor na outra. O primeiro envia pela amostra ondas sonoras de período conhecido. Desta forma, a velocidade do som pode ser calculada através da determinação do período das ondas sonoras recebidas, levando em consideração a distância entre o transmissor e o receptor.



Figura 2 - Densímetro DSA 5000 M – Anton Paar.
Fonte: Autor.

4.3.2 SVM 3000/ G2

O SVM 3000/ G2 (figura 3) é um viscosímetro rotacional de geometria cilíndrica. A medição com tal viscosímetro é baseada na medição de torque e rotação. No interior do SVM 3000/ G2, um ímã em rotação cria um campo de corrente induzida com um momento de frenagem exato dependente da rotação. O torque da corrente induzida é medido com uma resolução extremamente alta. A célula de medição contém um tubo que rotaciona a uma velocidade constante. O tubo é preenchido pela amostra e nela flutua um rotor magnético que é centralizado mediante forças centrífugas. As forças viscosas do fluido em análise acionam o rotor, levando a uma velocidade de equilíbrio do mesmo, que é registrada como uma medida exata da viscosidade. O rotor flutuando livremente não querer nenhum rolamento, portanto, não há fricção, o que resulta na eliminação das influências do atrito externo.



Figura 3 - Viscosímetro SVM 3000/ G2 – Anton Paar.
Fonte: Autor.

4.3.3 Thermo Scientific Nicolet 6700 FT-IR

O Nicolet 6700 FT-IR é um espectrômetro de infravermelho com transformada de Fourier. A radiação contendo todos os comprimentos de onda de interesse ($4000-400\text{ cm}^{-1}$) é

separada em dois feixes, sendo que um dos espelhos permanece fixo (espelho A) e o outro se move (espelho móvel B), conforme pode ser visto na figura 4.

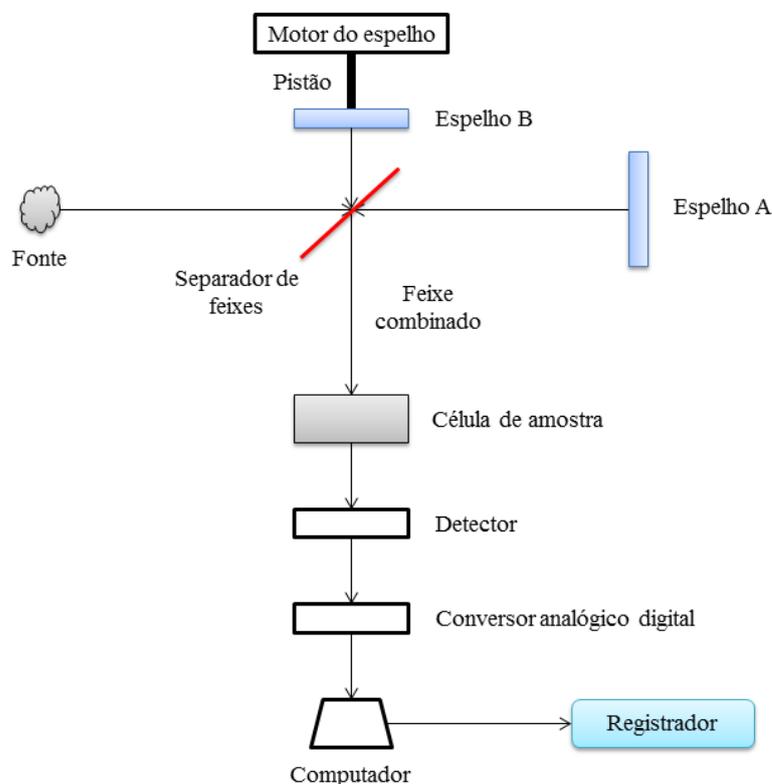


Figura 4 - Esquema de espectrômetro FT-IR.

Fonte: Autor “adaptado de” SILVERSTEIN; WEBSTER; KIEMLE, 2006, p. 76.

Segundo Silverstein, Webster e Kiemle (2006), fazendo-se variar as distâncias percorridas pelos dois feixes, obtêm-se uma sequência de interferências construtivas e destrutivas e, conseqüentemente, variações na intensidade de radiação recebida pelo detector, o chamado interferograma. Uma transformada de Fourier converte o interferograma obtido, que está sob domínio do tempo, para a forma mais familiar de um interferograma no domínio de frequências. A variação contínua do comprimento do pistão ajusta a posição do espelho B e faz variar a distância percorrida pelo feixe B. A transformada de Fourier em posições sucessivas do espelho dá origem ao espectro completo de infravermelho (IR).

O funcionamento consiste, portanto, na passagem de radiação através de uma solução, submetendo-a a uma faixa larga de energia. Em princípio, a análise dessa faixa de radiação que passa pela amostra dá origem ao espectro completo de IR (SILVERSTEIN; WEBSTER; KIEMLE, 2006).

Uma vantagem no uso de transformada de Fourier, além do ganho na resolução, é a conversão analógica para digital dos dados, facilitando a sua manipulação. O software OMNIC para os modelos de Nicolet FT-IR proporciona uma interface compatível com Windows[®] para obtenção e processamento de dados. A figura 5 abaixo mostra o sistema utilizado.



Figura 5 - Espectrômetro Nicolet 6700 - Thermo Scientific – acompanhado do software OMNIC.

^a Cristal onde as amostras são gotejadas.

Fonte: Autor.

4.3.4 Espectrômetro Avance III 600 HD

A espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) é outra forma de espectroscopia de absorção, como a espectroscopia de infravermelho. Vários núcleos podem ser estudados por esta técnica, mas os mais comumente disponíveis são hidrogênio e carbono, oferecendo informações acerca do número de átomos magneticamente distintos do isótopo estudado.

Núcleos atômicos que possuam massa ímpar, número atômico ímpar, ou ambos possuem momento angular de spin, ou seja, comportam-se como se estivessem girando. Os núcleos mais comuns que possuem spin são ^1_1H , ^2_1H , $^{13}_6\text{C}$, $^{14}_7\text{N}$, $^{17}_8\text{O}$ e $^{19}_9\text{F}$. Para cada núcleo com spin, o número de estados de spin permitidos que podem ser adotados é quantizado e determinado por seu número quântico de spin nuclear I (PAVIA et al., 2010).

Segundo Pavia et al. (2010), estados de spin não têm a mesma energia em um campo magnético aplicado, e qualquer carga que se desloca gera um campo magnético próprio. Sendo assim, o núcleo tem um momento magnético gerado por sua carga e spin. Tomando como base o núcleo de hidrogênio, que pode ter um spin no sentido horário ou anti horário, em um campo magnético aplicado, todos os núcleos têm seus momentos magnéticos alinhados com o campo ou opostos a ele. Deste modo, o fenômeno de ressonância magnética nuclear ocorre quando os núcleos alinhados com um campo aplicado são induzidos a absorver energia e mudar a orientação de spin em relação ao campo.

Para um próton (o núcleo de um átomo de hidrogênio), se o campo magnético aplicado for aproximadamente 1,41 Tesla, a diferença de energia entre os dois estados de spin será em torno de $2,39 \times 10^{-5}$ kJ/mol. Uma radiação com frequência de aproximadamente 60MHz corresponde a essa diferença de energia. Outros núcleos têm diferenças de energia entre os estados de spin maiores ou menores que os núcleos de hidrogênio, como pode ser visto na tabela 2.

Tabela 2 - Frequências e intensidades de campos em que núcleos de ^1H e ^{13}C têm suas ressonâncias nucleares.

Isótopo	Abundância natural (%)	Intensidade do campo magnético (Tesla)	Frequência (MHz)
^1H	99,98	1,41	60,0
		4,70	200,0
		7,05	300,0
^{13}C	1,108	1,41	15,1
		4,70	50,0
		7,05	75,0

Fonte: Autor “adaptado de” Pavia et al., 2010, p. 105.

O Avance III 600 HD (vide figura 6) é um espectrômetro de ressonância magnética nuclear, cuja frequência de operação é 600 MHz e campo magnético aplicado de 14,1 Tesla de intensidade. Portanto, para os núcleos de ^1H e ^{13}C estudados, as frequências nas quais o fenômeno ocorre são 600 MHz e 150 MHz, respectivamente.



Figura 6 - Espectrômetro Avance III 600 HD – Bruker.
Fonte: Autor.

A amostra a ser analisada deve ser primeiramente dissolvida em solvente que não contenha nenhum próton que possa interferir no processo, solventes deuterados, e também adiciona-se pequena quantidade de tetrametilsilano (TMS) para referência interna. A cela da amostra é um pequeno tubo de ensaio cilíndrico suspenso no espaço entre as fases dos polos do ímã. A amostra é girada sobre seu eixo para garantir que todas as partes da solução estejam em um campo magnético relativamente uniforme (PAVIA et al., 2010).

Segundo Pavia et al. (2010), também encontra-se no espaço do ímã uma bobina ligada a um gerador de radiofrequência (RF) de 600 MHz. Essa bobina fornece a energia eletromagnética usada para alterar as orientações de spin dos prótons. Perpendicular à bobina oscilatória RF fica uma bobina detectora. Quando a amostra absorve energia, a reorientação dos spins nucleares induz um sinal de RF no plano da bobina detectora, o que é registrado como sinal de ressonância ou pico. A figura 7 a seguir ilustra tal descrição.

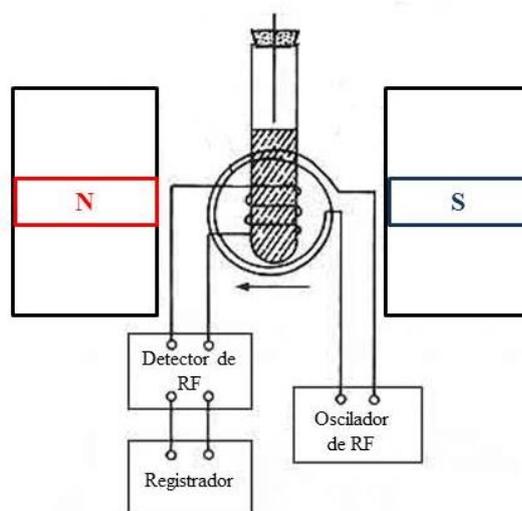


Figura 7 - Elementos básicos do espectrômetro de ressonância magnética nuclear.
 Fonte: Autor “adaptado de” TAGUEÑA; MARTINA, 1997, p. 41.

Segundo Pavia et al. (2010), a medição de frequências com precisão é de extrema dificuldade. Por isso, um composto de referência é colocada na amostra a ser medida, e a frequência de ressonância é medida em relação à frequência de ressonância da substância padrão. Logo, a diferença de frequência é medida diretamente. A substância de referência-padrão, usada universalmente, é o tetrametilsilano (TMS). O deslocamento químico (δ) expressa o quanto uma ressonância é deslocada em relação ao TMS, e esta é a medida indicada nos espectros de RMN.

4.4 Procedimento experimental

As calibrações do densímetro e do viscosímetro foram realizadas por um técnico da própria Anton Paar do Brasil, segundo programação de manutenções, e periodicamente pelo técnico do laboratório.

As soluções eram preparadas através das medidas das massas dos componentes puros, utilizando-se uma balança analítica (OHAUS AS200), com uma incerteza de $\pm 0,0001$ g. Os componentes foram mantidos nos seus respectivos frascos âmbar e a temperatura do laboratório era mantida em cerca de 20° C para diminuir perdas por evaporação.

As frações molares das soluções foram calculadas fazendo uso da equação (54).

$$x_1 = \frac{m_1/M_1}{m_1/M_1 + m_2/M_2}, \quad (54)$$

onde m_i e M_i representam, respectivamente, a massa e a massa molar dos componentes puros.

As soluções foram injetadas no DSA 5000 M e no SVM 3000/ G2 através de seringas plásticas especiais de 5 cm³. No primeiro, o equipamento foi programado para realizar o método de mapeamento de temperatura, com temperatura inicial igual a 15°C e final igual a 35°C, com 5°C de intervalo, fazendo as leituras de densidade e velocidade do som automaticamente. Entretanto, para o SVM 3000/G2 é necessário determinar essas temperaturas manualmente e então realizar as medidas, uma de cada vez, aguardando a estabilização da amostra.

A análise espectroscópica em FT-IR exigiu a varredura de um *background*, isto é, os *scans* foram primeiramente realizados para o cristal seco, sem adição de amostra. Então, a mistura a ser analisada foi gotejada no cristal fazendo uso de pipetas Pasteur de vidro e uma nova varredura foi efetuada. Repetiu-se este procedimento para todas as misturas em questão. Os espectros gerados foram processados através do software OMNIC e, quando necessário, a linha base foi corrigida para o alinhamento dos mesmos.

Para serem realizadas as análises de RMN, primeiramente foi necessário dissolver as amostras (componentes puros e soluções binárias) em solvente deuterado. O solvente utilizado foi o clorofórmio deuterado (CDCl₃) da Sigma Aldrich (99,96% atom. D) contendo 0,03% (v/v) de TMS. Para cada 5 µl de amostra, medidos com pipeta automática, foram inseridos 0,75 ml de CDCl₃, mantendo, portanto, o mesmo volume em cada tubo de ressonância. Após o preparo, os tubos foram introduzidos no trocador automático, prosseguindo-se com o experimento. Os espectros foram manuseados através do programa MestReNova 6.0.2.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As tabelas 3-5 apresentam uma comparação entre os valores experimentais das densidades, velocidades do som e viscosidades dos componentes puros determinados no presente estudo com valores disponíveis na literatura.

Tabela 3 - Densidade dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.

	T / K	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	
		Experimental	Literatura
Metanol	288,15	0,796353	0,7960 ^a
	293,15	0,791674	0,79162 ^b
	298,15	0,786967	0,7867 ^a ; 0,78714 ^c
	303,15	0,782241	0,781813 ^d
	308,15	0,777488	
Etanol	288,15	0,793694	0,79365 ^e
	293,15	0,789439	0,78940 ^b
	298,15	0,785152	0,78536 ^c ; 0,78507 ^e
	303,15	0,780830	0,78072 ^e
	308,15	0,776478	0,7777 ^f
1-Propanol	288,15	0,807624	0,80755 ^e
	293,15	0,803661	0,80364 ^b
	298,15	0,799654	0,79945 ^e ; 0,79975 ^g
	303,15	0,795617	0,79547 ^e
	308,15	0,791544	
1-Butanol	288,15	0,813309	0,813604 ^h
	293,15	0,809533	0,80954 ^b
	298,15	0,805723	0,805984 ^h ; 0,805778 ⁱ
	303,15	0,801884	0,804 ^j
	308,15	0,798012	
1-Pentanol	288,15	0,818164	0,81849 ^k
	293,15	0,814539	0,81482 ^k
	298,15	0,810885	0,81094 ^l
	303,15	0,807198	0,810 ^j
	308,15	0,803481	
Dietil Malonato	288,15	1.060548	1,060326 ^a
	293,15	1.055218	
	298,15	1.049868	1,049603 ^a
	303,15	1.044505	1,0443 ^m
	308,15	1.039131	1,0387 ^m

Fonte: ^a WANG; GAO; YAN, 2010; ^b TÔRRES; FRANCESCONI; VOLPE, 2003; ^c RESA; GONZÁLEZ; GOENAGA, 2005; ^d MARDONES et al., 2012; ^e ROMANO et al., 2003; ^f BAHADUR; DEENADAYULA; 2013; ^g RESA; GONZÁLEZ; GOENAGA, 2006; ^h WANG; GAO; YAN, 2010; ⁱ MOATTAR; SADEGHI; SARMAD, 2006; ^j SASTRY et al., 2013; ^k ALONSO et al., 2012; ^l AL-JIMAZ; AL-KANDARY; ABDUL-LATIF, 2004; ^m RATHNAM; MOHITE; KUMAR, 2012.

Tabela 4 - Velocidade do som dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.

	T / K	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	
		Experimental	Literatura
Metanol	288,15	1136,13	
	293,15	1119,59	1118,83 ^a
	298,15	1103,08	1102 ^b
	303,15	1086,98	1185,99 ^a
	308,15	1071,25	
Etanol	288,15	1177,08	
	293,15	1160,11	1160,07 ^a
	298,15	1142,99	1149 ^c ; 1143,10 ^d
	303,15	1126,18	1127,20 ^a
	308,15	1109,50	1098 ^c
1-Propanol	288,15	1240,53	
	293,15	1223,48	
	298,15	1206,22	1206 ^e
	303,15	1189,14	1189,2 ^f
	308,15	1172,14	
1-Butanol	288,15	1273,83	
	293,15	1257,05	
	298,15	1240,09	1240,16 ^d
	303,15	1223,25	1228,4 ^f
	308,15	1206,50	
1-Pentanol	288,15	1309,53	
	293,15	1292,81	
	298,15	1275,85	1275,18 ^g
	303,15	1259,04	1252,4 ^f
	308,15	1242,31	
Dietil Malonato	288,15	1338,74	
	293,15	1319,49	
	298,15	1300,04	
	303,15	1280,65	1274 ^h
	308,15	1259,79	1267,2 ⁱ

Fonte: ^a MARDONES et al., 2012; ^b RESA; GONZÁLES; GOENAGA, 2005. ^c BAHADUR; DEENADAYALU, 2013; ^d MOATTAR; SADEGHI; SARMAD, 2006; ^e RESA et al., 2010; ^f SASTRY et al., 2013; ^g KIYOHARA; BENSON, 1979; ^h OSWAL et al., 2005; ⁱ BALUJA et al., 2005.

Tabela 5 - Viscosidade dinâmica dos componentes puros a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica.

	T / K	η / mPa·s	
		Experimental	Literatura
Etanol	288,15	1,2120	1,313 ^a
	293,15	1,1971	1,216 ^a ; 1,187 ^b
	298,15	1,1300	1,132 ^a
	303,15	1,0629	1,010 ^a
	308,15	0,9831	
1-Propanol	288,15	2,4939	2,507 ^a
	293,15	2,1923	2,202 ^a
	298,15	1,9291	1,973 ^a
	303,15	1,7123	1,733 ^a ; 1,7153 ^c
	308,15	1,5243	1,546 ^d
1-Butanol	288,15	3,3575	
	293,15	2,9566	2,864 ^e ; 2,9623 ^c
	298,15	2,5942	
	303,15	2,2811	2,273 ^e ; 2,2662 ^c
	308,15	2,0104	2,017 ^d
1-Pentanol	288,15	4,6174	
	293,15	4,0590	
	298,15	3,5140	3,519 ^f
	303,15	3,0579	3,012 ^g
	308,15	2,6682	2,668 ^d
Dietil Malonato	288,15	2,3811	
	293,15	2,1774	
	298,15	1,9828	
	303,15	1,8092	1,728 ^h
	308,15	1,6561	1,57 ^h ; 1,3767 ⁱ

Fonte: ^a ROMANO et al., 2003; ^b GONZÁLEZ et al., 2007; ^c DIKIO et al., 2012; ^d SHAN; ASFOUR, 1998; ^e INDRASWATI et al., 2001; ^f AL-JIMAZ; AL-KANDARY; ABDUL-LATIF, 2004; ^g SASTRY et al., 2013; ^h RATHNAM; MOHITE; KUMAR, 2012; ⁱ BALUJA et al., 2005.

Observou-se através das tabelas 3-5 que os valores experimentais das grandezas medidas encontram-se próximos aos valores disponíveis na literatura, apresentando desvios aceitáveis.

As densidades experimentais obtidas para os sistemas {dietil malonato (DEM) + alcoóis}, a diferentes temperaturas e pressão atmosférica, encontram-se no Anexo B. As figuras 8-12 descrevem a influência da temperatura na densidade. Para todos os sistemas, observa-se que a densidade aumenta monotonicamente com a fração molar do DEM e diminui com o aumento da temperatura. É possível observar também que com o aumento da cadeia carbônica, o comportamento da densidade indica uma tendência de variar linearmente com a fração molar do DEM.

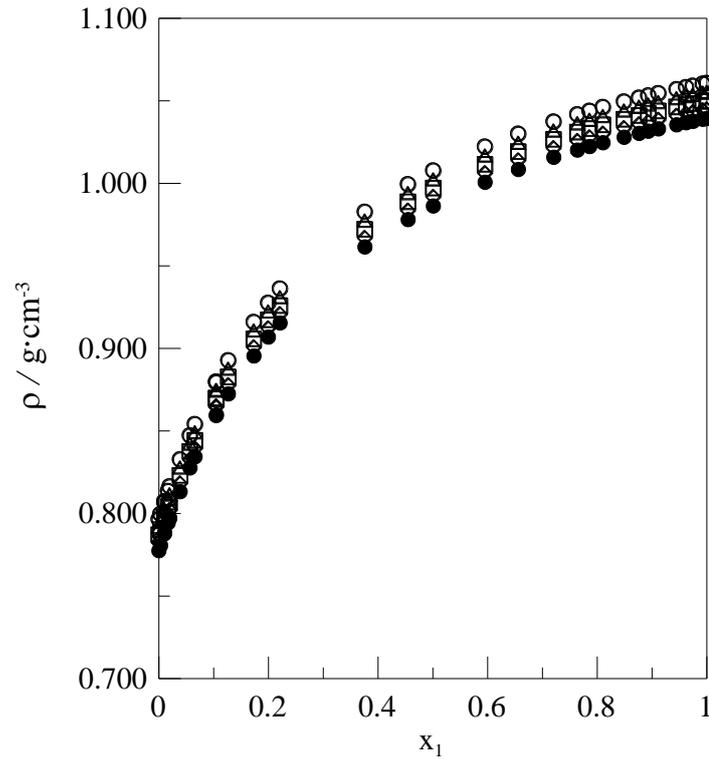


Figura 8 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K.

Fonte: Autor.

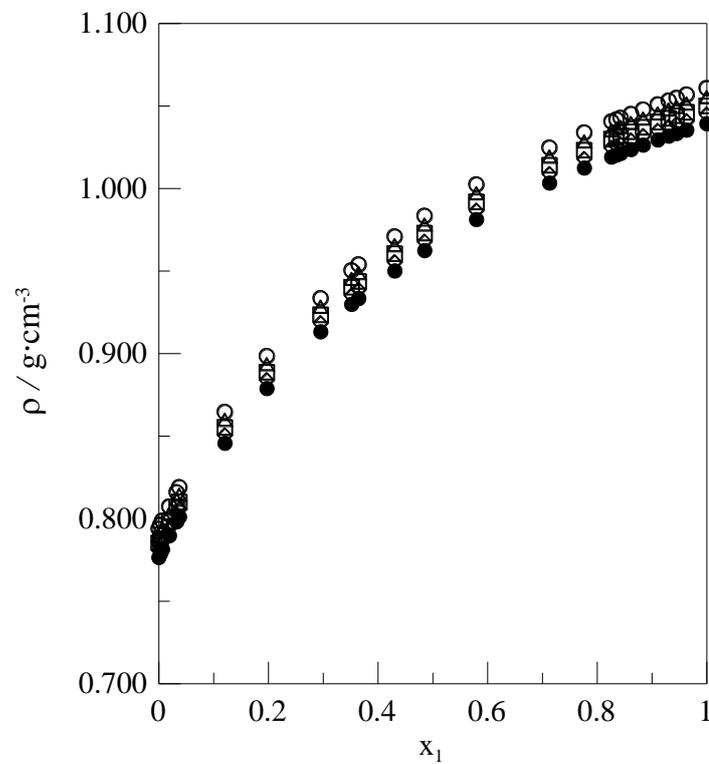


Figura 9 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K.

Fonte: Autor.

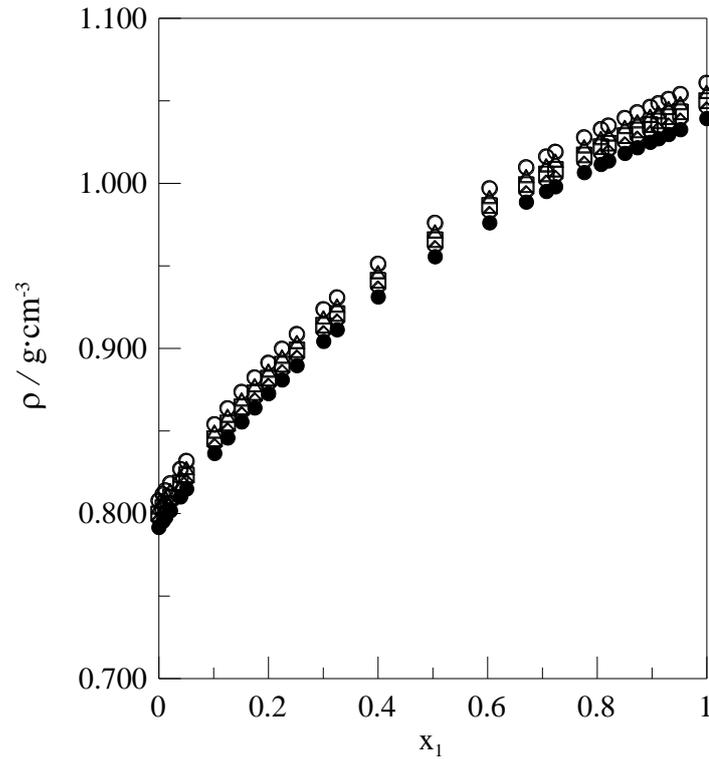


Figura 10 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {diethyl malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K.

Fonte: Autor.

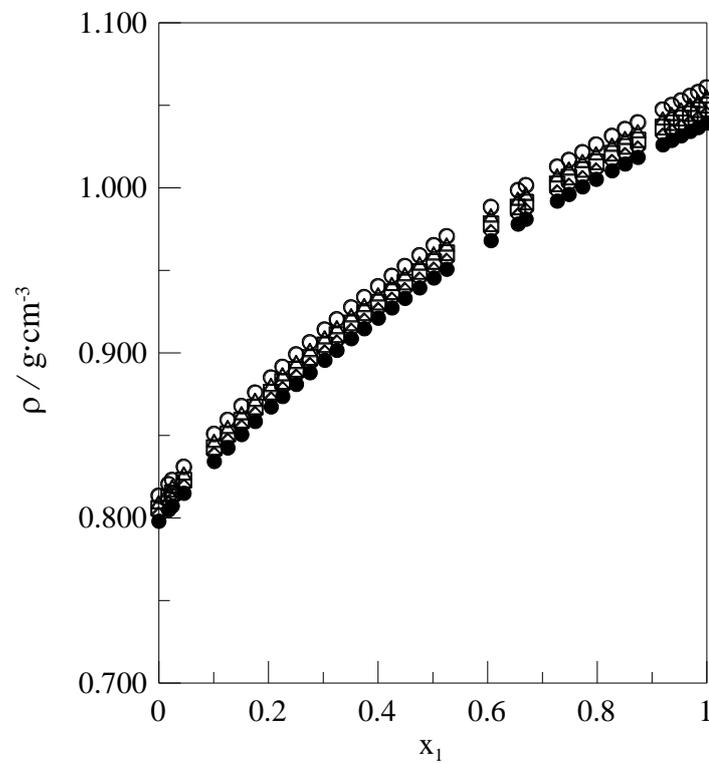


Figura 11 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {diethyl malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K.

Fonte: Autor.

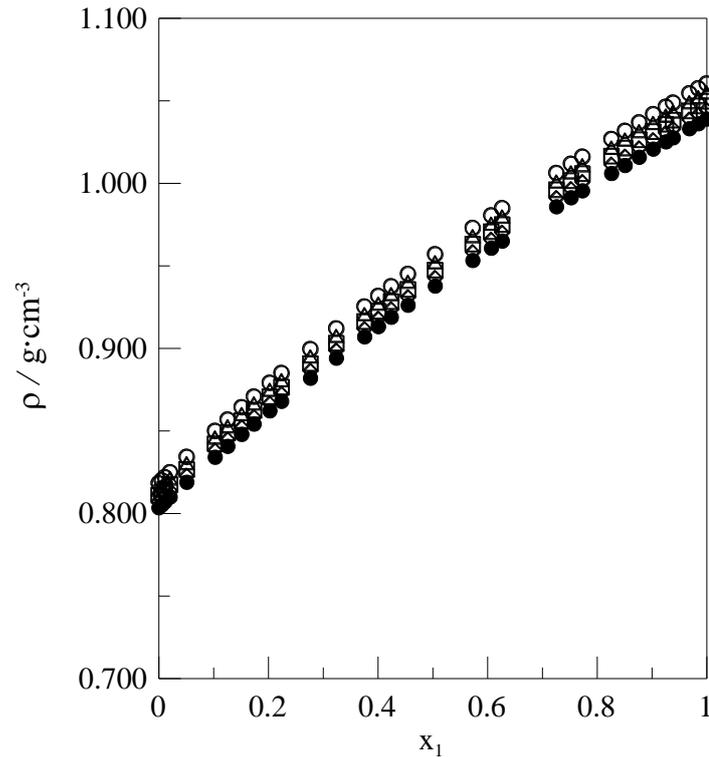


Figura 12 - Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

As velocidades do som experimentais obtidas para os sistemas (dietil malonato + álcoois), a diferentes temperaturas e pressão atmosférica, encontram-se no Anexo B. As figuras 13-17 exibem o comportamento desta propriedade com a composição e temperatura. Nota-se que para todos os sistemas estudados, assim como a densidade, a velocidade do som diminuiu com o aumento de temperatura, mas aumenta com a fração molar de DEM. Verifica-se também que com o aumento do número de átomos de carbono nos álcoois ocorre inversão da concavidade das curvas.

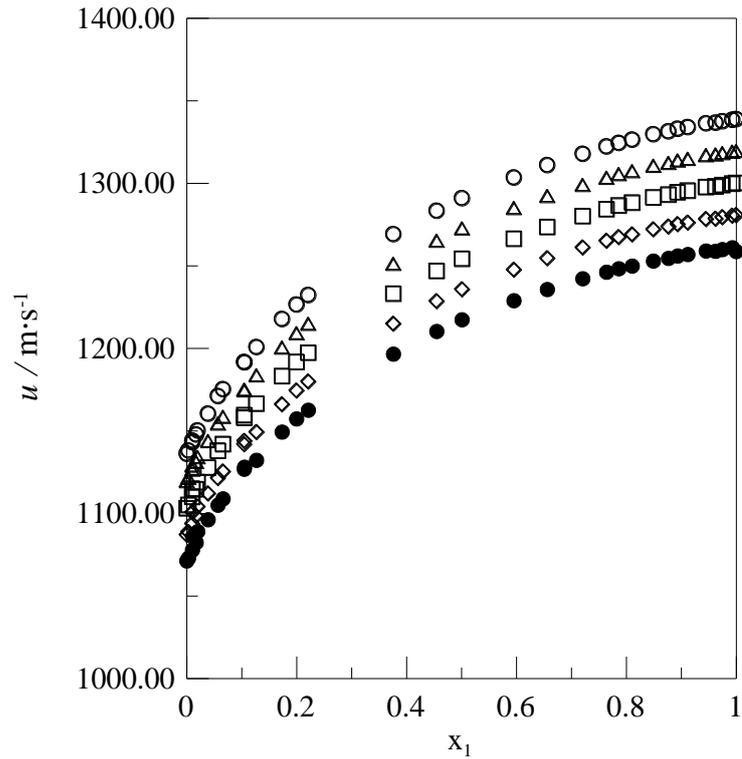


Figura 13 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

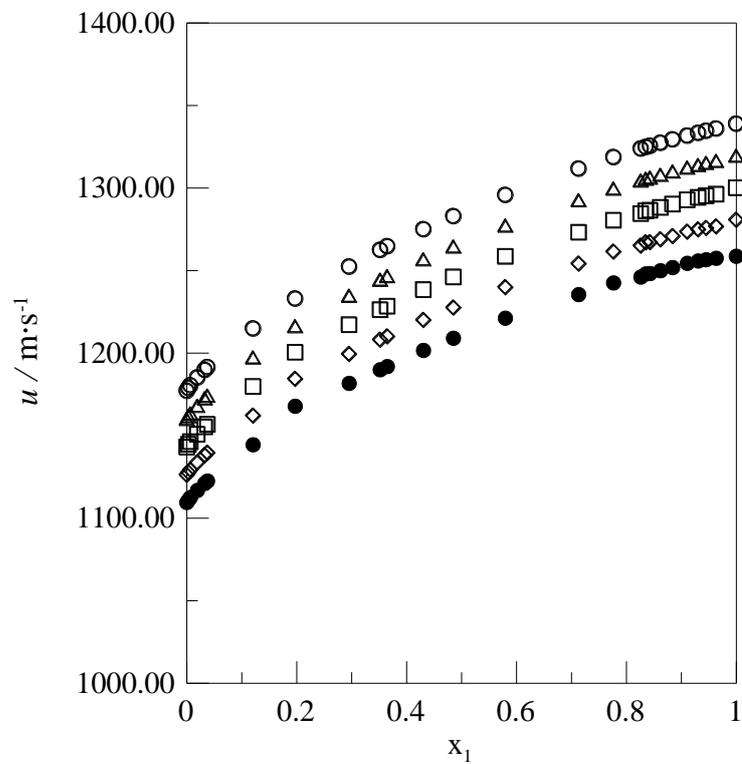


Figura 14 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

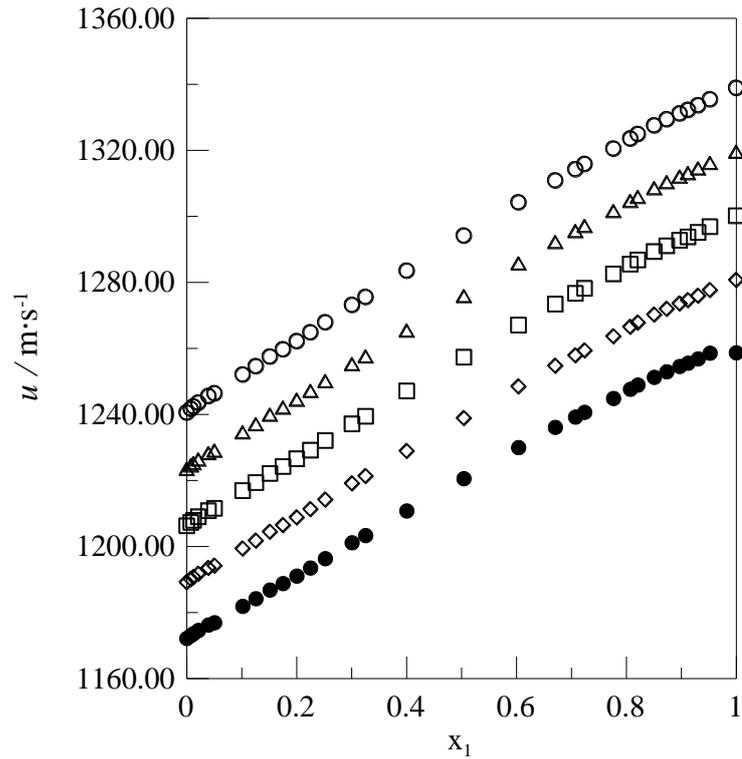


Figura 15 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

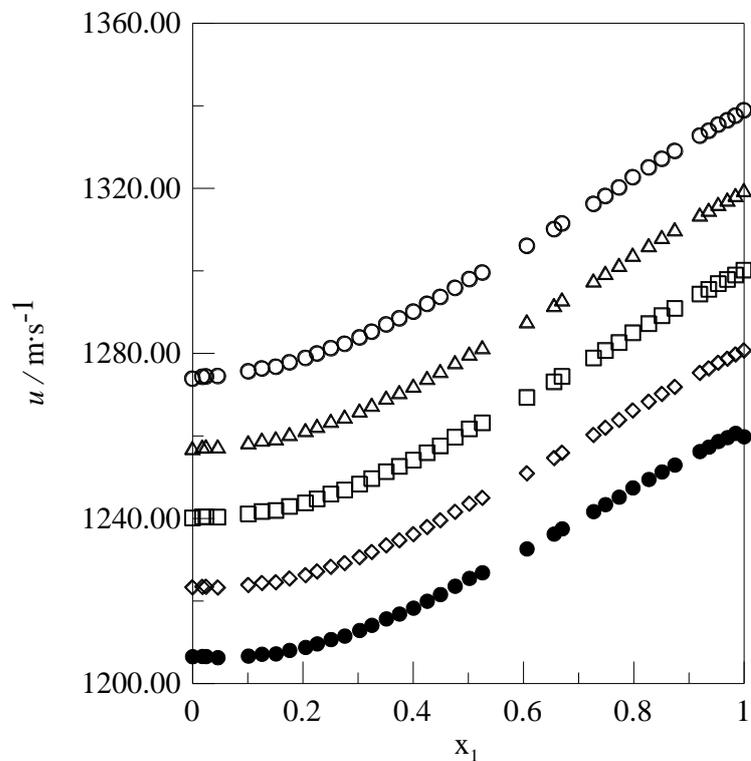


Figura 16 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

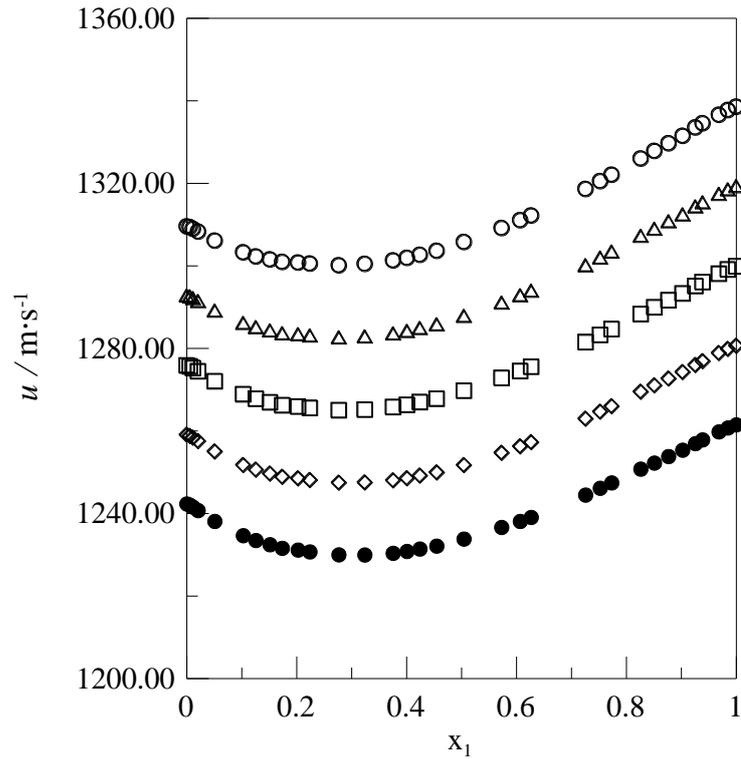


Figura 17 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

As viscosidades dinâmicas experimentais obtidas para os sistemas (DEM + álcoois), a diferentes temperaturas e pressão atmosférica, encontram-se no Anexo B. As figuras 18-21 exibem a influência da temperatura na viscosidade. Para os sistemas estudados, a viscosidade diminuiu com a temperatura. Verifica-se também que para todos os sistemas, as curvas da viscosidade em função da concentração do DEM apresentaram um ponto de mínimo.

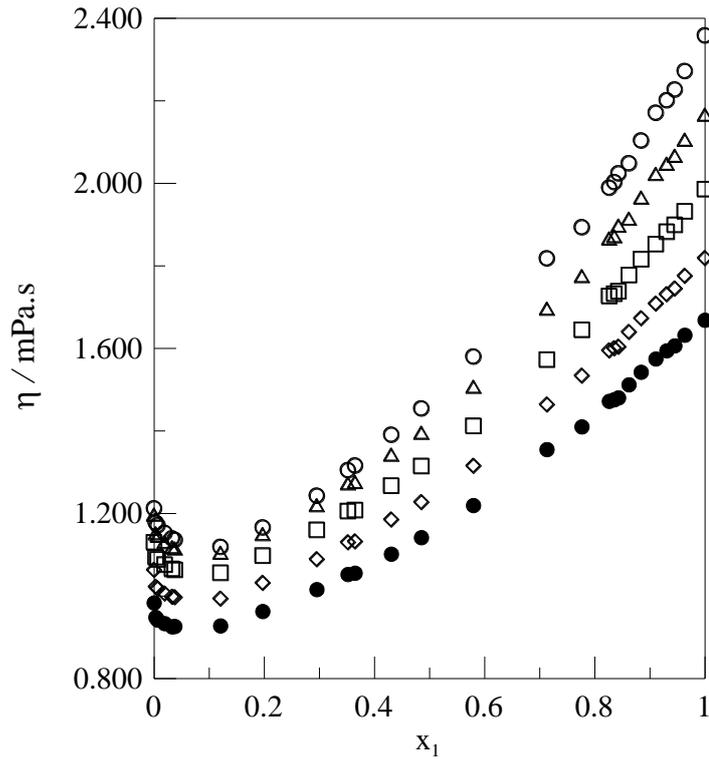


Figura 18 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

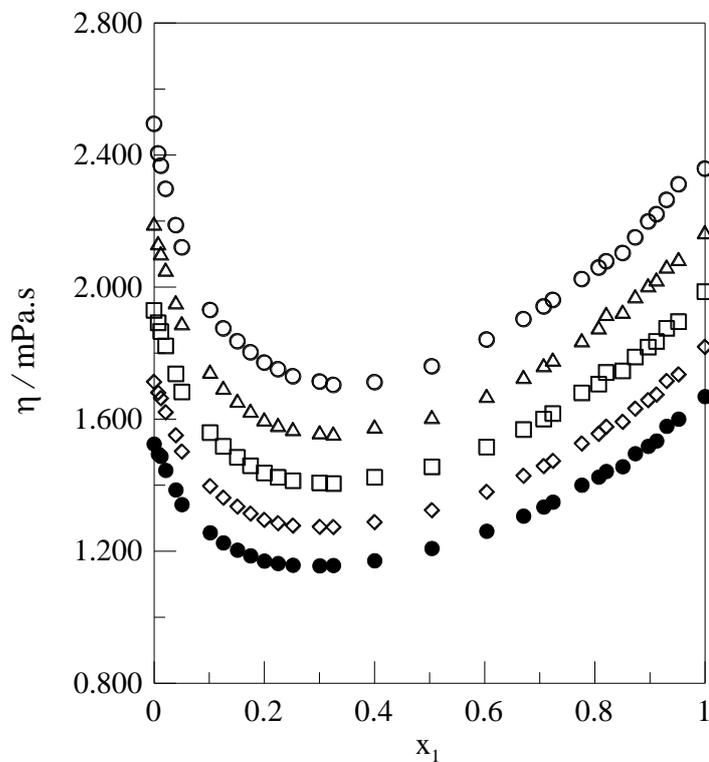


Figura 19 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

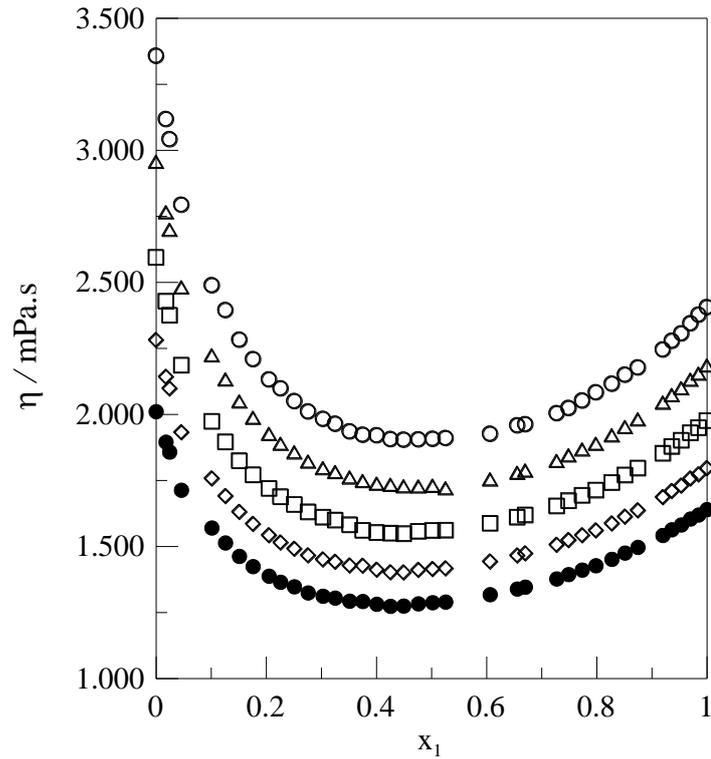


Figura 20 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

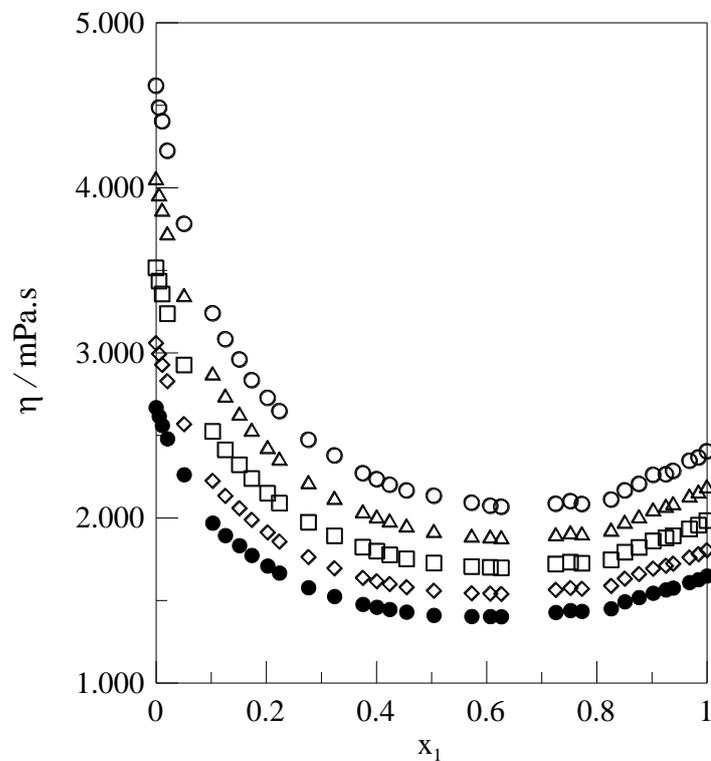


Figura 21 - Viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

O volume molar excesso, o desvio da compressibilidade isentrópica e o desvio da viscosidade foram calculados a partir dos resultados experimentais de densidades, velocidade do som e viscosidade. Os valores experimentais destas grandezas (Apêndice B) foram correlacionados através de polinômios do tipo Redlich-Kister (1948).

Várias versões desse polinômio são encontradas na literatura. Neste estudo utilizou-se a equação (55) mostrada a seguir.

$$Y_m^E = x_1(1-x_1) \sum_{j=0}^{j=n} A_j (1-2x_1)^j, \quad (55)$$

onde Y representa as grandezas excesso (V_m^E , $\Delta\eta$ e $\Delta\kappa$), A_j os parâmetros obtidos através do método dos mínimos quadrados, e j o grau do polinômio.

O desvio padrão (σ) foi determinado pela equação (56).

$$\sigma = \left\{ \frac{\sum [Y_{(\text{Exp})}^E - Y_{(\text{Calc})}^E]^2}{(N-n)} \right\}^{1/2}, \quad (56)$$

onde N é o número de pontos experimentais e n o número de coeficientes do polinômio.

Quando a grandeza Y , descrita em função da fração molar, foi muito assimétrica, a equação (55) se mostrou ineficiente para correlacionar os resultados experimentais. Essa assimetria foi corrigida através de uma modificação na equação que provou ser útil na minimização do número de coeficientes necessários para ajustar um conjunto de dados (MYERS; SCOTT, 1963).

O polinômio de Redlich-Kister modificado foi apresentado na equação (57).

$$Y_m^E = \frac{x_1(1-x_1)}{1-B(1-2x_1)} \sum_{j=0}^{j=n} A_j (1-2x_1)^j, \quad (57)$$

onde o coeficiente B deve seguir a restrição $-1 < B < 1$.

Não foi realizado nenhum estudo estatístico para definir o número de parâmetros necessários para o conjunto de dados experimentais. Entretanto, segundo estudos encontrados na literatura, foi definido que a utilização de cinco parâmetros ($0 \leq j \leq 4$) foi suficiente para correlacionar os dados de forma satisfatória, o que foi justificado pelos valores de desvio padrão obtidos.

Os coeficientes A_j e B são apresentados nas tabelas 6-8 juntamente com os valores do desvio padrão. O polinômio modificado foi usado para correlacionar os valores do volume molar excesso e desvio da viscosidade do sistema (DEM + etanol), e para os dados de desvio da compressibilidade isentrópica da sistema (DEM + 1-pentanol).

Tabela 6 - Coeficientes A_j e B para o volume molar excesso a diferentes temperaturas.

T / K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	B	σ
x_1 DEM + (1 - x_1) metanol							
288,15	-0,93475	-0,39521	-0,04853	-0,39363	-0,71409		0,0073
293,15	-0,91820	-0,41227	-0,03745	-0,39379	-0,74051		0,0074
298,15	-0,89645	-0,42786	-0,02487	-0,39789	-0,76002		0,0076
303,15	-0,87217	-0,44495	-0,01425	-0,38637	-0,78384		0,0077
308,15	-0,84277	-0,45872	-0,01454	-0,38495	-0,79336		0,0079
x_1 DEM + (1 - x_1) etanol							
288,15	0,01818	-0,42338	0,28706	0,12942	-0,09887	0,99451	0,0017
293,15	0,08012	-0,48799	0,29142	0,15875	-0,13047	0,99474	0,0017
298,15	0,15099	-0,55784	0,29925	0,17060	-0,15073	0,99485	0,0018
303,15	0,22372	-0,62602	0,29753	0,19437	-0,17756	0,99496	0,0018
308,15	0,30127	-0,69556	0,29045	0,22661	-0,21079	0,99500	0,0018
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-propanol							
288,15	1,01176	0,04228	0,18401	-0,36176	0,40640		0,0076
293,15	1,10209	0,05681	0,20034	-0,33270	0,40356		0,0077
298,15	1,19867	0,07739	0,21154	-0,32239	0,41414		0,0076
303,15	1,29801	0,09889	0,22895	-0,29937	0,40710		0,0076
308,15	1,39958	0,12326	0,24342	-0,27261	0,40628		0,0076
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-butanol							
288,15	1,39595	0,24003	0,51597	-0,04993	-0,38406		0,0041
293,15	1,49773	0,27040	0,53989	-0,05155	-0,39460		0,0045
298,15	1,60236	0,29421	0,55743	-0,03538	-0,40775		0,0045
303,15	1,71097	0,32005	0,57399	-0,02264	-0,40394		0,0045
308,15	1,82119	0,35439	0,60125	-0,02226	-0,42086		0,0046
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-pentanol							
288,15	1,96423	0,33172	0,54443	-0,07223	-0,33233		0,0088
293,15	2,07826	0,34999	0,51232	-0,04856	-0,23618		0,0078
298,15	2,19248	0,37464	0,50871	-0,03050	-0,21507		0,0073
303,15	2,30831	0,40052	0,52065	-0,02104	-0,21170		0,0072
308,15	2,42456	0,43452	0,54474	-0,02956	-0,23799		0,0074

* A_j e σ em $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$.

Fonte: Autor.

Tabela 7 - Coeficientes A_j e B para o desvio da compressibilidade isentrópica a diferentes temperaturas.

T/K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	B	σ
x_1 DEM + (1 - x_1) metanol							
288,15	-616,037	-371,194	-215,917	-366,267	-342,568		1,4194
293,15	-640,871	-383,309	-215,717	-391,346	-376,611		1,7962
298,15	-666,476	-391,118	-205,733	-431,411	-434,667		2,5567
303,15	-691,695	-399,064	-198,018	-470,010	-489,523		3,4092
308,15	-721,802	-409,235	-191,057	-477,206	-567,984		3,9619
x_1 DEM + (1 - x_1) etanol							
288,15	-417,168	-221,529	-116,559	-149,111	-134,855		0,7653
293,15	-431,700	-233,458	-131,692	-152,677	-123,419		0,7776
298,15	-445,973	-248,171	-159,819	-160,386	-93,294		0,9594
303,15	-460,308	-261,784	-188,573	-160,917	-63,469		1,2124
308,15	-480,490	-274,084	-206,106	-135,815	-77,732		1,5097
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-propanol							
288,15	-210,332	-77,718	-32,644	-31,402	-28,444		0,2722
293,15	-216,200	-79,503	-33,172	-30,133	-27,440		0,2754
298,15	-222,162	-80,730	-33,650	-30,588	-25,820		0,2776
303,15	-228,474	-81,839	-33,823	-28,776	-25,800		0,2715
308,15	-240,549	-81,347	-30,301	-5,597	-54,636		0,2768
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-butanol							
288,15	-105,457	-16,273	-1,472	-6,681	-22,013		0,1356
293,15	-107,025	-14,536	0,318	-7,636	-22,819		0,1528
298,15	-108,383	-13,377	1,311	-6,686	-21,719		0,1521
303,15	-109,650	-11,910	3,173	-6,167	-21,790		0,1607
308,15	-110,772	-10,050	5,570	-5,817	-22,136		0,1636
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-pentanol							
288,15	-23,142	35,585	-12,146	8,406	-9,800	0,9990	0,1406
293,15	-21,907	36,355	-12,488	6,718	-9,696	0,9991	0,1352
298,15	-20,414	36,769	-12,487	5,852	-11,027	0,9900	0,1445
303,15	-18,654	37,657	-13,852	3,932	-10,080	0,9992	0,1460
308,15	-16,677	38,052	-14,220	2,177	-10,414	0,9990	0,1487

* A_j e σ em TPa^{-1} .

Fonte: Autor.

Tabela 8 - Coeficientes A_j e B para o desvio da viscosidade a diferentes temperaturas.

T / K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	B	σ
x_1 DEM + (1 - x_1) etanol							
288,15	-1,21744	0,85557	-0,24676	0,31328	0,17091	0,9940	0,0079
293,15	-1,06116	0,83622	-0,21323	-0,21352	0,53123	0,9974	0,0058
298,15	-0,90483	0,72615	-0,19142	-0,19449	0,46444	0,9970	0,0042
303,15	-0,78615	0,56491	-0,07849	-0,15813	0,34748	0,9973	0,0044
308,15	-0,68354	0,51333	-0,05749	-0,23686	0,36438	0,9971	0,0040
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-propanol							
288,15	-2,687926	-1,178723	-0,77583	-2,20941	-1,97316		0,0163
293,15	-2,306572	-0,927135	-0,778145	-1,64827	-1,39203		0,0080
298,15	-2,024059	-0,801041	-0,686365	-1,09892	-1,21084		0,0064
303,15	-1,779878	-0,658526	-0,688248	-0,90380	-0,94118		0,0052
308,15	-1,56308	-0,54646	-0,64038	-0,80935	-0,74411		0,0061
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-butanol							
288,15	-3,93764	-1,79054	-1,54729	-2,51805	-2,48613		0,0173
293,15	-3,39702	-1,52458	-1,27161	-1,97395	-1,86150		0,0120
298,15	-2,93474	-1,25688	-0,92996	-1,85383	-1,92018		0,0129
303,15	-2,52192	-1,06501	-0,78143	-1,58887	-1,61627		0,0113
308,15	-2,17404	-0,90980	-0,64051	-1,32778	-1,36494		0,0103
x_1 DEM + (1 - x_1) 1-pentanol							
288,15	-5,57789	-2,58577	-2,43367	-3,53255	-2,93864		0,0193
293,15	-4,82536	-2,23578	-1,92452	-3,16123	-2,92800		0,0162
298,15	-4,09945	-1,85113	-1,59560	-2,69010	-2,46584		0,0143
303,15	-3,49473	-1,56158	-1,33079	-2,19748	-2,02895		0,0127
308,15	-2,98737	-1,32116	-1,11216	-1,76217	-1,65797		0,0113

* A_j e σ em mPa·s

Fonte: Autor.

As figuras 22-26 apresentam os valores experimentais de volume molar excesso em função da composição do dietil malonato a diferentes temperaturas. Para o sistema (DEM + metanol), V_m^E foi negativo em toda faixa de fração molar e tornou-se menos negativo com o aumento da temperatura. O sistema (DEM + etanol) apresentou um comportamento sigmoidal (valores negativos a baixas concentrações, tornando-se positivos com o aumento da concentração de DEM). Os demais sistemas apresentaram valores positivos para o V_m^E .

Observou-se que para uma dada temperatura, os valores de volume molar excesso aumentaram com o aumento da cadeia carbônica dos alcoóis.

Segundo Romano et al. (2003), valores positivos do V_m^E estão associados à ruptura de interações entre moléculas semelhantes (ligações de hidrogênio em 1-álcool e dipolo-dipolo em ambos componentes), enquanto os valores negativos são devidos à formação de novas interações intermoleculares e a efeitos estruturais decorrentes do empacotamento molecular entre as diferentes espécies presentes nas soluções. Trenzado et al. (2011) também considera que há diminuição nas ligações de Van der Waals com o aumento da distância entre moléculas, ocasionando espaços vazios entre as mesmas. Portanto, quanto menor o tamanho da cadeia do álcool, melhor o efeito de empacotamento e a distância intermolecular diminui, aumentando as interações intermoleculares.

Assim, quando as interações intermoleculares entre as moléculas dos dois componentes presentes na mistura forem mais fracas do que as dos componentes puros, o volume molar excesso tende a ser positivo. Isso ocorre quando um dos componentes possui grupos polares e o outro é apolar ou possui comportamento fracamente polar. Os álcoois possuem o grupamento hidroxila (polar), enquanto o dietil malonato é fracamente polar. Quando os componentes puros são misturados, há formação de clusters ocasionando microheterogeneidade no sistema. Esse fenômeno é dependente da fração molar, pois a cada adição muda-se o arranjo molecular no sistema.

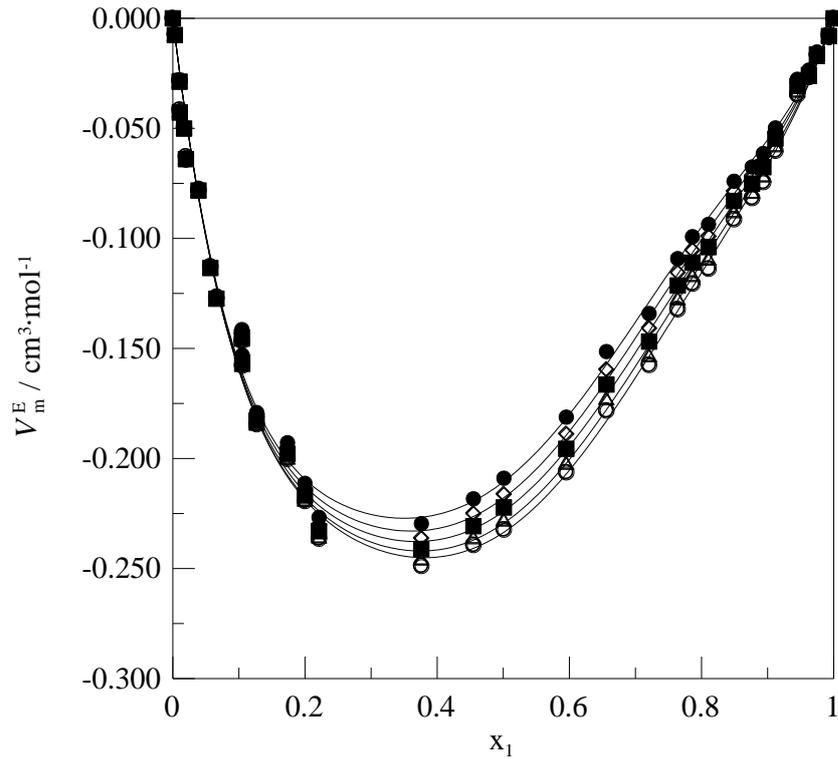


Figura 22 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

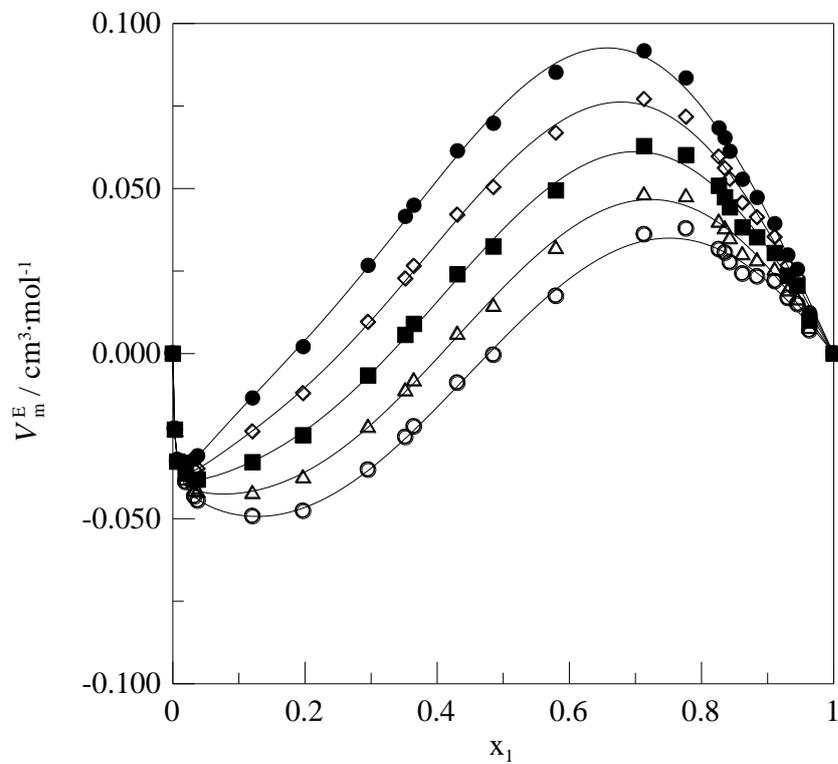


Figura 23 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

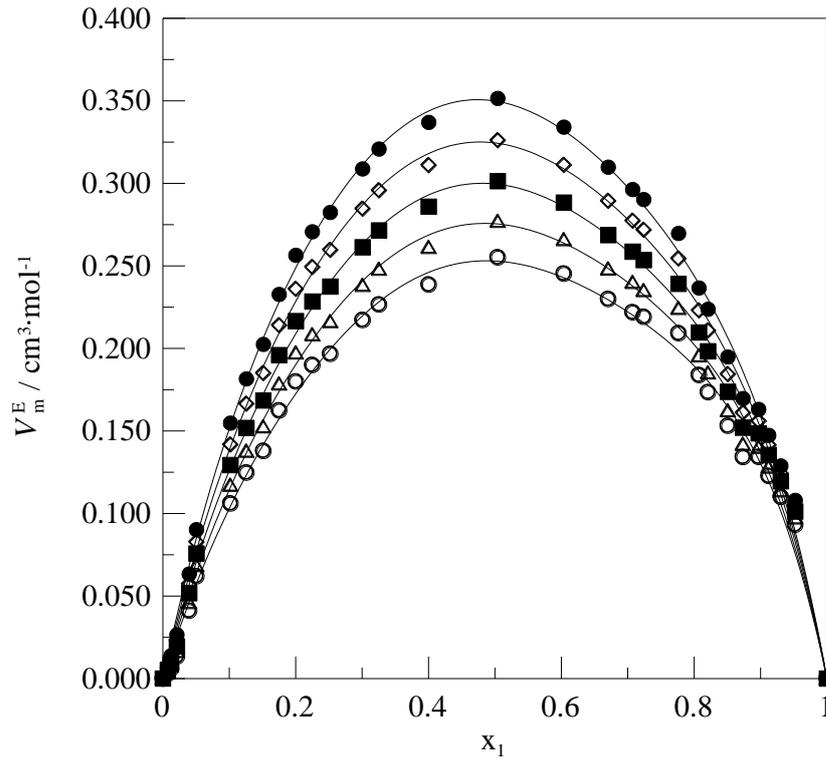


Figura 24 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

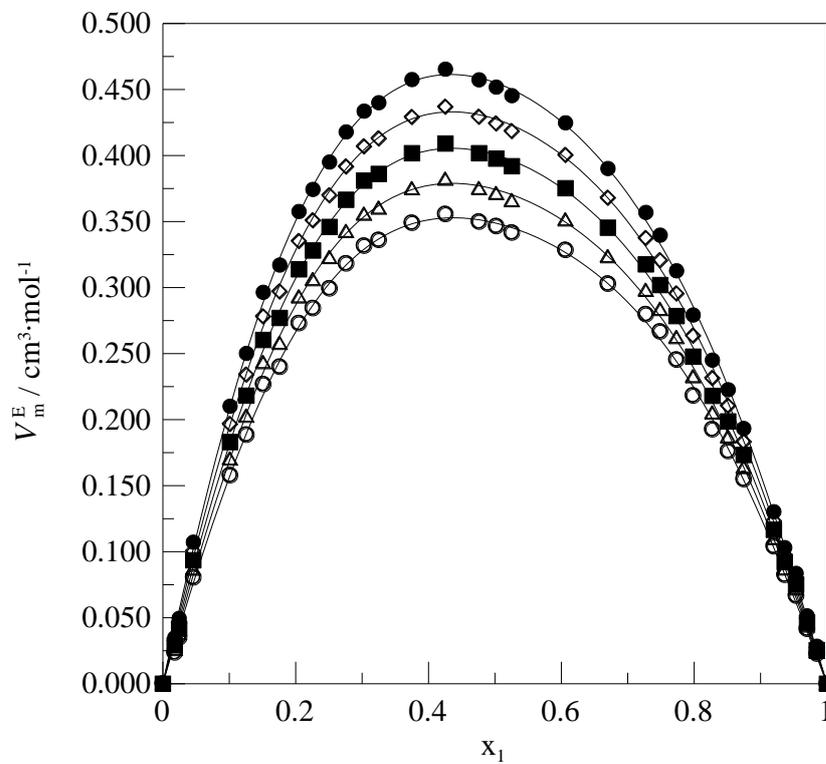


Figura 25 - Volume molar excesso em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

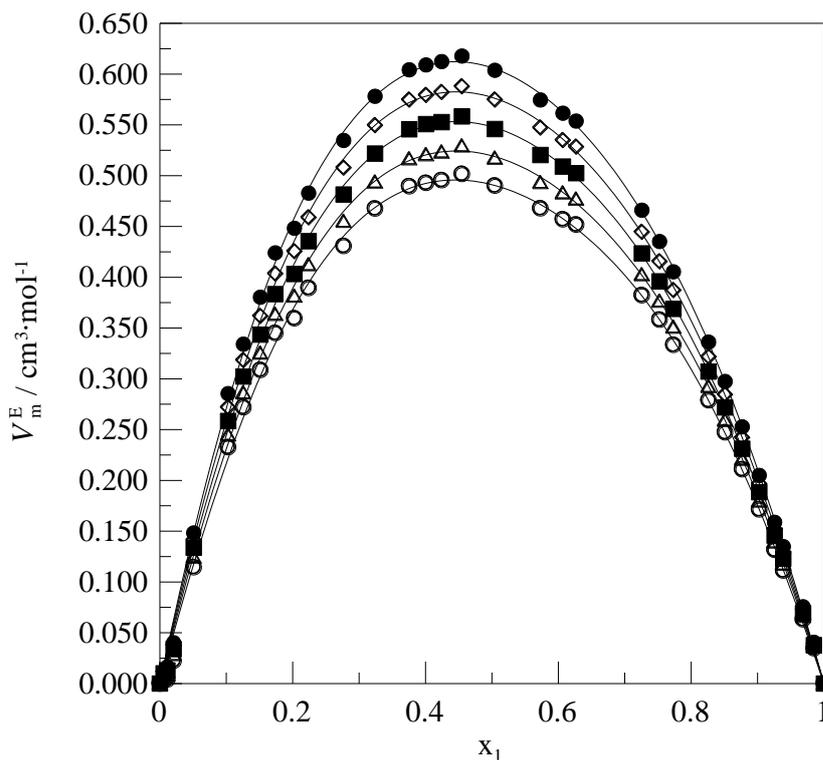


Figura 26 - Volume molar excedente em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

As figuras 27-31 mostram o comportamento do desvio da compressibilidade isentrópica em função da composição a diferentes temperaturas. Para todos os sistemas estudados, $\Delta\kappa$ foi negativo em toda faixa de fração molar e em todas as temperaturas estudadas, exceto para o sistema (DEM + 1-pentanol) cuja curva apresentou um comportamento sigmoideal, com valores positivos à baixas concentrações de dietil malonato.

A magnitude dos desvios negativos da compressibilidade isentrópica diminuiu com o aumento da cadeia carbônica. Para a maioria dos sistemas, o $\Delta\kappa$ tornou-se mais negativo com o aumento da temperatura, com exceção do sistema (dietil malonato + 1-pentanol). Os valores negativos do $\Delta\kappa$ revelaram que a solução formada é menos compressível do que os componentes puros e que isso pode ser um indicativo da predominância de forças de dispersão entre as moléculas do dietil malonato e as moléculas dos alcoóis.

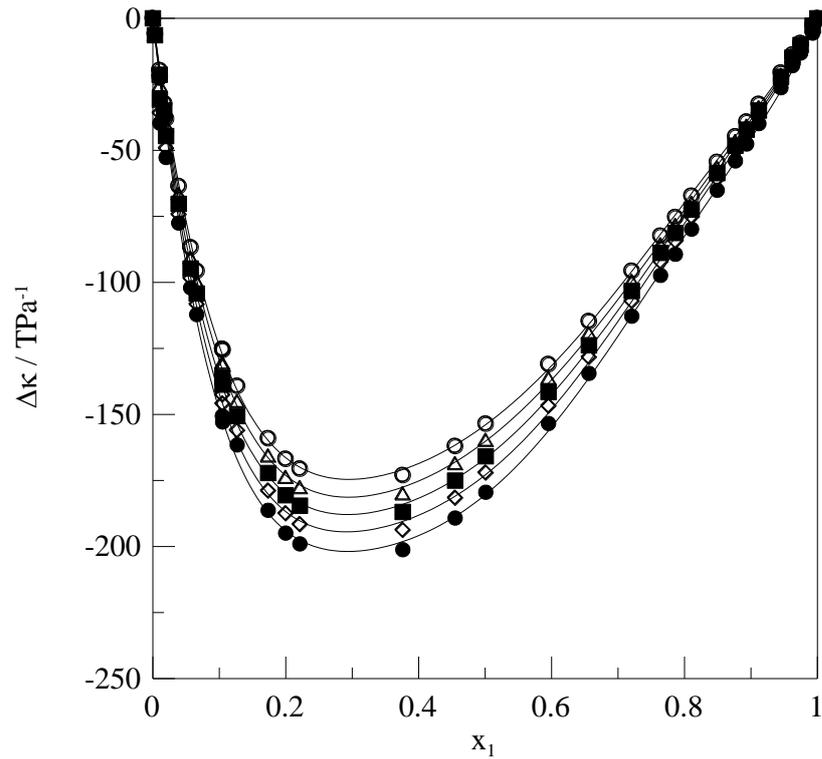


Figura 27 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

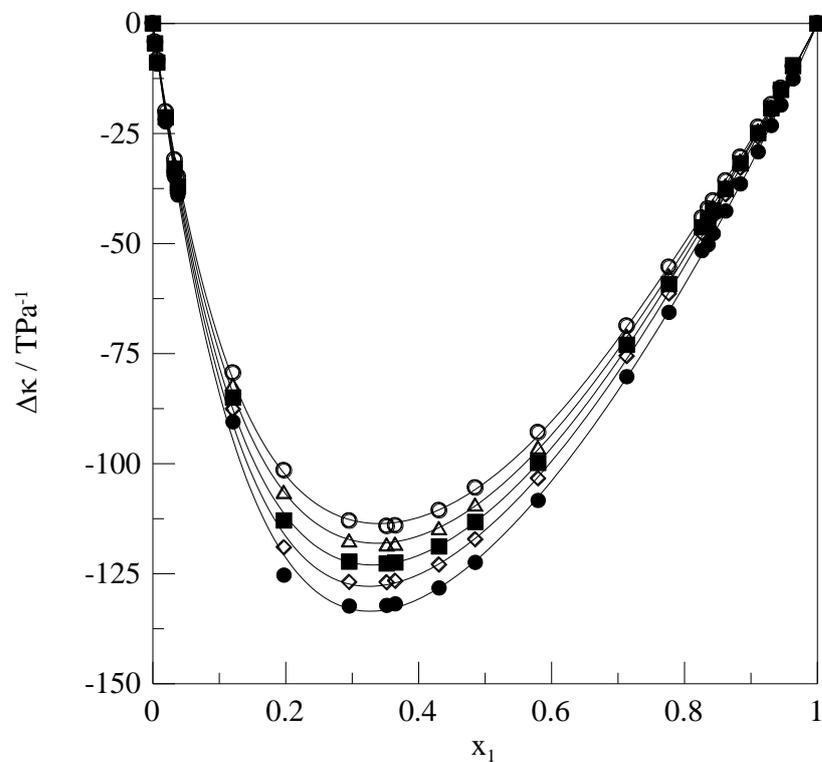


Figura 28 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

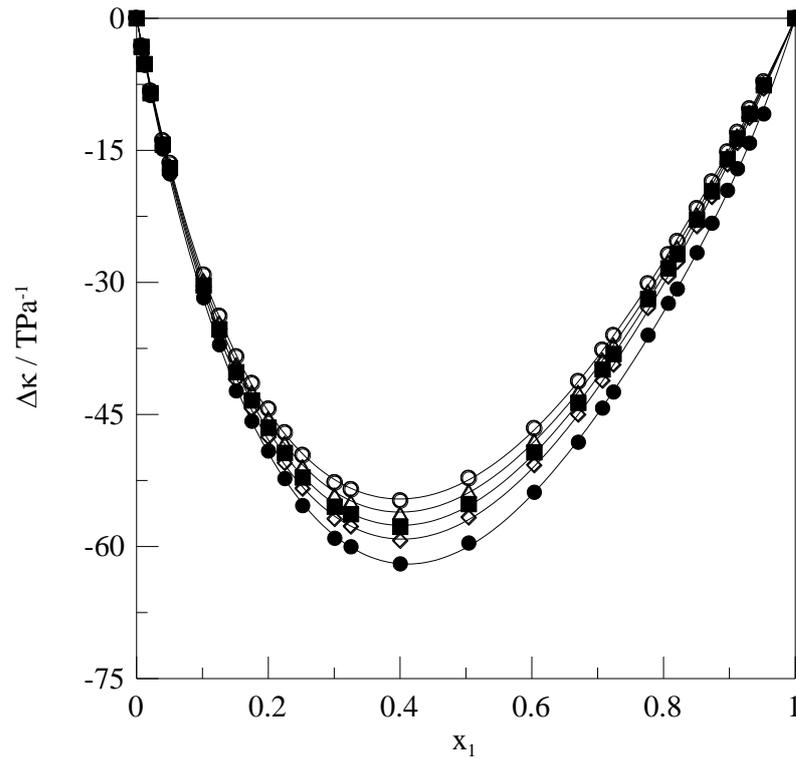


Figura 29 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

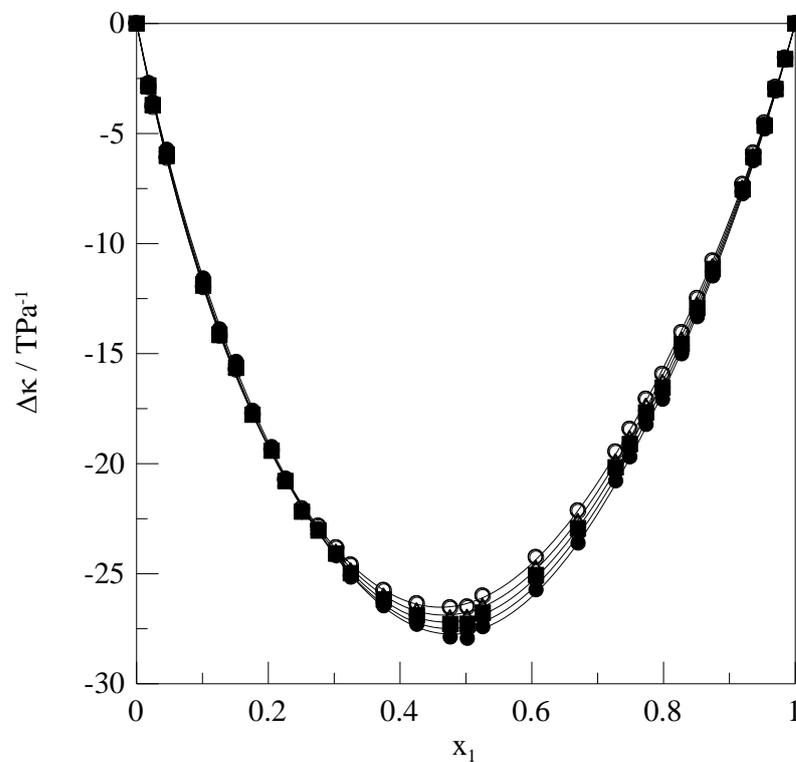


Figura 30 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

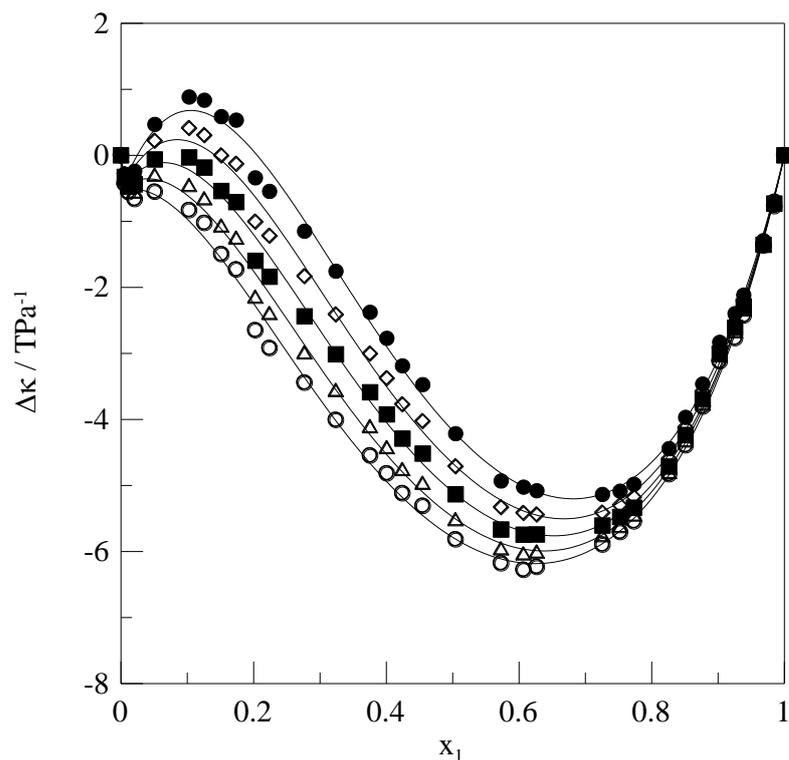


Figura 31 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

Segundo Mehra, Gupta e Israni (2001), os sinais do desvio da compressibilidade e do volume molar possuem um papel vital na avaliação de rearranjos e interações moleculares existentes nas misturas líquidas. Valores negativos dessas duas grandezas indicam fortes interações entre as espécies química nas misturas como consequência de efeitos específicos e também de acomodações intersticiais entre as moléculas presentes no sistema. Já os valores positivos são indícios de enfraquecimento das interações e, conseqüentemente, quebra da estrutura líquida das espécies presentes na solução devido à predominância de forças de dispersão.

As figuras 32-35 apresentam os valores de desvio da viscosidade em função da composição e da temperatura. Uma vez que as viscosidades das soluções do sistema (DEM + metanol) eram próximas da incerteza do viscosímetro, não foi possível estudar o $\Delta\eta$ deste sistema.

Para as misturas estudadas, o desvio da viscosidade foi negativo em toda faixa de composição e temperatura. A magnitude dos desvios negativos aumentou (tornou-se mais negativo) com o aumento da cadeia carbônica, isto é: 1-pentanol > 1-butanol > 1-propanol > etanol. Segundo Fort e Moore (1966), o desvio da viscosidade tende a tornar-se menos

negativo à medida que a força de interação entre as diferentes moléculas aumenta e que o sinal negativo está fortemente relacionado à predominância de forças de dispersão nas misturas. Constatou-se também que os valores de $\Delta\eta$ tornaram-se menos negativos com o aumento da temperatura.

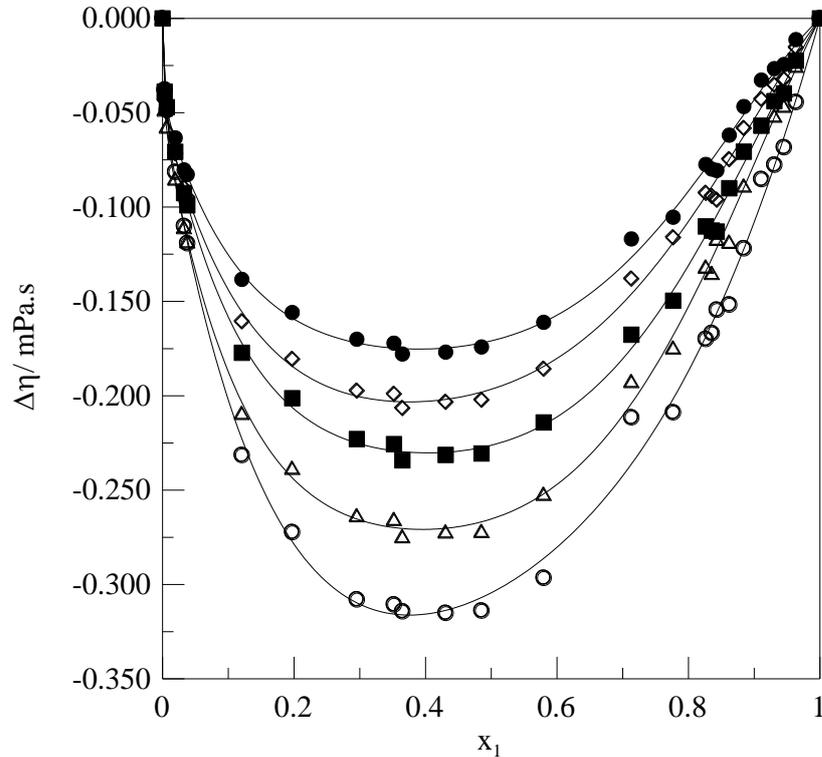


Figura 32 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

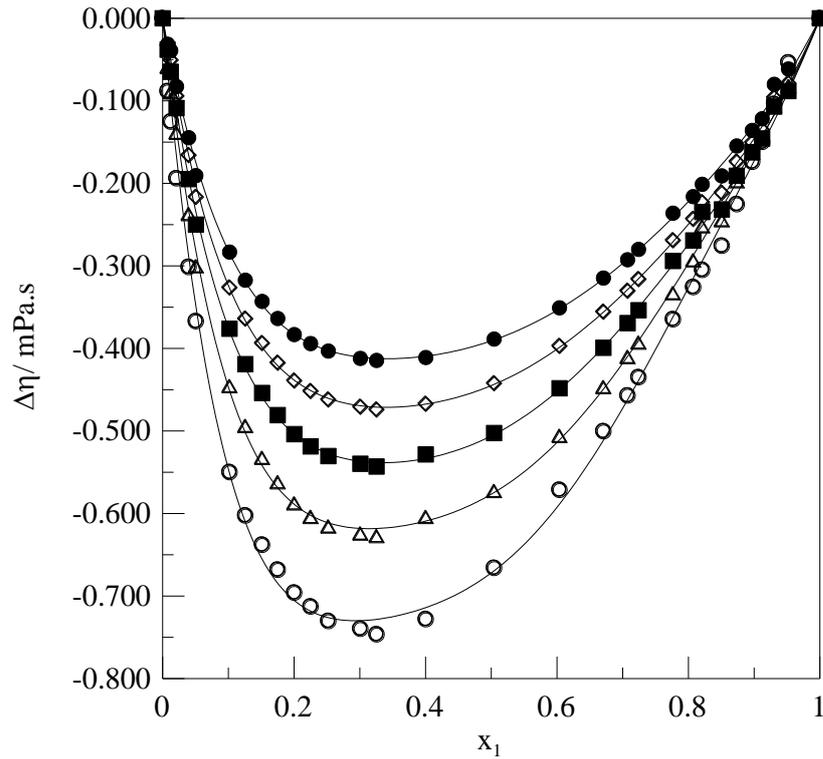


Figura 33 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

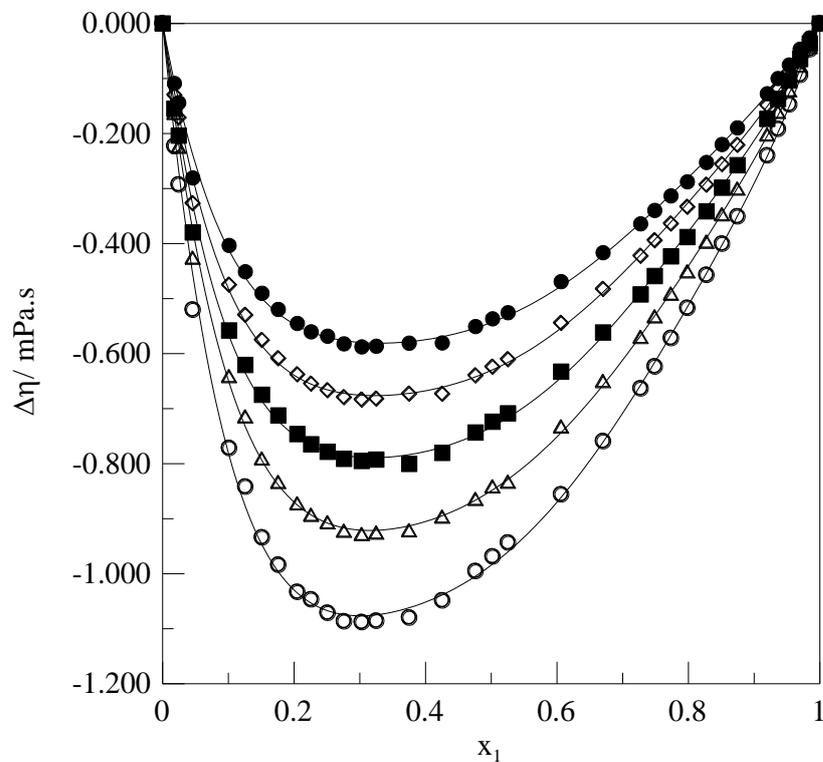


Figura 34 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K. (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

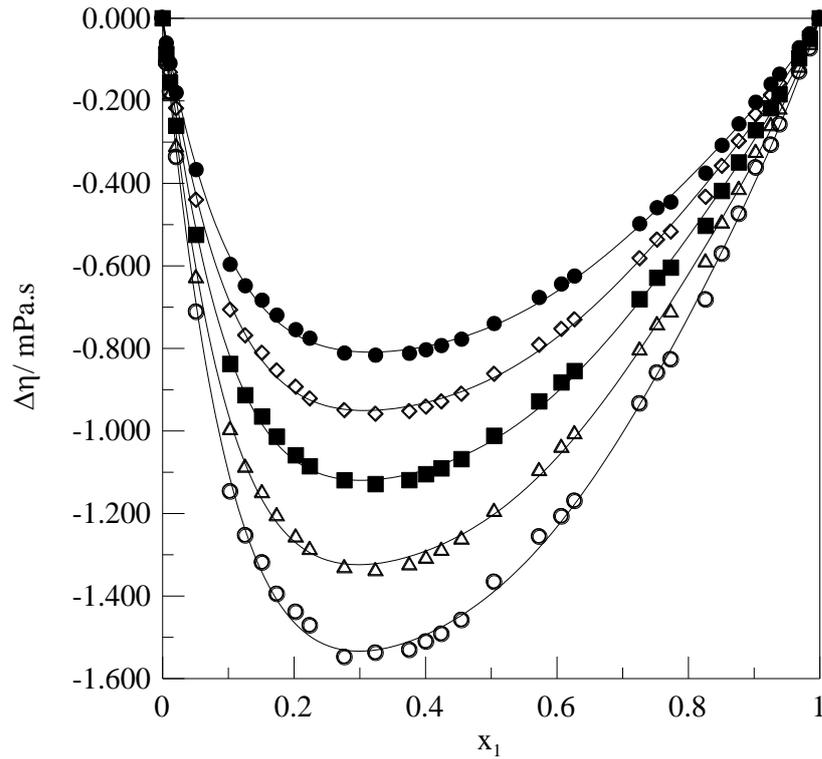


Figura 35 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {dielil malonato (1) + 1-pentanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○288,15K; △293,15K; ■298,15K; ◇303,15K; ●308,15K; (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

A figura 36 mostra a variação das grandezas excesso (V_m^E , $\Delta\kappa$ e $\Delta\eta$) para os sistemas estudados, em função da fração molar do DEM, à temperatura de $T = 298,15$ K e à pressão atmosférica. É possível observar que o aumento da cadeia carbônica do álcool primário ocasionou um aumento no volume molar excesso e no desvio da compressibilidade isentrópica, mas uma diminuição no desvio da viscosidade. Portanto, a estrutura do álcool influencia diretamente no comportamento das grandezas estudadas.

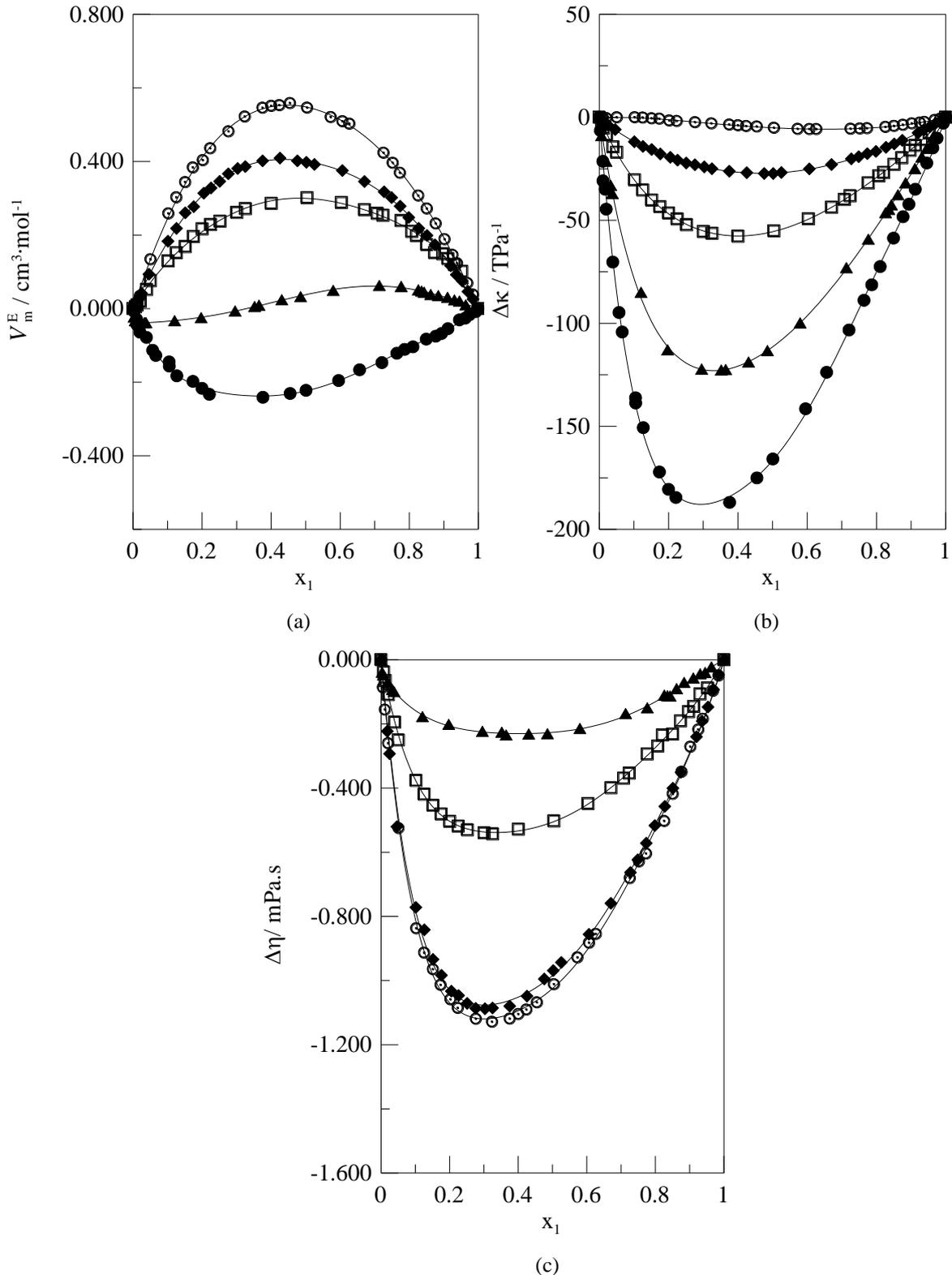


Figura 36 - Volume molar excesso (a), desvio da compressibilidade isentrópica (b) e desvio da viscosidade (c) em função da fração molar do componente 1 a 298,15 K e pressão atmosférica: ●, {dietil malonato (1) + metanol (2)}; ▲, {dietil malonato (1) + etanol (2)}; □, {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)}; ◆, {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)}; ⊙, {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)}; (—) Redlich-Kister.

Fonte: Autor.

A figura 37 apresenta o efeito da temperatura sobre o volume molar excesso. Observou-se que os valores de V_m^E aumentaram linearmente com o aumento da temperatura, isto é, $(\partial V_m^E / \partial T)$ é positiva. O efeito tornou-se mais pronunciado à medida que se aumentou a cadeia do álcool.

Segundo Prausnitz, Lichtenthaler e Azevedo (1999), a entalpia de ligação da maioria das ligações de hidrogênio encontra-se na faixa de 8-40 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, enquanto a entalpia de uma ligação covalente usual está entre 200 e 400 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Portanto, a ligação de hidrogênio é quebrada com mais facilidade e, por esse motivo, os efeitos específicos tendem a diminuir a altas temperaturas onde a energia cinética das moléculas é suficiente para quebrar tais ligações.

O aumento dos valores V_m^E com a temperatura sugere que a elevação da agitação térmica promove enfraquecimento de interações específicas como resultado de uma mudança nas posições moleculares médias, porém, as temperaturas estudadas não são altas o suficiente para promover a quebra das ligações de hidrogênio presentes nos álcoois.

A derivada do volume molar excesso em relação à temperatura sendo positiva, também indica que o aumento do volume do agregado compensa o efeito do aumento do volume nos compostos puros.

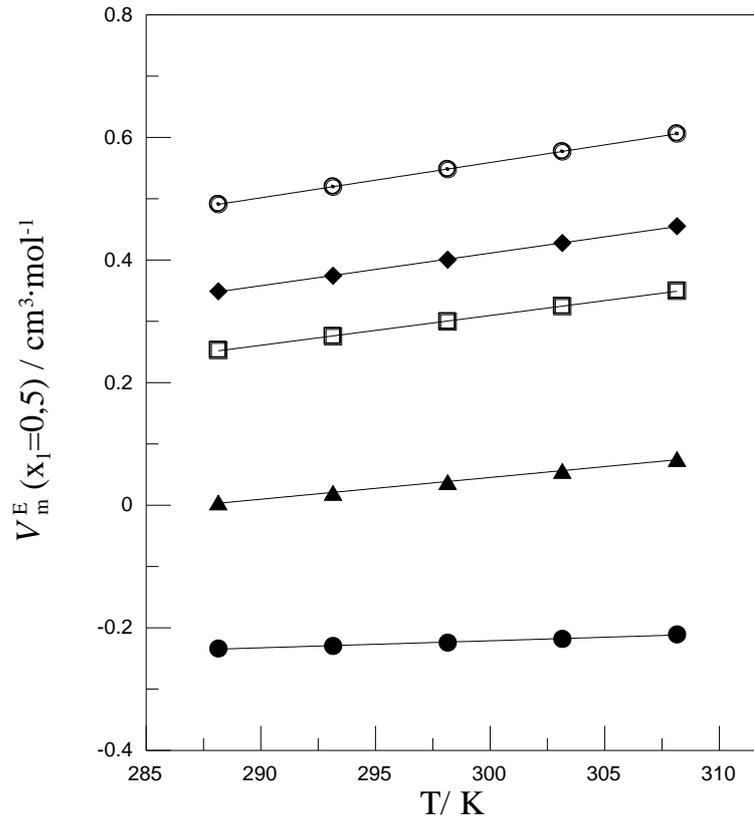


Figura 37 - Volume molar excedente em função da temperatura à composição equimolar e pressão atmosférica: ●, {dietil malonato (1) + metanol (2)}; ▲, {dietil malonato (1) + etanol (2)}; □, {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)}; ◆, {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)}; ○, {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)}; (—) ajuste linear.

Fonte: Autor.

Diferenciando-se a equação (55) em relação a x_2 e combinando o resultado com as relações (40) e (41), obtém-se as seguintes equações para os volumes parciais molares dos componentes 1 e 2:

$$\bar{V}_1 = V_1^o + x_2^2 \sum_{j=0}^{j=n} A_j (1 - 2x_2)^j + 2x_2^2 (1 - x_2) \sum_{j=0}^{j=n} A_j(j) (1 - 2x_2)^{j-1} \quad (58)$$

$$\bar{V}_2 = V_2^o + (1 - x_2)^2 \sum_{j=0}^{j=n} A_j (1 - 2x_2)^j - 2x_2 (1 - x_2) \sum_{j=0}^{j=n} A_j(j) (1 - 2x_2)^{j-1} \quad (59)$$

O cálculo das grandezas parciais à diluição infinita são de interesse, uma vez que, à diluição infinita a interação soluto-soluto desaparece. Deste modo, proporcionan informações a respeito da interação soluto-solvente independentemente do efeito da composição.

Da equação (58), tomando $x_2 = 1$ e $x_1 = 0$, obtém-se o volume parcial molar do componente 1 à diluição infinita:

$$\bar{V}_1^\infty = V_1^o + \sum_{j=0}^{j=n} A_j (-1)^j \quad (60)$$

Analogamente, com $x_2 = 0$ e $x_1 = 1$, obtve-se o volume parcial molar do componente 2 à diluição infinita:

$$\bar{V}_2^\infty = V_2^o + \sum_{j=0}^{j=n} A_j \quad (61)$$

Todavia, a equações de Redlich-Kister e suas derivadas nem sempre proporcionam as melhores representações dessas grandezas à diluição infinita. Foi utilizado um método mais conveniente e mais exato, calculando-se os volumes parciais molares à diluição infinita através dos volumes molares aparentes.

O volume molar aparente do componente 1, $V_{\phi 1}$, e o volume molar aparente do componente 2, $V_{\phi 2}$, foram expressos nas equações (47) e (48). Estas grandezas também foram expressas em função do volume molar excesso através das relações (52) e (53). Efetuando-se uma extrapolação gráfica ou analítica do $V_{\phi 1}$ para $x_1 = 0$ ($x_2 = 1$) determina-se o \bar{V}_1^∞ desejado. Similarmente, extrapolando-se $V_{\phi 2}$ para $x_2 = 0$ ($x_1 = 1$), obtém-se \bar{V}_2^∞ .

O volume parcial molar à diluição infinita também foi calculado a partir do volume molar excesso fazendo uso do método da extrapolação do volume reduzido. Esse método consiste no rearranjo das eq. (52) e (53) e sua divisão por x_2 e x_1 , respectivamente, resultando nas equações a seguir.

$$\frac{V_m^E}{x_1 x_2} = \frac{(V_{\phi 1} - V_1^o)}{x_2} \quad (62)$$

$$\frac{V_m^E}{x_1 x_2} = \frac{(V_{\phi 2} - V_2^o)}{x_1} \quad (63)$$

A extrapolação linear do volume reduzido ($V_m^E/x_1 x_2$) para $x_1 = 0$ leva ao valor desejado de \bar{V}_1^∞ . A partir de uma extrapolação semelhante de $V_m^E/x_1 x_2$ para $x_2 = 0$, obtém-se \bar{V}_2^∞ .

Os métodos utilizados para obtenção dos volumes parciais molares à diluição infinita devem levar a valores equivalentes. Estes dados estão apresentados nas tabelas 9 e 10. Observa-se que para os dois primeiros sistemas {DEM + (metanol ou etanol)} os volumes parciais à diluição infinita são menores que os volumes molares dos componentes puros. Esses valores, em adição a valores negativos de V_m^E para o primeiro sistema, podem ser indícios de que os efeitos químicos e estruturais podem estar prevalecendo sobre os efeitos físicos, sobretudo para o sistema contendo metanol. Para as demais misturas {DEM + (1-

propanol, ou 1-butanol, ou 1-pentanol)), os valores dos volumes parciais molares à diluição infinita são maiores do que dos componentes puros e os dados de v_m^E são positivos, indicando possivelmente predomínio de efeitos físicos.

Como pode ser visto nas tabelas B26-B50 presentes no Apêndice B, o único sistema que apresenta valores de \bar{V}_i^E inteiramente negativos é o sistema (DEM + metanol). A mistura (DEM + etanol) apresentou alternância de valores positivos e negativos, enquanto os demais sistemas exibiram valores positivos para \bar{V}_i^E . Segundo Bittencourt (2011), valores negativos de \bar{V}_i^E podem ser indícios da predominância de forças específicas ou efeitos estruturais. Logo, valores positivos indicam que efeitos físicos podem estar prevalecendo nos sistemas estudados.

Tabela 9 - Volume parcial molar e parcial molar excesso à diluição infinita do DEM nos álcoois à diferentes temperaturas e pressão atmosférica.

T/ K	$V_1^o /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}_1^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (63)	$\bar{V}_1^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (55)	$\bar{V}_1^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (65)	$\bar{V}_1^{E,\infty} /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
x_1 dietil malonato + (1- x_1) metanol					
288.15	151.01	149.31	149.07	149.07	-1.699
293.15	151.77	150.05	149.72	149.72	-1.720
298.15	152.54	150.83	150.54	150.54	-1.710
303.15	153.33	151.60	151.38	149.44	-1.730
308.15	154.12	152.39	152.22	150.32	-1.730
x_1 dietil malonato + (1- x_1) etanol					
288.15	151.01	150.66	149,08	149,04	-0.350
293.15	151.77	151.36	149,91	149,87	-0.410
298.15	152.54	152.11	150,78	150,74	-0.430
303.15	153.33	152.85	151,65	151,61	-0.480
308.15	154.12	153.58	152,55	152,51	-0.540
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-propanol					
288.15	151.01	153.01	151.27	151.26	2.000
293.15	151.77	153.86	152.17	152.16	2.090
298.15	152.54	154.77	153.09	153.29	2.230
303.15	153.33	155.66	154.02	154.02	2.330
308.15	154.12	156.56	155.02	155.02	2.440
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-butanol					
288.15	151.06	152.87	152.10	152.09	1.810
293.15	151.82	153.78	153.00	152.99	1.960
298.15	152.59	154.67	153.94	153.92	2.080
303.15	153.37	155.60	154.91	154.89	2.230
308.15	154.17	156.55	155.85	155.83	2.380
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-pentanol					
288.15	151.05	153.64	151.27	151.26	2.590
293.15	151.82	154.57	152.87	152.86	2.750
298.15	152.59	155.48	154.19	154.19	2.890
303.15	153.37	156.41	155.22	155.21	3.040
308.15	154.17	157.36	156.07	156.07	3.190

Fonte: Autor.

Tabela 10 - Volume parcial molar e parcial molar excesso à diluição infinita dos álcoois em DEM à diferentes temperaturas e pressão atmosférica.

T / K	$V_2^o /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}_2^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (64)	$\bar{V}_2^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (56)	$\bar{V}_2^\infty /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ Eq. (66)	$\bar{V}_2^{E,\infty} /$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
x_1 dietil malonato + (1- x_1) metanol					
288,15	40,23	37,75	39,16	39,15	-2,48
293,15	40,47	37,97	39,30	39,30	-2,50
298,15	40,71	38,21	39,53	39,52	-2,50
303,15	40,96	38,46	39,68	39,67	-2,50
308,15	41,21	38,72	39,90	39,9	-2,49
x_1 dietil malonato + (1- x_1) etanol					
288,15	58,05	57,96	58,19	58,19	-0,09
293,15	58,36	58,27	58,53	58,52	-0,09
298,15	58,68	58,59	58,89	58,89	-0,09
303,15	59,00	58,91	59,25	59,24	-0,09
308,15	59,33	59,24	59,58	59,58	-0,09
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-propanol					
288,15	74,40	75,69	77,00	77,05	1,29
293,15	74,77	76,20	77,48	77,54	1,43
298,15	75,15	76,72	77,93	77,98	1,57
303,15	75,53	77,26	78,38	78,43	1,73
308,15	75,91	77,81	78,84	78,90	1,90
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-butanol					
288,15	91,13	92,85	92,62	92,62	1,72
293,15	91,56	93,42	93,12	93,12	1,86
298,15	91,99	94,00	93,65	93,65	2,01
303,15	92,43	94,61	94,19	94,19	2,18
308,15	92,88	95,21	94,73	94,73	2,33
x_1 dietil malonato + (1- x_1) 1-pentanol					
288,15	107,74	110,18	110,12	110,13	2,44
293,15	108,22	110,88	110,74	110,75	2,66
298,15	108,71	111,54	111,29	111,30	2,83
303,15	109,20	112,20	111,89	111,90	3,00
308,15	109,71	112,85	112,48	112,49	3,14

Fonte: Autor.

As figuras 38-42 apresentam os espectros de infravermelho dos cinco sistemas estudados, onde é possível visualizar a absorbância para cada concentração em função do número de onda (inverso do comprimento de onda). A absorbância representa a capacidade intrínseca da solução de absorver radiação em frequências específicas, sendo definida pela equação (64).

$$A = \log \frac{I_0}{I}, \quad (64)$$

onde A é a absorbância, I_0 energia radiante incidente na amostra e I a energia radiante transmitida pela mesma.

O grupamento hidroxila livre (que não participa de ligação de hidrogênio) dos álcoois absorve fortemente na faixa de $3650-3584 \text{ cm}^{-1}$. Essas bandas agudas são observadas na fase vapor, em soluções muito diluídas em solventes apolares ou em grupamentos $-\text{OH}$ estericamente impedidos. A ligação de hidrogênio intermolecular torna-se importante quando a concentração de solução aumenta e outras bandas começam a aparecer em frequências mais baixas, tipicamente na faixa de $3550-3200 \text{ cm}^{-1}$ (SILVERSTEIN; WEBSTER; KIEMLE, 2006). Por esta razão, apesar do espectro compreender uma faixa de número de onda ($4000-400 \text{ cm}^{-1}$), a região de interesse é aquela entre 3650 e 3200 cm^{-1} que representam as bandas características de álcoois que provém de vibrações de deformação axial do grupamento $-\text{OH}$.

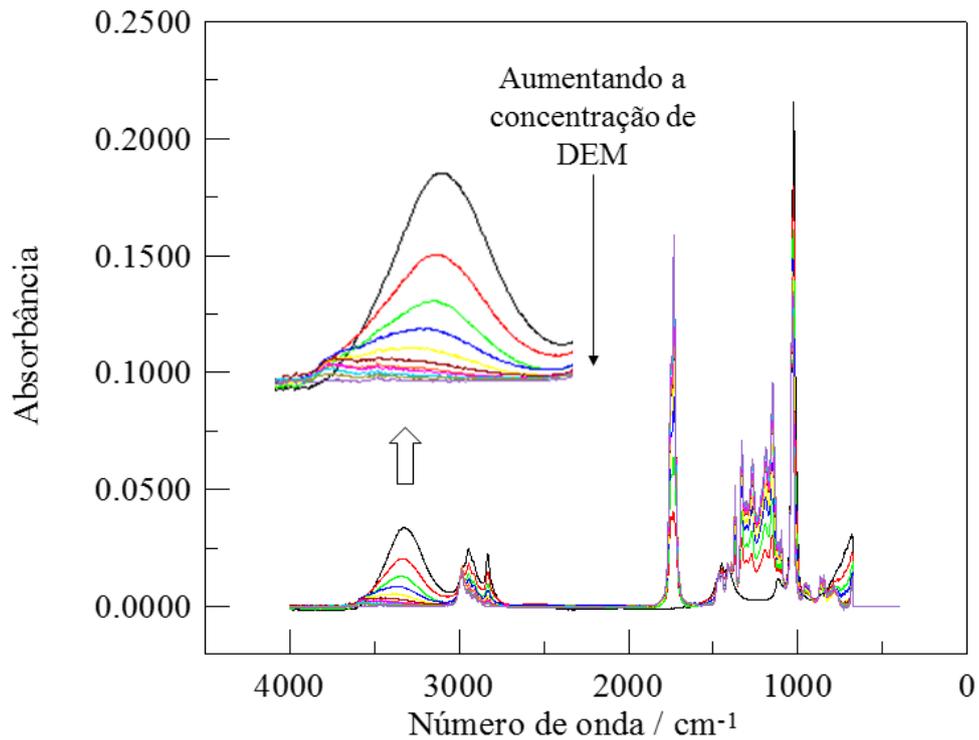


Figura 38 - Espectro FT-IR do metanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + metanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo).
Fonte: Autor.

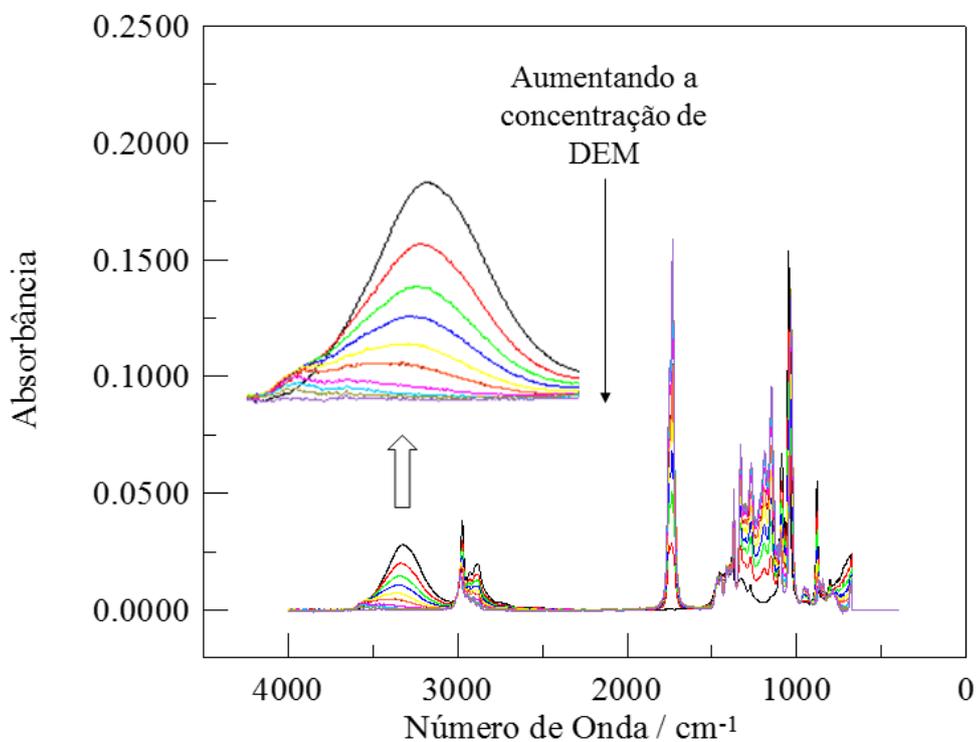


Figura 39 - Espectro FT-IR do etanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + etanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo).
Fonte: Autor.

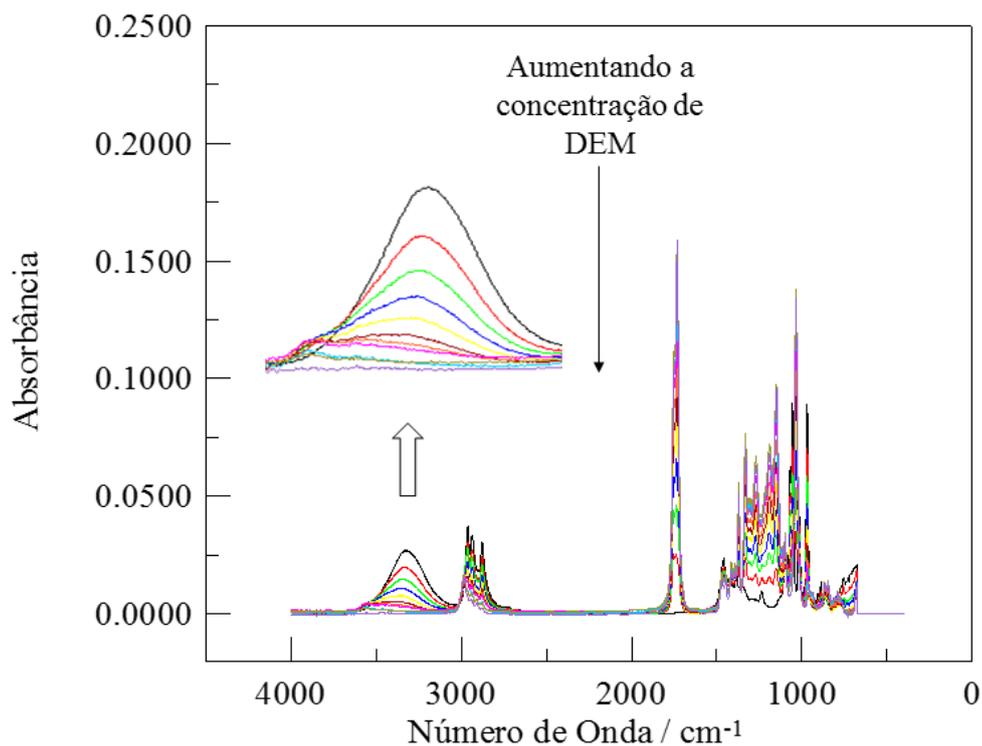


Figura 40 - Espectro FT-IR do 1-propanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-propanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo).
Fonte: Autor.

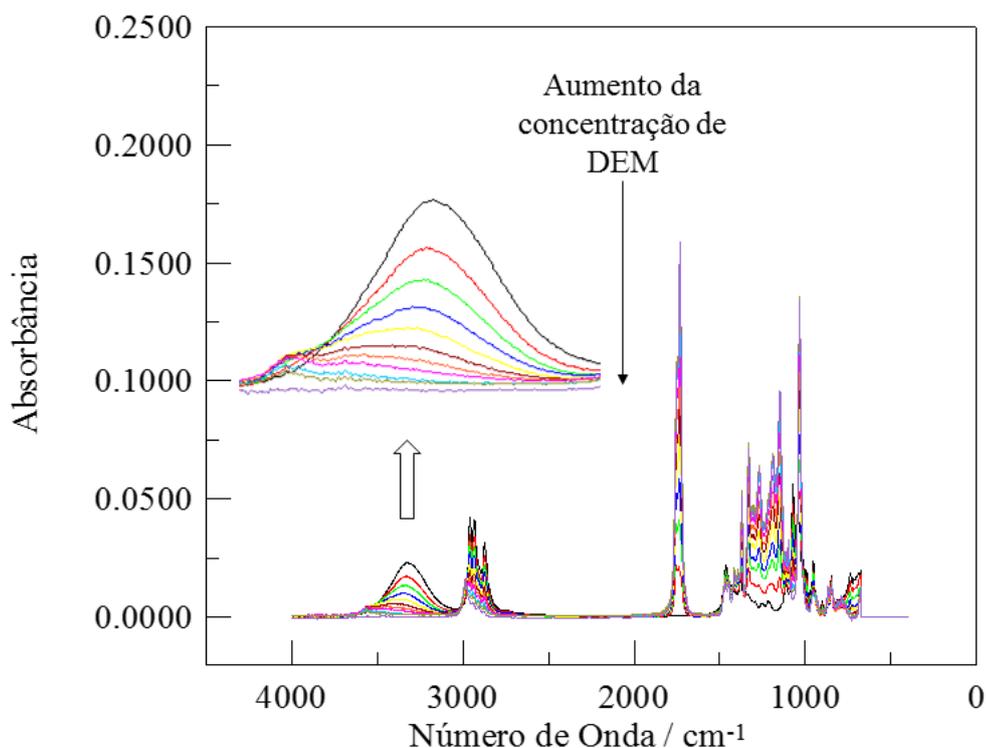


Figura 41 - Espectro FT-IR do 1-butanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-butanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo).
Fonte: Autor.

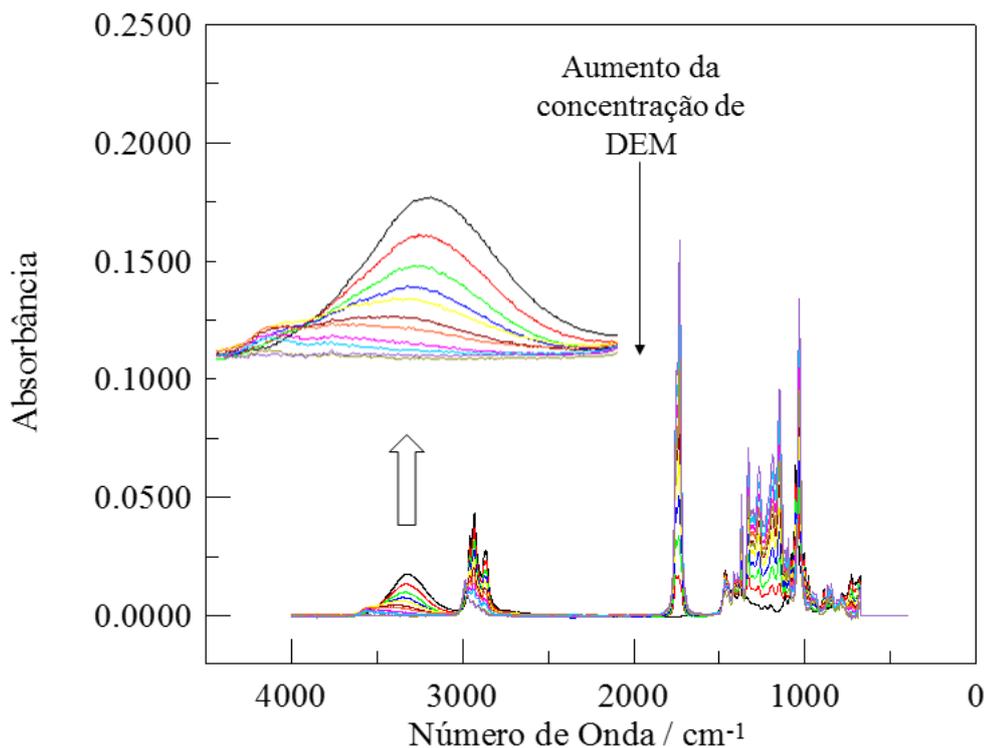


Figura 42 - Espectro FT-IR do 1-pentanol puro (preto), do dietil malonato puro (lilás), e das soluções de (DEM + 1-pentanol): $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (vermelho); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (amarelo); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (laranja); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (rosa); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (verde musgo).

Fonte: Autor.

Com o auxílio do software OMNIC foi possível obter o valor do pico de absorção na faixa de interesse dos álcoois primários puros e das soluções binárias com concentrações até $x_1 = 0,4$ para os sistemas {DEM + (metanol e etanol)} e $x_1 = 0,5$ para os demais. Esses dados são apresentados na tabela 11. Através dos números de onda observados foi possível obter o valor aproximado da absorbância nos picos, sendo estes mostrados na tabela 12.

Tabela 11 - Absorções de deformação axial O-H observadas.

x_1	Número de onda / cm^{-1}				
0	3321,29 ^a	3317,65 ^b	3319,13 ^c	3319,84 ^d	3319,95 ^e
0,1	3335,61	3332,25	3334,37	3333,96	3335,04
0,2	3351,35	3339,75	3345,42	3335,60	3342,26
0,3	3355,53	3356,91	3352,58	3342,40	3349,27
0,4	3365,27	3357,98	3368,34	3364,93	3359,10
0,5			3429,53	3390,24	3362,04

^ametanol puro; ^betanol puro; ^c1-propanol puro; ^d1-butanol puro; ^e1-pentanol puro.

Fonte: Autor.

Tabela 12 - Absorbância relativa aos picos de absorção citados na Tabela 11.

x_1	Absorbância				
0	0,03375 ^a	0,02797 ^b	0,02697 ^c	0,02303 ^d	0,01762 ^e
0,1	0,02053	0,02027	0,01988	0,01733	0,01350
0,2	0,01289	0,01468	0,01469	0,01345	0,01008
0,3	0,00859	0,01085	0,01093	0,01016	0,00775
0,4	0,00544	0,00731	0,00767	0,00768	0,00631
0,5			0,00533	0,00567	0,00438

^ametanol puro; ^betanol puro; ^c1-propanol puro; ^d1-butanol puro; ^e1-pentanol puro.

Fonte: Autor.

Observa-se, portanto, que os álcoois puros absorvem em números de onda muito próximos, mas que a absorção diminui com o aumento da cadeia carbônica do álcool. O Apêndice A apresenta os espectros FT-IR dos álcoois puros.

A formação de associações em soluções binárias é interpretada em termos de ligação de hidrogênio. A formação destas ligações altera a constante de força dos grupamentos nela envolvidos. Com isso, alteram-se as frequências de deformação axial e de deformação angular, o que resulta no deslocamento das bandas e na mudança de intensidade das mesmas, tornando os espectros infravermelhos uma importante ferramenta no estudo de associações inter e intramoleculares. Segundo Silverstein, Webster e Kiemle (2006) as bandas de deformação X-H deslocam-se para frequências mais baixas, usualmente com aumento de intensidade e alargamento da banda.

Valores negativos de deslocamento, isto é, se as bandas deslocarem-se para números de onda menores, são indícios de forte associação entre as moléculas diferentes presentes na solução. Porém, no presente estudo, observou-se que as bandas do grupamento –OH deslocaram-se em direção a frequências mais elevadas quando comparadas aos álcoois puros, assinalando o enfraquecimento de associações intermoleculares. Além disso, houve diminuição da intensidade e estreitamento da banda.

A espectroscopia de ressonância magnética nuclear pode proporcionar informações importantes acerca da estrutura e das interações moleculares. Os deslocamentos químicos, δ , de ^1H e ^{13}C para os componentes puros e para os sistemas (dietil malonaton + álcoois) foram estudados. Primeiramente, os espectros dos componentes puros foram analisados, apresentando o significado de cada pico observado.

A figura 43 representa o espectro de hidrogênio-1 do metanol puro. O pico em $\delta = 3,49$ ppm (a) é um singlete e refere-se aos hidrogênios do grupamento metila. Os outros pequenos picos podem ser relativos a traços de impurezas na amostra. A figura 44 mostra o

espectro carbono-13 desse álcool, onde observa-se em $\delta = 51,04$ ppm o pico relativo ao carbono do grupamento metila.

Apresenta-se na figura 45 o espectro de ^1H do etanol puro. O quadrupletto representa os hidrogênios do grupamento $-\text{CH}_2$ em *b*, apresentando maior deslocamento químico, pois são relativos ao carbono que está ligado ao elemento mais eletronegativo (oxigênio). O tripleto refere-se aos hidrogênios do grupamento metila. Na figura 46 está mostrado o espectro de ^{13}C do etanol. O pico em $\delta = 58,59$ ppm é relativo ao carbono *b*, pois como está ligado ao elemento mais eletronegativo apresenta maior deslocamento químico. O pico em $\delta = 18,55$ ppm representa o carbono do grupamento metila.

A figura 47 exhibe o espectro de ^1H do 1-propanol puro, onde o tripleto localizado mais a esquerda do quadro (campo baixo) representa os prótons do grupamento $-\text{CH}_2$ *c*, grupo ligado ao elemento mais eletronegativo. O multipletto (com 6 picos) representa os hidrogênios de $-\text{CH}_2$ *b*, enquanto o tripleto mais a direita (campo alto) é relativo aos prótons do grupamento metila. Observa-se na figura 48 o espectro RMN de ^{13}C deste álcool. O pico em $\delta = 64,86$ ppm refere-se ao carbono do grupamento $-\text{CH}_2$ ligado ao elemento mais eletronegativo, enquanto o carbono do outro grupamento $-\text{CH}_2$ apresenta deslocamento químico igual a 26,04 ppm e o carbono do grupamento metila encontra-se em $\delta = 10,29$ ppm.

O espectro de hidrogênio-1 para o 1-butanol é apresentado na figura 49. O tripleto de maior deslocamento químico é relativo aos prótons mais próximos ao elemento mais eletronegativo, ou seja, hidrogênios *d*. Seguindo este princípio, o multipletto com cinco picos (em torno de $\delta = 1,55$ ppm) refere-se aos prótons *c*, enquanto o multipletto com seis picos (em torno de $\delta = 1,38$ ppm) aos prótons *b*. Os hidrogênios do grupamento metila (*a*) são representados pelo tripleto de menor frequência. No espectro de carbono-13 (figura 50), o pico do carbono ligado ao elemento mais eletronegativo possui maior deslocamento químico, logo, encontra-se em $\delta = 62,91$ ppm. Desse modo, o carbono *c* é relativo ao sinal presente em 35,01 ppm e o carbono *b* em 19,03 ppm. O carbono do grupamento metila está representado por $\delta = 14,01$ ppm.

A figura 51 mostra o espectro de hidrogênio-1 do 1-pentanol puro. É possível observar que os prótons mais próximos do elemento mais eletronegativo estão indicados pelo pico no campo mais baixo, isto é, pelo tripleto cujo pico central está em $\delta = 3,64$ ppm. O multipletto com cinco picos (em torno de $\delta = 1,57$ ppm) é relativo aos hidrogênios do grupamento $-\text{CH}_2$ em *d*. O sinal dos hidrogênios *b* e *c* caíram juntos, o que pode ser justificado pelo valor da integral, cujo deslocamento químico está em torno de 1,33 ppm e trata-se de um multipletto com 6 picos. Os prótons do grupamento metila estão representados pelo tripleto de menor

frequência. O espectro RMN de carbono-13 está apresentado na figura 52. O carbono ligado ao elemento mais eletronegativo (*e*) está representado pelo pico de maior frequência ($\delta = 63,23$ ppm). Sendo assim, os carbonos *d*, *c* e *b* são previstos pelos picos em deslocamentos iguais a 32,63 ppm, 28,04 ppm e 22,63 ppm, respectivamente. O carbono do grupo metila é indicado pelo sinal em $\delta = 14,19$ ppm.

A molécula do dietil malonato é simétrica. No espectro de ^1H (figura 53) desse composto são encontrados apenas três sinais para os diferentes prótons presentes na estrutura. Os hidrogênios relativos ao grupo $-\text{CH}_2$ central (entre os dois grupos carbonila adjacentes) são representados pelo singlete em $\delta = 3,38$ ppm. Os prótons do grupo $-\text{CH}_2$ em *b* estão representados pelo quadrupelo e os hidrogênios relativos ao grupo metila ao triplo. A figura 54 exibe o espectro de ^{13}C . Do mesmo modo que o espectro de ^1H , e por se tratar de uma molécula simétrica, os sinais relativos aos carbonos que se encontram em ambientes quimicamente idênticos exibem o mesmo deslocamento químico. O carbono do grupo carbonila é o de maior frequência, em $\delta = 166,66$ ppm. É importante evidenciar que tal dado foi previsto por Pavia et al. (2010), onde indica-se que o sinal do grupo carbonila para ésteres aparece em uma faixa de 155-185 ppm. O carbono do grupo $-\text{CH}_2$ em *b* é indicado por $\delta = 61,53$ ppm, enquanto o grupo em *f* é relativo ao $\delta = 41,70$ ppm. O carbono do grupo metila é expresso pelo sinal de menor frequência.

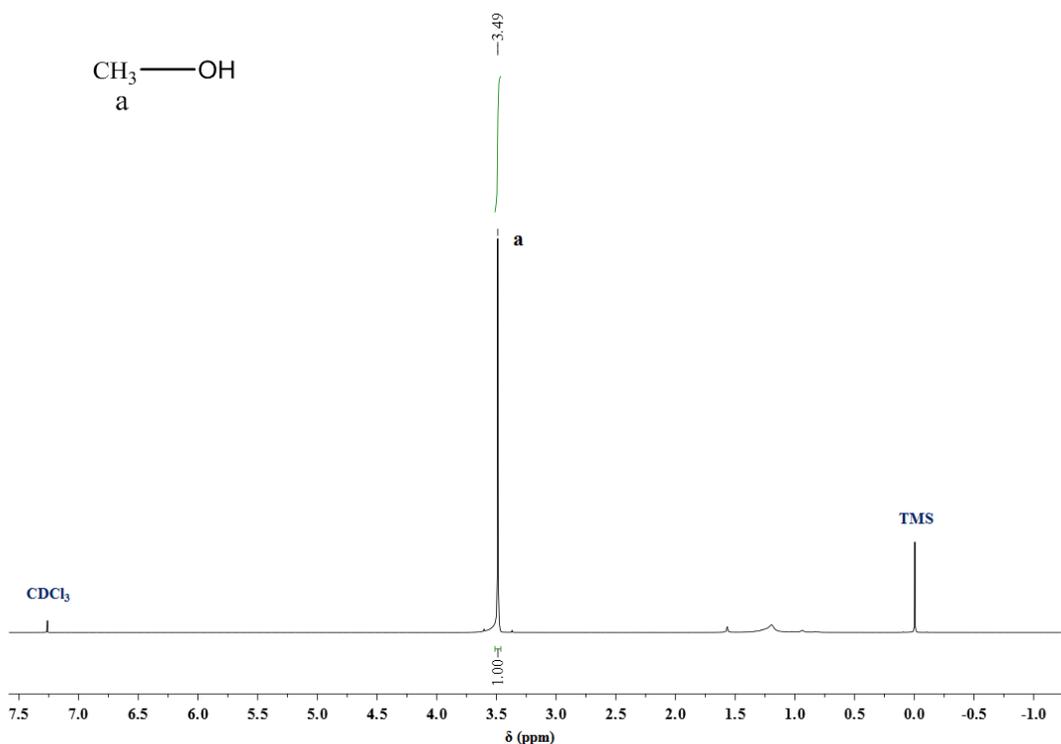


Figura 43 - Espectro de RMN – ^1H do metanol puro.
Fonte: Autor.

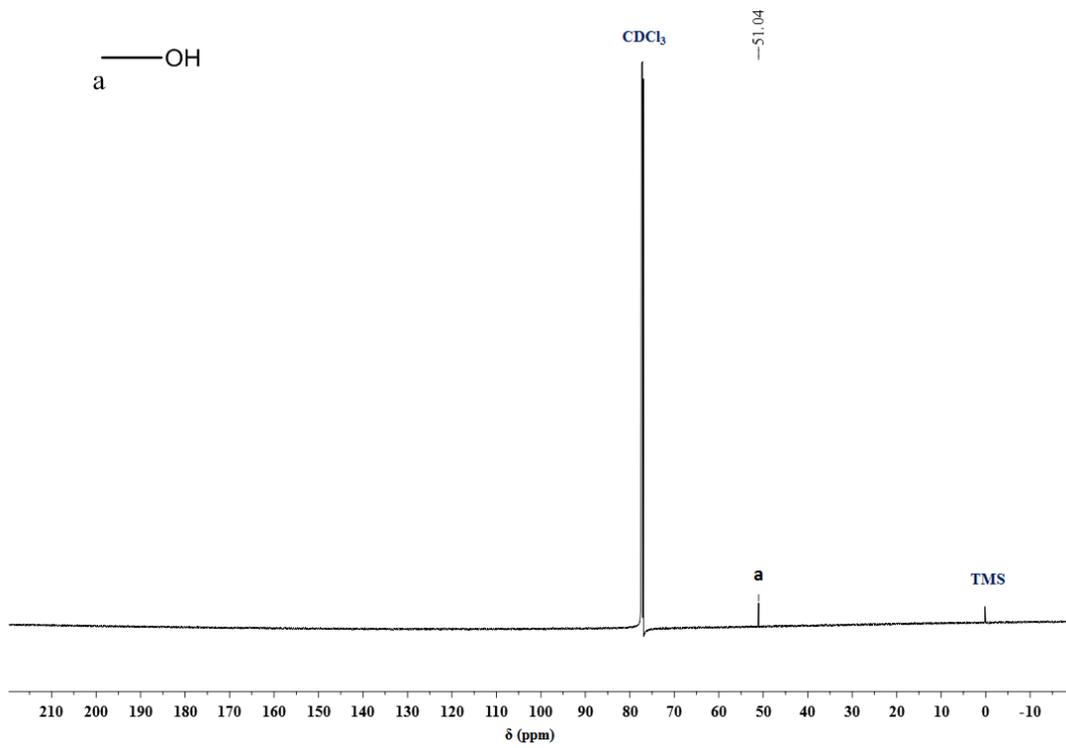


Figura 44 - Espectro de RMN – ^{13}C do metanol puro.
Fonte: Autor.

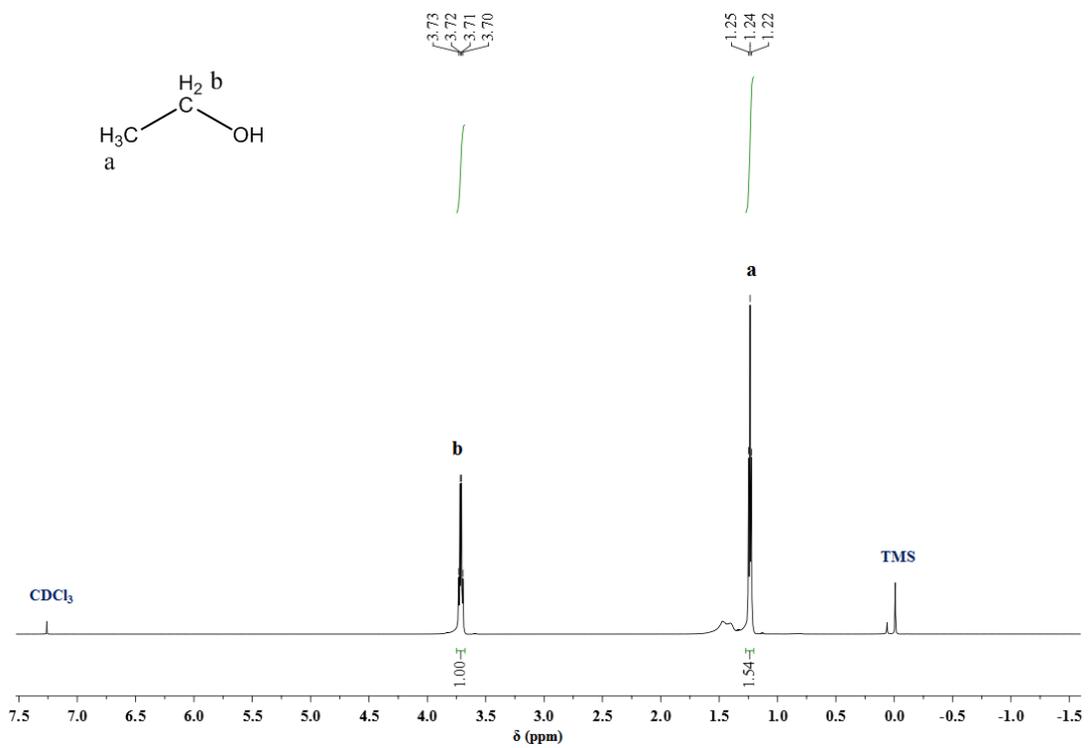


Figura 45 - Espectro de RMN – 1H do etanol puro.
Fonte: Autor.

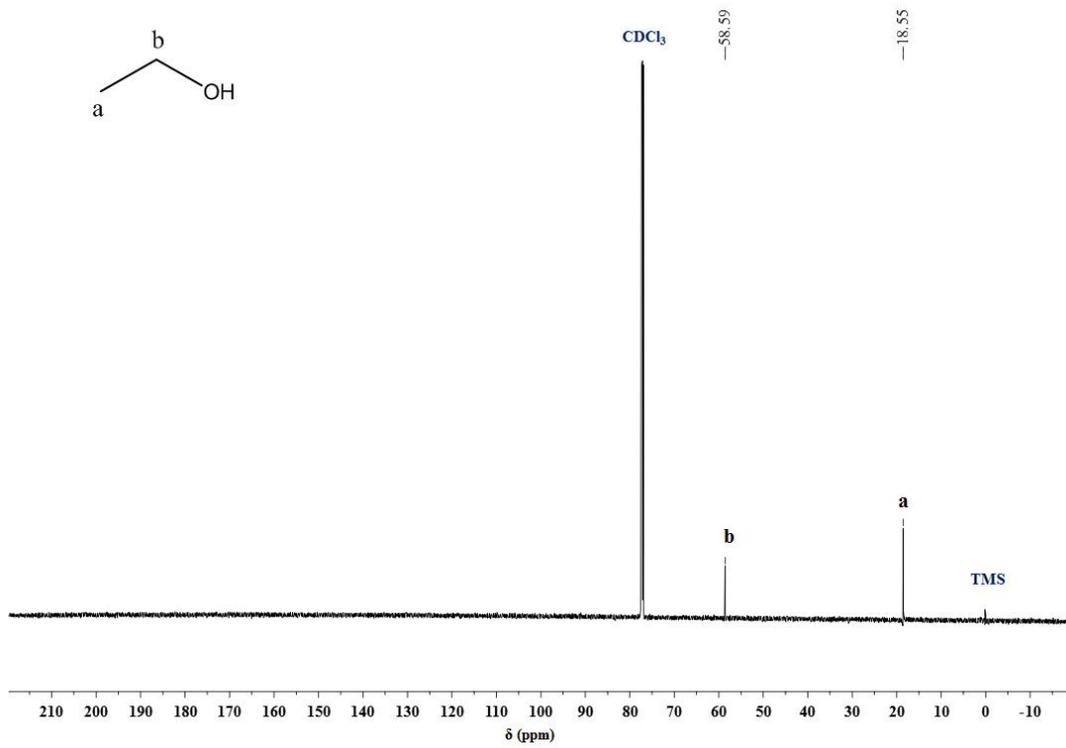


Figura 46 - Espectro de RMN – ^{13}C do etanol puro.
Fonte: Autor.

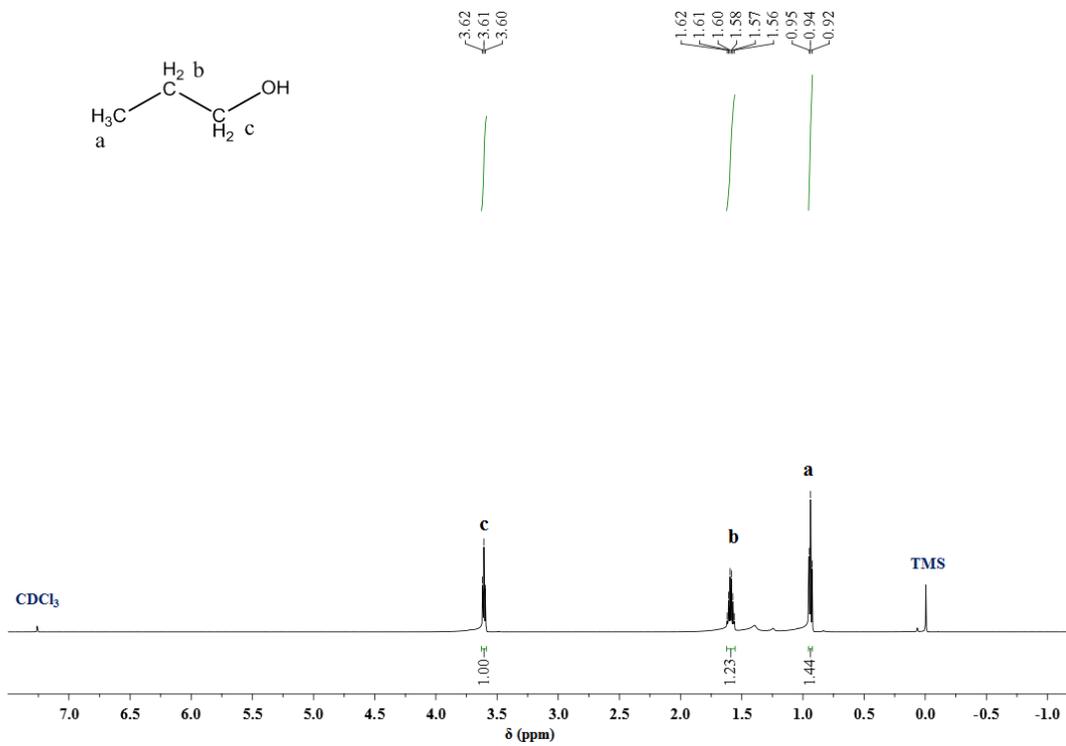


Figura 47 - Espectro de RMN – ^1H do 1-propanol puro.
Fonte: Autor.

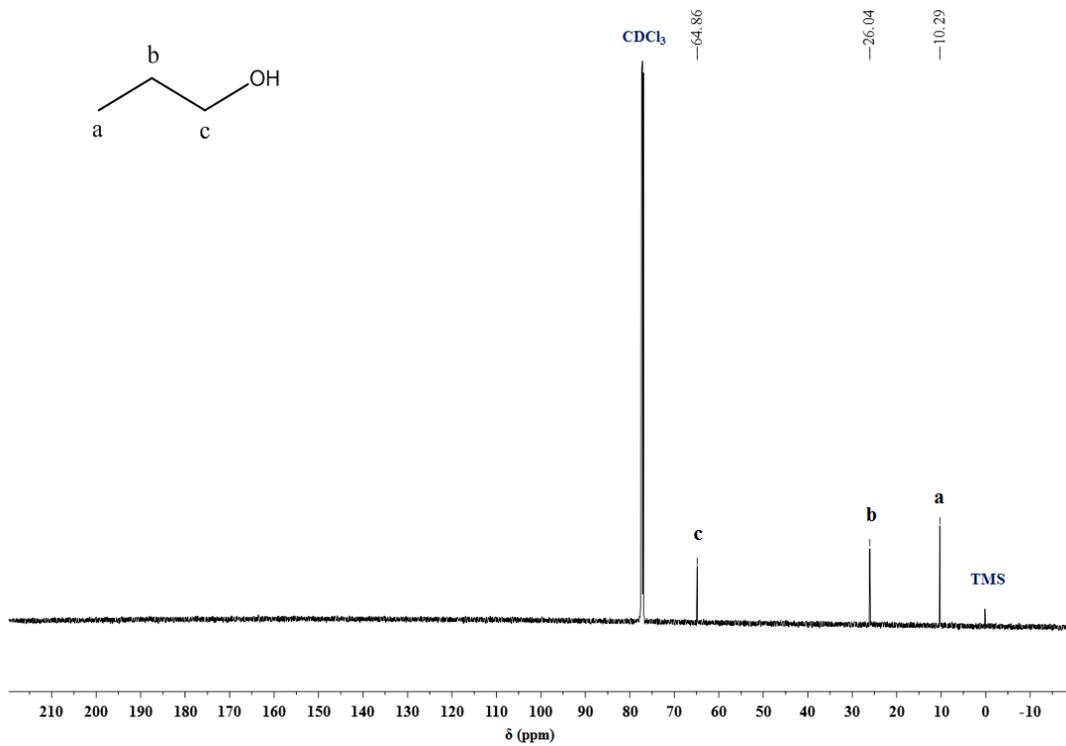


Figura 48 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-propanol puro.
Fonte: Autor.

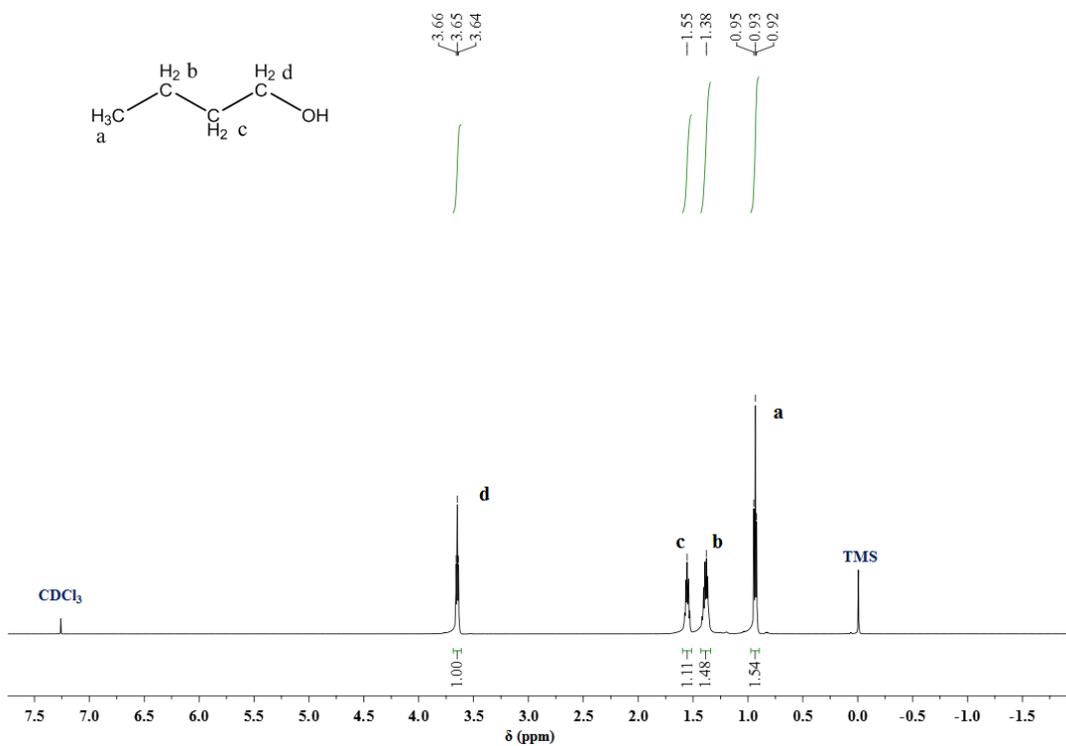


Figura 49 - Espectro de RMN – ^1H do 1-butanol puro.
Fonte: Autor.

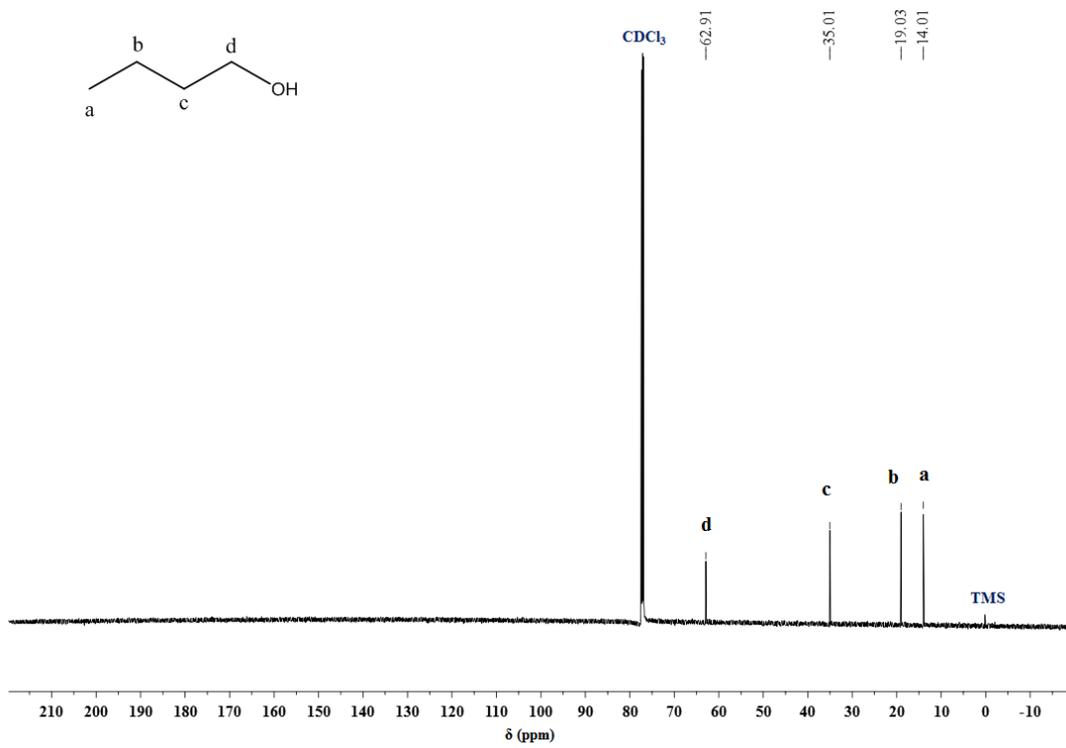


Figura 50 - Espectro de RMN – ^{13}C do 1-butanol puro.
Fonte: Autor.

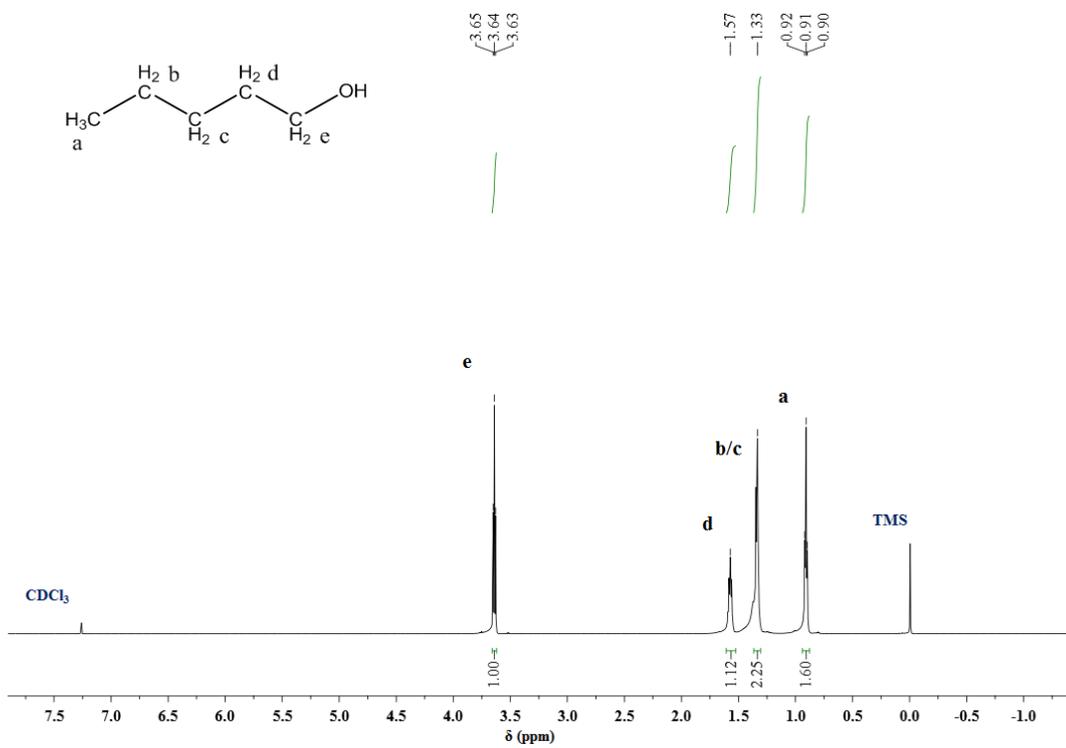


Figura 51 - Espectro de RMN – ^1H do 1-pentanol puro.
Fonte: Autor.

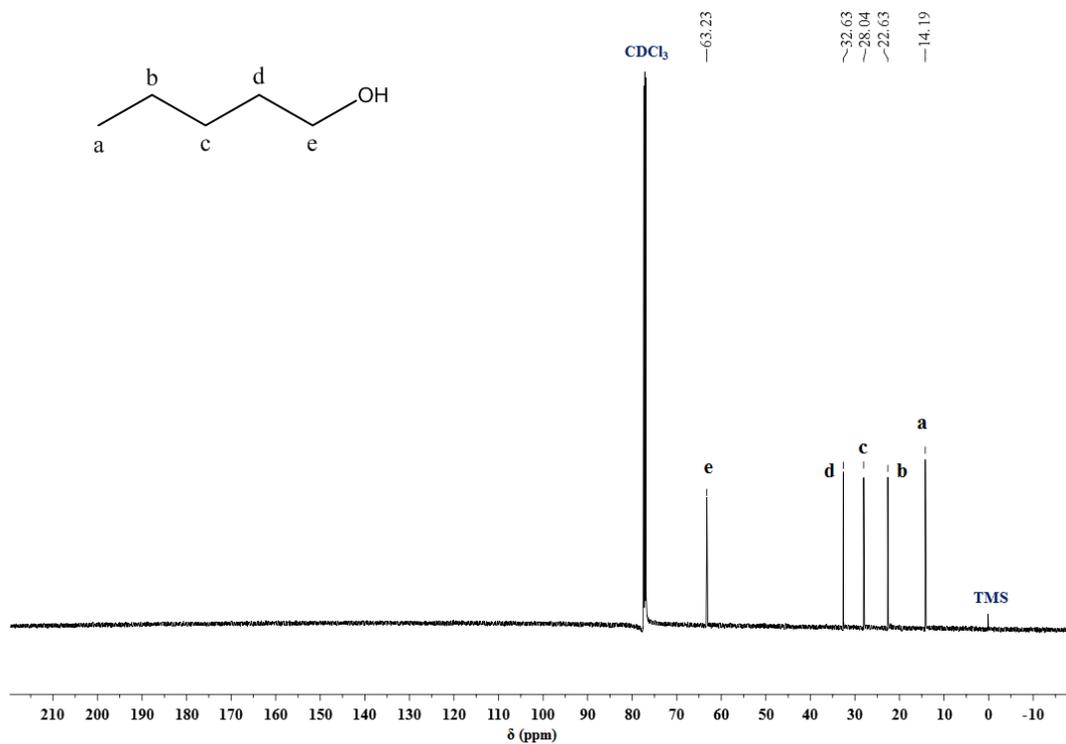


Figura 52 - Espectro de RMN – ¹³C do 1-pentanol puro.
Fonte: Autor.

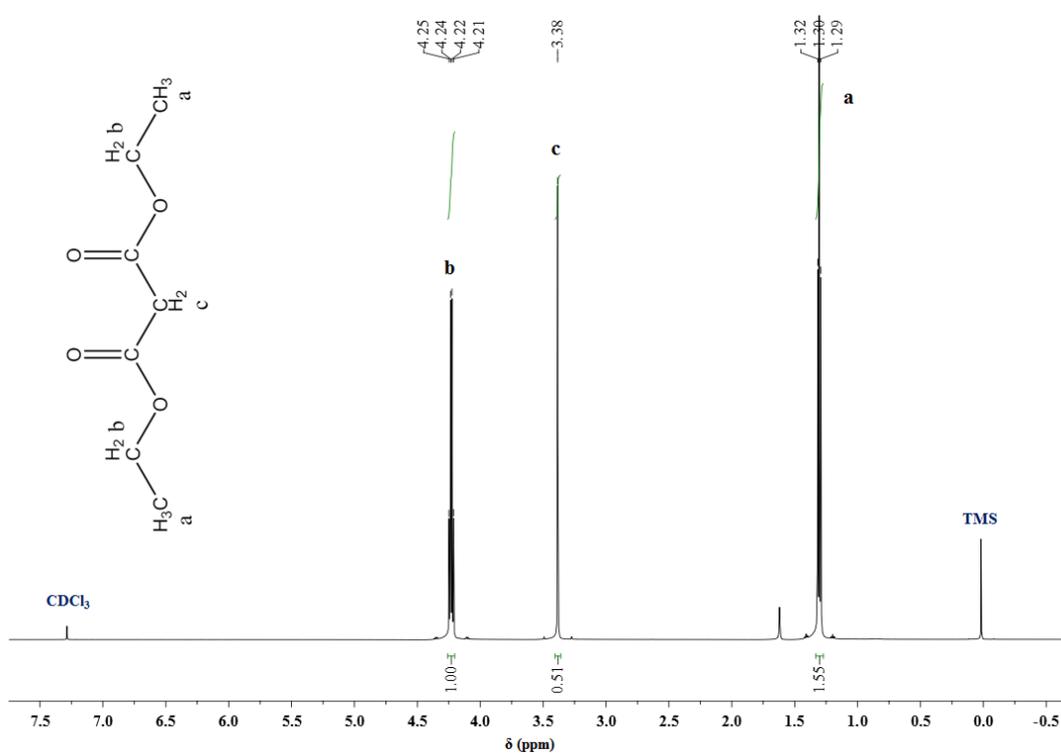


Figura 53 - Espectro de RMN – ¹H do dietil malonato puro.
Fonte: Autor.

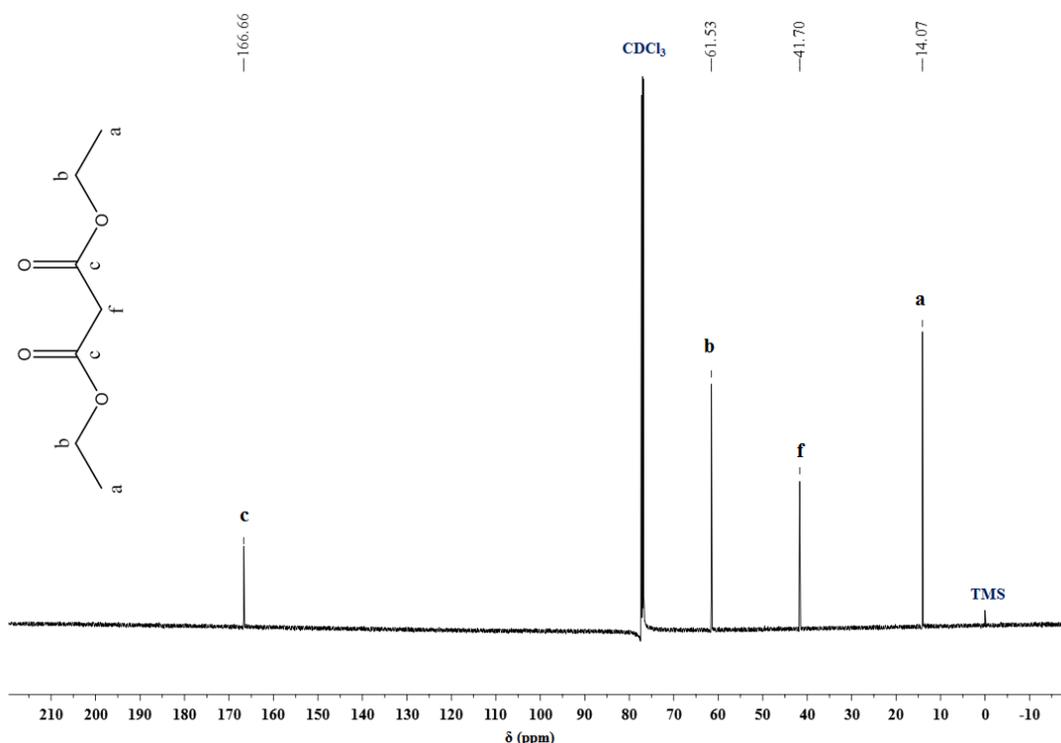


Figura 54 - Espectro de RMN – ^{13}C do dietil malonato puro.

Fonte: Autor.

O sinal do grupamento hidroxila em álcoois pode ser encontrado entre $\delta \sim 0,5$ e $\delta \sim 5,0$ ppm. Conclui-se então, que o deslocamento químico desse grupamento é variável, dependendo da concentração, temperatura e do tipo de solvente (PAVIA et al., 2010). Essa ampla faixa torna difícil a identificação do sinal do grupamento hidroxila em vista dos outros sinais, como pode ser observado nos espectros dos álcoois puros onde este sinal não foi identificado.

Segundo Silverstein, Webster e Kiemle (2006), a formação de ligações de hidrogênio intermoleculares diminui a densidade eletrônica em torno do hidrogênio e, assim, causa deslocamento para frequências mais altas.

No presente estudo, caso se observasse aumento no deslocamento químico dos prótons do grupamento hidroxila em função da concentração, seria um indicativo de ligações de hidrogênio entre os grupamentos carbonila e hidroxila ($\text{C}=\text{O} \cdots \text{H}-\text{O}$). Porém, a alta concentração de álcool frente ao clorofórmio utilizada nas análises implicou em um pico de CDCl_3 pouco expressivo e espectros de ^1H de baixa resolução, não possibilitando a visualização do sinal do grupamento $-\text{OH}$ e como este se comporta com o aumento da concentração de dietil malonato.

Contudo, a concentração de amostra frente ao clorofórmio foi ideal para as análises de RMN - ^{13}C , uma vez que trata-se de um núcleo pouco abundante (1,1%) e com frequência de detecção muito mais baixa que a do hidrogênio. Analogamente aos prótons do grupamento hidroxila, o deslocamento do carbono do grupamento carbonila ($>\text{C}=\text{O}$) para altas frequências confirmaria a formação de ligações de hidrogênio $\text{C}=\text{O} \cdots \text{H}-\text{O}$ (MEHTA et al., 2009).

Nas figuras 55-59 são mostrados os espectros de RMN de carbono-13 dos sistemas {DEM + (metanol, ou etanol, ou 1-propanol, ou 1-butanol, ou 1-pentanol)}. Ressalta-se que os espectros de hidrogênio-1 não foram apresentados pois a dificuldade de visualização do sinal do grupamento $-\text{OH}$ tornou o resultado inconclusivo.

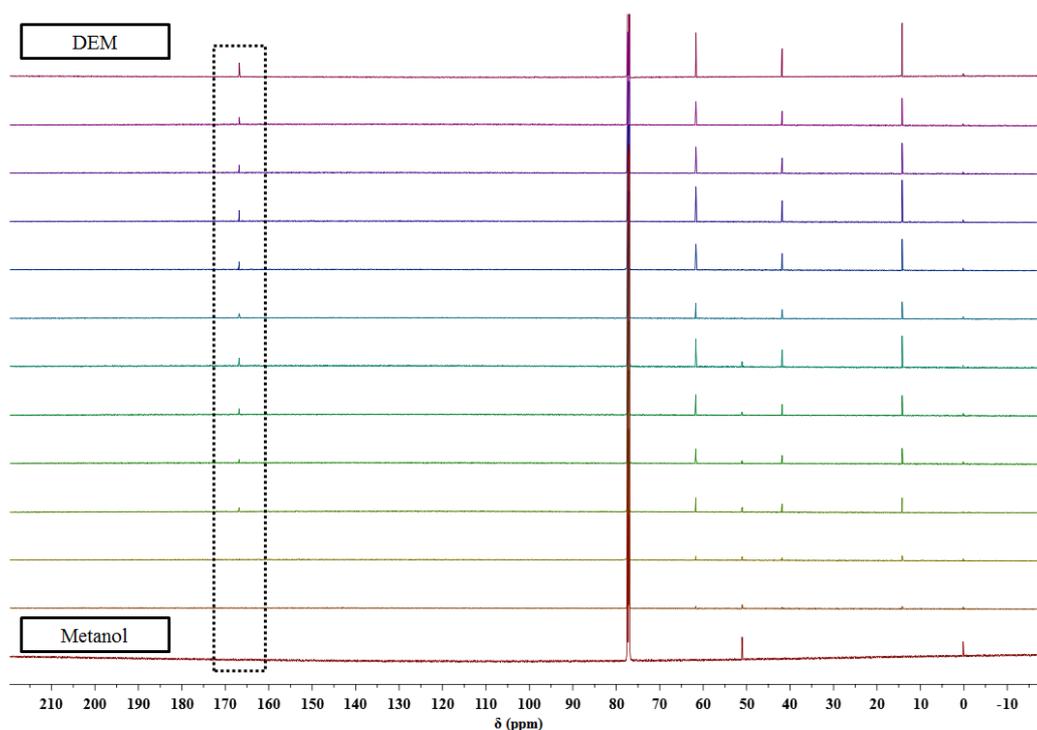


Figura 55 - Espectro de RMN - ^{13}C do metanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + metanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta).

Fonte: Autor.

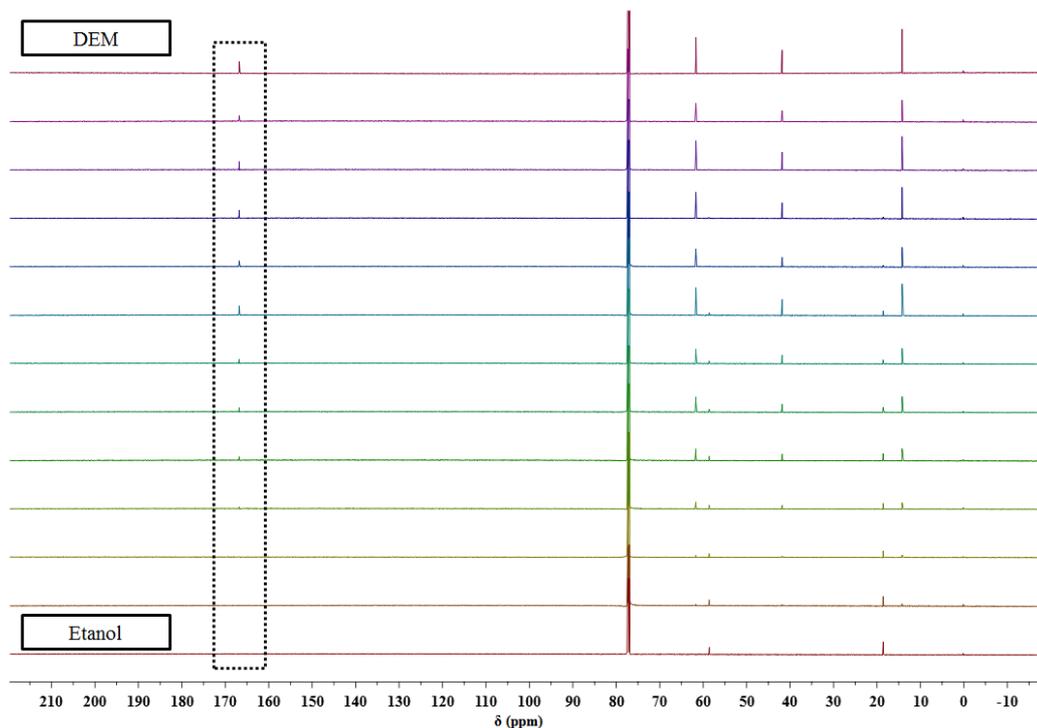


Figura 56 - Espectro de RMN ^{13}C do etanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + etanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta).

Fonte: Autor.

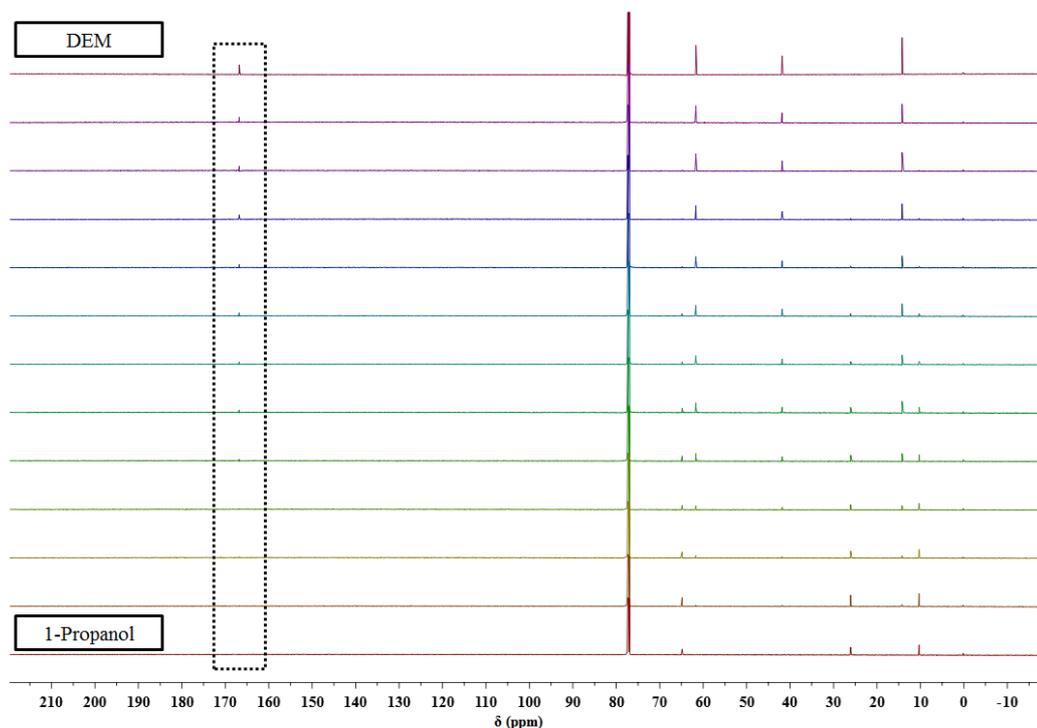


Figura 57 - Espectro de RMN ^{13}C do 1-propanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-propanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta).

Fonte: Autor.

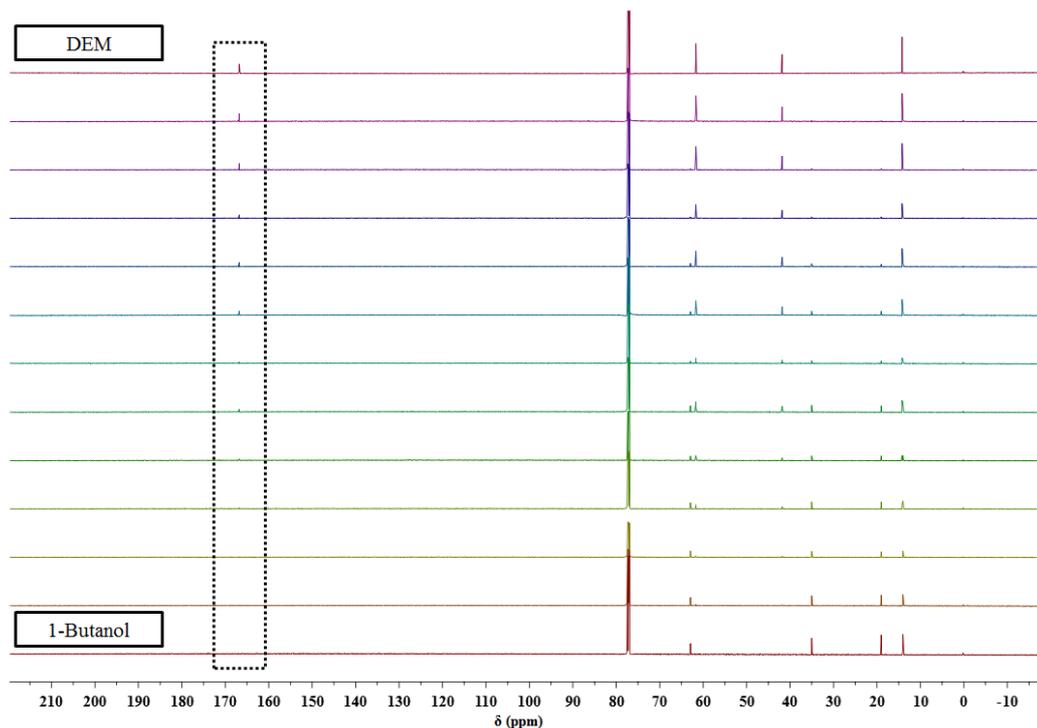


Figura 58 - Espectro de RMN ^{13}C do 1-butanol puro (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-butanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta).

Fonte: Autor.

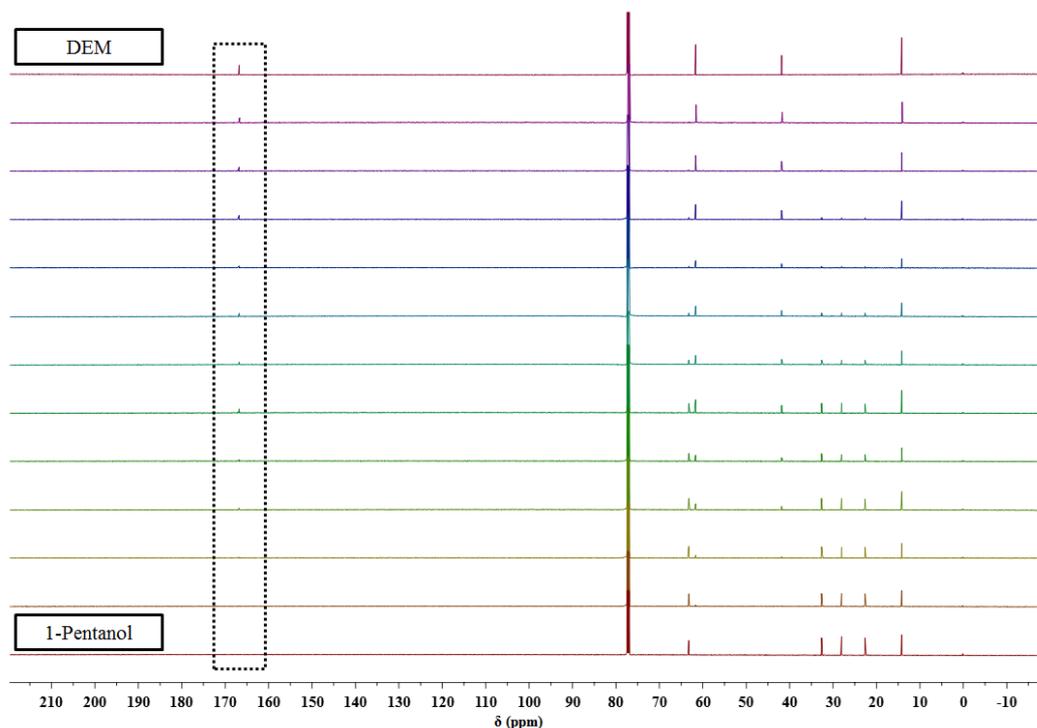


Figura 59 - Espectro de RMN ^{13}C do 1-pentanol (vinho), do dietil malonato puro (rosa), e das soluções (DEM + 1-pentanol): $x_{\text{DEM}} = 0,05$ (marrom); $x_{\text{DEM}} = 0,1$ (bege); $x_{\text{DEM}} = 0,2$ (verde claro); $x_{\text{DEM}} = 0,3$ (verde água); $x_{\text{DEM}} = 0,4$ (turquesa); $x_{\text{DEM}} = 0,5$ (verde escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,6$ (azul claro); $x_{\text{DEM}} = 0,7$ (azul escuro); $x_{\text{DEM}} = 0,8$ (lilás); $x_{\text{DEM}} = 0,9$ (roxo); $x_{\text{DEM}} = 0,95$ (violeta).

Fonte: Autor.

Através dos gráficos é possível observar que para os cinco sistemas estudados há somente aumento da intensidade do sinal do grupamento carbonila com o aumento da concentração de dietil malonato, não havendo mudança no deslocamento químico do mesmo. O sinal do grupamento $>C=O$ surge na concentração aproximada de $x_1 = 0,2$. Na tabela 13 são apresentados os valores dos deslocamentos químicos δ em ppm do grupamento citado em função da concentração de dietil malonato no sistema.

Tabela 13 - Deslocamentos químicos de RMN – ^{13}C do grupamento carbonila ($>\text{C}=\text{O}$) nos sistemas (dietil malonato + álcoois).

x_1 DEM + (1- x_1) metanol		x_1 DEM + (1- x_1) etanol		x_1 DEM + (1- x_1) 1-propanol		x_1 DEM + (1- x_1) 1-butanol		x_1 DEM + (1- x_1) 1-pentanol	
x_1	δ / ppm	x_1	δ / ppm	x_1	δ / ppm	x_1	δ / ppm	x_1	δ / ppm
0	---	0	---	0	---	0	---	0	---
0,0521	---	0,0550	---	0,0511	---	0,0491	---	0,0512	---
0,1011	---	0,0982	---	0,1012	---	0,1003	---	0,1014	---
0,2013	166,813	0,2044	166,809	0,2015	166,809	0,1999	166,809	0,2016	166,806
0,3004	166,809	0,2982	166,806	0,3027	166,807	0,3014	166,807	0,3024	166,808
0,3849	166,806	0,3989	166,803	0,3998	166,806	0,4011	166,804	0,4012	166,800
0,4970	166,803	0,4986	166,803	0,5000	166,805	0,5020	166,807	0,4927	166,802
0,5960	166,803	0,6018	166,797	0,5969	166,804	0,5998	166,801	0,5961	166,799
0,7022	166,800	0,6960	166,800	0,7014	166,805	0,6952	166,801	0,6953	166,805
0,7950	166,797	0,7915	166,798	0,8014	166,799	0,7959	166,800	0,8028	166,799
0,8924	166,797	0,9007	166,797	0,8851	166,800	0,8925	166,796	0,9006	166,800
0,9399	166,797	0,9431	166,799	0,9497	166,799	0,9432	166,794	0,9500	166,798
1	166,790	1	166,790	1	166,790	1	166,790	1	166,790

Fonte: Autor.

Como observado nos espectros, não há variação considerável no deslocamento químico do carbono do grupamento carbonila com a concentração de dietil malonato. Tais resultados estão de acordo com os dados termodinâmicos, indicando a ausência de associações entre (DEM + álcoois primários). Esse fato constata o prevalecimento de efeitos físicos sobre os efeitos químicos e estruturais para os sistemas estudados.

CONCLUSÕES

Os resultados experimentais do volume molar excesso apresentaram valores positivos para os sistemas contendo {dietil malonato (+ 1-propanol, ou + 1-butanol, ou + 1-pentanol)}, enquanto observou-se um comportamento sigmoidal para o sistema (DEM + etanol) com valores negativos na região de baixa concentração e valores positivos na região de alta concentração de dietil malonato. O sistema (DEM + metanol) foi o único que apresentou valores negativos de V_m^E . Todos os sistemas estudados apresentaram ainda valores negativos do desvio da compressibilidade isentrópica, com exceção do sistema (DEM + 1-pentanol), cujo comportamento sigmoidal exibiu valores positivos na região de baixa fração molar de dietil malonato. Para finalizar a análise das grandezas excesso, os dados experimentais de desvio da viscosidade exibiram valores negativos para todos os sistemas em estudo.

Os resultados das grandezas excesso obtidas foram correlacionados por um polinômio Redlich-Kister de quarta ordem. Para o sistema (DEM + etanol), V_m^E e $\Delta\eta$ necessitaram de uma versão modificada deste polinômio para o ajuste dos resultados experimentais. O mesmo ocorreu para o $\Delta\kappa$ do sistema (DEM + 1-pentanol).

Para o primeiro sistema (dietil malonato + metanol), os valores negativos de V_m^E e dos volumes parciais molares excesso à diluição infinita sugerem a predominância de efeitos estruturais e efeitos específicos. Em oposição, o comportamento positivo das propriedades volumétricas para os sistemas {DEM + (1-propanol, ou 1-butanol, ou 1-pentanol)} podem ser relativos à predominância de efeitos físicos. A alternância de sinais para o sistema (dietil malonato + etanol) indicaria um sistema com predominância de efeitos físicos, químicos e estruturais. O comportamento da curva de V_m^E pode ser atribuído a efeitos químicos e estruturais resultando numa contribuição negativa, e efeitos físicos contribuindo positivamente no comportamento de V_m^E .

Observou-se ainda que o aumento da cadeia carbônica do álcool primário ocasiona em aumento no volume molar excesso e no desvio da compressibilidade isentrópica, mas em diminuição no desvio da viscosidade.

Os valores do volume molar excesso, do desvio da compressibilidade isentrópica e do desvio da viscosidade estão coerentes com os estudos realizados por Wang, Gao e Yan (2010a e 2010b), os quais obtiveram valores positivos de entalpia molar excesso para as misturas estudadas. Os valores positivos de H_m^E indicam que o processo de mistura dos cinco sistemas é

endotérmico e que o dietil malonato pode não interagir facilmente com os álcoois na formação de associações cruzadas através de ligação de hidrogênio intermoleculares.

Os álcoois apresentam auto associação através de ligações de hidrogênio. A diluição destes compostos em solventes não polares, leva a dispersão das ligações-H contribuindo para valores positivos de H_m^E . Segundo Prausnitz, Lichtenthaler e Azevedo (1999), à diluição infinita, as moléculas de álcool passam a existir como monômeros ao invés de dímeros, trímeros ou agregados mais elevados.

O fenômeno da diluição foi observado através da análise espectroscópica de infravermelho, onde verificou-se o deslocamento positivo das bandas e a diminuição da intensidade das mesmas, um indicativo do enfraquecimento de interações à medida que o dietil malonato foi adicionado ao sistema. A ressonância magnética nuclear comprovou a ausência de efeitos específicos entre o grupamento carbonila do dietil malonato e o grupamento hidroxila dos álcoois, não havendo mudanças expressivas no deslocamento químico.

Os resultados do presente estudo sugerem, portanto, que os efeitos físicos devem ser predominantes sobre os efeitos químicos e estruturais existentes nos sistemas estudados.

Para trabalhos futuros, sugere-se o estudo do equilíbrio líquido-vapor (ELV) dos sistemas estudados na presente dissertação.

REFERÊNCIAS

- ACREE, W.E. **Thermodynamics properties of nonelectrolyte solutions**. Orlando: Academic Press, 1984.
- AL-JIMAZ, A. S.; AL-KANDARY, J. A.; ABDUL-LATIF, A. H. M. Densities and viscosities for binary mixtures of phenetole with 1-pentanol, 1-hexanol, 1-heptanol, 1-octanol, 1-nonanol, and 1-decanol at different temperatures. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 218, p. 247-260, 2004.
- ALONSO, V. et al. Dielectric and refractive index measurements for the systems 1-pentanol + octane, or + dibutyl ether or for dibutyl ether + octane at different temperatures. **Thermochimica Acta**, Amsterdam, v. 543, p. 246-253, 2012.
- BAHADUR, I.; DEENADAYULA, N. Apparent molar volume and apparent molar isentropic compressibility for the binary systems {methyltrioctylammoniumbis (trifluoromethylsulfonyl) imide + ethyl acetate or ethanol} at different temperatures under atmospheric pressure. **Thermochimica Acta**, Amsterdam, v. 566, p. 77-83, 2013.
- BALUJA, S. et al. Thermodynamic and acoustical studies of binary mixtures of diethyl malonate at 308.15 K. **Physics and Chemistry of Liquids**, Oxford, v. 43, p. 309-316, 2005.
- BHALODIA, J.; SHARMA S. Volumetric, refractive and FT-IR behaviour of β -pinene with o, m, p-cresol at 303.15, 308.15 and 313.15 K. **Journal of Molecular Liquids**, New York, v. 193, p. 249-255, 2014.
- BITTENCOURT, S. S. **Estudo experimental e modelagem de propriedades volumétricas de soluções líquidas binárias contendo acetonitrila e aminas a diferentes temperaturas e à pressão atmosférica**. 2011. 121 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Centro Universitário da FEI, São Bernardo do Campo, 2011.
- CHAUDHARY, G. R. et al. Thermophysical and spectroscopic studies of room temperature ionic liquid, 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate in Tritons. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 50, p. 63-70, 2012.
- DIKIO, E. D. et al. Density, dynamic viscosity and derived properties of binary mixtures of methanol, ethanol, n-propanol, and n-butanol with pyridine at T = (293.15, 303.15, 313.15 and 323.15) K. **International Journal of Electrochemical Science**, Belgrade, v. 7, p. 11101-11122, 2012.
- FORT, R. J.; MOORE, W. R. Adiabatic Compressibilities of Binary Mixtures. **Transactions of Faraday Society**, Cambridge, v. 61, p. 2102-2111, 1965.
- FORT, R. J.; MOORE, W. R. Viscosity of binary Mixtures. **Transactions of Faraday Society**, Cambridge, v. 62, p. 1112-1119, 1966.
- GONZÁLES-SALGADO D. et al. Study of the volumetric properties of weakly associated alcohols by means of high-pressure speed of sound measurements. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 38, p. 893-899, 2006.

GONZÁLEZ B. et al. Density, dynamic viscosity, and derived properties of binary mixtures of methanol or ethanol with water, ethyl acetate, and methyl acetate at $T = (293.15, 298.15$ and $303.15)$ K. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 39, p. 1578-1588, 2007.

GUGGENHEIM, E. A. **Thermodynamics an advanced treatment for chemists and physicists**. Amsterdam: North-Holland Publishing Co, 1967.

HASAN, M. et al. Densities, sound speed, and IR studies of (methanol + 1-acetoxybutane) and (methanol + 1,1-dimethylethyl ester) at (298.15, 303.15, 308.15, and 313.15) K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 55, p. 535-538, 2010.

INDRASWATI, N. et al. Measurements of density and viscosity of binary mixtures of several flavor compounds with 1-butanol and 1-pentanol at 293.15 K, 303.15 K, 313.15 K, and 323.15 K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 46, p. 696-702, 2001.

KINART, C. M.; KINART, M. J.; MAJ, M. H-RMN studies of the binary mixtures of sulfolane with ethylene glycol, diethylene glycol, triethylene glycol, and tetraethylene glycol at 303 K. **Journal of Molecular Liquids**, New York, v. 141, p. 31-34, 2008.

KIYOHARA, O.; BENSON, G. C. Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of n-alkanol + n-heptane mixtures at 298.15 K. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 11, p. 861-873, 1979.

KORETSKY, M. D. **Termodinâmica para Engenharia Química**. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

KUMAR, R.; ASHOKAN, P.; ASKAR ALI, S. J. Spectroscopic and ultrasonic studies on the hydrogen bonded complexes of aromatic aldehydes with phenol in hexane medium. **Journal of Molecular Liquids**, New York, v. 179, p. 124-129, 2013.

MARDONES, M. G. et al. Thermodynamic properties of binary mixtures combining two pyridinium-based ionic liquids and two alkanols. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 51, p. 17-24, 2012.

MEHRA, R.; GUPTA, A.; ISRANI, R. Excess volume, excess isentropic compressibility, partial molar volume and specific heat ratio of ternary mixtures of cyclohexane + decane + alkanols at 298.15 K and 308.15 K. **Indian Journal of Chemistry**, New Delhi, v. 40, p. 505-508, 2001.

MEHTA, S. K. et al. Thermodynamic, transport, and spectroscopic studies for mixtures of isomeric butanediol e n-metil-2-pirrolidona. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 41, p. 1329-1338, 2009.

MOATTAR, M. T. Z.; SADEGHI, R.; SARMA, S. Measurement and modeling of densities and sound velocities of systems {poly (propylene glycol) + methanol, + ethanol, + 1-propanol, +1-propanol and 1-butanol} at $T = 298.15$ K. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 38, p. 257-263, 2006.

MONSON, J. M.; OTIN, S.; LOSA, C. G. Thermodynamics properties of organic oxygen compounds: Excess enthalpies for (n-hexane + a diester). **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 13, p. 385-388, 1981.

MYERS, D. B.; SCOTT, R. L. Thermodynamics function for nonelectrolyte solutions. **Industrial Engineering Chemistry**, Washington, D. C., v. 55, p. 43-46, 1963.

NIKAM, P. S.; MAHALE, T. R.; HASAN, M. Densities and viscosities for ethyl acetate + pentan-1-ol, + hexan-1-ol, + 3,5,5-trimethylhexan-1-ol, + heptan-1-ol, + octan-1-ol, and + decan-1-ol at (298.15, 303.15 and 308.15) K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 43, p. 436-440, 1998.

OSWAL, S. L. et al. Speeds of sound, isentropic compressibilities, viscosities, and excess molar volumes of binary mixtures of alkanooates with tetra- and trichloromethanes at 303.15 K. **Thermochimica Acta**, Amsterdam, v. 426, p. 141-149, 2005.

PAVIA, Donald L. et al. **Introdução à espectroscopia**. 4. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. 3th ed. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1999.

RATHNAM, M.; MOHITE, S.; KUMAR, M. S. Volumetric, viscometric and optical study of molecular interactions in binary mixtures of diethyl malonate with ketones at 303.15, 308.15 and 313.15 K. **Journal of the Serbian Chemical Society**, Belgrade, v. 77, p. 507-521, 2012.

RESA, J. M. et al. Density, refractive index, speed of sound at 298,15 K, and vapor-liquid equilibrium at 101,3 kPa for binary mixtures of methanol + ethyl lactate and 1-propanol + ethyl lactate. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C.,v. 55, p. 1017-1021, 2010.

_____. Mixing properties of isopropyl acetate + aromatic hydrocarbons at 298.15 K: density, refractive index and isentropic compressibility. **Korean Journal of Chemical Engineering**, Seoul, v. 24, p. 1015-1025, 2004.

_____. Vapor liquid equilibrium and mixing properties of methanol + diethyl carbonate and vinyl acetate + diethyl carbonate systems. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 50, p. 1212-1217, 2005.

_____; GONZÁLEZ, C.; GOENAGA, J. M. density, refractive index, speed of sound at 298.15 K, and vapor-liquid equilibria at 101,3 kPa for binary mixtures of methanol + 2-methyl-1-butanol and ethanol + 2-methyl-1-butanol. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 50, p. 1570-1575, 2005.

_____; _____. Density, refractive index, speed of sound at 298.15 K, and vapor-liquid equilibria at 101.3 kPa for binary mixtures of propanol + 2-methyl-1-butanol and propanol + 3-methyl-1butanol. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 51, p. 73-78, 2006.

RIDLICH, O.; KISTER, A.T. Algebraic representation of thermodynamic properties and the classifications of solutions. **Industrial Engineering Chemistry**, Washington, D. C., v.40, p. 345-348, 1948.

ROMANO, E. et al. Thermophysical properties of four binary dimethyl carbonate + 1-alcohol systems at 288.15 K-303.15 K. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 211, p. 219-240, 2003.

SANTHI, B. S. et al. Ultrasonic and spectroscopic investigations of hydrogen bonded complexes of aromatic aldehydes with aniline in n-Hexane at 303.15 K. **Journal of Molecular Liquids**, New York, v. 188, p. 120-125, 2013.

SASTRY, N. V. et al. Densities, relative permittivities, excess volumes, and excess molar polarizations for alkyl ester (methyl propanoate, methyl butanoate, ethyl propanoate, and ethyl butanoate) + hydrocarbons (n-heptane, benzene, chlorobenzene, and 1,1,2,2-tetrachloroethane) at 308.15 K and 318.15 K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 44, p. 456-464, 1999.

_____. Viscosities, speeds of sound and excess isentropic compressibilities of binary mixtures of alkyl alkanoate-hydrocarbons at 308.15 K and 318.15 K. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 163, p. 275-289, 1999.

_____; VALAND, M. K. Thermodynamics of acrylic ester organic solvent mixtures. v. viscosities and excess viscosities of alkyl acrylates-1-alcohol binary mixtures at 298.15 K and 308.15 K. **International Journal of Thermophysics**, New York, v. 18, p. 1387-1403, 1997.

SASTRY, S. S. et al. Excess parameters for binary mixtures of ethylbenzoate with 1-propanol, 1-butanol and 1-pentanol at T = 303, 308, 313, 318, and 323 K. **Physica B**, Amsterdam, v. 420, p. 40-48, 2013.

SCATCHARD, G. Change of volume on mixing and the equations for non-electrolyte mixtures. **Transactions of the Faraday Society**, Cambridge, v. 33, p. 160-166, 1937.

_____. Equilibria in Non-electrolyte solutions in relation to the vapor pressures and densities of the components. **Chemical Reviews**, Washington, D. C., v. 8, p. 321, 1931.

_____; HEMER, W. J. The application of Equation for the chemical potentials to partially miscible solutions. **Journal of the American Chemical Society**, Washington, D.C., v. 57, p. 1805, 1935.

_____; RAYMOND, C. L. Vapor-liquid equilibrium. II. chloroform – ethanol mixtures at 35, 45 and 55°C. **Journal of the American Chemical Society**, Washington, D.C., v. 60, p. 1278-1287, 1938.

SHAN, Z.; ASFOUR, A. F. A. Viscosities and densities of eight binary 1-alkanol systems at 308.15 and 313.15 K. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 143, p. 253-262, 1998.

SHOEMAKER, D. P.; GARLAND, C. W.; NIBLER, J. W. **Experiments in physical chemistry**. 6th ed. Boston: WCB McGraw-Hill, 1996.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

SPASOJEVIC, V. D. et al. Densities, refractive indices, viscosities, and spectroscopic study of 1-amino-2-propanol + 1-butanol and + 2-butanol solutions at (288.15 and 333.15) K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 59, p. 1817-1829, 2014.

TAGUEÑA, J.; MARTINA, E. **De la brujula al espin: el magnetismo**. 2. ed. México, D.F.: F.C.E., 1997.

TÔRRES, R. B.; FRANCESCONI, A. Z.; VOLPE, P. L. O. Experimental study and modelling using ERAS-Model of the excess molar volume of acetonitrile-alkanol mixtures at different temperatures and atmospheric pressure. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 210, p. 287-306, 2003.

_____. Volumetric properties of binary mixtures of acetonitrile and alcohols at different temperatures and atmospheric pressure. **Journal of Molecular Liquids**, New York, v. 131-132, p. 139-144, 2007.

_____. **Estudo experimental do volume molar excesso de soluções de dietilamina/ acetonitrila e s-butilamina/ acetonitrila na faixa de 288,15 a 303,15 K, à pressão atmosférica, com aplicação do modelo ERAS**. 1998. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas – Unicamp, São Paulo.

TRENZADO, J. et al. Study of properties derived from densities and viscosities for the ternary systems (methyl pentanoate + methyl heptanoate) + octane + 1-hexanol and their binary subsystems at various temperatures. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 48, p. 1004-1014, 2003.

_____. Densities and viscosities of four binary diethyl carbonate + 1-alcohol systems from (288.15 to 313.15) K. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 56, p. 2841-2848, 2011.

ULLMANN'S encyclopedia of industrial chemistry. Biotechnology, 2. Metabolic engineering to carbon, 5. Activated carbon. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 6, p. 417-430.

_____. Enzymes, 5. Enzymes in organic synthesis to explosives. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 13, p. 333-404.

_____. Magnesium to metals, surface treatment. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 22, p. 157-174.

_____. Methacrylic acid and derivatives to natural gas. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 23, p. 25-48.

_____. Paints and coatings, 3. Paint systems to phosphorus. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 26, p. 245-258.

_____. Powder metallurgy and sintered materials to quasicrystals. 7th ed. Weinheim: VCH, 2011, v. 30, p. 243-254.

VISAK, Z. P. Volumetric properties and spectroscopic studies of pyridine or nicotine solutions in liquid polietileno glicóis. **The Journal of Physical Chemistry**, Washington, D. C., v. 115, p. 8481-8492, 2011.

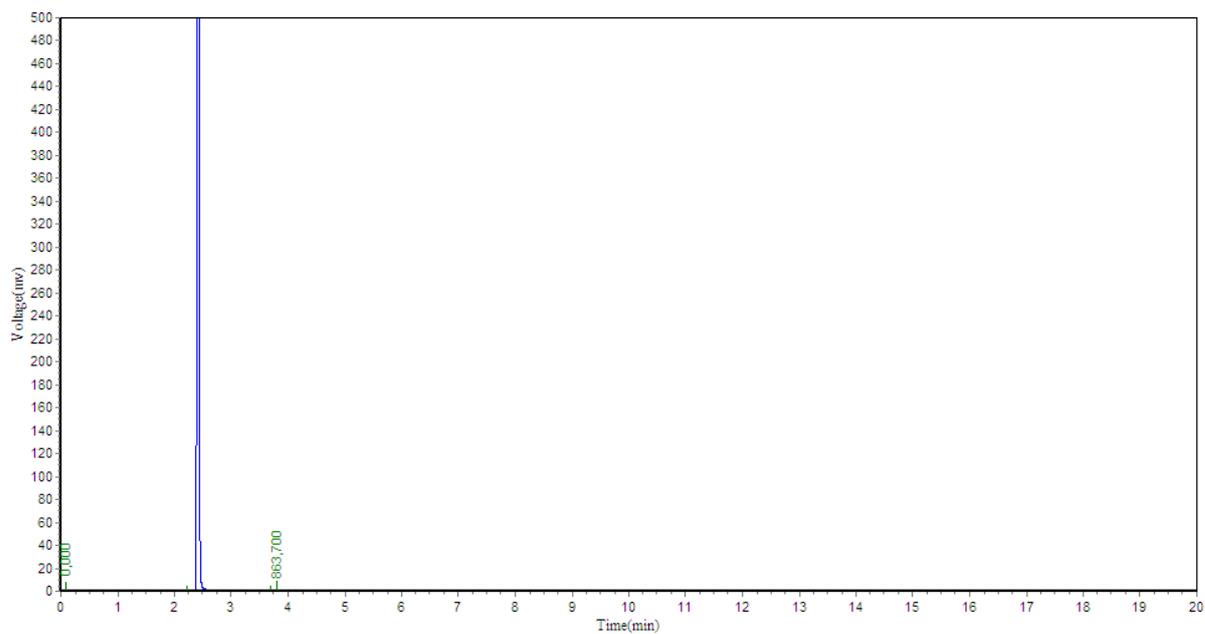
WANG, Y.; GAO, H.; YAN, W. Excess molar enthalpies of diethyl malonate + (1-butanol, 2-methyl-1-propanol, 1-pentanol, n-heptane, and ethyl acetate) at T = (288.2, 298.2, 313.2, 328.2, 338.2, and 348.2) K and P = 101.3 kPa. **Fluid Phase Equilibria**, Amsterdam, v. 291, p. 8-12, 2010a.

_____; _____. Excess molar enthalpies of diethyl malonate + (methanol, + ethanol, +1-propanol, and + 2-propanol) at T = (288.2, 298.2, 313.2, and 328.2) K and P = 101.3 kPa. **Journal of Chemical Engineering Data**, Washington, D. C., v. 55, p. 381-384, 2010b.

WISNIAKI, J. et al. Density, excess volume, and excess coefficient of thermal expansion of the binary systems of dimethyl carbonate with butyl methacrylate, allyl methacrylate, styrene, and vinyl acetate at T = (293.15, 303.15 and 313.15) K. **Journal of Chemical Thermodynamics**, London, v. 40, p. 1671-1683, 2008.

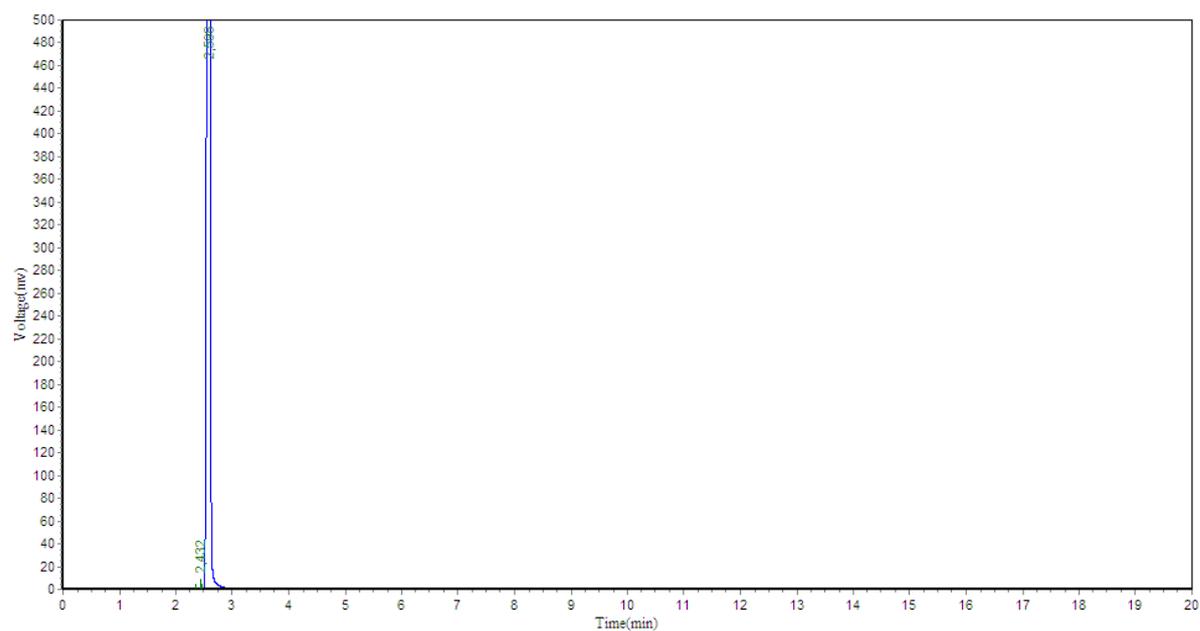
ZHANG, J. B. et al. Hydrogen bonding interactions between ethylene glycol and water: density, excess molar volume, and spectral study. **Science in China Series B: Chemistry**, Beijing, v. 51, p. 420-426, 2008.

APÊNDICE A – CROMATOGRAMAS E ESPECTROS



X-axis -0,791(min), Y-axis 512,987(mv)

Figura A1 - Cromatograma do metanol.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.



X-axis -1,121(min), Y-axis 514,069(mv)

Figura A2 - Cromatograma do etanol.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.

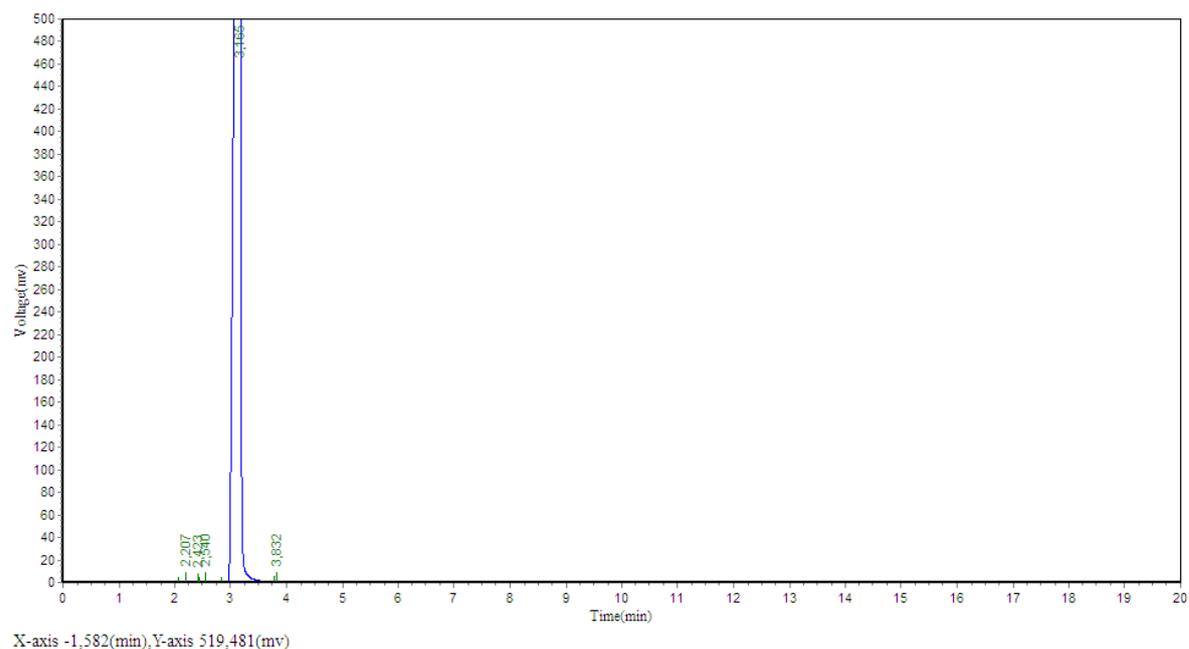


Figura A3 - Cromatograma do 1-propanol.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.

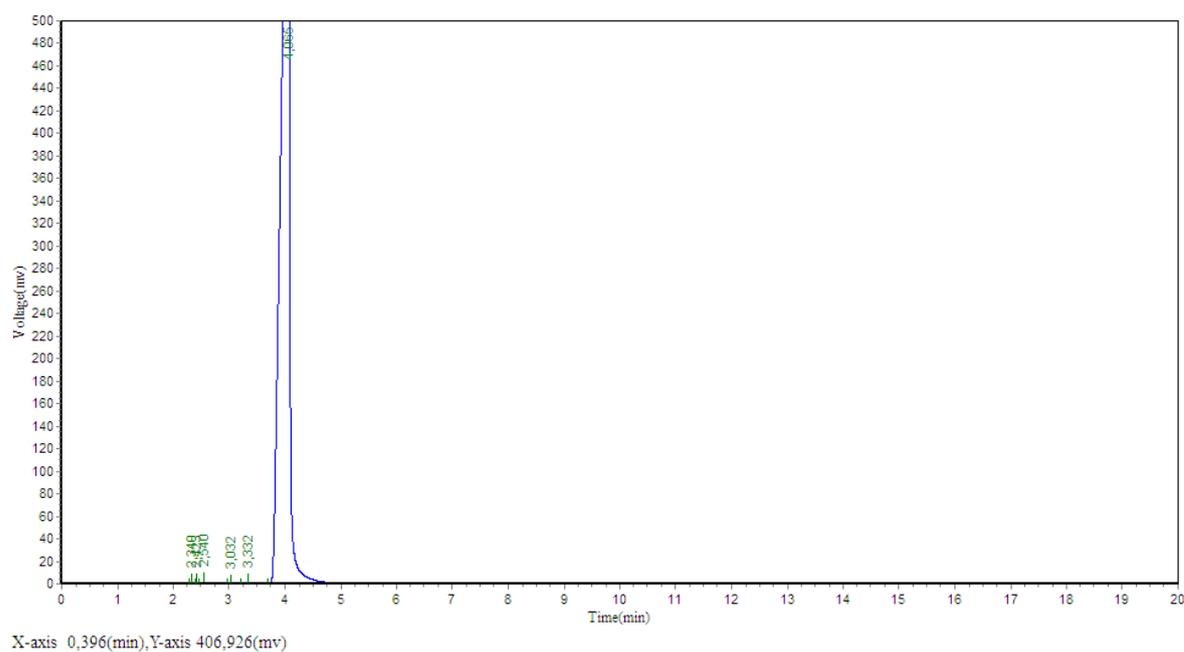
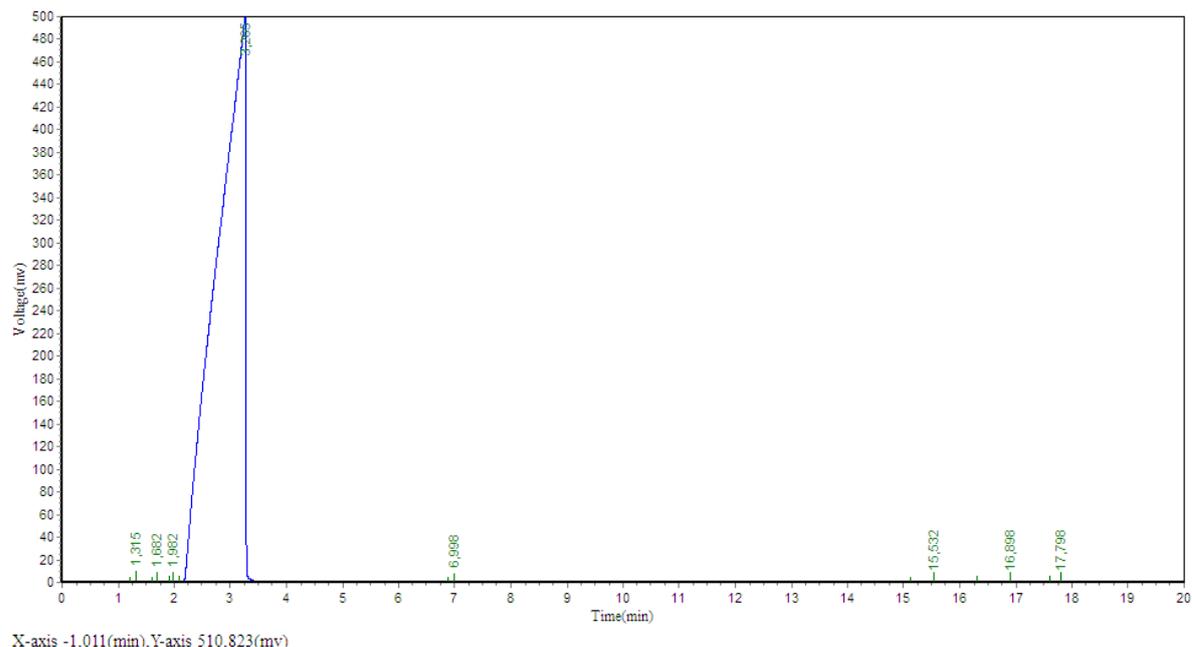
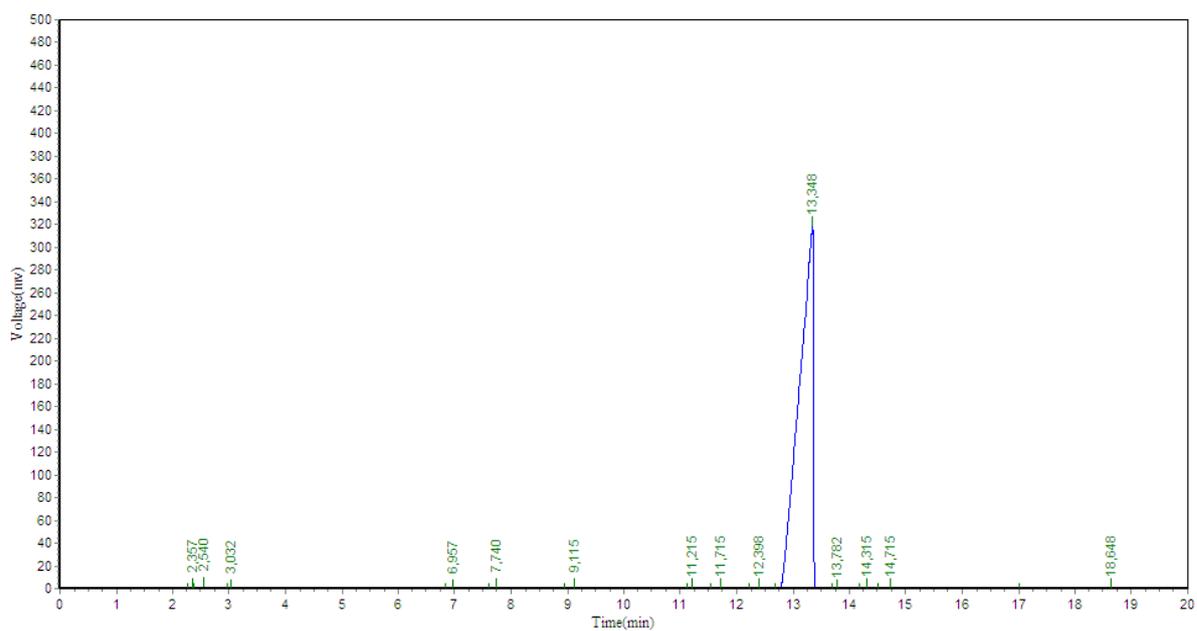


Figura A4 - Cromatograma do 1-butanol.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.



X-axis -1,011(min),Y-axis 510,823(mv)

Figura A5 - Cromatograma do 1-pentanol.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.



X-axis -1,055(min),Y-axis 522,727(mv)

Figura A6 - Cromatograma do dietil malonato.
Fonte: Autor - disponibilizado pelo CPQ.

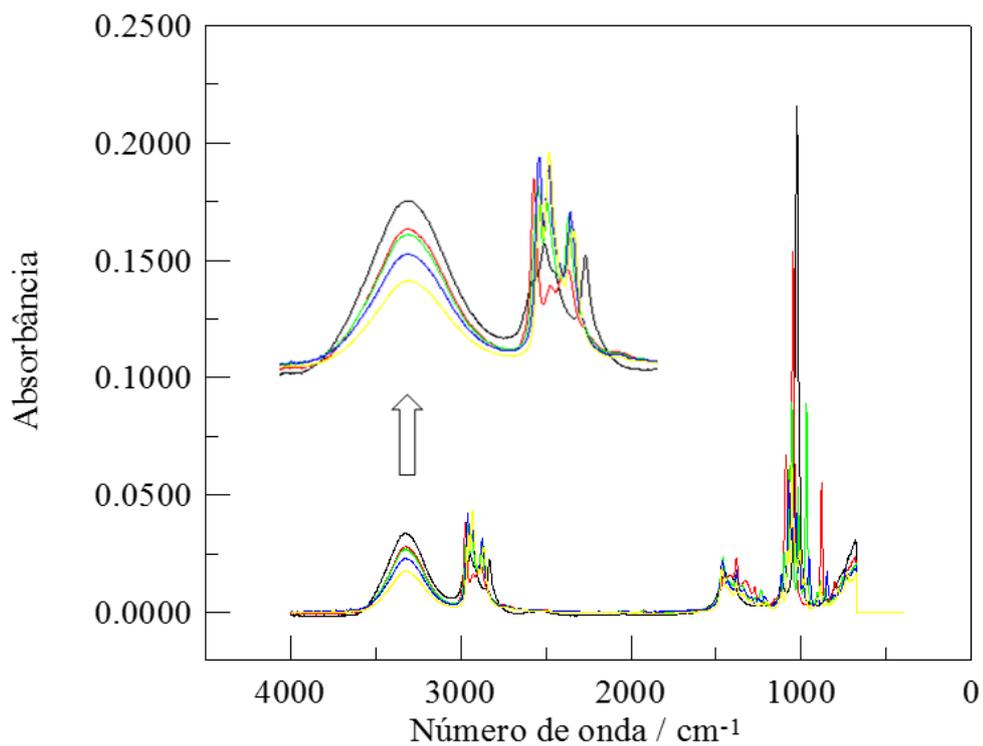


Figura A7 - Espectros FT-IR dos álcoois puros: metanol (preto); etanol (vermelho); 1-propanol (verde); 1-butanol (azul); 1-pentanol (amarelo).
Fonte: Autor.

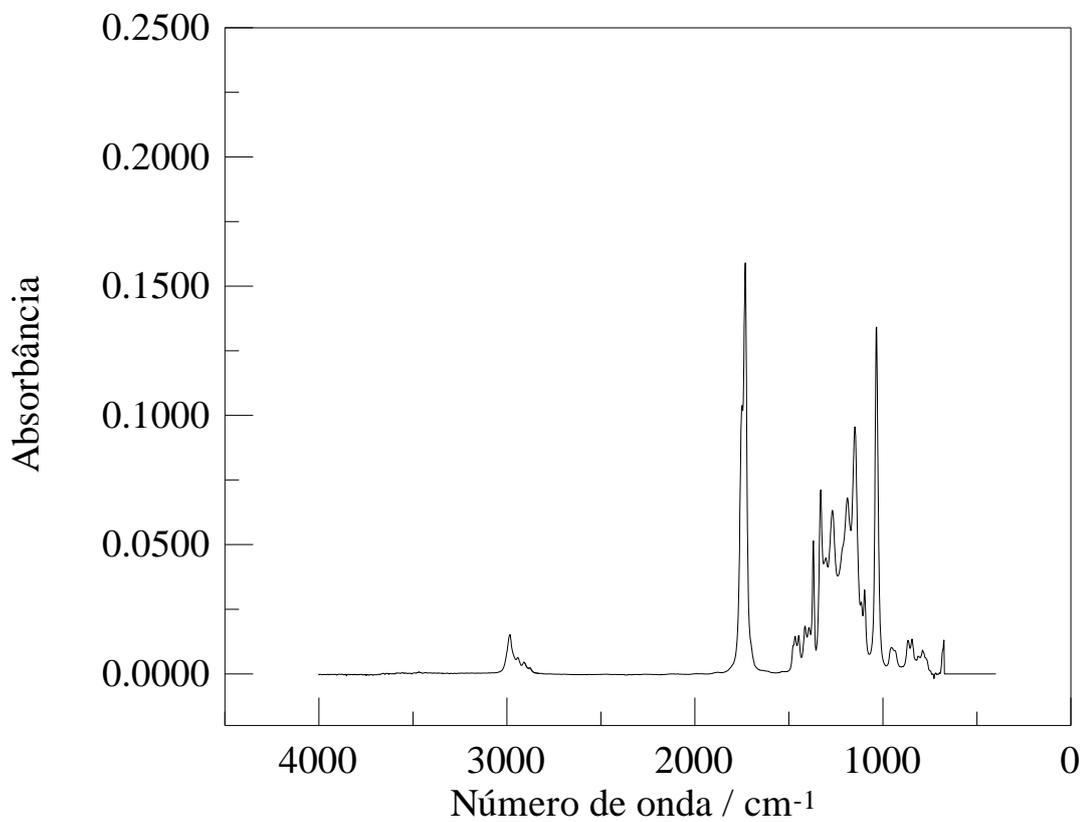


Figura A8 - Espectro FT-IR do dietil malonato.
Fonte: Autor.

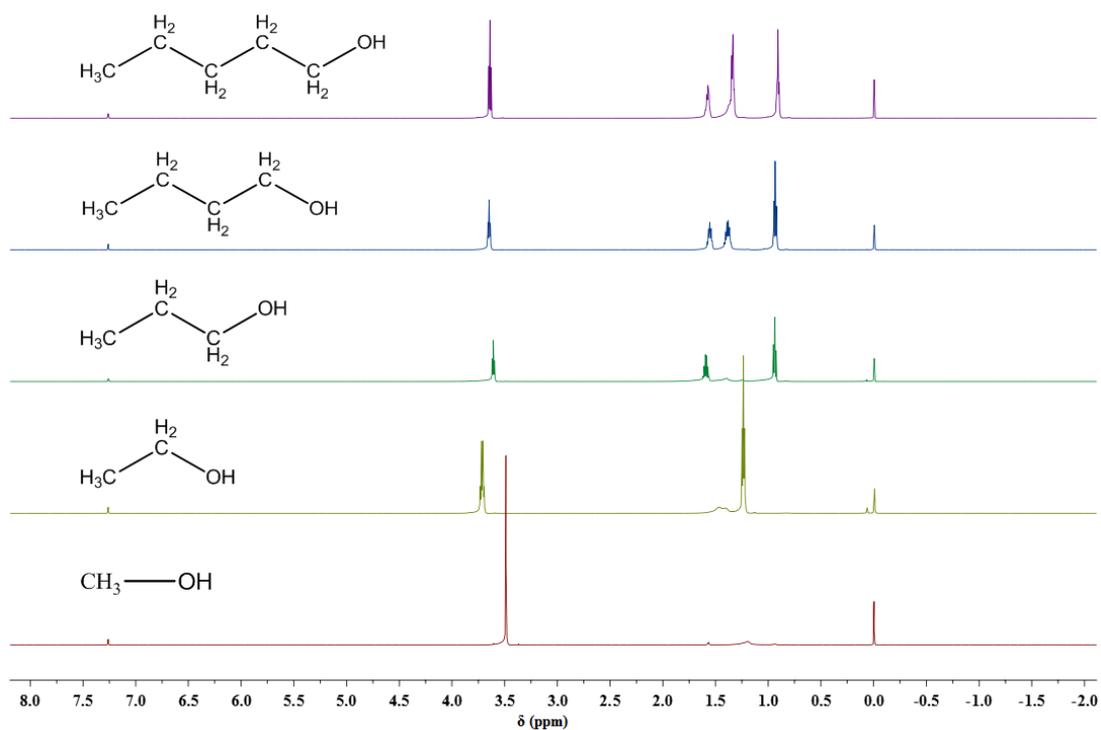


Figura A9 - Comparação dos espectro de RMN - ^1H dos álcoois puros.
Fonte: Autor.

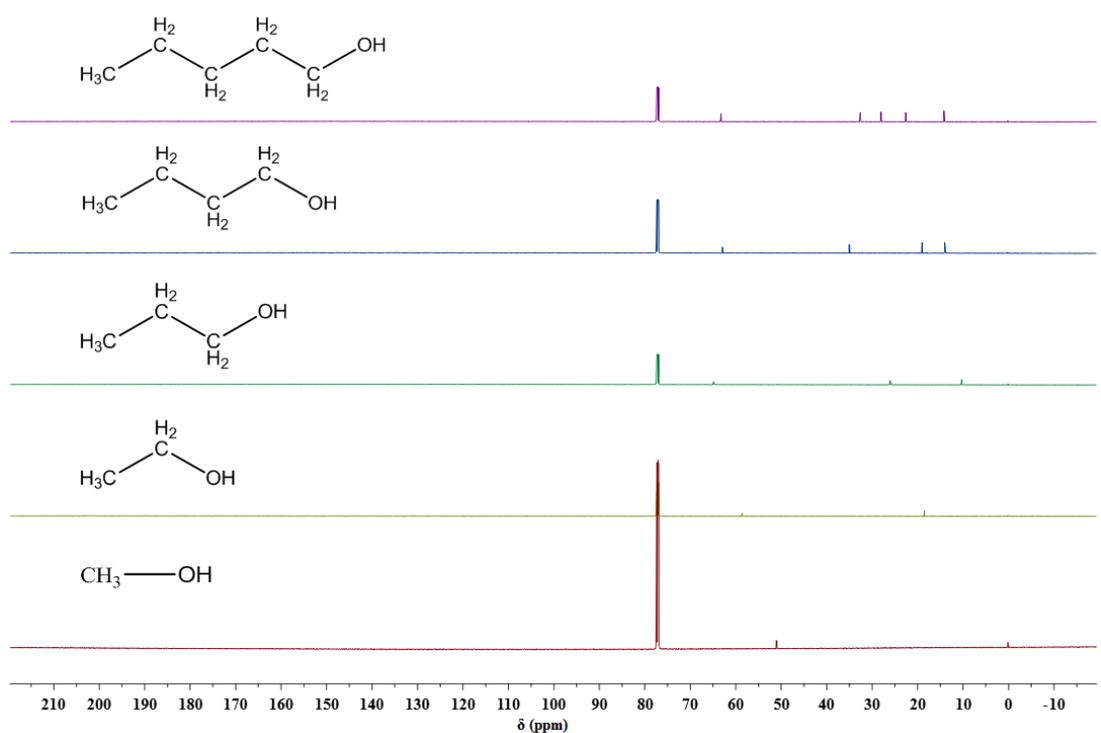


Figura A10 - Comparação dos espectro de RMN - ^{13}C dos álcoois puros.
Fonte: Autor.

APÊNDICE B – RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Tabela B1 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som e desvio da compressibilidade isentrópica para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ metanol}\}$ a $T = 288,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$V_m^E / \text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\Delta k / \text{TPa}^{-1}$
0,0031	0,799520	-0,007	1138,10	-5,832
0,0101	0,806694	-0,028	1143,12	-19,647
0,0105	0,807250	-0,042	1144,10	-21,782
0,0171	0,813483	-0,050	1147,80	-32,126
0,0199	0,816268	-0,063	1150,24	-37,989
0,0388	0,832622	-0,078	1160,40	-63,535
0,0568	0,847167	-0,113	1171,08	-86,719
0,0660	0,854021	-0,127	1175,25	-95,599
0,1046	0,879383	-0,147	1191,54	-125,161
0,1050	0,879816	-0,158	1191,69	-125,575
0,1269	0,892686	-0,184	1200,76	-139,180
0,1735	0,915906	-0,200	1217,74	-159,040
0,1998	0,927487	-0,219	1226,51	-166,829
0,2211	0,936134	-0,236	1232,28	-170,548
0,3761	0,982645	-0,249	1269,16	-172,981
0,4549	0,999349	-0,239	1283,34	-161,982
0,5009	1,007679	-0,232	1290,95	-153,514
0,5953	1,022138	-0,206	1303,46	-130,959
0,6561	1,029922	-0,178	1310,99	-114,687
0,7207	1,037306	-0,158	1317,81	-95,643
0,7639	1,041681	-0,132	1322,26	-82,363
0,7863	1,043823	-0,121	1324,43	-75,301
0,8106	1,046111	-0,114	1326,40	-67,234
0,8491	1,049451	-0,091	1329,69	-54,431
0,8766	1,051754	-0,082	1331,44	-44,752
0,8934	1,053107	-0,074	1333,01	-39,172
0,9118	1,054496	-0,060	1334,02	-32,463
0,9451	1,056909	-0,035	1336,29	-20,621
0,9625	1,058161	-0,027	1336,69	-13,793
0,9747	1,058992	-0,017	1337,55	-9,410
0,9929	1,060234	-0,007	1338,44	-2,622

Fonte: Autor.

Tabela B2 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som e desvio da compressibilidade isentrópica para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ metanol}\}$ a $T = 293,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$V_m^E / \text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\Delta k / \text{TPa}^{-1}$
0,0031	0,794835	-0,008	1121,64	-6,249
0,0101	0,801985	-0,029	1126,60	-20,595
0,0105	0,802540	-0,042	1129,01	-25,314
0,0171	0,808747	-0,050	1131,28	-33,643
0,0199	0,811527	-0,064	1134,14	-40,495
0,0388	0,827818	-0,078	1143,87	-66,473
0,0568	0,842319	-0,113	1154,51	-90,669
0,0660	0,849147	-0,127	1158,55	-99,754
0,1046	0,874420	-0,146	1174,61	-130,364
0,1050	0,874853	-0,157	1174,98	-131,107
0,1269	0,887686	-0,184	1183,72	-144,911
0,1735	0,910839	-0,200	1200,52	-165,541
0,1998	0,922390	-0,219	1209,21	-173,650
0,2211	0,931009	-0,235	1214,92	-177,511
0,3761	0,977392	-0,245	1251,24	-179,876
0,4549	0,994066	-0,236	1265,23	-168,446
0,5009	1,002372	-0,228	1272,70	-159,606
0,5953	1,016813	-0,202	1285,02	-136,175
0,6561	1,024577	-0,173	1292,34	-119,183
0,7207	1,031962	-0,153	1299,05	-99,413
0,7639	1,036328	-0,127	1303,36	-85,561
0,7863	1,038477	-0,117	1305,55	-78,281
0,8106	1,040757	-0,109	1307,39	-69,820
0,8491	1,044101	-0,088	1310,61	-56,521
0,8766	1,046408	-0,079	1312,38	-46,521
0,8934	1,047758	-0,071	1313,86	-40,673
0,9118	1,049150	-0,058	1314,82	-33,685
0,9451	1,051566	-0,033	1317,06	-21,404
0,9625	1,052829	-0,027	1317,49	-14,358
0,9747	1,053666	-0,018	1318,31	-9,791
0,9929	1,054904	-0,008	1319,18	-2,742

Fonte: Autor.

Tabela B3 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som e desvio da compressibilidade isentrópica para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ metanol}\}$ a $T = 298,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$V_m^E / \text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\Delta k / \text{TPa}^{-1}$
0,0031	0,790115	-0,008	1105,06	-6,408
0,0101	0,797240	-0,029	1109,98	-21,356
0,0105	0,797802	-0,043	1114,86	-30,807
0,0171	0,803978	-0,050	1114,61	-34,928
0,0199	0,806755	-0,064	1118,86	-44,583
0,0388	0,822982	-0,078	1127,76	-70,253
0,0568	0,837439	-0,113	1137,91	-94,763
0,0660	0,844240	-0,127	1141,92	-104,219
0,1046	0,869422	-0,145	1157,91	-136,165
0,1050	0,869852	-0,156	1159,47	-138,699
0,1269	0,882644	-0,183	1166,48	-150,640
0,1735	0,905732	-0,198	1183,14	-172,165
0,1998	0,917251	-0,217	1191,72	-180,584
0,2211	0,925842	-0,233	1197,32	-184,543
0,3761	0,972108	-0,241	1233,09	-186,914
0,4549	0,988748	-0,231	1246,87	-175,031
0,5009	0,997037	-0,222	1254,22	-165,839
0,5953	1,011452	-0,196	1266,33	-141,486
0,6561	1,019209	-0,166	1273,47	-123,783
0,7207	1,026587	-0,147	1280,06	-103,249
0,7639	1,030953	-0,121	1284,25	-88,826
0,7863	1,033101	-0,111	1286,44	-81,303
0,8106	1,035382	-0,104	1288,18	-72,460
0,8491	1,038728	-0,083	1291,33	-58,644
0,8766	1,041039	-0,075	1293,04	-48,243
0,8934	1,042388	-0,068	1294,50	-42,177
0,9118	1,043784	-0,055	1295,44	-34,926
0,9451	1,046205	-0,031	1297,64	-22,182
0,9625	1,047475	-0,026	1298,04	-14,857
0,9747	1,048310	-0,016	1298,86	-10,128
0,9929	1,049555	-0,008	1299,74	-2,840

Fonte: Autor.

Tabela B4 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som e desvio da compressibilidade isentrópica para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ metanol}\}$ a $T = 303,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$V_m^E / \text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\Delta k / \text{TPa}^{-1}$
0,0031	0,785375	-0,007	1088,81	-6,406
0,0101	0,792474	-0,029	1093,72	-22,040
0,0105	0,793037	-0,043	1100,64	-35,844
0,0171	0,799187	-0,050	1098,33	-36,212
0,0199	0,801957	-0,064	1104,11	-49,183
0,0388	0,818120	-0,078	1112,08	-74,269
0,0568	0,832530	-0,113	1121,37	-98,430
0,0660	0,839305	-0,127	1125,35	-108,286
0,1046	0,864397	-0,143	1141,84	-142,560
0,1050	0,864825	-0,155	1143,86	-145,926
0,1269	0,877578	-0,181	1149,30	-156,061
0,1735	0,900599	-0,196	1166,05	-178,887
0,1998	0,912085	-0,214	1174,39	-187,465
0,2211	0,920650	-0,230	1179,90	-191,565
0,3761	0,966801	-0,236	1214,88	-193,763
0,4549	0,983406	-0,225	1228,55	-181,580
0,5009	0,991681	-0,216	1235,75	-172,023
0,5953	1,006072	-0,189	1247,62	-146,747
0,6561	1,013821	-0,160	1254,54	-128,302
0,7207	1,021198	-0,141	1261,08	-107,090
0,7639	1,025562	-0,116	1265,16	-92,108
0,7863	1,027710	-0,105	1267,34	-84,338
0,8106	1,029995	-0,099	1269,01	-75,141
0,8491	1,033342	-0,079	1272,08	-60,802
0,8766	1,035657	-0,072	1273,75	-50,018
0,8934	1,037011	-0,065	1275,20	-43,750
0,9118	1,038409	-0,052	1276,12	-36,235
0,9451	1,040834	-0,029	1278,27	-23,021
0,9625	1,042106	-0,025	1278,46	-15,248
0,9747	1,042946	-0,016	1279,38	-10,456
0,9929	1,044194	-0,009	1280,33	-2,984

Fonte: Autor.

Tabela B5 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som e desvio da compressibilidade isentrópica para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ metanol}\}$ a $T = 308,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$V_m^E / \text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\Delta k / \text{TPa}^{-1}$
0,0031	0,780609	-0,007	1072,94	-6,418
0,0101	0,787683	-0,029	1077,79	-22,685
0,0105	0,788248	-0,043	1085,98	-39,715
0,0171	0,794370	-0,050	1082,33	-37,402
0,0199	0,797134	-0,064	1088,98	-52,719
0,0388	0,813230	-0,077	1096,19	-77,523
0,0568	0,827596	-0,113	1105,02	-102,050
0,0660	0,834343	-0,126	1108,86	-112,155
0,1046	0,859345	-0,141	1126,79	-150,583
0,1050	0,859773	-0,153	1128,04	-152,859
0,1269	0,872485	-0,179	1132,22	-161,551
0,1735	0,895438	-0,193	1149,31	-186,280
0,1998	0,906893	-0,211	1157,29	-194,915
0,2211	0,915432	-0,227	1162,55	-199,003
0,3761	0,961458	-0,230	1196,52	-201,219
0,4549	0,978039	-0,218	1210,27	-189,218
0,5009	0,986298	-0,209	1217,34	-179,444
0,5953	1,000670	-0,181	1228,90	-153,425
0,6561	1,008408	-0,151	1235,65	-134,442
0,7207	1,015791	-0,134	1242,19	-112,784
0,7639	1,020155	-0,109	1246,16	-97,351
0,7863	1,022303	-0,099	1248,28	-89,346
0,8106	1,024591	-0,094	1249,87	-79,842
0,8491	1,027942	-0,074	1252,89	-65,107
0,8766	1,030259	-0,068	1254,52	-54,008
0,8934	1,031615	-0,061	1255,98	-47,599
0,9118	1,033019	-0,050	1256,88	-39,868
0,9451	1,035449	-0,028	1258,99	-26,277
0,9625	1,036722	-0,024	1258,83	-17,943
0,9747	1,037563	-0,015	1259,88	-13,157
0,9929	1,038818	-0,009	1260,97	-5,624

Fonte: Autor.

Tabela B6 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ etanol}\}$ a $T = 288,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0031	0,796144	-0,023	1178,73	-4,148	1,1776	-0,0379
0,0065	0,798641	-0,033	1180,44	-8,259	1,1710	-0,0485
0,0193	0,807205	-0,039	1185,17	-19,996	1,1527	-0,0814
0,0327	0,815858	-0,043	1189,75	-30,906	1,1394	-0,1101
0,0376	0,818919	-0,045	1191,45	-34,726	1,1359	-0,1192
0,1206	0,864521	-0,049	1214,84	-79,348	1,1188	-0,2314
0,1972	0,898369	-0,048	1232,97	-101,513	1,1658	-0,2723
0,2955	0,933388	-0,035	1252,34	-112,954	1,2427	-0,3079
0,3519	0,950289	-0,025	1262,46	-114,175	1,3047	-0,3106
0,3649	0,953879	-0,022	1264,71	-114,040	1,3159	-0,3143
0,4307	0,970814	-0,009	1275,00	-110,591	1,3905	-0,3151
0,4852	0,983342	0,000	1282,91	-105,449	1,4542	-0,3139
0,5797	1,002339	0,017	1295,75	-92,875	1,5799	-0,2965
0,7131	1,024634	0,036	1311,68	-68,677	1,8179	-0,2114
0,7766	1,033802	0,038	1318,67	-55,320	1,8933	-0,2088
0,8263	1,040479	0,032	1323,86	-44,164	1,9891	-0,1699
0,8354	1,041658	0,031	1324,82	-42,072	2,0027	-0,1668
0,8430	1,042644	0,028	1325,53	-40,254	2,0238	-0,1544
0,8620	1,045027	0,024	1327,33	-35,703	2,0483	-0,1517
0,8841	1,047704	0,023	1329,42	-30,321	2,1034	-0,1219
0,9108	1,050840	0,022	1331,68	-23,519	2,1707	-0,0852
0,9307	1,053133	0,017	1333,34	-18,400	2,2011	-0,0776
0,9452	1,054757	0,015	1334,59	-14,659	2,2270	-0,0683
0,9634	1,056793	0,007	1335,95	-9,785	2,2718	-0,0444

Fonte: Autor.

Tabela B7 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ etanol}\}$ a $T = 293,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0031	0,791882	-0,023	1161,78	-4,371	1,1518	-0,0483
0,0065	0,794365	-0,033	1163,43	-8,567	1,1461	-0,0573
0,0193	0,802874	-0,038	1168,05	-20,637	1,1309	-0,0849
0,0327	0,811476	-0,041	1172,60	-31,977	1,1182	-0,1106
0,0376	0,814511	-0,042	1174,20	-35,805	1,1154	-0,1181
0,1206	0,859868	-0,042	1197,35	-82,119	1,1049	-0,2091
0,1972	0,893544	-0,037	1216,32	-106,425	1,1501	-0,2382
0,2955	0,928400	-0,022	1234,78	-117,431	1,2202	-0,2633
0,3519	0,945228	-0,011	1244,47	-118,361	1,2729	-0,2653
0,3649	0,948807	-0,008	1246,65	-118,182	1,2763	-0,2744
0,4307	0,965674	0,006	1256,82	-114,635	1,3426	-0,2719
0,4852	0,978159	0,015	1264,60	-109,295	1,3957	-0,2716
0,5797	0,997095	0,032	1277,26	-96,280	1,5070	-0,2519
0,7131	1,019336	0,049	1292,61	-70,912	1,6961	-0,1922
0,7766	1,028491	0,048	1299,66	-57,239	1,7754	-0,1744
0,8263	1,035156	0,040	1304,51	-45,463	1,8664	-0,1315
0,8354	1,036338	0,038	1305,62	-43,442	1,8719	-0,1349
0,8430	1,037321	0,035	1306,30	-41,544	1,8974	-0,1168
0,8620	1,039706	0,030	1308,01	-36,782	1,9142	-0,1184
0,8841	1,042381	0,029	1310,05	-31,197	1,9654	-0,0886
0,9108	1,045516	0,026	1312,40	-24,263	2,0229	-0,0570
0,9307	1,047809	0,019	1313,98	-18,920	2,0476	-0,0515
0,9452	1,049433	0,017	1315,24	-15,073	2,0669	-0,0463
0,9634	1,051466	0,008	1316,43	-9,903	2,1057	-0,0251

Fonte: Autor.

Tabela B8 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ etanol}\}$ a $T = 298,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0031	0,787580	-0,023	1144,63	-4,515	1,0938	-0,0388
0,0065	0,790050	-0,033	1146,27	-8,886	1,0885	-0,0471
0,0193	0,798504	-0,036	1150,79	-21,322	1,0758	-0,0707
0,0327	0,807050	-0,038	1155,25	-33,019	1,0654	-0,0926
0,0376	0,810068	-0,038	1156,83	-36,989	1,0631	-0,0991
0,1206	0,855167	-0,033	1179,67	-84,986	1,0560	-0,1772
0,1972	0,888672	-0,025	1200,47	-112,911	1,0975	-0,2013
0,2955	0,923369	-0,007	1217,12	-122,251	1,1599	-0,2229
0,3519	0,940125	0,006	1226,23	-122,684	1,2055	-0,2256
0,3649	0,943689	0,009	1228,34	-122,453	1,2080	-0,2342
0,4307	0,960490	0,024	1238,38	-118,799	1,2672	-0,2313
0,4852	0,972934	0,032	1246,04	-113,262	1,3146	-0,2306
0,5797	0,991813	0,049	1258,55	-99,818	1,4119	-0,2142
0,7131	1,014006	0,063	1273,11	-73,002	1,5726	-0,1676
0,7766	1,023148	0,060	1280,42	-59,192	1,6449	-0,1496
0,8263	1,029802	0,051	1284,44	-46,300	1,7268	-0,1103
0,8354	1,030991	0,047	1286,09	-44,723	1,7324	-0,1125
0,8430	1,031971	0,044	1286,47	-42,492	1,7384	-0,1130
0,8620	1,034357	0,038	1288,19	-37,597	1,7776	-0,0900
0,8841	1,037031	0,035	1290,19	-31,808	1,8159	-0,0706
0,9108	1,040169	0,030	1292,80	-24,895	1,8525	-0,0569
0,9307	1,042458	0,024	1294,24	-19,258	1,8825	-0,0439
0,9452	1,044078	0,021	1295,25	-15,068	1,8991	-0,0397
0,9634	1,046117	0,010	1296,17	-9,498	1,9320	-0,0224

Fonte: Autor.

Tabela B9 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ etanol}\}$ a $T = 303,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0031	0,783247	-0,023	1127,70	-4,509	1,0219	-0,0433
0,0065	0,785701	-0,032	1129,30	-9,007	1,0182	-0,0496
0,0193	0,794101	-0,035	1133,70	-21,791	1,0059	-0,0716
0,0327	0,802593	-0,035	1138,07	-33,864	0,9978	-0,0898
0,0376	0,805593	-0,035	1139,60	-37,934	0,9967	-0,0946
0,1206	0,850434	-0,024	1162,06	-87,619	0,9935	-0,1606
0,1972	0,883771	-0,012	1184,32	-119,012	1,0314	-0,1805
0,2955	0,918305	0,010	1199,41	-126,903	1,0888	-0,1974
0,3519	0,934995	0,023	1208,06	-126,971	1,1298	-0,1990
0,3649	0,938542	0,027	1210,06	-126,641	1,1320	-0,2066
0,4307	0,955283	0,042	1220,00	-122,949	1,1850	-0,2033
0,4852	0,967687	0,050	1227,51	-117,201	1,2273	-0,2022
0,5797	0,986511	0,067	1239,86	-103,347	1,3152	-0,1857
0,7131	1,008660	0,077	1254,15	-75,579	1,4638	-0,1379
0,7766	1,017793	0,072	1261,42	-61,372	1,5336	-0,1161
0,8263	1,024446	0,060	1265,01	-47,686	1,5947	-0,0925
0,8354	1,025631	0,056	1266,99	-46,396	1,6000	-0,0942
0,8430	1,026609	0,053	1267,15	-43,883	1,6038	-0,0961
0,8620	1,028995	0,046	1268,89	-38,866	1,6396	-0,0746
0,8841	1,031670	0,041	1270,83	-32,852	1,6728	-0,0581
0,9108	1,034806	0,035	1273,50	-25,796	1,7083	-0,0428
0,9307	1,037099	0,027	1274,89	-19,942	1,7309	-0,0352
0,9452	1,038717	0,023	1275,75	-15,482	1,7449	-0,0322
0,9634	1,040757	0,011	1276,66	-9,725	1,7755	-0,0153

Fonte: Autor.

Tabela B10 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ etanol}\}$ a $T = 308,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0031	0,778881	-0,023	1110,97	-4,628	0,9480	-0,0373
0,0065	0,781319	-0,032	1112,52	-9,245	0,9416	-0,0460
0,0193	0,789665	-0,033	1116,78	-22,382	0,9330	-0,0633
0,0327	0,798103	-0,032	1121,04	-34,843	0,9253	-0,0803
0,0376	0,801082	-0,031	1122,50	-38,986	0,9262	-0,0827
0,1206	0,845666	-0,013	1144,49	-90,507	0,9274	-0,1383
0,1972	0,878832	0,002	1167,83	-125,323	0,9624	-0,1559
0,2955	0,913212	0,027	1181,68	-132,339	1,0155	-0,1700
0,3519	0,929829	0,042	1189,90	-132,188	1,0521	-0,1721
0,3649	0,933369	0,045	1191,84	-131,855	1,0552	-0,1779
0,4307	0,950047	0,061	1201,63	-128,239	1,1013	-0,1769
0,4852	0,962412	0,070	1209,00	-122,426	1,1414	-0,1741
0,5797	0,981187	0,085	1221,15	-108,359	1,2192	-0,1611
0,7131	1,003298	0,092	1235,44	-80,240	1,3548	-0,1169
0,7766	1,012424	0,084	1242,51	-65,621	1,4098	-0,1054
0,8263	1,019078	0,068	1246,06	-51,612	1,4718	-0,0774
0,8354	1,020255	0,065	1247,99	-50,278	1,4756	-0,0799
0,8430	1,021236	0,061	1248,17	-47,722	1,4801	-0,0806
0,8620	1,023623	0,053	1249,90	-42,599	1,5118	-0,0619
0,8841	1,026297	0,047	1251,82	-36,444	1,5421	-0,0467
0,9108	1,029436	0,039	1254,39	-29,158	1,5744	-0,0327
0,9307	1,031727	0,030	1255,79	-23,181	1,5941	-0,0266
0,9452	1,033345	0,026	1256,57	-18,539	1,6062	-0,0245
0,9634	1,035387	0,012	1257,44	-12,605	1,6319	-0,0112

Fonte: Autor.

Tabela B11 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-propanol}\}$ a $T = 288,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0076	0,811446	0,00293	1241,66	-3,140	2,4045	-0,0884
0,0124	0,813824	0,00607	1242,37	-5,050	2,3670	-0,1252
0,0211	0,818102	0,01339	1243,53	-8,244	2,2971	-0,1939
0,0396	0,826739	0,04109	1245,54	-13,872	2,1872	-0,3013
0,0506	0,831665	0,06200	1246,36	-16,452	2,1200	-0,3670
0,1019	0,853885	0,10604	1252,05	-29,138	1,9302	-0,5499
0,1258	0,863550	0,12476	1254,59	-33,821	1,8744	-0,6024
0,1514	0,873496	0,13786	1257,49	-38,420	1,8355	-0,6378
0,1752	0,882221	0,16239	1259,69	-41,452	1,8020	-0,6681
0,2003	0,891111	0,17991	1262,16	-44,357	1,7708	-0,6959
0,2251	0,899623	0,18993	1264,84	-47,052	1,7506	-0,7127
0,2521	0,908519	0,19669	1267,88	-49,627	1,7294	-0,7303
0,3008	0,923541	0,21718	1273,13	-52,727	1,7134	-0,7396
0,3255	0,930719	0,22657	1275,54	-53,510	1,7033	-0,7464
0,4004	0,951084	0,23866	1283,51	-54,780	1,7115	-0,7280
0,5043	0,975912	0,25514	1294,13	-52,234	1,7595	-0,6659
0,6038	0,996827	0,24528	1304,21	-46,576	1,8406	-0,5713
0,6707	1,009547	0,22990	1310,84	-41,233	1,9025	-0,5003
0,7074	1,016093	0,22187	1314,24	-37,676	1,9408	-0,4570
0,7241	1,018967	0,21910	1315,83	-36,007	1,9607	-0,4349
0,7766	1,027657	0,20920	1320,48	-30,135	2,0238	-0,3646
0,8073	1,032658	0,18384	1323,53	-26,834	2,0586	-0,3257
0,8209	1,034821	0,17344	1324,91	-25,330	2,0776	-0,3048
0,8508	1,039413	0,15312	1327,51	-21,597	2,1028	-0,2756
0,8735	1,042848	0,13417	1329,36	-18,559	2,1501	-0,2252
0,8971	1,046166	0,13425	1331,13	-15,158	2,1982	-0,1739
0,9122	1,048340	0,12270	1332,21	-12,931	2,2203	-0,1497
0,9306	1,050919	0,11005	1333,61	-10,263	2,2637	-0,1038
0,9522	1,053911	0,09316	1335,41	-7,193	2,3110	-0,0536

Fonte: Autor.

Tabela B12 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-propanol}\}$ a $T = 293,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0076	0,807452	0,004	1224,56	-3,191	2,1330	-0,0591
0,0124	0,809807	0,008	1225,23	-5,117	2,1023	-0,0897
0,0211	0,814049	0,017	1226,35	-8,378	2,0530	-0,1388
0,0396	0,822621	0,046	1228,28	-14,118	1,9540	-0,2373
0,0506	0,827506	0,069	1229,03	-16,702	1,8905	-0,3005
0,1019	0,849564	0,117	1234,58	-29,739	1,7440	-0,4457
0,1258	0,859160	0,138	1237,05	-34,542	1,6951	-0,4939
0,1514	0,869038	0,153	1239,92	-39,320	1,6558	-0,5326
0,1752	0,877705	0,179	1242,07	-42,444	1,6255	-0,5622
0,2003	0,886537	0,198	1244,47	-45,420	1,5993	-0,5878
0,2251	0,894996	0,209	1247,11	-48,222	1,5823	-0,6041
0,2521	0,903835	0,217	1250,10	-50,895	1,5700	-0,6157
0,3008	0,918767	0,239	1255,25	-54,112	1,5602	-0,6243
0,3255	0,925905	0,248	1257,59	-54,907	1,5564	-0,6274
0,4004	0,946157	0,261	1265,40	-56,245	1,5777	-0,6042
0,5043	0,970865	0,277	1275,84	-53,701	1,6065	-0,5727
0,6038	0,991683	0,266	1285,75	-47,939	1,6706	-0,5060
0,6707	1,004356	0,248	1292,21	-42,428	1,7280	-0,4469
0,7074	1,010869	0,240	1295,53	-38,762	1,7635	-0,4104
0,7241	1,013745	0,235	1297,10	-37,067	1,7805	-0,3930
0,7766	1,022396	0,225	1301,61	-30,992	1,8390	-0,3331
0,8073	1,027395	0,196	1304,65	-27,655	1,8780	-0,2933
0,8209	1,029546	0,185	1305,89	-26,010	1,9189	-0,2521
0,8508	1,034132	0,163	1308,53	-22,260	1,9254	-0,2448
0,8735	1,037558	0,142	1310,35	-19,146	1,9721	-0,1975
0,8971	1,040872	0,140	1312,05	-15,624	2,0054	-0,1636
0,9122	1,043037	0,128	1313,10	-13,326	2,0232	-0,1454
0,9306	1,045614	0,114	1314,52	-10,628	2,0622	-0,1059
0,9522	1,048586	0,098	1316,19	-7,388	2,0851	-0,0824

Fonte: Autor.

Tabela B13 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-propanol}\}$ a $T = 298,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0076	0,803413	0,005	1207,26	-3,256	1,8915	-0,0380
0,0124	0,805751	0,010	1207,89	-5,203	1,8650	-0,0648
0,0211	0,809959	0,019	1208,95	-8,507	1,8215	-0,1088
0,0396	0,818460	0,052	1210,79	-14,344	1,7366	-0,1947
0,0506	0,823305	0,076	1211,53	-17,012	1,6819	-0,2501
0,1019	0,845200	0,129	1216,90	-30,360	1,5587	-0,3762
0,1258	0,854729	0,152	1219,33	-35,330	1,5171	-0,4191
0,1514	0,864538	0,168	1222,10	-40,206	1,4837	-0,4540
0,1752	0,873147	0,196	1224,19	-43,414	1,4582	-0,4808
0,2003	0,881918	0,217	1226,55	-46,499	1,4366	-0,5038
0,2251	0,890326	0,228	1229,12	-49,379	1,4232	-0,5186
0,2521	0,899110	0,237	1232,06	-52,157	1,4130	-0,5304
0,3008	0,913951	0,261	1237,09	-55,474	1,4064	-0,5397
0,3255	0,921050	0,271	1239,40	-56,326	1,4045	-0,5430
0,4004	0,941190	0,286	1247,08	-57,766	1,4234	-0,5284
0,5043	0,965779	0,301	1257,29	-55,169	1,4551	-0,5025
0,6038	0,986508	0,288	1267,03	-49,300	1,5150	-0,4483
0,6707	0,999132	0,269	1273,39	-43,675	1,5679	-0,3992
0,7074	1,005627	0,259	1276,63	-39,900	1,5998	-0,3693
0,7241	1,008489	0,254	1278,15	-38,138	1,6164	-0,3537
0,7766	1,017123	0,239	1282,55	-31,883	1,6791	-0,2940
0,8073	1,022101	0,210	1285,49	-28,415	1,7056	-0,2692
0,8209	1,024248	0,198	1286,77	-26,785	1,7409	-0,2347
0,8508	1,028821	0,174	1289,29	-22,869	1,7456	-0,2317
0,8735	1,032239	0,152	1291,05	-19,646	1,7878	-0,1907
0,8971	1,035547	0,149	1292,72	-16,029	1,8178	-0,1621
0,9122	1,037708	0,135	1293,74	-13,659	1,8351	-0,1456
0,9306	1,040282	0,120	1295,10	-10,858	1,8748	-0,1070
0,9522	1,043251	0,101	1296,83	-7,609	1,8949	-0,0881

Fonte: Autor.

Tabela B14 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-propanol}\}$ a $T = 303,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0076	0,799345	0,006	1190,11	-3,279	1,6798	-0,0333
0,0124	0,801662	0,012	1190,71	-5,257	1,6629	-0,0507
0,0211	0,805835	0,023	1191,71	-8,602	1,6204	-0,0941
0,0396	0,814270	0,057	1193,47	-14,558	1,5507	-0,1658
0,0506	0,819075	0,083	1194,18	-17,287	1,5012	-0,2165
0,1019	0,840805	0,142	1199,35	-30,933	1,3968	-0,3263
0,1258	0,850264	0,166	1201,72	-36,051	1,3617	-0,3640
0,1514	0,860005	0,185	1204,43	-41,087	1,3348	-0,3936
0,1752	0,868557	0,214	1206,45	-44,373	1,3135	-0,4174
0,2003	0,877271	0,236	1208,76	-47,569	1,2945	-0,4391
0,2251	0,885624	0,249	1211,26	-50,530	1,2845	-0,4517
0,2521	0,894352	0,260	1214,16	-53,436	1,2771	-0,4620
0,3008	0,909109	0,285	1219,08	-56,884	1,2735	-0,4708
0,3255	0,916165	0,296	1221,31	-57,738	1,2728	-0,4741
0,4004	0,936198	0,311	1228,89	-59,343	1,2876	-0,4672
0,5043	0,960670	0,326	1238,87	-56,714	1,3236	-0,4423
0,6038	0,981312	0,311	1248,45	-50,771	1,3793	-0,3971
0,6707	0,993889	0,289	1254,69	-45,023	1,4279	-0,3556
0,7074	1,000366	0,277	1257,88	-41,172	1,4572	-0,3302
0,7241	1,003217	0,272	1259,35	-39,346	1,4731	-0,3161
0,7766	1,011829	0,254	1263,65	-32,921	1,5257	-0,2691
0,8073	1,016795	0,223	1266,51	-29,346	1,5549	-0,2431
0,8209	1,018936	0,211	1267,78	-27,689	1,5766	-0,2229
0,8508	1,023499	0,184	1270,21	-23,634	1,5912	-0,2115
0,8735	1,026910	0,161	1271,92	-20,312	1,6313	-0,1738
0,8971	1,030212	0,156	1273,57	-16,610	1,6571	-0,1505
0,9122	1,032371	0,142	1274,57	-14,178	1,6741	-0,1351
0,9306	1,034940	0,124	1275,91	-11,308	1,7151	-0,0960
0,9522	1,037903	0,104	1277,63	-7,995	1,7349	-0,0785

Fonte: Autor.

Tabela B15 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-propanol}\}$ a $T = 308,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0076	0,795237	0,008	1173,05	-3,329	1,4940	-0,0314
0,0124	0,797536	0,014	1173,61	-5,337	1,4869	-0,0392
0,0211	0,801671	0,026	1174,57	-8,772	1,4447	-0,0826
0,0396	0,810041	0,063	1176,22	-14,851	1,3853	-0,1447
0,0506	0,814808	0,090	1176,90	-17,671	1,3410	-0,1906
0,1019	0,836374	0,155	1181,87	-31,752	1,2557	-0,2833
0,1258	0,845766	0,182	1184,18	-37,089	1,2251	-0,3173
0,1514	0,855436	0,202	1186,81	-42,325	1,2030	-0,3431
0,1752	0,863934	0,233	1188,77	-45,770	1,1858	-0,3637
0,2003	0,872589	0,256	1191,04	-49,155	1,1699	-0,3832
0,2251	0,880892	0,271	1193,48	-52,282	1,1626	-0,3941
0,2521	0,889565	0,282	1196,31	-55,354	1,1574	-0,4032
0,3008	0,904238	0,309	1201,12	-59,063	1,1555	-0,4121
0,3255	0,911251	0,321	1203,31	-60,031	1,1566	-0,4145
0,4004	0,931180	0,337	1210,76	-61,970	1,1709	-0,4110
0,5043	0,955538	0,351	1220,53	-59,597	1,2082	-0,3887
0,6038	0,976099	0,334	1229,95	-53,838	1,2604	-0,3508
0,6707	0,988633	0,310	1236,08	-48,148	1,3061	-0,3147
0,7074	0,995089	0,296	1239,19	-44,279	1,3336	-0,2925
0,7241	0,997930	0,290	1240,63	-42,449	1,3485	-0,2800
0,7766	1,006522	0,270	1244,84	-35,993	1,3999	-0,2361
0,8073	1,011474	0,237	1247,62	-32,381	1,4244	-0,2161
0,8209	1,013609	0,224	1248,89	-30,743	1,4413	-0,2011
0,8508	1,018165	0,195	1251,24	-26,627	1,4558	-0,1909
0,8735	1,021571	0,170	1252,92	-23,281	1,4953	-0,1547
0,8971	1,024867	0,163	1254,54	-19,542	1,5175	-0,1359
0,9122	1,027023	0,147	1255,52	-17,084	1,5338	-0,1218
0,9306	1,029587	0,129	1256,83	-14,180	1,5782	-0,0800
0,9522	1,032541	0,108	1258,55	-10,863	1,5999	-0,0614

Fonte: Autor.

Tabela B16 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-butanol}\}$ a $T = 288,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0179	0,820359	0,024	1274,29	-2,886	3,1179	-0,2228
0,0245	0,822895	0,035	1274,39	-3,785	3,0416	-0,2927
0,0459	0,830855	0,081	1274,47	-6,101	2,7935	-0,5202
0,1012	0,850792	0,158	1275,62	-11,974	2,4887	-0,7716
0,1259	0,859288	0,189	1276,31	-14,175	2,3946	-0,8419
0,1512	0,867655	0,227	1276,73	-15,719	2,2824	-0,9341
0,1760	0,875841	0,240	1277,80	-17,754	2,2089	-0,9838
0,2050	0,884927	0,273	1278,86	-19,386	2,1320	-1,0331
0,2259	0,891428	0,284	1279,94	-20,730	2,0984	-1,0467
0,2510	0,898983	0,299	1281,22	-22,042	2,0500	-1,0711
0,2760	0,906266	0,318	1282,29	-22,831	2,0107	-1,0866
0,3031	0,914005	0,332	1283,83	-23,811	1,9827	-1,0880
0,3251	0,920187	0,336	1285,22	-24,593	1,9642	-1,0856
0,3751	0,933652	0,349	1288,45	-25,750	1,9227	-1,0798
0,4255	0,946561	0,356	1291,97	-26,355	1,9062	-1,0486
0,4761	0,958988	0,350	1295,84	-26,537	1,9052	-0,9952
0,5021	0,965114	0,347	1297,97	-26,502	1,9072	-0,9687
0,5256	0,970543	0,342	1299,56	-26,004	1,9102	-0,9435
0,6063	0,988263	0,328	1306,03	-24,254	1,9262	-0,8558
0,6702	1,001485	0,303	1311,46	-22,136	1,9624	-0,7592
0,7273	1,012665	0,280	1316,19	-19,458	2,0043	-0,6633
0,7488	1,016774	0,267	1318,11	-18,428	2,0238	-0,6234
0,7735	1,021437	0,245	1320,18	-17,062	2,0520	-0,5718
0,7984	1,026083	0,218	1322,66	-15,935	2,0833	-0,5169
0,8274	1,031322	0,193	1325,03	-14,039	2,1158	-0,4570
0,8512	1,035495	0,176	1327,11	-12,483	2,1500	-0,4003
0,8746	1,039554	0,155	1329,02	-10,782	2,1775	-0,3507
0,9199	1,047275	0,104	1332,72	-7,303	2,2454	-0,2399
0,9363	1,050015	0,082	1333,91	-5,877	2,2782	-0,1916
0,9535	1,052809	0,067	1335,40	-4,507	2,3064	-0,1471
0,9700	1,055523	0,042	1336,45	-2,895	2,3445	-0,0934
0,9847	1,057893	0,023	1337,57	-1,559	2,3771	-0,0469

Fonte: Autor.

Tabela B17 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-butanol}\}$ a $T = 293,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0179	0,816522	0,026	1257,43	-2,896	2,7654	-0,1627
0,0245	0,819038	0,038	1257,48	-3,766	2,6991	-0,2240
0,0459	0,826922	0,087	1257,49	-6,069	2,4812	-0,4257
0,1012	0,846691	0,171	1258,46	-11,958	2,2241	-0,6410
0,1259	0,855122	0,203	1259,10	-14,203	2,1322	-0,7142
0,1512	0,863421	0,244	1259,43	-15,689	2,0491	-0,7907
0,1760	0,871546	0,258	1260,47	-17,799	1,9874	-0,8332
0,2050	0,880561	0,293	1261,43	-19,418	1,9262	-0,8721
0,2259	0,887009	0,306	1262,44	-20,766	1,8891	-0,8930
0,2510	0,894504	0,323	1263,67	-22,113	1,8563	-0,9065
0,2760	0,901737	0,343	1264,70	-22,937	1,8215	-0,9220
0,3031	0,909432	0,356	1266,18	-23,957	1,7965	-0,9279
0,3251	0,915575	0,361	1267,56	-24,810	1,7820	-0,9254
0,3751	0,928944	0,375	1270,63	-25,960	1,7476	-0,9211
0,4255	0,941770	0,382	1274,06	-26,628	1,7335	-0,8964
0,4761	0,954131	0,375	1277,89	-26,936	1,7273	-0,8641
0,5021	0,960222	0,372	1279,96	-26,917	1,7300	-0,8414
0,5256	0,965621	0,366	1281,50	-26,420	1,7203	-0,8329
0,6063	0,983239	0,352	1287,78	-24,687	1,7538	-0,7324
0,6702	0,996395	0,324	1293,07	-22,563	1,7875	-0,6498
0,7273	1,007522	0,298	1297,67	-19,852	1,8240	-0,5697
0,7488	1,011615	0,284	1299,52	-18,794	1,8450	-0,5322
0,7735	1,016248	0,263	1301,45	-17,328	1,8672	-0,4912
0,7984	1,020882	0,233	1303,92	-16,243	1,8889	-0,4504
0,8274	1,026101	0,205	1306,23	-14,323	1,9206	-0,3966
0,8512	1,030258	0,187	1308,23	-12,722	1,9522	-0,3468
0,8746	1,034304	0,164	1310,08	-10,986	1,9810	-0,3001
0,9199	1,041994	0,110	1313,65	-7,421	2,0446	-0,2019
0,9363	1,044726	0,087	1314,81	-5,973	2,0733	-0,1607
0,9535	1,047497	0,072	1316,22	-4,538	2,0995	-0,1213
0,9700	1,050213	0,044	1317,28	-2,934	2,1315	-0,0767
0,9847	1,052575	0,024	1318,39	-1,591	2,1543	-0,0427

Fonte: Autor.

Tabela B18 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-butanol}\}$ a $T = 298,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0179	0,812644	0,029	1240,34	-2,814	2,4280	-0,1551
0,0245	0,815140	0,042	1240,38	-3,704	2,3751	-0,2038
0,0459	0,822954	0,094	1240,29	-5,961	2,1859	-0,3798
0,1012	0,842555	0,183	1241,07	-11,855	1,9733	-0,5580
0,1259	0,850914	0,218	1241,65	-14,130	1,8954	-0,6205
0,1512	0,859151	0,260	1241,90	-15,638	1,8240	-0,6748
0,1760	0,867210	0,277	1242,87	-17,777	1,7709	-0,7125
0,2050	0,876158	0,314	1243,75	-19,409	1,7194	-0,7461
0,2259	0,882558	0,328	1244,71	-20,788	1,6878	-0,7647
0,2510	0,889999	0,346	1245,89	-22,180	1,6587	-0,7783
0,2760	0,897182	0,366	1246,88	-23,042	1,6303	-0,7913
0,3031	0,904820	0,381	1248,30	-24,092	1,6106	-0,7951
0,3251	0,910922	0,386	1249,63	-24,977	1,5994	-0,7927
0,3751	0,924203	0,402	1252,58	-26,170	1,5609	-0,8004
0,4255	0,936950	0,409	1255,90	-26,890	1,5499	-0,7804
0,4761	0,949238	0,402	1259,67	-27,286	1,5572	-0,7433
0,5021	0,955294	0,398	1261,67	-27,277	1,5606	-0,7239
0,5256	0,960663	0,392	1263,15	-26,772	1,5614	-0,7085
0,6063	0,978188	0,375	1269,27	-25,059	1,5874	-0,6328
0,6702	0,991276	0,345	1274,41	-22,930	1,6189	-0,5617
0,7273	1,002349	0,318	1278,85	-20,165	1,6529	-0,4923
0,7488	1,006424	0,302	1280,66	-19,109	1,6728	-0,4591
0,7735	1,011043	0,278	1282,58	-17,671	1,6934	-0,4232
0,7984	1,015654	0,248	1284,95	-16,545	1,7130	-0,3881
0,8274	1,020854	0,218	1287,16	-14,567	1,7418	-0,3414
0,8512	1,024993	0,199	1289,09	-12,930	1,7701	-0,2984
0,8746	1,029028	0,173	1290,87	-11,154	1,7964	-0,2576
0,9199	1,036687	0,117	1294,34	-7,533	1,8524	-0,1735
0,9363	1,039410	0,092	1295,48	-6,072	1,8785	-0,1373
0,9535	1,042176	0,075	1296,88	-4,642	1,9016	-0,1035
0,9700	1,044878	0,046	1297,88	-2,981	1,9302	-0,0647
0,9847	1,047230	0,025	1298,96	-1,614	1,9496	-0,0362

Fonte: Autor.

Tabela B19 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-butanol}\}$ a $T = 303,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0179	0,808738	0,032	1223,40	-2,757	2,1419	-0,1301
0,0245	0,811213	0,046	1223,42	-3,652	2,0979	-0,1709
0,0459	0,818957	0,100	1223,23	-5,853	1,9319	-0,3267
0,1012	0,838388	0,197	1223,83	-11,751	1,7573	-0,4749
0,1259	0,846679	0,234	1224,33	-14,032	1,6906	-0,5299
0,1512	0,854851	0,278	1224,50	-15,522	1,6305	-0,5753
0,1760	0,862845	0,297	1225,41	-17,702	1,5851	-0,6087
0,2050	0,871729	0,335	1226,21	-19,345	1,5419	-0,6378
0,2259	0,878080	0,351	1227,13	-20,767	1,5147	-0,6549
0,2510	0,885468	0,370	1228,25	-22,192	1,4907	-0,6667
0,2760	0,892599	0,392	1229,15	-23,030	1,4659	-0,6794
0,3031	0,900185	0,407	1230,55	-24,177	1,4506	-0,6838
0,3251	0,906243	0,413	1231,84	-25,104	1,4417	-0,6820
0,3751	0,919440	0,429	1234,68	-26,352	1,4265	-0,6730
0,4255	0,932107	0,437	1237,89	-27,125	1,4018	-0,6733
0,4761	0,944322	0,429	1241,58	-27,591	1,4110	-0,6399
0,5021	0,950349	0,424	1243,54	-27,628	1,4142	-0,6240
0,5256	0,955685	0,418	1244,95	-27,101	1,4165	-0,6103
0,6063	0,973115	0,400	1250,90	-25,397	1,4427	-0,5445
0,6702	0,986140	0,368	1255,90	-23,274	1,4735	-0,4826
0,7273	0,997163	0,337	1260,20	-20,471	1,5060	-0,4224
0,7488	1,001221	0,321	1261,96	-19,406	1,5237	-0,3943
0,7735	1,005822	0,295	1263,83	-17,957	1,5421	-0,3639
0,7984	1,010412	0,264	1266,13	-16,817	1,5605	-0,3334
0,8274	1,015596	0,231	1268,26	-14,798	1,5866	-0,2932
0,8512	1,019719	0,210	1270,14	-13,141	1,6124	-0,2559
0,8746	1,023740	0,183	1271,85	-11,320	1,6362	-0,2207
0,9199	1,031371	0,123	1275,22	-7,638	1,6864	-0,1485
0,9363	1,034084	0,098	1276,33	-6,155	1,7096	-0,1173
0,9535	1,036838	0,080	1277,71	-4,717	1,7299	-0,0887
0,9700	1,039534	0,049	1278,67	-3,018	1,7572	-0,0534
0,9847	1,041879	0,027	1279,72	-1,628	1,7727	-0,0307

Fonte: Autor.

Tabela B20 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-butanol}\}$ a $T = 308,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0179	0,804803	0,035	1206,55	-2,681	1,8949	-0,1090
0,0245	0,807253	0,050	1206,54	-3,563	1,8573	-0,1442
0,0459	0,814928	0,107	1206,26	-5,714	1,7129	-0,2808
0,1012	0,834191	0,210	1206,65	-11,566	1,5701	-0,4034
0,1259	0,842413	0,250	1207,09	-13,874	1,5133	-0,4512
0,1512	0,850522	0,296	1207,18	-15,353	1,4624	-0,4903
0,1760	0,858454	0,317	1208,03	-17,575	1,4238	-0,5197
0,2050	0,867268	0,358	1208,75	-19,223	1,3876	-0,5452
0,2259	0,873573	0,374	1209,60	-20,651	1,3646	-0,5604
0,2510	0,880904	0,395	1210,65	-22,093	1,3473	-0,5684
0,2760	0,887985	0,418	1211,50	-22,955	1,3241	-0,5823
0,3031	0,895521	0,434	1212,86	-24,179	1,3116	-0,5878
0,3251	0,901540	0,440	1214,11	-25,153	1,3046	-0,5867
0,3751	0,914649	0,458	1216,84	-26,454	1,2916	-0,5811
0,4255	0,927240	0,465	1219,95	-27,294	1,2733	-0,5806
0,4761	0,939386	0,457	1223,58	-27,872	1,2828	-0,5508
0,5021	0,945380	0,452	1225,48	-27,932	1,2872	-0,5368
0,5256	0,950689	0,445	1226,84	-27,406	1,2896	-0,5257
0,6063	0,968031	0,425	1232,62	-25,725	1,3174	-0,4692
0,6702	0,980992	0,390	1237,48	-23,606	1,3461	-0,4166
0,7273	0,991966	0,357	1241,65	-20,774	1,3772	-0,3642
0,7488	0,996001	0,340	1243,35	-19,686	1,3936	-0,3398
0,7735	1,000586	0,313	1245,16	-18,216	1,4107	-0,3134
0,7984	1,005157	0,279	1247,40	-17,071	1,4270	-0,2878
0,8274	1,010322	0,245	1249,45	-15,006	1,4514	-0,2526
0,8512	1,014429	0,223	1251,27	-13,319	1,4752	-0,2199
0,8746	1,018439	0,193	1252,93	-11,471	1,4967	-0,1897
0,9199	1,026041	0,130	1256,21	-7,736	1,5418	-0,1277
0,9363	1,028747	0,103	1257,29	-6,231	1,5633	-0,1001
0,9535	1,031493	0,084	1258,65	-4,788	1,5815	-0,0755
0,9700	1,034182	0,051	1259,59	-3,068	1,6040	-0,0468
0,9847	1,036517	0,028	1260,62	-1,661	1,6192	-0,0261

Fonte: Autor.

Tabela B21 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-pentanol}\}$ a $T = 288,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0056	0,819972	0,003	1309,40	-0,429	4,4848	-0,1082
0,0113	0,821885	0,004	1308,97	-0,558	4,4021	-0,1783
0,0207	0,824898	0,022	1308,29	-0,662	4,2232	-0,3364
0,0510	0,834219	0,115	1306,09	-0,552	3,7810	-0,7114
0,1028	0,849922	0,233	1303,25	-0,831	3,2392	-1,1467
0,1258	0,856782	0,272	1302,25	-1,025	3,0818	-1,2531
0,1514	0,864293	0,309	1301,54	-1,497	2,9594	-1,3189
0,1738	0,870718	0,345	1300,93	-1,729	2,8337	-1,3951
0,2026	0,879063	0,360	1300,78	-2,649	2,7265	-1,4386
0,2240	0,885020	0,389	1300,53	-2,920	2,6463	-1,4713
0,2767	0,899481	0,431	1300,11	-3,444	2,4727	-1,5479
0,3240	0,912005	0,468	1300,46	-4,008	2,3777	-1,5376
0,3755	0,925299	0,490	1301,30	-4,547	2,2700	-1,5306
0,4008	0,931692	0,493	1301,91	-4,818	2,2339	-1,5106
0,4243	0,937551	0,496	1302,66	-5,118	2,2004	-1,4917
0,4549	0,945021	0,502	1303,63	-5,310	2,1657	-1,4583
0,5044	0,956949	0,490	1305,76	-5,817	2,1335	-1,3659
0,5730	0,972863	0,468	1309,14	-6,179	2,0912	-1,2560
0,6069	0,980470	0,457	1311,04	-6,278	2,0729	-1,2071
0,6268	0,984859	0,452	1312,18	-6,234	2,0667	-1,1695
0,7258	1,006173	0,382	1318,61	-5,896	2,0848	-0,9335
0,7524	1,011730	0,358	1320,51	-5,705	2,1009	-0,8588
0,7733	1,016052	0,333	1322,06	-5,544	2,0834	-0,8267
0,8262	1,026760	0,279	1325,98	-4,830	2,1103	-0,6816
0,8511	1,031705	0,247	1327,83	-4,392	2,1659	-0,5706
0,8768	1,036790	0,211	1329,68	-3,805	2,2052	-0,4739
0,9024	1,041790	0,171	1331,48	-3,120	2,2601	-0,3619
0,9256	1,046277	0,132	1333,51	-2,768	2,2637	-0,3066
0,9387	1,048779	0,111	1334,53	-2,426	2,2840	-0,2571
0,9685	1,054400	0,063	1336,58	-1,365	2,3455	-0,1292
0,9848	1,057456	0,035	1337,73	-0,770	2,3654	-0,0730

Fonte: Autor.

Tabela B22 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-pentanol}\}$ a $T = 293,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0056	0,816331	0,007	1292,63	-0,364	3,9606	-0,0996
0,0113	0,818223	0,009	1292,20	-0,491	3,8677	-0,1819
0,0207	0,821206	0,029	1291,48	-0,549	3,7244	-0,3076
0,0510	0,830438	0,125	1289,16	-0,293	3,3505	-0,6249
0,1028	0,846001	0,245	1286,17	-0,449	2,8759	-0,9930
0,1258	0,852801	0,287	1285,16	-0,651	2,7419	-1,0840
0,1514	0,860246	0,326	1284,36	-1,062	2,6324	-1,1458
0,1738	0,866615	0,364	1283,68	-1,246	2,5347	-1,2018
0,2026	0,874879	0,382	1283,45	-2,141	2,4296	-1,2531
0,2240	0,880788	0,413	1283,14	-2,387	2,3594	-1,2833
0,2767	0,895141	0,456	1282,68	-2,983	2,2173	-1,3277
0,3240	0,907567	0,494	1282,93	-3,553	2,1220	-1,3347
0,3755	0,920763	0,517	1283,65	-4,102	2,0401	-1,3206
0,4008	0,927106	0,521	1284,24	-4,419	2,0091	-1,3045
0,4243	0,932925	0,524	1284,95	-4,751	1,9843	-1,2855
0,4549	0,940344	0,530	1285,85	-4,959	1,9544	-1,2583
0,5044	0,952194	0,518	1287,87	-5,511	1,9219	-1,1910
0,5730	0,968007	0,494	1291,11	-5,952	1,8930	-1,0922
0,6069	0,975553	0,484	1292,89	-6,029	1,8877	-1,0359
0,6268	0,979917	0,478	1293,98	-6,001	1,8837	-1,0027
0,7258	1,001111	0,403	1300,16	-5,752	1,9017	-0,8000
0,7524	1,006641	0,377	1302,02	-5,613	1,9133	-0,7387
0,7733	1,010939	0,351	1303,48	-5,441	1,9069	-0,7077
0,8262	1,021594	0,293	1307,29	-4,794	1,9293	-0,5865
0,8511	1,026514	0,260	1309,01	-4,317	1,9772	-0,4923
0,8768	1,031575	0,221	1310,81	-3,760	2,0104	-0,4110
0,9024	1,036548	0,180	1312,48	-3,029	2,0525	-0,3211
0,9256	1,041005	0,140	1314,41	-2,665	2,0739	-0,2565
0,9387	1,043497	0,118	1315,40	-2,334	2,0899	-0,2161
0,9685	1,049099	0,067	1317,45	-1,348	2,1356	-0,1148
0,9848	1,052141	0,037	1318,54	-0,742	2,1605	-0,0595

Fonte: Autor.

Tabela B23 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-pentanol}\}$ a $T = 298,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0056	0,812653	0,010	1275,63	-0,327	3,4338	-0,0865
0,0113	0,814526	0,013	1275,20	-0,455	3,3559	-0,1557
0,0207	0,817481	0,034	1274,42	-0,440	3,2366	-0,2606
0,0510	0,826626	0,134	1272,01	-0,062	2,9258	-0,5248
0,1028	0,842043	0,258	1268,86	-0,032	2,5234	-0,8375
0,1258	0,848781	0,302	1267,79	-0,184	2,4121	-0,9134
0,1514	0,856161	0,343	1266,91	-0,540	2,3213	-0,9650
0,1738	0,862476	0,383	1266,19	-0,709	2,2381	-1,0139
0,2026	0,870671	0,403	1265,89	-1,597	2,1489	-1,0589
0,2240	0,876531	0,436	1265,54	-1,838	2,0893	-1,0856
0,2767	0,890765	0,481	1264,99	-2,438	1,9724	-1,1195
0,3240	0,903095	0,522	1265,14	-3,013	1,8909	-1,1288
0,3755	0,916193	0,546	1265,76	-3,589	1,8219	-1,1191
0,4008	0,922485	0,551	1266,30	-3,923	1,7978	-1,1047
0,4243	0,928268	0,553	1266,97	-4,290	1,7758	-1,0908
0,4549	0,935638	0,558	1267,80	-4,516	1,7516	-1,0682
0,5044	0,947407	0,546	1269,72	-5,133	1,7260	-1,0118
0,5730	0,963119	0,520	1272,82	-5,666	1,7047	-0,9282
0,6069	0,970620	0,509	1274,49	-5,745	1,7003	-0,8825
0,6268	0,974956	0,502	1275,54	-5,742	1,6973	-0,8550
0,7258	0,996027	0,423	1281,48	-5,606	1,7198	-0,6809
0,7524	1,001526	0,396	1283,25	-5,477	1,7311	-0,6288
0,7733	1,005801	0,369	1284,66	-5,337	1,7247	-0,6043
0,8262	1,016400	0,307	1288,30	-4,714	1,7450	-0,5028
0,8511	1,021297	0,272	1289,93	-4,234	1,7915	-0,4183
0,8768	1,026335	0,231	1291,66	-3,695	1,8210	-0,3493
0,9024	1,031281	0,188	1293,29	-3,000	1,8598	-0,2713
0,9256	1,035720	0,146	1295,10	-2,611	1,8778	-0,2179
0,9387	1,038200	0,123	1296,05	-2,287	1,8914	-0,1842
0,9685	1,043774	0,069	1298,07	-1,355	1,9329	-0,0971
0,9848	1,046803	0,038	1299,09	-0,730	1,9555	-0,0495

Fonte: Autor.

Tabela B24 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-pentanol}\}$ a $T = 303,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0056	0,808947	0,011	1258,78	-0,285	2,9921	-0,0725
0,0113	0,810801	0,015	1258,34	-0,400	2,9264	-0,1310
0,0207	0,813726	0,038	1257,52	-0,328	2,8273	-0,2182
0,0510	0,822784	0,142	1254,99	0,220	2,5672	-0,4400
0,1028	0,838060	0,272	1251,70	0,412	2,2236	-0,7063
0,1258	0,844736	0,318	1250,58	0,303	2,1325	-0,7685
0,1514	0,852051	0,362	1249,63	-0,004	2,0580	-0,8109
0,1738	0,858312	0,404	1248,85	-0,130	1,9873	-0,8535
0,2026	0,866436	0,426	1248,48	-1,006	1,9116	-0,8931
0,2240	0,872250	0,459	1248,07	-1,219	1,8563	-0,9215
0,2767	0,886366	0,508	1247,45	-1,832	1,7622	-0,9498
0,3240	0,898602	0,550	1247,50	-2,412	1,6943	-0,9586
0,3755	0,911602	0,575	1248,01	-3,005	1,6362	-0,9523
0,4008	0,917854	0,579	1248,51	-3,376	1,6156	-0,9414
0,4243	0,923590	0,582	1249,14	-3,772	1,5988	-0,9288
0,4549	0,930909	0,588	1249,91	-4,026	1,5791	-0,9102
0,5044	0,942600	0,575	1251,72	-4,711	1,5580	-0,8618
0,5730	0,958214	0,547	1254,67	-5,330	1,5426	-0,7915
0,6069	0,965670	0,535	1256,24	-5,418	1,5406	-0,7531
0,6268	0,969975	0,528	1257,25	-5,441	1,5388	-0,7300
0,7258	0,990927	0,445	1262,94	-5,413	1,5631	-0,5818
0,7524	0,996396	0,416	1264,63	-5,302	1,5749	-0,5366
0,7733	1,000649	0,387	1265,98	-5,176	1,5697	-0,5169
0,8262	1,011194	0,322	1269,47	-4,595	1,5874	-0,4329
0,8511	1,016068	0,285	1271,02	-4,121	1,6314	-0,3578
0,8768	1,021080	0,242	1272,66	-3,579	1,6595	-0,2975
0,9024	1,026007	0,197	1274,25	-2,925	1,6918	-0,2331
0,9256	1,030426	0,152	1275,96	-2,526	1,7096	-0,1863
0,9387	1,032891	0,129	1276,88	-2,214	1,7218	-0,1577
0,9685	1,038439	0,073	1278,86	-1,332	1,7595	-0,0828
0,9848	1,041457	0,039	1279,84	-0,715	1,7792	-0,0427

Fonte: Autor.

Tabela B25 - Densidade, volume molar excesso, velocidade do som, desvio da compressibilidade isentrópica, viscosidade e desvio da viscosidade para o sistema $\{x_1 \text{ DEM} + (1 - x_1) \text{ 1-pentanol}\}$ a $T = 308,15 \text{ K}$ e pressão atmosférica.

x_1	ρ g·cm ⁻³	V_m^E cm ³ ·mol ⁻¹	u m·s ⁻¹	$\Delta\kappa$ TPa ⁻¹	η mPa·s	$\Delta\eta$ mPa·s
0,0056	0,805211	0,012	1242,02	-0,284	2,6152	-0,0599
0,0113	0,807047	0,016	1241,55	-0,360	2,5602	-0,1090
0,0207	0,809944	0,040	1240,70	-0,241	2,4792	-0,1803
0,0510	0,818915	0,148	1238,07	0,469	2,2616	-0,3667
0,1028	0,834049	0,285	1234,62	0,884	1,9685	-0,5962
0,1258	0,840665	0,334	1233,44	0,834	1,8931	-0,6481
0,1514	0,847913	0,380	1232,42	0,586	1,8320	-0,6831
0,1738	0,854119	0,424	1231,56	0,533	1,7729	-0,7193
0,2026	0,862174	0,448	1231,13	-0,341	1,7085	-0,7543
0,2240	0,867941	0,483	1230,68	-0,546	1,6658	-0,7751
0,2767	0,881944	0,535	1229,97	-1,149	1,5772	-0,8112
0,3240	0,894086	0,578	1229,94	-1,755	1,5239	-0,8164
0,3755	0,906991	0,604	1230,35	-2,377	1,4760	-0,8118
0,4008	0,913199	0,609	1230,80	-2,771	1,4590	-0,8032
0,4243	0,918893	0,612	1231,38	-3,189	1,4453	-0,7929
0,4549	0,926163	0,618	1232,09	-3,473	1,4295	-0,7776
0,5044	0,937776	0,604	1233,80	-4,216	1,4097	-0,7396
0,5730	0,953292	0,575	1236,61	-4,932	1,4029	-0,6766
0,6069	0,960702	0,562	1238,07	-5,025	1,4024	-0,6438
0,6268	0,964985	0,554	1239,04	-5,080	1,4013	-0,6246
0,7258	0,985813	0,466	1244,46	-5,136	1,4272	-0,4978
0,7524	0,991255	0,435	1246,11	-5,087	1,4388	-0,4590
0,7733	0,995485	0,405	1247,40	-4,981	1,4339	-0,4451
0,8262	1,005978	0,336	1250,74	-4,441	1,4498	-0,3752
0,8511	1,010826	0,297	1252,21	-3,968	1,4920	-0,3077
0,8768	1,015816	0,253	1253,80	-3,463	1,5176	-0,2559
0,9024	1,020722	0,205	1255,33	-2,832	1,5440	-0,2034
0,9256	1,025117	0,159	1256,92	-2,397	1,5642	-0,1596
0,9387	1,027567	0,135	1257,83	-2,117	1,5751	-0,1353
0,9685	1,033094	0,076	1259,77	-1,292	1,6088	-0,0713
0,9848	1,036100	0,041	1260,72	-0,691	1,6263	-0,0372

Fonte: Autor.

Tabela B26 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ metanol} a $T = 288,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	148,609	40,226	150,120	40,225	-0,886	-0,008
0,0101	148,213	40,205	150,167	40,208	-0,839	-0,025
0,0105	147,032	40,191	150,169	40,207	-0,837	-0,026
0,0171	148,099	40,183	150,209	40,194	-0,797	-0,040
0,0199	147,848	40,169	150,225	40,189	-0,781	-0,045
0,0388	148,995	40,152	150,316	40,163	-0,690	-0,071
0,0568	149,023	40,114	150,380	40,150	-0,626	-0,083
0,0660	149,078	40,097	150,406	40,148	-0,600	-0,086
0,1046	149,604	40,070	150,475	40,159	-0,531	-0,075
0,1050	149,502	40,057	150,475	40,159	-0,531	-0,074
0,1269	149,553	40,022	150,494	40,176	-0,513	-0,057
0,1735	149,852	39,991	150,506	40,223	-0,500	-0,010
0,1998	149,908	39,959	150,506	40,251	-0,500	0,017
0,2211	149,937	39,930	150,506	40,271	-0,500	0,038
0,3761	150,344	39,835	150,563	40,303	-0,443	0,070
0,4549	150,480	39,794	150,632	40,243	-0,374	0,009
0,5009	150,542	39,768	150,674	40,196	-0,332	-0,037
0,5953	150,660	39,724	150,747	40,103	-0,259	-0,130
0,6561	150,734	39,715	150,781	40,051	-0,225	-0,182
0,7207	150,787	39,669	150,811	39,989	-0,195	-0,245
0,7639	150,833	39,673	150,833	39,923	-0,173	-0,310
0,7863	150,853	39,669	150,847	39,874	-0,159	-0,359
0,8106	150,866	39,633	150,863	39,804	-0,143	-0,430
0,8491	150,899	39,628	150,893	39,640	-0,113	-0,594
0,8766	150,913	39,572	150,918	39,470	-0,088	-0,764
0,8934	150,923	39,535	150,934	39,338	-0,072	-0,896
0,9118	150,940	39,551	150,951	39,164	-0,055	-1,069
0,9451	150,969	39,602	150,980	38,758	-0,026	-1,476
0,9625	150,978	39,521	150,993	38,489	-0,013	-1,744
0,9747	150,989	39,574	151,000	38,273	-0,006	-1,961
0,9929	150,999	39,190	151,005	37,907	-0,001	-2,326

Fonte: Autor.

Tabela B27 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ metanol} a $T = 293,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	149,277	40,464	150,902	40,463	-0,867	-0,009
0,0101	148,932	40,442	150,951	40,445	-0,819	-0,026
0,0105	147,738	40,429	150,953	40,444	-0,817	-0,027
0,0171	148,840	40,420	150,994	40,430	-0,776	-0,041
0,0199	148,577	40,406	151,010	40,424	-0,759	-0,047
0,0388	149,753	40,390	151,103	40,397	-0,666	-0,074
0,0568	149,777	40,351	151,168	40,384	-0,601	-0,087
0,0660	149,837	40,335	151,194	40,382	-0,575	-0,090
0,1046	150,372	40,308	151,262	40,394	-0,507	-0,078
0,1050	150,269	40,295	151,263	40,394	-0,507	-0,077
0,1269	150,318	40,260	151,280	40,412	-0,490	-0,059
0,1735	150,619	40,230	151,288	40,463	-0,481	-0,009
0,1998	150,675	40,198	151,285	40,492	-0,484	0,021
0,2211	150,705	40,169	151,283	40,514	-0,487	0,043
0,3761	151,117	40,078	151,329	40,554	-0,441	0,082
0,4549	151,251	40,039	151,396	40,494	-0,373	0,023
0,5009	151,315	40,015	151,437	40,447	-0,332	-0,024
0,5953	151,430	39,972	151,510	40,352	-0,260	-0,119
0,6561	151,506	39,969	151,543	40,300	-0,226	-0,171
0,7207	151,557	39,923	151,573	40,238	-0,196	-0,233
0,7639	151,603	39,933	151,595	40,174	-0,174	-0,297
0,7863	151,621	39,926	151,609	40,125	-0,161	-0,346
0,8106	151,635	39,895	151,625	40,054	-0,144	-0,417
0,8491	151,666	39,891	151,655	39,890	-0,114	-0,581
0,8766	151,679	39,833	151,680	39,719	-0,089	-0,753
0,8934	151,689	39,802	151,696	39,585	-0,073	-0,886
0,9118	151,706	39,817	151,713	39,409	-0,056	-1,062
0,9451	151,735	39,873	151,743	38,997	-0,026	-1,474
0,9625	151,742	39,761	151,756	38,724	-0,013	-1,747
0,9747	151,751	39,777	151,763	38,504	-0,007	-1,967
0,9929	151,761	39,354	151,769	38,132	-0,001	-2,339

Fonte: Autor.

Tabela B28 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ metanol} a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	150,072	40,706	151,710	40,705	-0,833	-0,009
0,0101	149,702	40,684	151,759	40,686	-0,784	-0,027
0,0105	148,453	40,670	151,761	40,686	-0,782	-0,028
0,0171	149,608	40,662	151,802	40,671	-0,741	-0,042
0,0199	149,323	40,648	151,818	40,666	-0,725	-0,048
0,0388	150,528	40,632	151,911	40,638	-0,632	-0,075
0,0568	150,547	40,593	151,975	40,626	-0,568	-0,088
0,0660	150,611	40,577	152,000	40,623	-0,543	-0,090
0,1046	151,156	40,551	152,064	40,637	-0,479	-0,076
0,1050	151,053	40,539	152,064	40,637	-0,478	-0,076
0,1269	151,102	40,504	152,079	40,657	-0,464	-0,057
0,1735	151,402	40,474	152,081	40,710	-0,461	-0,003
0,1998	151,457	40,442	152,076	40,741	-0,467	0,028
0,2211	151,489	40,414	152,071	40,765	-0,472	0,051
0,3761	151,901	40,327	152,106	40,809	-0,437	0,096
0,4549	152,035	40,290	152,171	40,749	-0,371	0,036
0,5009	152,099	40,268	152,212	40,702	-0,330	-0,011
0,5953	152,214	40,230	152,284	40,607	-0,259	-0,106
0,6561	152,289	40,229	152,317	40,555	-0,226	-0,158
0,7207	152,339	40,187	152,346	40,494	-0,196	-0,219
0,7639	152,384	40,199	152,368	40,431	-0,175	-0,283
0,7863	152,401	40,194	152,381	40,383	-0,162	-0,331
0,8106	152,414	40,164	152,397	40,312	-0,145	-0,401
0,8491	152,445	40,163	152,427	40,148	-0,115	-0,566
0,8766	152,457	40,105	152,452	39,976	-0,090	-0,738
0,8934	152,467	40,078	152,468	39,841	-0,074	-0,872
0,9118	152,483	40,093	152,486	39,664	-0,057	-1,049
0,9451	152,510	40,153	152,516	39,2476	-0,0265	-1,466
0,9625	152,516	40,027	152,529	38,9713	-0,0136	-1,742
0,9747	152,526	40,061	152,536	38,7485	-0,0066	-1,965
0,9929	152,534	39,580	152,542	38,3712	-0,0006	-2,3421

Fonte: Autor.

Tabela B29 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ metanol} a $T = 303,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	150,895	40,952	152,511	40,950	-0,815	-0,009
0,0101	150,493	40,930	152,562	40,931	-0,764	-0,029
0,0105	149,217	40,916	152,564	40,930	-0,762	-0,029
0,0171	150,395	40,908	152,607	40,915	-0,719	-0,045
0,0199	150,099	40,894	152,624	40,909	-0,702	-0,051
0,0388	151,323	40,878	152,720	40,879	-0,606	-0,080
0,0568	151,336	40,839	152,786	40,866	-0,540	-0,094
0,0660	151,403	40,823	152,812	40,863	-0,514	-0,096
0,1046	151,955	40,799	152,877	40,877	-0,449	-0,083
0,1050	151,852	40,786	152,877	40,877	-0,449	-0,082
0,1269	151,899	40,752	152,891	40,897	-0,435	-0,062
0,1735	152,199	40,723	152,889	40,954	-0,437	-0,005
0,1998	152,254	40,692	152,881	40,988	-0,445	0,028
0,2211	152,285	40,664	152,874	41,013	-0,452	0,053
0,3761	152,698	40,581	152,895	41,068	-0,431	0,109
0,4549	152,831	40,547	152,957	41,010	-0,369	0,051
0,5009	152,894	40,526	152,997	40,963	-0,329	0,003
0,5953	153,009	40,493	153,068	40,866	-0,258	-0,093
0,6561	153,083	40,495	153,101	40,814	-0,225	-0,145
0,7207	153,131	40,455	153,130	40,754	-0,196	-0,205
0,7639	153,175	40,470	153,152	40,691	-0,174	-0,268
0,7863	153,192	40,466	153,164	40,643	-0,162	-0,316
0,8106	153,204	40,436	153,180	40,574	-0,146	-0,386
0,8491	153,233	40,438	153,211	40,410	-0,115	-0,550
0,8766	153,244	40,379	153,235	40,238	-0,091	-0,722
0,8934	153,253	40,349	153,251	40,103	-0,075	-0,856
0,9118	153,268	40,365	153,269	39,925	-0,057	-1,034
0,9451	153,295	40,425	153,299	39,507	-0,027	-1,452
0,9625	153,300	40,297	153,312	39,229	-0,014	-1,730
0,9747	153,309	40,311	153,319	39,004	-0,007	-1,955
0,9929	153,317	39,748	153,325	38,624	-0,001	-2,335

Fonte: Autor.

Tabela B30 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ metanol} a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	151,712	41,202	153,336	41,200	-0,783	-0,009
0,0101	151,285	41,181	153,387	41,181	-0,732	-0,029
0,0105	149,978	41,166	153,390	41,180	-0,730	-0,030
0,0171	151,191	41,159	153,433	41,164	-0,687	-0,046
0,0199	150,880	41,144	153,450	41,158	-0,670	-0,052
0,0388	152,131	41,129	153,546	41,128	-0,573	-0,081
0,0568	152,136	41,090	153,612	41,114	-0,507	-0,095
0,0660	152,207	41,075	153,637	41,112	-0,482	-0,098
0,1046	152,766	41,052	153,700	41,126	-0,419	-0,084
0,1050	152,661	41,039	153,700	41,126	-0,419	-0,083
0,1269	152,708	41,004	153,712	41,147	-0,407	-0,062
0,1735	153,008	40,976	153,707	41,206	-0,412	-0,004
0,1998	153,062	40,946	153,696	41,241	-0,423	0,031
0,2211	153,094	40,918	153,687	41,267	-0,432	0,057
0,3761	153,509	40,842	153,697	41,329	-0,422	0,120
0,4549	153,639	40,809	153,756	41,274	-0,363	0,064
0,5009	153,702	40,791	153,795	41,227	-0,325	0,018
0,5953	153,815	40,762	153,863	41,133	-0,256	-0,077
0,6561	153,888	40,769	153,895	41,082	-0,224	-0,128
0,7207	153,933	40,729	153,924	41,023	-0,196	-0,187
0,7639	153,976	40,747	153,944	40,961	-0,175	-0,249
0,7863	153,993	40,745	153,957	40,913	-0,162	-0,297
0,8106	154,004	40,715	153,973	40,843	-0,146	-0,366
0,8491	154,032	40,719	154,003	40,679	-0,116	-0,530
0,8766	154,042	40,662	154,028	40,507	-0,091	-0,703
0,8934	154,051	40,633	154,044	40,371	-0,075	-0,838
0,9118	154,065	40,645	154,062	40,193	-0,057	-1,017
0,9451	154,090	40,706	154,092	39,772	-0,027	-1,438
0,9625	154,095	40,583	154,105	39,492	-0,014	-1,718
0,9747	154,104	40,604	154,113	39,266	-0,007	-1,944
0,9929	154,110	39,980	154,119	38,883	-0,001	-2,327

Fonte: Autor.

Tabela B31 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ etanol} a $T = 288,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	143,641	58,022	151,501	58,046	0,495	0,001
0,0065	146,012	58,012	151,494	58,048	0,488	0,003
0,0193	148,988	58,005	151,469	58,055	0,463	0,010
0,0327	149,683	58,000	151,440	58,064	0,434	0,019
0,0376	149,821	57,999	151,430	58,068	0,424	0,023
0,1206	150,598	57,989	151,241	58,149	0,235	0,104
0,1972	150,764	57,986	151,086	58,229	0,080	0,184
0,2955	150,887	57,995	150,953	58,301	-0,053	0,256
0,3519	150,934	58,006	150,913	58,316	-0,093	0,271
0,3649	150,946	58,010	150,907	58,316	-0,099	0,271
0,4307	150,986	58,030	150,895	58,303	-0,111	0,258
0,4852	151,005	58,044	150,901	58,272	-0,105	0,227
0,5797	151,036	58,087	150,932	58,189	-0,074	0,144
0,7131	151,057	58,171	150,981	58,049	-0,025	0,004
0,7766	151,055	58,215	150,996	57,994	-0,010	-0,051
0,8263	151,044	58,227	151,003	57,963	-0,003	-0,082
0,8354	151,043	58,231	151,004	57,958	-0,002	-0,087
0,8430	151,039	58,221	151,004	57,955	-0,002	-0,090
0,8620	151,034	58,221	151,005	57,948	-0,001	-0,097
0,8841	151,032	58,247	151,006	57,943	0,000	-0,102
0,9108	151,030	58,291	151,006	57,940	0,000	-0,105
0,9307	151,024	58,288	151,006	57,940	0,000	-0,105
0,9452	151,022	58,318	151,006	57,942	0,000	-0,103
0,9634	151,013	58,237	151,006	57,946	0,000	-0,100

Fonte: Autor.

Tabela B32 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ etanol} a $T = 293,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	144,269	58,335	152,335	58,358	0,566	0,001
0,0065	146,736	58,325	152,330	58,359	0,561	0,001
0,0193	149,804	58,319	152,308	58,364	0,539	0,006
0,0327	150,509	58,315	152,283	58,371	0,514	0,013
0,0376	150,664	58,315	152,273	58,374	0,504	0,016
0,1206	151,422	58,310	152,080	58,456	0,311	0,098
0,1972	151,581	58,312	151,906	58,549	0,137	0,191
0,2955	151,695	58,327	151,746	58,640	-0,023	0,282
0,3519	151,739	58,341	151,693	58,664	-0,076	0,306
0,3649	151,748	58,346	151,685	58,667	-0,084	0,309
0,4307	151,784	58,369	151,663	58,660	-0,106	0,302
0,4852	151,800	58,387	151,665	58,632	-0,105	0,275
0,5797	151,825	58,435	151,692	58,549	-0,077	0,191
0,7131	151,837	58,527	151,741	58,403	-0,028	0,045
0,7766	151,831	58,573	151,757	58,344	-0,013	-0,014
0,8263	151,818	58,590	151,764	58,308	-0,005	-0,050
0,8354	151,815	58,590	151,765	58,303	-0,004	-0,055
0,8430	151,811	58,583	151,766	58,299	-0,004	-0,059
0,8620	151,805	58,578	151,767	58,290	-0,002	-0,068
0,8841	151,802	58,604	151,768	58,282	-0,001	-0,076
0,9108	151,798	58,646	151,769	58,275	0,000	-0,083
0,9307	151,790	58,638	151,769	58,272	0,000	-0,086
0,9452	151,787	58,663	151,769	58,270	0,000	-0,088
0,9634	151,778	58,580	151,769	58,270	0,000	-0,088

Fonte: Autor.

Tabela B33 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ etanol} a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	145,099	58,653	153,224	58,677	0,682	0,000
0,0065	147,551	58,644	153,219	58,677	0,676	0,001
0,0193	150,662	58,640	153,195	58,681	0,653	0,005
0,0327	151,376	58,637	153,167	58,689	0,625	0,012
0,0376	151,527	58,637	153,156	58,692	0,614	0,015
0,1206	152,270	58,639	152,939	58,782	0,396	0,105
0,1972	152,417	58,646	152,739	58,887	0,196	0,211
0,2955	152,520	58,667	152,550	58,994	0,007	0,317
0,3519	152,559	58,685	152,485	59,026	-0,058	0,349
0,3649	152,567	58,691	152,474	59,030	-0,068	0,353
0,4307	152,598	58,719	152,443	59,029	-0,100	0,352
0,4852	152,609	58,740	152,439	59,003	-0,103	0,327
0,5797	152,628	58,794	152,462	58,920	-0,080	0,244
0,7131	152,631	58,896	152,510	58,769	-0,032	0,093
0,7766	152,620	58,946	152,527	58,705	-0,016	0,029
0,8263	152,604	58,969	152,535	58,665	-0,008	-0,011
0,8354	152,599	58,964	152,536	58,659	-0,007	-0,017
0,8430	152,595	58,959	152,537	58,654	-0,006	-0,022
0,8620	152,587	58,953	152,538	58,643	-0,004	-0,034
0,8841	152,582	58,980	152,540	58,631	-0,003	-0,045
0,9108	152,576	59,018	152,541	58,620	-0,001	-0,057
0,9307	152,568	59,017	152,542	58,612	-0,001	-0,064
0,9452	152,564	59,052	152,542	58,607	-0,001	-0,069
0,9634	152,553	58,951	152,542	58,601	0,000	-0,075

Fonte: Autor.

Tabela B34 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ etanol} a $T = 303,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	145,844	58,978	154,097	59,001	0,771	0,000
0,0065	148,369	58,969	154,092	59,001	0,766	0,000
0,0193	151,526	58,966	154,071	59,003	0,746	0,001
0,0327	152,248	58,965	154,045	59,008	0,719	0,007
0,0376	152,399	58,965	154,034	59,011	0,708	0,009
0,1206	153,130	58,974	153,807	59,103	0,481	0,102
0,1972	153,265	58,986	153,585	59,221	0,259	0,220
0,2955	153,358	59,015	153,368	59,347	0,042	0,346
0,3519	153,391	59,036	153,289	59,389	-0,036	0,387
0,3649	153,399	59,043	153,276	59,394	-0,050	0,393
0,4307	153,424	59,075	153,234	59,401	-0,092	0,400
0,4852	153,430	59,099	153,225	59,380	-0,101	0,378
0,5797	153,441	59,160	153,243	59,299	-0,083	0,297
0,7131	153,434	59,270	153,290	59,143	-0,036	0,142
0,7766	153,418	59,322	153,307	59,075	-0,019	0,074
0,8263	153,398	59,345	153,316	59,030	-0,010	0,029
0,8354	153,393	59,342	153,317	59,023	-0,009	0,022
0,8430	153,389	59,338	153,318	59,017	-0,008	0,016
0,8620	153,379	59,332	153,320	59,003	-0,006	0,002
0,8841	153,373	59,358	153,322	58,988	-0,004	-0,013
0,9108	153,365	59,397	153,323	58,971	-0,002	-0,030
0,9307	153,355	59,386	153,324	58,960	-0,002	-0,042
0,9452	153,350	59,424	153,325	58,951	-0,001	-0,050
0,9634	153,338	59,312	153,326	58,939	0,000	-0,062

Fonte: Autor.

Tabela B35 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$
DEM + $(1 - x_1)$ etanol} a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0031	146,674	59,309	154,967	59,331	0,847	-0,001
0,0065	149,234	59,300	154,964	59,329	0,844	-0,003
0,0193	152,415	59,299	154,948	59,328	0,829	-0,004
0,0327	153,141	59,299	154,926	59,330	0,807	-0,002
0,0376	153,297	59,300	154,916	59,332	0,797	0,000
0,1206	154,008	59,317	154,689	59,424	0,570	0,092
0,1972	154,130	59,335	154,447	59,555	0,328	0,223
0,2955	154,210	59,370	154,200	59,703	0,081	0,371
0,3519	154,237	59,396	154,108	59,756	-0,012	0,424
0,3649	154,242	59,403	154,092	59,764	-0,028	0,432
0,4307	154,262	59,440	154,037	59,780	-0,082	0,448
0,4852	154,263	59,468	154,021	59,764	-0,098	0,432
0,5797	154,266	59,535	154,034	59,686	-0,086	0,354
0,7131	154,248	59,652	154,079	59,526	-0,040	0,194
0,7766	154,227	59,706	154,097	59,454	-0,023	0,122
0,8263	154,202	59,726	154,106	59,404	-0,013	0,072
0,8354	154,198	59,729	154,108	59,396	-0,012	0,064
0,8430	154,192	59,722	154,109	59,389	-0,011	0,057
0,8620	154,181	59,715	154,111	59,372	-0,008	0,040
0,8841	154,173	59,740	154,113	59,354	-0,006	0,022
0,9108	154,163	59,773	154,116	59,332	-0,004	0,000
0,9307	154,151	59,763	154,117	59,315	-0,002	-0,017
0,9452	154,146	59,798	154,118	59,302	-0,002	-0,030
0,9634	154,132	59,671	154,119	59,285	-0,001	-0,047

Fonte: Autor.

Tabela B36 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-propanol} a $T = 288,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0076	151,394	74,406	152,811	74,447	1,805	0,044
0,0124	151,497	74,410	152,741	74,473	1,735	0,070
0,0211	151,640	74,417	152,620	74,517	1,614	0,114
0,0396	152,043	74,446	152,395	74,595	1,389	0,192
0,0506	152,231	74,469	152,280	74,633	1,274	0,230
0,1019	152,047	74,522	151,879	74,740	0,873	0,337
0,1258	151,998	74,546	151,754	74,760	0,748	0,356
0,1514	151,917	74,566	151,653	74,765	0,647	0,362
0,1752	151,933	74,600	151,583	74,759	0,577	0,356
0,2003	151,904	74,628	151,527	74,745	0,521	0,342
0,2251	151,850	74,649	151,486	74,726	0,480	0,322
0,2521	151,786	74,666	151,453	74,702	0,447	0,298
0,3008	151,728	74,714	151,411	74,659	0,405	0,255
0,3255	151,702	74,739	151,394	74,640	0,388	0,236
0,4004	151,602	74,801	151,346	74,608	0,340	0,204
0,5043	151,512	74,918	151,266	74,638	0,260	0,235
0,6038	151,412	75,022	151,184	74,736	0,177	0,333
0,6707	151,349	75,102	151,134	74,824	0,128	0,420
0,7074	151,320	75,162	151,111	74,876	0,105	0,473
0,7241	151,309	75,198	151,101	74,901	0,095	0,497
0,7766	151,275	75,340	151,074	74,982	0,068	0,579
0,8073	151,234	75,357	151,060	75,035	0,054	0,631
0,8209	151,217	75,372	151,055	75,060	0,049	0,656
0,8508	151,186	75,429	151,043	75,120	0,037	0,717
0,8735	151,160	75,464	151,035	75,173	0,029	0,770
0,8971	151,156	75,708	151,027	75,237	0,021	0,833
0,9122	151,141	75,801	151,022	75,283	0,016	0,879
0,9306	151,124	75,989	151,017	75,346	0,011	0,943
0,9522	151,104	76,352	151,012	75,433	0,006	1,030

Fonte: Autor.

Tabela B37 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-propanol} a $T = 293,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0076	152,292	74,774	153,636	74,813	1,866	0,043
0,0124	152,423	74,779	153,566	74,838	1,797	0,068
0,0211	152,559	74,787	153,447	74,881	1,678	0,111
0,0396	152,939	74,819	153,224	74,957	1,455	0,187
0,0506	153,129	74,843	153,110	74,994	1,340	0,224
0,1019	152,922	74,901	152,709	75,099	0,940	0,329
0,1258	152,867	74,928	152,584	75,118	0,814	0,348
0,1514	152,779	74,950	152,481	75,124	0,712	0,354
0,1752	152,790	74,987	152,408	75,119	0,639	0,349
0,2003	152,756	75,017	152,350	75,106	0,580	0,336
0,2251	152,696	75,040	152,306	75,088	0,536	0,318
0,2521	152,628	75,060	152,269	75,066	0,500	0,296
0,3008	152,562	75,112	152,221	75,026	0,452	0,256
0,3255	152,532	75,138	152,201	75,010	0,432	0,239
0,4004	152,422	75,206	152,144	74,983	0,374	0,213
0,5043	152,319	75,330	152,055	75,021	0,286	0,250
0,6038	152,210	75,442	151,966	75,125	0,197	0,355
0,6707	152,140	75,525	151,913	75,219	0,144	0,449
0,7074	152,109	75,592	151,888	75,276	0,118	0,506
0,7241	152,094	75,623	151,877	75,303	0,108	0,533
0,7766	152,058	75,775	151,847	75,394	0,078	0,624
0,8073	152,012	75,787	151,832	75,454	0,062	0,684
0,8209	151,995	75,806	151,825	75,483	0,056	0,713
0,8508	151,960	75,860	151,812	75,553	0,043	0,783
0,8735	151,932	75,895	151,802	75,615	0,033	0,844
0,8971	151,926	76,135	151,793	75,688	0,024	0,918
0,9122	151,910	76,234	151,788	75,742	0,019	0,971
0,9306	151,892	76,413	151,782	75,814	0,013	1,044
0,9522	151,872	76,812	151,776	75,914	0,007	1,144

Fonte: Autor.

Tabela B38 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-propanol} a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0076	153,218	75,150	154,495	75,188	1,952	0,043
0,0124	153,327	75,155	154,424	75,213	1,882	0,068
0,0211	153,463	75,165	154,303	75,256	1,761	0,111
0,0396	153,849	75,199	154,077	75,332	1,535	0,187
0,0506	154,039	75,225	153,960	75,369	1,418	0,224
0,1019	153,812	75,289	153,553	75,474	1,010	0,329
0,1258	153,749	75,319	153,424	75,494	0,881	0,349
0,1514	153,655	75,344	153,318	75,499	0,775	0,354
0,1752	153,661	75,383	153,242	75,494	0,700	0,349
0,2003	153,624	75,416	153,181	75,481	0,639	0,336
0,2251	153,557	75,440	153,135	75,464	0,592	0,319
0,2521	153,485	75,463	153,095	75,442	0,553	0,297
0,3008	153,411	75,519	153,042	75,403	0,500	0,258
0,3255	153,376	75,547	153,020	75,387	0,477	0,242
0,4004	153,257	75,622	152,955	75,365	0,413	0,220
0,5043	153,140	75,753	152,857	75,410	0,315	0,265
0,6038	153,020	75,873	152,761	75,524	0,218	0,379
0,6707	152,943	75,961	152,703	75,627	0,160	0,482
0,7074	152,908	76,029	152,675	75,689	0,132	0,544
0,7241	152,893	76,064	152,663	75,719	0,121	0,574
0,7766	152,850	76,215	152,630	75,820	0,087	0,675
0,8073	152,802	76,233	152,613	75,888	0,070	0,743
0,8209	152,784	76,252	152,605	75,921	0,063	0,776
0,8508	152,747	76,309	152,590	76,000	0,048	0,855
0,8735	152,717	76,347	152,580	76,069	0,037	0,924
0,8971	152,708	76,589	152,569	76,152	0,027	1,007
0,9122	152,691	76,689	152,563	76,212	0,021	1,067
0,9306	152,671	76,867	152,557	76,294	0,014	1,149
0,9522	152,649	77,261	152,550	76,406	0,007	1,261

Fonte: Autor.

Tabela B39 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-propanol} a $T = 303,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0076	154,147	75,533	155,345	75,568	2,019	0,042
0,0124	154,269	75,538	155,275	75,593	1,949	0,067
0,0211	154,400	75,549	155,155	75,635	1,829	0,108
0,0396	154,771	75,586	154,931	75,709	1,605	0,182
0,0506	154,962	75,613	154,815	75,744	1,489	0,218
0,1019	154,717	75,684	154,408	75,847	1,082	0,321
0,1258	154,649	75,717	154,278	75,866	0,952	0,340
0,1514	154,548	75,744	154,170	75,872	0,844	0,346
0,1752	154,548	75,786	154,092	75,868	0,766	0,342
0,2003	154,504	75,821	154,028	75,856	0,702	0,330
0,2251	154,433	75,848	153,979	75,840	0,653	0,313
0,2521	154,356	75,873	153,936	75,820	0,610	0,293
0,3008	154,272	75,933	153,877	75,784	0,551	0,258
0,3255	154,234	75,965	153,851	75,770	0,525	0,244
0,4004	154,103	76,045	153,778	75,753	0,452	0,226
0,5043	153,973	76,184	153,671	75,805	0,345	0,279
0,6038	153,841	76,312	153,566	75,929	0,240	0,402
0,6707	153,757	76,405	153,504	76,039	0,178	0,513
0,7074	153,718	76,474	153,474	76,108	0,148	0,581
0,7241	153,701	76,511	153,461	76,141	0,135	0,614
0,7766	153,654	76,665	153,424	76,254	0,098	0,728
0,8073	153,602	76,683	153,404	76,330	0,078	0,804
0,8209	153,583	76,704	153,396	76,367	0,070	0,841
0,8508	153,543	76,762	153,379	76,457	0,053	0,931
0,8735	153,510	76,800	153,367	76,535	0,041	1,009
0,8971	153,500	77,042	153,356	76,629	0,030	1,102
0,9122	153,481	77,139	153,349	76,696	0,023	1,170
0,9306	153,460	77,316	153,341	76,787	0,015	1,261
0,9522	153,436	77,711	153,334	76,911	0,008	1,384

Fonte: Autor.

Tabela B40 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-propanol} a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0076	155,142	75,923	156,204	75,956	2,084	0,041
0,0124	155,235	75,929	156,135	75,980	2,015	0,065
0,0211	155,372	75,942	156,016	76,020	1,897	0,105
0,0396	155,717	75,981	155,794	76,092	1,675	0,177
0,0506	155,902	76,010	155,679	76,127	1,560	0,212
0,1019	155,638	76,087	155,273	76,227	1,153	0,312
0,1258	155,562	76,123	155,142	76,245	1,023	0,330
0,1514	155,456	76,153	155,032	76,251	0,913	0,336
0,1752	155,448	76,197	154,952	76,247	0,833	0,332
0,2003	155,400	76,236	154,886	76,236	0,767	0,321
0,2251	155,322	76,264	154,834	76,221	0,714	0,306
0,2521	155,239	76,292	154,788	76,202	0,669	0,288
0,3008	155,145	76,356	154,723	76,171	0,603	0,256
0,3255	155,105	76,391	154,694	76,158	0,575	0,243
0,4004	154,961	76,477	154,613	76,146	0,493	0,232
0,5043	154,816	76,624	154,495	76,207	0,376	0,293
0,6038	154,673	76,758	154,383	76,340	0,264	0,425
0,6707	154,581	76,856	154,316	76,459	0,196	0,545
0,7074	154,538	76,928	154,283	76,534	0,164	0,619
0,7241	154,520	76,967	154,269	76,570	0,150	0,655
0,7766	154,467	77,122	154,228	76,695	0,109	0,780
0,8073	154,412	77,143	154,207	76,780	0,087	0,865
0,8209	154,392	77,164	154,198	76,822	0,078	0,907
0,8508	154,348	77,221	154,179	76,922	0,059	1,007
0,8735	154,313	77,256	154,165	77,010	0,046	1,095
0,8971	154,301	77,499	154,152	77,115	0,033	1,200
0,9122	154,281	77,594	154,145	77,190	0,025	1,275
0,9306	154,258	77,770	154,136	77,292	0,017	1,377
0,9522	154,233	78,173	154,128	77,429	0,009	1,514

Fonte: Autor.

Tabela B41 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-butanol} a $T = 288,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0179	152,378	91,157	152,381	91,116	1,326	-0,017
0,0245	152,485	91,168	152,374	91,112	1,318	-0,020
0,0459	152,810	91,217	152,339	91,106	1,283	-0,026
0,1012	152,616	91,308	152,205	91,128	1,150	-0,004
0,1259	152,554	91,348	152,135	91,149	1,079	0,016
0,1512	152,556	91,402	152,062	91,175	1,006	0,040
0,1760	152,419	91,426	151,991	91,199	0,935	0,065
0,2050	152,388	91,478	151,912	91,228	0,856	0,093
0,2259	152,315	91,502	151,859	91,247	0,803	0,112
0,2510	152,249	91,534	151,800	91,267	0,744	0,133
0,2760	152,209	91,574	151,747	91,285	0,691	0,151
0,3031	152,150	91,610	151,696	91,301	0,640	0,167
0,3251	152,089	91,632	151,659	91,312	0,603	0,177
0,3751	151,986	91,693	151,589	91,328	0,533	0,194
0,4255	151,892	91,753	151,533	91,340	0,477	0,205
0,4761	151,791	91,799	151,486	91,350	0,430	0,219
0,5021	151,746	91,827	151,463	91,361	0,407	0,230
0,5256	151,706	91,851	151,442	91,374	0,386	0,244
0,6063	151,596	91,968	151,365	91,465	0,310	0,331
0,6702	151,507	92,052	151,296	91,594	0,241	0,460
0,7273	151,439	92,160	151,231	91,763	0,176	0,630
0,7488	151,411	92,196	151,206	91,840	0,152	0,706
0,7735	151,372	92,218	151,179	91,937	0,124	0,803
0,7984	151,328	92,217	151,153	92,041	0,098	0,907
0,8274	151,287	92,250	151,126	92,171	0,071	1,037
0,8512	151,262	92,318	151,106	92,281	0,051	1,147
0,8746	151,232	92,369	151,089	92,390	0,035	1,256
0,9199	151,168	92,433	151,067	92,594	0,012	1,460
0,9363	151,143	92,428	151,062	92,661	0,007	1,527
0,9535	151,125	92,568	151,058	92,725	0,003	1,591
0,9700	151,097	92,520	151,056	92,779	0,001	1,645
0,9847	151,078	92,624	151,055	92,819	0,000	1,685

Fonte: Autor.

Tabela B42 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-butanol} a $T = 293,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0179	153,286	91,584	153,228	91,540	1,410	-0,017
0,0245	153,379	91,596	153,220	91,536	1,402	-0,021
0,0459	153,717	91,649	153,183	91,530	1,365	-0,027
0,1012	153,503	91,747	153,042	91,552	1,224	-0,005
0,1259	153,431	91,789	152,968	91,573	1,150	0,016
0,1512	153,429	91,846	152,891	91,599	1,073	0,040
0,1760	153,285	91,873	152,817	91,624	0,999	0,065
0,2050	153,249	91,928	152,734	91,653	0,916	0,094
0,2259	153,174	91,955	152,678	91,673	0,860	0,114
0,2510	153,105	91,991	152,617	91,694	0,799	0,135
0,2760	153,060	92,033	152,561	91,712	0,743	0,153
0,3031	152,993	92,070	152,507	91,729	0,689	0,170
0,3251	152,927	92,093	152,468	91,740	0,650	0,181
0,3751	152,818	92,160	152,394	91,758	0,576	0,199
0,4255	152,717	92,225	152,334	91,771	0,516	0,212
0,4761	152,606	92,272	152,283	91,784	0,465	0,228
0,5021	152,558	92,302	152,258	91,796	0,440	0,240
0,5256	152,515	92,328	152,235	91,812	0,417	0,256
0,6063	152,397	92,453	152,151	91,912	0,334	0,352
0,6702	152,300	92,541	152,077	92,052	0,260	0,492
0,7273	152,227	92,653	152,007	92,234	0,190	0,674
0,7488	152,196	92,690	151,981	92,316	0,164	0,757
0,7735	152,156	92,719	151,952	92,420	0,135	0,860
0,7984	152,109	92,715	151,924	92,532	0,107	0,973
0,8274	152,065	92,749	151,894	92,671	0,077	1,112
0,8512	152,037	92,818	151,873	92,790	0,056	1,231
0,8746	152,005	92,868	151,855	92,908	0,038	1,349
0,9199	151,937	92,938	151,831	93,130	0,014	1,570
0,9363	151,910	92,930	151,825	93,204	0,008	1,644
0,9535	151,893	93,112	151,821	93,275	0,004	1,716
0,9700	151,863	93,030	151,818	93,336	0,001	1,776
0,9847	151,842	93,141	151,817	93,383	0,000	1,823

Fonte: Autor.

Tabela B43 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-butanol} a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0179	154,218	92,020	154,074	91,970	1,483	-0,020
0,0245	154,293	92,033	154,067	91,965	1,475	-0,025
0,0459	154,629	92,088	154,032	91,957	1,440	-0,033
0,1012	154,400	92,194	153,891	91,977	1,300	-0,014
0,1259	154,325	92,240	153,816	91,997	1,224	0,007
0,1512	154,314	92,299	153,738	92,024	1,145	0,031
0,1760	154,166	92,329	153,661	92,050	1,068	0,058
0,2050	154,124	92,387	153,575	92,080	0,982	0,088
0,2259	154,045	92,416	153,516	92,101	0,924	0,109
0,2510	153,971	92,454	153,451	92,124	0,858	0,131
0,2760	153,921	92,499	153,392	92,144	0,799	0,151
0,3031	153,849	92,539	153,334	92,162	0,742	0,170
0,3251	153,779	92,564	153,292	92,175	0,700	0,182
0,3751	153,663	92,635	153,212	92,196	0,620	0,204
0,4255	153,553	92,705	153,147	92,213	0,555	0,220
0,4761	153,436	92,756	153,091	92,229	0,499	0,240
0,5021	153,384	92,788	153,064	92,244	0,472	0,255
0,5256	153,337	92,815	153,039	92,261	0,447	0,272
0,6063	153,210	92,945	152,949	92,369	0,358	0,377
0,6702	153,107	93,039	152,870	92,519	0,278	0,527
0,7273	153,028	93,156	152,795	92,712	0,204	0,720
0,7488	152,994	93,194	152,767	92,800	0,176	0,808
0,7735	152,951	93,221	152,736	92,909	0,145	0,918
0,7984	152,901	93,221	152,706	93,029	0,115	1,037
0,8274	152,855	93,255	152,675	93,178	0,084	1,186
0,8512	152,825	93,327	152,652	93,305	0,061	1,313
0,8746	152,789	93,373	152,633	93,432	0,042	1,440
0,9199	152,718	93,448	152,606	93,672	0,015	1,681
0,9363	152,690	93,438	152,600	93,754	0,009	1,762
0,9535	152,670	93,606	152,596	93,833	0,004	1,841
0,9700	152,639	93,536	152,593	93,902	0,002	1,910
0,9847	152,617	93,658	152,592	93,956	0,000	1,964

Fonte: Autor.

Tabela B44 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-butanol} a $T = 303,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0179	155,176	92,464	154,946	92,410	1,571	-0,021
0,0245	155,236	92,478	154,938	92,405	1,563	-0,026
0,0459	155,561	92,536	154,900	92,396	1,525	-0,034
0,1012	155,317	92,650	154,753	92,415	1,378	-0,016
0,1259	155,234	92,699	154,675	92,435	1,300	0,005
0,1512	155,214	92,761	154,592	92,463	1,217	0,029
0,1760	155,062	92,793	154,512	92,489	1,137	0,056
0,2050	155,010	92,855	154,423	92,519	1,048	0,086
0,2259	154,928	92,886	154,362	92,541	0,987	0,108
0,2510	154,848	92,927	154,294	92,564	0,919	0,131
0,2760	154,794	92,974	154,232	92,585	0,857	0,152
0,3031	154,718	93,017	154,171	92,604	0,796	0,172
0,3251	154,645	93,044	154,127	92,618	0,752	0,185
0,3751	154,519	93,120	154,041	92,642	0,666	0,209
0,4255	154,402	93,193	153,971	92,661	0,596	0,229
0,4761	154,276	93,249	153,910	92,682	0,535	0,252
0,5021	154,220	93,281	153,880	92,699	0,505	0,269
0,5256	154,171	93,311	153,853	92,718	0,479	0,289
0,6063	154,034	93,449	153,756	92,835	0,382	0,403
0,6702	153,923	93,548	153,672	92,994	0,298	0,562
0,7273	153,838	93,670	153,593	93,199	0,219	0,766
0,7488	153,802	93,709	153,563	93,291	0,189	0,859
0,7735	153,756	93,737	153,530	93,407	0,156	0,975
0,7984	153,704	93,740	153,499	93,534	0,125	1,102
0,8274	153,654	93,773	153,465	93,692	0,091	1,260
0,8512	153,621	93,847	153,441	93,828	0,067	1,396
0,8746	153,584	93,894	153,420	93,965	0,046	1,533
0,9199	153,508	93,972	153,391	94,228	0,017	1,796
0,9363	153,478	93,966	153,384	94,318	0,010	1,886
0,9535	153,458	94,146	153,379	94,408	0,005	1,976
0,9700	153,425	94,071	153,376	94,488	0,002	2,056
0,9847	153,401	94,200	153,374	94,552	0,000	2,120

Fonte: Autor.

Tabela B45 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-butanol} a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0179	156,112	92,915	155,824	92,857	1,657	-0,022
0,0245	156,185	92,930	155,815	92,852	1,648	-0,028
0,0459	156,502	92,992	155,777	92,842	1,610	-0,037
0,1012	156,244	93,113	155,624	92,860	1,457	-0,020
0,1259	156,154	93,166	155,543	92,881	1,376	0,001
0,1512	156,128	93,231	155,458	92,908	1,290	0,027
0,1760	155,969	93,266	155,374	92,935	1,207	0,054
0,2050	155,912	93,331	155,281	92,967	1,113	0,085
0,2259	155,824	93,365	155,217	92,989	1,050	0,107
0,2510	155,741	93,409	155,146	93,013	0,978	0,132
0,2760	155,682	93,459	155,081	93,035	0,913	0,153
0,3031	155,599	93,504	155,018	93,055	0,850	0,174
0,3251	155,521	93,533	154,971	93,069	0,803	0,188
0,3751	155,387	93,614	154,881	93,095	0,713	0,213
0,4255	155,261	93,692	154,806	93,116	0,638	0,235
0,4761	155,128	93,751	154,740	93,139	0,573	0,261
0,5021	155,067	93,785	154,709	93,158	0,541	0,280
0,5256	155,015	93,817	154,680	93,179	0,513	0,301
0,6063	154,867	93,960	154,576	93,306	0,409	0,425
0,6702	154,749	94,064	154,485	93,477	0,319	0,596
0,7273	154,657	94,190	154,401	93,695	0,234	0,814
0,7488	154,620	94,233	154,369	93,794	0,202	0,913
0,7735	154,571	94,262	154,334	93,918	0,167	1,038
0,7984	154,516	94,266	154,300	94,054	0,134	1,173
0,8274	154,463	94,301	154,265	94,223	0,098	1,342
0,8512	154,428	94,377	154,239	94,368	0,072	1,487
0,8746	154,388	94,422	154,217	94,515	0,050	1,634
0,9199	154,308	94,508	154,185	94,797	0,019	1,917
0,9363	154,277	94,499	154,178	94,895	0,011	2,014
0,9535	154,254	94,678	154,172	94,992	0,006	2,112
0,9700	154,220	94,594	154,169	95,079	0,002	2,199
0,9847	154,195	94,740	154,167	95,150	0,001	2,269

Fonte: Autor.

Tabela B46 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-pentanol} a $T = 288,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0056	151,648	107,752	152,960	107,745	1,903	-0,004
0,0113	151,416	107,753	152,945	107,743	1,888	-0,006
0,0207	152,142	107,772	152,918	107,739	1,861	-0,010
0,0510	153,301	107,870	152,818	107,740	1,761	-0,009
0,1028	153,319	108,000	152,623	107,761	1,568	0,021
0,1258	153,217	108,051	152,534	107,781	1,479	0,041
0,1514	153,094	108,104	152,437	107,806	1,382	0,066
0,1738	153,041	108,158	152,355	107,828	1,300	0,088
0,2026	152,830	108,191	152,255	107,856	1,200	0,116
0,2240	152,793	108,242	152,186	107,876	1,131	0,136
0,2767	152,611	108,337	152,034	107,920	0,980	0,179
0,3240	152,497	108,433	151,922	107,951	0,868	0,210
0,3755	152,358	108,525	151,821	107,980	0,767	0,238
0,4008	152,284	108,564	151,777	107,993	0,723	0,252
0,4243	152,222	108,602	151,740	108,007	0,685	0,265
0,4549	152,157	108,662	151,693	108,027	0,639	0,286
0,5044	152,026	108,729	151,622	108,069	0,568	0,330
0,5730	151,871	108,835	151,524	108,168	0,470	0,429
0,6069	151,807	108,904	151,474	108,241	0,420	0,500
0,6268	151,775	108,952	151,444	108,291	0,390	0,550
0,7258	151,581	109,136	151,292	108,641	0,237	0,900
0,7524	151,530	109,189	151,252	108,765	0,198	1,024
0,7733	151,486	109,212	151,223	108,870	0,168	1,129
0,8262	151,392	109,346	151,154	109,166	0,099	1,425
0,8511	151,346	109,402	151,127	109,316	0,072	1,575
0,8768	151,296	109,454	151,103	109,476	0,048	1,735
0,9024	151,245	109,498	151,084	109,635	0,029	1,894
0,9256	151,197	109,510	151,071	109,777	0,016	2,036
0,9387	151,174	109,555	151,066	109,855	0,011	2,114
0,9685	151,120	109,748	151,058	110,023	0,003	2,282
0,9848	151,090	110,023	151,056	110,106	0,001	2,365

Fonte: Autor.

Tabela B47 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-pentanol} a $T = 293,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0056	153,145	108,232	153,852	108,224	2,033	-0,001
0,0113	152,643	108,234	153,831	108,223	2,011	-0,002
0,0207	153,226	108,255	153,795	108,223	1,975	-0,002
0,0510	154,271	108,357	153,673	108,231	1,854	0,006
0,1028	154,204	108,493	153,457	108,256	1,640	0,037
0,1258	154,096	108,548	153,363	108,275	1,546	0,055
0,1514	153,969	108,603	153,264	108,296	1,447	0,076
0,1738	153,912	108,660	153,181	108,315	1,364	0,096
0,2026	153,702	108,698	153,080	108,339	1,263	0,120
0,2240	153,660	108,752	153,010	108,356	1,193	0,137
0,2767	153,463	108,851	152,858	108,396	1,041	0,176
0,3240	153,342	108,952	152,742	108,427	0,925	0,206
0,3755	153,194	109,049	152,635	108,459	0,818	0,238
0,4008	153,117	109,091	152,588	108,476	0,771	0,255
0,4243	153,051	109,131	152,547	108,492	0,730	0,272
0,4549	152,982	109,193	152,496	108,518	0,679	0,297
0,5044	152,843	109,264	152,417	108,569	0,600	0,350
0,5730	152,679	109,375	152,310	108,680	0,493	0,461
0,6069	152,614	109,451	152,257	108,758	0,440	0,537
0,6268	152,579	109,500	152,225	108,811	0,408	0,590
0,7258	152,372	109,691	152,068	109,169	0,251	0,948
0,7524	152,318	109,744	152,027	109,295	0,210	1,074
0,7733	152,272	109,770	151,997	109,402	0,180	1,181
0,8262	152,172	109,907	151,926	109,707	0,109	1,486
0,8511	152,122	109,965	151,898	109,863	0,081	1,643
0,8768	152,070	110,018	151,873	110,033	0,055	1,813
0,9024	152,017	110,068	151,852	110,208	0,035	1,987
0,9256	151,968	110,101	151,837	110,369	0,020	2,148
0,9387	151,943	110,148	151,830	110,461	0,013	2,240
0,9685	151,886	110,337	151,821	110,666	0,003	2,446
0,9848	151,855	110,639	151,818	110,777	0,001	2,556

Fonte: Autor.

Tabela B48 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-pentanol} a $T = 298,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0056	154,406	108,722	154,714	108,710	2,121	-0,001
0,0113	153,738	108,725	154,692	108,710	2,099	-0,002
0,0207	154,233	108,746	154,654	108,710	2,061	-0,002
0,0510	155,214	108,853	154,529	108,716	1,936	0,005
0,1028	155,106	108,996	154,308	108,742	1,717	0,034
0,1258	154,993	109,054	154,213	108,759	1,622	0,051
0,1514	154,860	109,113	154,112	108,780	1,521	0,072
0,1738	154,797	109,172	154,027	108,798	1,436	0,090
0,2026	154,581	109,214	153,924	108,822	1,333	0,114
0,2240	154,535	109,269	153,852	108,839	1,261	0,131
0,2767	154,331	109,375	153,694	108,880	1,103	0,171
0,3240	154,201	109,481	153,573	108,913	0,982	0,204
0,3755	154,044	109,583	153,459	108,949	0,869	0,240
0,4008	153,965	109,628	153,409	108,968	0,818	0,259
0,4243	153,894	109,669	153,365	108,987	0,774	0,278
0,4549	153,818	109,733	153,310	109,016	0,719	0,307
0,5044	153,673	109,809	153,225	109,074	0,634	0,367
0,5730	153,499	109,926	153,111	109,195	0,520	0,488
0,6069	153,430	110,004	153,054	109,278	0,463	0,569
0,6268	153,392	110,055	153,021	109,333	0,430	0,624
0,7258	153,174	110,253	152,856	109,708	0,265	0,999
0,7524	153,117	110,308	152,813	109,840	0,222	1,131
0,7733	153,069	110,335	152,782	109,950	0,190	1,242
0,8262	152,963	110,475	152,708	110,269	0,117	1,561
0,8511	152,911	110,533	152,678	110,434	0,087	1,726
0,8768	152,855	110,585	152,651	110,614	0,060	1,906
0,9024	152,800	110,640	152,629	110,800	0,038	2,092
0,9256	152,749	110,666	152,613	110,974	0,022	2,266
0,9387	152,722	110,713	152,606	111,073	0,015	2,365
0,9685	152,663	110,904	152,595	111,300	0,004	2,593
0,9848	152,630	111,190	152,592	111,424	0,001	2,716

Fonte: Autor.

Tabela B49 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-pentanol} a $T = 303,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0056	155,423	109,219	155,592	109,207	2,216	-0,001
0,0113	154,721	109,223	155,569	109,206	2,193	-0,002
0,0207	155,199	109,246	155,531	109,205	2,154	-0,003
0,0510	156,149	109,357	155,401	109,211	2,025	0,003
0,1028	156,021	109,507	155,174	109,236	1,800	0,031
0,1258	155,904	109,568	155,076	109,253	1,702	0,049
0,1514	155,764	109,631	154,971	109,273	1,597	0,069
0,1738	155,696	109,693	154,884	109,292	1,510	0,088
0,2026	155,475	109,738	154,777	109,316	1,403	0,112
0,2240	155,423	109,796	154,703	109,334	1,329	0,130
0,2767	155,209	109,908	154,538	109,377	1,164	0,171
0,3240	155,070	110,019	154,411	109,412	1,037	0,206
0,3755	154,904	110,126	154,292	109,451	0,918	0,245
0,4008	154,820	110,172	154,239	109,472	0,865	0,266
0,4243	154,747	110,217	154,192	109,493	0,818	0,287
0,4549	154,667	110,284	154,133	109,524	0,759	0,319
0,5044	154,514	110,364	154,043	109,587	0,669	0,383
0,5730	154,329	110,485	153,922	109,716	0,548	0,512
0,6069	154,255	110,566	153,862	109,804	0,488	0,598
0,6268	154,217	110,621	153,827	109,862	0,453	0,657
0,7258	153,987	110,827	153,653	110,256	0,279	1,051
0,7524	153,926	110,884	153,609	110,394	0,235	1,189
0,7733	153,875	110,912	153,576	110,510	0,201	1,306
0,8262	153,764	111,057	153,498	110,845	0,124	1,641
0,8511	153,709	111,116	153,467	111,019	0,092	1,814
0,8768	153,651	111,171	153,438	111,209	0,064	2,005
0,9024	153,593	111,222	153,415	111,407	0,040	2,203
0,9256	153,539	111,248	153,398	111,592	0,023	2,387
0,9387	153,512	111,304	153,390	111,698	0,016	2,494
0,9685	153,449	111,506	153,379	111,943	0,004	2,738
0,9848	153,414	111,786	153,375	112,077	0,001	2,872

Fonte: Autor.

Tabela B50 - Volume molar aparente, volume parcial molar e volume parcial molar excesso para o sistema $\{x_1$ DEM + $(1 - x_1)$ 1-pentanol} a $T = 308,15$ K e pressão atmosférica.

x_1	$V_{\phi 1}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$V_{\phi 2}$ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_1^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	\bar{V}_2^E $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
0,0056	156,286	109,726	156,474	109,712	2,305	-0,002
0,0113	155,622	109,730	156,451	109,710	2,282	-0,004
0,0207	156,115	109,755	156,413	109,709	2,244	-0,005
0,0510	157,074	109,870	156,283	109,713	2,114	-0,001
0,1028	156,944	110,028	156,051	109,736	1,885	0,027
0,1258	156,822	110,092	155,950	109,754	1,784	0,044
0,1514	156,679	110,158	155,842	109,775	1,675	0,065
0,1738	156,607	110,223	155,751	109,794	1,584	0,085
0,2026	156,379	110,272	155,640	109,820	1,473	0,110
0,2240	156,322	110,332	155,563	109,838	1,396	0,129
0,2767	156,099	110,450	155,391	109,883	1,224	0,173
0,3240	155,951	110,566	155,258	109,920	1,092	0,210
0,3755	155,775	110,678	155,133	109,961	0,967	0,250
0,4008	155,686	110,727	155,078	109,983	0,911	0,272
0,4243	155,610	110,774	155,029	110,005	0,862	0,295
0,4549	155,524	110,844	154,967	110,038	0,801	0,328
0,5044	155,364	110,927	154,873	110,105	0,706	0,396
0,5730	155,170	111,054	154,746	110,242	0,579	0,532
0,6069	155,092	111,139	154,682	110,335	0,515	0,624
0,6268	155,050	111,194	154,645	110,397	0,478	0,686
0,7258	154,809	111,410	154,460	110,816	0,294	1,106
0,7524	154,745	111,468	154,413	110,962	0,247	1,252
0,7733	154,691	111,498	154,379	111,086	0,211	1,376
0,8262	154,574	111,645	154,296	111,440	0,129	1,730
0,8511	154,517	111,707	154,263	111,623	0,096	1,913
0,8768	154,455	111,762	154,233	111,823	0,066	2,113
0,9024	154,394	111,811	154,209	112,029	0,042	2,320
0,9256	154,339	111,844	154,191	112,221	0,024	2,512
0,9387	154,311	111,910	154,183	112,332	0,016	2,622
0,9685	154,245	112,107	154,171	112,583	0,004	2,873
0,9848	154,208	112,380	154,168	112,720	0,001	3,010

Fonte: Autor.

APÊNDICE C – SISTEMA TESTE

Sistema teste: acetonitrila + etanol

O sistema (acetonitrila + etanol) foi estabelecido como sistema teste de modo a gerar medidas de confirmação da metodologia utilizada e promover a aptidão no exercício dos equipamentos usados nesta dissertação. Este sistema foi escolhido por fazer parte de um estudo experimental realizado pelo orientador do presente estudo, cujos resultados já foram publicados em revistas especializadas.

Utilizou-se para o sistema teste: acetonitrila (Merck, pureza > 99,0%) e etanol (Merck, pureza > 99,0%). As medidas de densidade e velocidade do som foram realizadas no densímetro DSA 5000 M (Anton Paar) e as de viscosidade no viscosímetro SVM 300/ G2 (Anton Paar), como descrito na seção 4 (Materiais e Métodos).

As densidades experimentais obtidas para o sistema teste a diferentes temperaturas e pressão atmosférica estão mostradas na Figura C1. Para todos os sistemas, observa-se que a densidade diminui monotonicamente com a fração molar do acetonitrila e também sofre decréscimo com o aumento da temperatura.

As velocidades de propagação do som experimentais obtidas para o sistema (acetonitrila + etanol) a diferentes temperaturas e pressão atmosférica podem ser vistas na Figura C2. Para todos os sistemas, observa-se que a velocidade aumenta com a fração molar da acetonitrila e diminui com o aumento da temperatura.

As viscosidades dinâmicas experimentais obtidas para o sistema teste a diferentes temperaturas e pressão atmosférica encontram-se na Figura C3. Para o sistema em questão, constata-se que a propriedade diminui com a temperatura e com o aumento da concentração de acetonitrila na mistura.

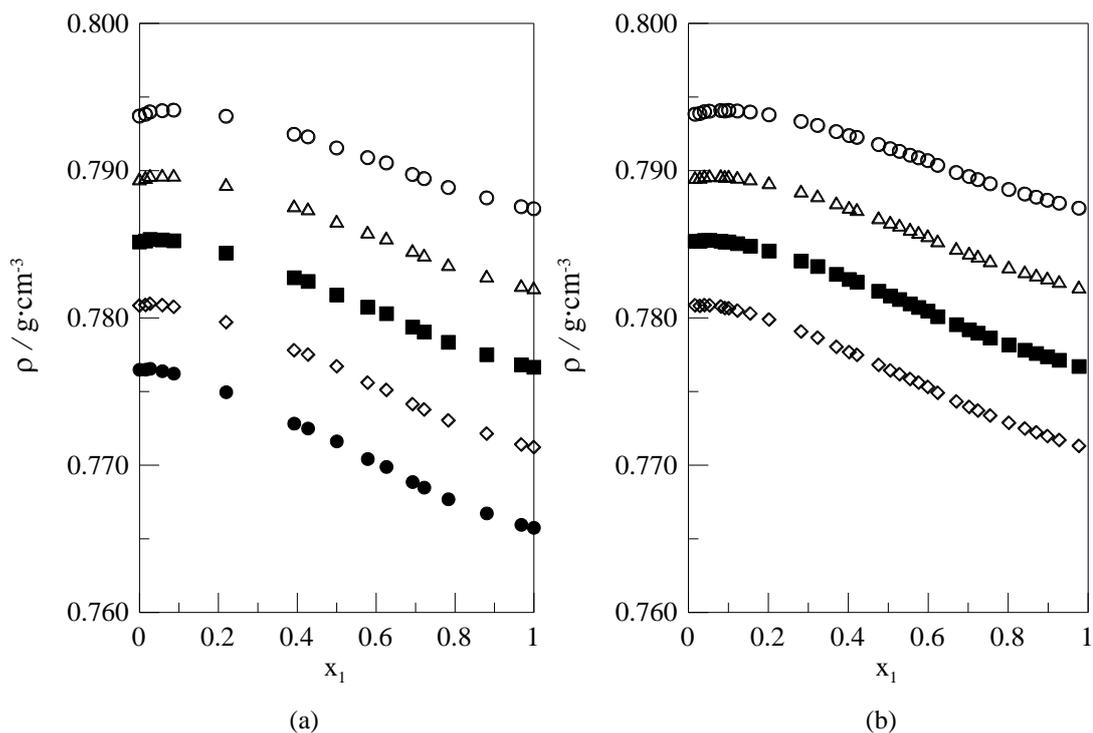


Figura C1 – Densidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetoneitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: (a) Presente estudo; (b) Literatura: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: (a) Autor; (b) Tôrres, Francesconi e Volpe (2003).

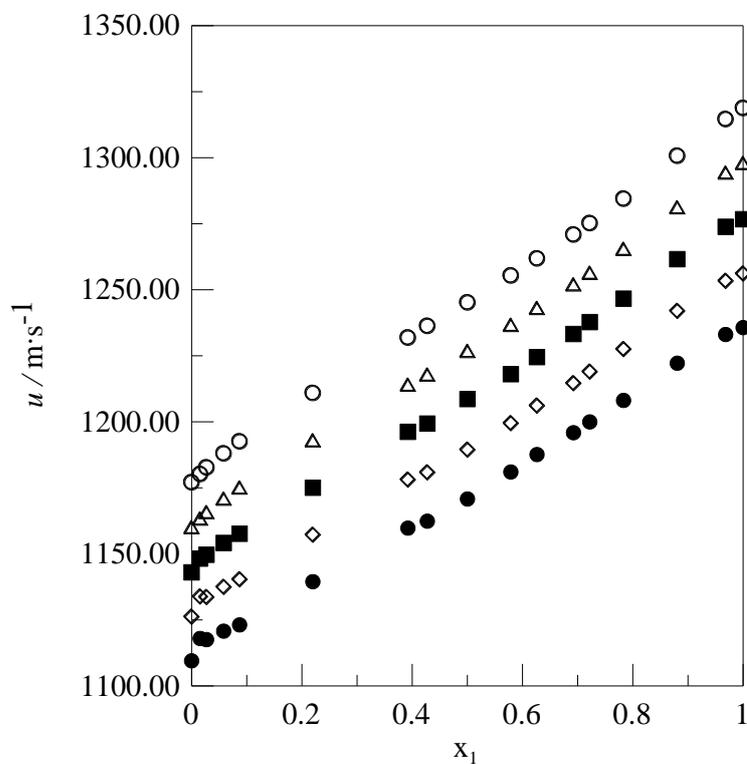


Figura C2 - Velocidade do som em função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetoneitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

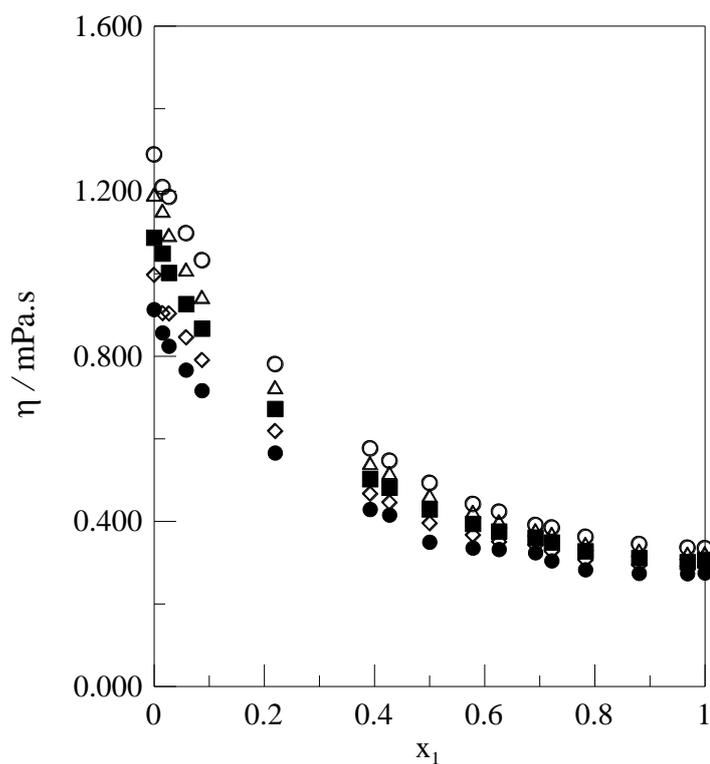


Figura C3 - Viscosidade dinâmica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetonitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

Foram calculados o volume molar excesso, o desvio da compressibilidade isentrópica e o desvio da viscosidade para o sistema de acordo com as equações descritas na seção 3 (Formalismo Termodinâmico). Estas grandezas também foram ajustadas usando um polinômio de Redlich-Kister. Os coeficientes A_j são apresentados na Tabela C1 juntamente com os valores do desvio padrão.

Tabela C1 - Coeficientes A_j e desvio padrão para o volume molar excesso, desvio da compressibilidade isentrópica e desvio da viscosidade para sistema (acetonitrila + etanol) a diferentes temperaturas.

T / K	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	σ
$v_m^E / \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$						
288,15	-0,24795	0,36626	0,07688	0,30026	-0,36796	0,0035
293,15	-0,19984	-0,36332	0,09573	-0,30038	-0,38459	0,0036
298,15	-0,14641	-0,36409	0,10553	-0,29426	-0,37926	0,0036
303,15	-0,10759	-0,36555	0,25614	-0,27954	-0,55678	0,0036
308,15	-0,04694	-0,36086	0,27109	-0,27056	-0,56432	0,0037
$\Delta\kappa / \text{TPa}^{-1}$						
288,15	-20,691	-47,794	-20,451	-7,182	-63,714	0,2124
293,15	-22,485	-45,979	-19,049	-1,506	-78,239	0,2971
298,15	-26,845	-35,874	-0,433	-14,286	-137,685	1,2197
303,15	-27,200	-22,247	11,901	-42,709	-183,011	2,4892
308,15	-27,071	-10,462	25,840	-65,184	-218,346	3,1425
$\Delta\eta / \text{mPa} \cdot \text{s}$						
288,15	-1,28445	-0,49430	-0,13296	-0,42645	-0,59480	0,0075
293,15	-1,16972	-0,48614	-0,19197	-0,36791	-0,54791	0,0053
298,15	-1,05837	-0,43879	-0,01856	-0,27115	-0,69699	0,0040
303,15	-0,97942	-0,32386	0,27149	-0,51571	-1,27058	0,0137
308,15	-0,91409	-0,32231	0,30471	-0,43149	-1,31586	0,0092

Fonte: Autor.

As figuras C4-C6 apresentam, respectivamente, o volume molar excesso, o desvio da compressibilidade isentrópica e o desvio da viscosidade para o sistema teste (acetonitrila + etanol). O v_m^E apresentou comportamento sigmoidal, sendo negativo a baixas frações molares de acetonitrila e positivo a altas composições. O $\Delta\kappa$ e o $\Delta\eta$ exibiram valores negativos para toda a faixa de composição.

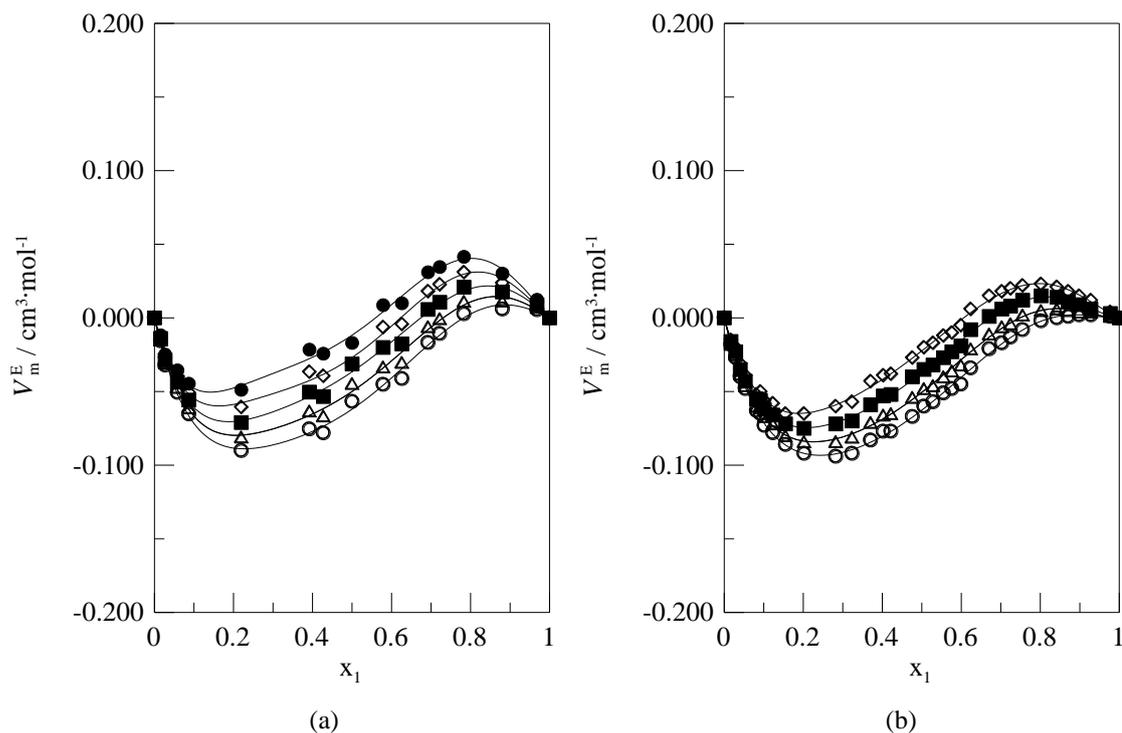


Figura C4 - Volume molar excesso função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetoneitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas, sendo (a) Presente estudo; (b) Literatura: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K,

Fonte: (a) Autor; (b) Tôrres, Francesconi e Volpe (2003) e Tôrres, Francesconi e Volpe (2007).

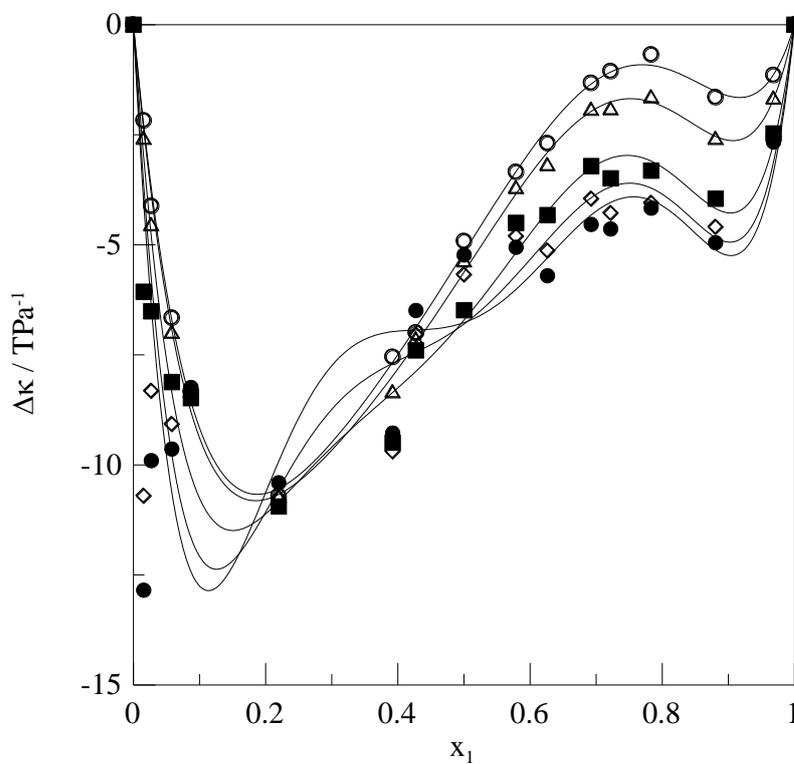


Figura C5 - Desvio da compressibilidade isentrópica em função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetoneitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: \circ , 288,15K; \triangle , 293,15K; \blacksquare , 298,15K; \diamond , 303,15K; \bullet , 308,15K.

Fonte: Autor.

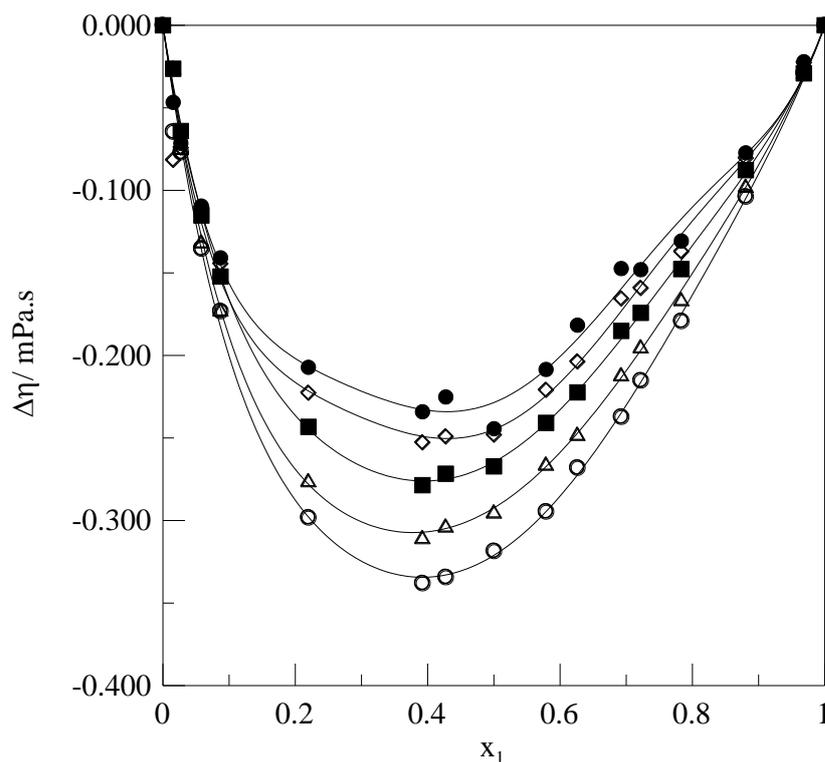


Figura C6 - Desvio da viscosidade em função da fração molar do componente 1 para o sistema {acetoneitrila (1) + etanol (2)} à pressão atmosférica e diferentes temperaturas: ○, 288,15K; △, 293,15K; ■, 298,15K; ◇, 303,15K; ●, 308,15K.

Fonte: Autor.

Os dados obtidos para densidade e volume molar excesso foram comparados com valores disponíveis na literatura. É possível verificar pelas figuras C1 e C4 que os resultados foram compatíveis com os estudos de Tôrres, Francesconi e Volpe (2003) e Tôrres, Francesconi e Volpe (2007).

APÊNDICE D – CÁLCULO DE INCERTEZAS

Cálculo de Incertezas

Medidas de grandezas físicas obtidas experimentalmente possuem uma incerteza intrínseca, que advém das características do equipamento utilizado na medição e de quem exerceu a análise. Por conseguinte, uma medida experimental só é completa quando acompanhada do valor declarado de sua incerteza.

Segundo Shoemaker, Garland e Nibler (1996), a partir dos valores obtidos por medidas diretas e com o auxílio de uma teoria fenomenológica, um resultado numérico final é calculado.

Considerando o volume molar excesso, V_m^E , como uma função da composição, densidade e temperatura, o resultado numérico final para esta grandeza pode ser expresso por:

$$V_m^E = V_m^E(x_1, x_2, \rho, \rho_1, \rho_2, T), \quad (D1)$$

onde x_1 , x_2 , ρ , ρ_1 , ρ_2 e T são as medidas individuais, cujas incertezas são dadas, respectivamente, por Δx_1 , Δx_2 , $\Delta \rho$, $\Delta \rho_1$, $\Delta \rho_2$ e ΔT .

Variações infinitesimais nos valores determinados experimentalmente produzem uma variação infinitesimal no resultado final (SHOEMAKER; GARLAND; NIBLER, 1996), Deste modo, dV_m^E é expresso por:

$$dV_m^E = \frac{\partial V_m^E}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho} d\rho + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1} d\rho_1 + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2} d\rho_2 + \frac{\partial V_m^E}{\partial T} dT \quad (D2)$$

Se os erros forem finitos, mas suficientemente pequenos para que os valores das derivadas parciais não sejam afetados, tem-se aproximadamente:

$$\Delta V_m^E = \frac{\partial V_m^E}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho} \Delta \rho + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1} \Delta \rho_1 + \frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2} \Delta \rho_2 + \frac{\partial V_m^E}{\partial T} \Delta T \quad (D3)$$

Elevando ao quadrado os dois lados da equação anterior e desprezando os termos cruzados, obtém-se:

$$(\Delta V_m^E)^2 = \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}\right)^2 (\Delta x_1)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}\right)^2 (\Delta x_2)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}\right)^2 (\Delta \rho)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}\right)^2 (\Delta \rho_1)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}\right)^2 (\Delta \rho_2)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial T}\right)^2 (\Delta T)^2 \quad (D4)$$

Ao extrair-se a raiz quadrada, a expressão para a incerteza do volume molar excesso, ΔV_m^E , é obtida.

$$\Delta V_m^E = \sqrt{\left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1} \Delta x_1\right)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} \Delta x_2\right)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho} \Delta \rho\right)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1} \Delta \rho_1\right)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2} \Delta \rho_2\right)^2 + \left(\frac{\partial V_m^E}{\partial T} \Delta T\right)^2} \quad (D5)$$

O mesmo procedimento é aplicado para a obtenção do resultado numérico final do desvio da compressibilidade isentrópica, $\Delta\kappa$, considerando esta grandeza como função da composição, densidade, velocidade do som e temperatura. Logo, $\Delta\kappa$ pode ser expresso como:

$$\Delta\kappa = \Delta\kappa(x_1, x_2, \rho, \rho_1, \rho_2, u, u_1, u_2, T), \quad (D6)$$

onde x_1 , x_2 , ρ , ρ_1 , ρ_2 , u , u_1 , u_2 e T são as medidas individuais, cujas incertezas são dadas, respectivamente, por Δx_1 , Δx_2 , $\Delta\rho$, $\Delta\rho_1$, $\Delta\rho_2$, Δu , Δu_1 , Δu_2 e ΔT .

Variações infinitesimais nas medidas produzem a variação $d(\Delta\kappa)$ no resultado final, ou seja:

$$\begin{aligned} d(\Delta\kappa) = & \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho} d\rho + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1} d\rho_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2} d\rho_2 \\ & + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u} du + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1} du_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2} du_2 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T} dT \end{aligned} \quad (D7)$$

Se os erros forem finitos, mas suficientemente pequenos para que os valores das derivadas parciais não sejam afetados, tem-se aproximadamente:

$$\begin{aligned} \Delta(\Delta\kappa) = & \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho} \Delta\rho + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1} \Delta\rho_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2} \Delta\rho_2 \\ & + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u} \Delta u + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1} \Delta u_1 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2} \Delta u_2 + \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T} \Delta T \end{aligned} \quad (D8)$$

Elevando ao quadrado os dois lados da equação anterior e desprezando os termos cruzados, obtém-se:

$$\begin{aligned} (\Delta(\Delta\kappa))^2 = & \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1} \right)^2 (\Delta x_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2} \right)^2 (\Delta x_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho} \right)^2 (\Delta\rho)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1} \right)^2 (\Delta\rho_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2} \right)^2 (\Delta\rho_2)^2 \\ & + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u} \right)^2 (\Delta u)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1} \right)^2 (\Delta u_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2} \right)^2 (\Delta u_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T} \right)^2 (\Delta T)^2 \end{aligned} \quad (D9)$$

Extraindo a raiz quadrada, a expressão final para a incerteza no desvio da compressibilidade isentrópica, $\Delta(\Delta\kappa)$, é:

$$\Delta(\Delta\kappa) = \sqrt{\left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1} \Delta x_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2} \Delta x_2 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho} \Delta\rho \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1} \Delta\rho_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2} \Delta\rho_2 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u} \Delta u \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1} \Delta u_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2} \Delta u_2 \right)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T} \Delta T \right)^2} \quad (D10)$$

O mesmo é aplicado para o resultado numérico final do desvio da viscosidades, $\Delta\eta$, considerando esta grandeza como função da composição, viscosidade e temperatura, Sendo assim:

$$\Delta\eta = \Delta\eta(x_1, x_2, \eta, \eta_1, \eta_2, T), \quad (D11)$$

onde x_1 , x_2 , η , η_1 , η_2 e T são as medidas individuais, cujas incertezas são dadas, respectivamente, por Δx_1 , Δx_2 , $\Delta\eta$, $\Delta\eta_1$, $\Delta\eta_2$ e ΔT .

Variações infinitesimais produzem a variação $d(\Delta\eta)$ no resultado final:

$$d(\Delta\eta) = \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta} d\eta + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1} d\eta_1 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2} d\eta_2 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T} dT \quad (D12)$$

Se os erros forem finitos, mas suficientemente pequenos para que os valores das derivadas parciais não sejam afetados, tem-se aproximadamente:

$$\Delta(\Delta\eta) = \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta} \Delta\eta + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1} \Delta\eta_1 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2} \Delta\eta_2 + \frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T} \Delta T \quad (D13)$$

Elevando ao quadrado os dois lados da equação anterior e desprezando os termos cruzados, obtém-se:

$$(\Delta(\Delta\eta))^2 = \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}\right)^2 (\Delta x_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}\right)^2 (\Delta x_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}\right)^2 (\Delta\eta)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}\right)^2 (\Delta\eta_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}\right)^2 (\Delta\eta_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}\right)^2 (\Delta T)^2 \quad (D14)$$

Extraindo a raiz quadrada, a expressão final para a incerteza no desvio da compressibilidade isentrópica, $\Delta(\Delta\eta)$, é:

$$\Delta(\Delta\eta) = \sqrt{\left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}\right)^2 (\Delta x_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}\right)^2 (\Delta x_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}\right)^2 (\Delta\eta)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}\right)^2 (\Delta\eta_1)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}\right)^2 (\Delta\eta_2)^2 + \left(\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}\right)^2 (\Delta T)^2} \quad (D15)$$

As incertezas nas medidas individuais foram consideradas como a metade do valor da menor escala. Deste modo, as incertezas nas densidades, sabendo-se que a resolução do densímetro é $1 \times 10^{-6} \text{ g cm}^{-3}$, foram:

$$\Delta\rho = \Delta\rho_1 = \Delta\rho_2 = \pm 0,0000005 \text{ g cm}^{-3}.$$

As incertezas nas velocidades do som, sabendo-se que a resolução do medidor de velocidade do som é $1 \times 10^{-2} \text{ m s}^{-1}$, foram:

$$\Delta u = \Delta u_1 = \Delta u_2 = \pm 0,005 \text{ m s}^{-1}$$

As incertezas nas viscosidades, dada a resolução do viscosímetro igual a $1 \times 10^{-4} \text{ mPa s}$, foram:

$$\Delta\eta = \Delta\eta_1 = \Delta\eta_2 = \pm 0,00005 \text{ mPa s}.$$

As incertezas na temperatura foram determinadas considerando a resolução do dispositivo Peltier como sendo $1 \times 10^{-2} \text{ K}$, logo:

$$\Delta T = \pm 0,005 \text{ K}.$$

As incertezas nas frações molares são dadas pela seguinte equação.

$$\Delta x_i = \left(\frac{\partial x_i}{\partial m_1}\right)_{m_2} \Delta m_1 + \left(\frac{\partial x_i}{\partial m_2}\right)_{m_1} \Delta m_2, \quad (D16)$$

onde Δm_i foram as incertezas nas medidas das massa. Considerando que a balança analítica possui resolução igual a 1×10^{-4} g, tem-se:

$$\Delta m = \Delta m_1 = \Delta m_2 = \pm 0,00005 \text{ g.}$$

As incertezas nas frações molares a serem calculadas foram:

$$\Delta x_1 = \left(\frac{\partial x_1}{\partial m_1} \right)_{m_2} \Delta m_1 + \left(\frac{\partial x_1}{\partial m_2} \right)_{m_1} \Delta m_2 \quad (\text{D17})$$

$$\Delta x_2 = \left(\frac{\partial x_2}{\partial m_1} \right)_{m_2} \Delta m_1 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial m_2} \right)_{m_1} \Delta m_2 \quad (\text{D18})$$

As frações molares dos componentes puros 1 e 2, foram expressas pelas seguintes equações:

$$x_1 = \frac{m_1 / M_1}{m_1 / M_1 + m_2 / M_2} \quad (\text{D19})$$

$$x_2 = \frac{m_2 / M_2}{m_1 / M_1 + m_2 / M_2} \quad (\text{D20})$$

Portanto, as derivadas parciais das frações molares foram calculadas através das equações abaixo:

$$\frac{\partial x_1}{\partial m_1} = \frac{m_2 / M_1 M_2}{(m_1 / M_1 + m_2 / M_2)^2} \quad (\text{D21})$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial m_2} = -\frac{m_1 / M_1 M_2}{(m_1 / M_1 + m_2 / M_2)^2} \quad (\text{D22})$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial m_1} = -\frac{m_2 / M_1 M_2}{(m_1 / M_1 + m_2 / M_2)^2} \quad (\text{D23})$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial m_2} = \frac{m_1 / M_1 M_2}{(m_1 / M_1 + m_2 / M_2)^2} \quad (\text{D24})$$

O volume molar excesso é definido pela expressão a seguir.

$$V_m^E = x_1 M_1 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_1} \right) + x_2 M_2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (\text{D25})$$

Logo, as derivadas parciais do V_m^E foram calculadas seguindo as equações listadas abaixo.

$$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1} = M_1 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_1} \right) \quad (\text{D26})$$

$$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2} = M_2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (D27)$$

$$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho} = - \left(\frac{x_1 M_1 + x_2 M_2}{\rho^2} \right) \quad (D28)$$

$$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1} = \frac{x_1 M_1}{\rho_1^2} \quad (D29)$$

$$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2} = \frac{x_2 M_2}{\rho_2^2} \quad (D30)$$

O desvio da compressibilidade isentrópica é definido pela equação abaixo.

$$\Delta\kappa = \frac{1}{\rho \cdot u^2} - \left(x_1 \frac{1}{\rho_1 \cdot u_1^2} + x_2 \frac{1}{\rho_2 \cdot u_2^2} \right) \quad (D31)$$

Portanto, as derivadas de $\Delta\kappa$ foram calculadas fazendo uso das equações a seguir:

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1} = - \frac{1}{\rho_1 \cdot u_1^2} \quad (D32)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2} = - \frac{1}{\rho_2 \cdot u_2^2} \quad (D33)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho} = - \frac{1}{\rho^2 \cdot u^2} \quad (D34)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1} = \frac{x_1}{\rho_1^2 \cdot u_1^2} \quad (D35)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2} = \frac{x_2}{\rho_2^2 \cdot u_2^2} \quad (D36)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u} = - \frac{2}{\rho \cdot u^3} \quad (D37)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1} = \frac{2 \cdot x_1}{\rho_1 \cdot u_1^3} \quad (D38)$$

$$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2} = \frac{2 \cdot x_2}{\rho_2 \cdot u_2^3} \quad (D39)$$

A equação a seguir define o desvio da viscosidade.

$$\Delta\eta = \eta - (x_1 \eta_1 + x_2 \eta_2) \quad (D40)$$

Conseqüentemente, as derivadas parciais do desvio da viscosidade foram calculadas através das equações abaixo:

$$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1} = -\eta_1 \quad (\text{D41})$$

$$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2} = -\eta_2 \quad (\text{D42})$$

$$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta} = 1 \quad (\text{D43})$$

$$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1} = -x_1 \quad (\text{D44})$$

$$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2} = -x_2 \quad (\text{D45})$$

As derivadas do volume molar excesso em função da temperatura, $\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$, do desvio da compressibilidade isentrópica em função da temperatura, $\frac{\partial \Delta \kappa}{\partial T}$, e do desvio da viscosidade em função da temperatura, $\frac{\partial \Delta \eta}{\partial T}$, foram calculadas ajustando os valores destas grandezas em função da temperatura. No presente estudo, uma dependência linear ou quadrática foi suficiente para a determinação das derivadas.

As frações molares utilizadas para os cálculos das incertezas foram as que mais se aproximaram de 10, 50 e 90% da fração molar do componente 1 presente na mistura.

Tabela D1 - Massa molar e densidade dos componentes puros para diferentes temperaturas.

	M / g·mol ⁻¹	ρ / g·cm ³				
		288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
Metanol	32,04	0,796353	0,791674	0,786967	0,782241	0,777488
Etanol	46,07	0,793694	0,789439	0,785152	0,780830	0,776478
1-Propanol	60,09	0,807624	0,803661	0,799654	0,795617	0,791544
1-Butanol	74,12	0,813309	0,809533	0,805723	0,801884	0,798012
1-Pentanol	88,15	0,818164	0,814539	0,810885	0,807198	0,803481
Dietil Malonato	160,17	1,060548	1,055218	1,049868	1,044505	1,039131

Fonte: Autor.

Tabela D2 - Densidade das soluções para os diferentes sistemas a diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	ρ / g·cm ³				
	288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
$x_1 = 0,1$					
DEM (1) + metanol (2)	0,879383	0,874420	0,869422	0,864397	0,859345
DEM (1) + etanol (2)	0,864521	0,859868	0,855167	0,850434	0,845666
DEM (1)+ 1-propanol (2)	0,853885	0,849564	0,845200	0,840805	0,836374
DEM (1) + 1-butanol (2)	0,850792	0,846691	0,842555	0,838388	0,834191
DEM (1) + 1-pentanol (2)	0,849922	0,846001	0,842043	0,838060	0,834049
$x_1 = 0,5$					
DEM (1) + metanol (2)	1,007679	1,002372	0,997037	0,991681	0,986298
DEM (1) + etanol (2)	0,983342	0,978159	0,972934	0,967687	0,962412
DEM (1)+ 1-propanol (2)	0,975912	0,970865	0,965779	0,960670	0,955538
DEM (1) + 1-butanol (2)	0,965114	0,960222	0,955294	0,950349	0,945380
DEM (1) + 1-pentanol (2)	0,956949	0,952194	0,947407	0,942600	0,937776
$x_1 = 0,9$					
DEM (1) + metanol (2)	1,053107	1,047758	1,042388	1,037011	1,031615
DEM (1) + etanol (2)	1,050840	1,045516	1,040169	1,034806	1,029436
DEM (1)+ 1-propanol (2)	1,046166	1,040872	1,035547	1,030212	1,024867
DEM (1) + 1-butanol (2)	1,047275	1,041994	1,036687	1,031371	1,026041
DEM (1) + 1-pentanol (2)	1,041790	1,036548	1,031281	1,026007	1,020722

Fonte: Autor.

Tabela D3 - Derivadas parciais do volume molar excesso em relação à composição, densidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$x_1 = 0,1$						
288,15	31,1133	-3,7988	-58,0010	14,2404	45,4699	0,0003
293,15	31,3843	-3,8298	-58,6613	14,3846	46,0089	0,0003
298,15	31,6637	-3,8612	-59,3376	14,5316	46,5610	0,0003
303,15	31,9514	-3,8929	-60,0295	14,6812	47,1253	0,0003
308,15	32,2478	-3,9254	-60,7374	14,8334	47,7032	0,0003
$x_1 = 0,5$						
288,15	7,9237	-8,4376	-94,6458	71,2018	25,2610	0,0012
293,15	8,0024	-8,5070	-95,6507	71,9229	25,5605	0,0012
298,15	8,0839	-8,5781	-96,6771	72,6578	25,8672	0,0012
303,15	8,1682	-8,6505	-97,7242	73,4058	26,1807	0,0012
308,15	8,2568	-8,7245	-98,7938	74,1669	26,5018	0,0012
$x_1 = 0,9$						
288,15	1,0671	-9,80916	-132,87	128,1632	5,052209	0,0006
293,15	1,0807	-9,89162	-134,23	129,4612	5,112105	0,0006
298,15	1,0947	-9,97615	-135,616	130,784	5,173441	0,0006
303,15	1,1081	-10,0628	-137,026	132,130	5,236141	0,0006
308,15	1,1230	-10,1515	-138,464	133,500	5,300357	0,0006

Fonte: Autor.

Tabela D4 - Derivadas parciais do volume molar excesso em relação à composição, densidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$x_1 = 0,1$						
288,15	34,2445	-4,7554	-76,9070	14,2404	65,8195	0,0018
293,15	34,4842	-4,7799	-77,7415	14,3846	66,5309	0,0018
298,15	34,7347	-4,8040	-78,5986	14,5316	67,2594	0,0018
303,15	34,9937	-4,8290	-79,4759	14,6812	68,0061	0,0018
308,15	35,2627	-4,8542	-80,3746	14,8334	68,7705	0,0018
$x_1 = 0,5$						
288,15	11,8576	-11,1946	-106,6433	71,2018	36,5664	0,0035
293,15	11,9578	-11,2592	-107,7765	71,9229	36,9616	0,0035
298,15	12,0637	-11,3249	-108,9372	72,6578	37,3664	0,0035
303,15	12,1730	-11,3929	-110,1217	73,4058	37,7812	0,0035
308,15	12,2872	-11,4627	-111,3322	74,1669	38,2059	0,0035
$x_1 = 0,9$						
288,15	1,3952	-14,2039	-134,7141	128,1632	7,3133	0,0009
293,15	1,4085	-14,2935	-136,0896	129,4612	7,3923	0,0009
298,15	1,4225	-14,3857	-137,4923	130,7840	7,4733	0,0009
303,15	1,4372	-14,4809	-138,9211	132,1304	7,5562	0,0009
308,15	1,4517	-14,5793	-140,3743	133,5005	7,6412	0,0009

Fonte: Autor.

Tabela D5 - Derivadas parciais do volume molar excesso em relação à composição, densidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$x_1 = 0,1$						
288,15	36,5522	-4,0310	-96,1406	14,2404	82,9137	0,0025
293,15	36,7434	-4,0399	-97,1211	14,3846	83,7334	0,0025
298,15	36,9433	-4,0494	-98,1266	14,5316	84,5747	0,0025
303,15	37,1506	-4,0591	-99,1551	14,6812	85,4352	0,0025
308,15	37,3669	-4,0691	-100,2085	14,8334	86,3167	0,0025
$x_1 = 0,5$						
288,15	13,0977	-12,8303	-115,6337	71,2018	46,0632	0,0048
293,15	13,1880	-12,8771	-116,8390	71,9229	46,5186	0,0048
298,15	13,2833	-12,9258	-118,0729	72,6578	46,9859	0,0048
303,15	13,3820	-12,9762	-119,3321	73,4058	47,4640	0,0048
308,15	13,4845	-13,0289	-120,6173	74,1669	47,9537	0,0048
$x_1 = 0,9$						
288,15	2,0761	-16,9651	-137,2015	128,1632	9,2126	0,0015
293,15	2,0920	-17,0399	-138,6007	129,4612	9,3037	0,0015
298,15	2,1098	-17,1177	-140,0298	130,7840	9,3972	0,0015
303,15	2,1275	-17,1985	-141,4838	132,1304	9,4928	0,0015
308,15	2,1453	-17,2829	-142,9635	133,5005	9,5907	0,0015

Fonte: Autor.

Tabela D6 - Derivadas parciais do volume molar excesso em relação à composição, densidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$x_1 = 0,1$						
288,15	37,2341	-4,0150	-114,2852	14,2404	100,8479	0,0026
293,15	37,3832	-4,0182	-115,3950	14,3846	101,7909	0,0026
298,15	37,5383	-4,0214	-116,5307	14,5316	102,7558	0,0026
303,15	37,6998	-4,0246	-117,6919	14,6812	103,7420	0,0026
308,15	37,8680	-4,0283	-118,8792	14,8334	104,7512	0,0026
$x_1 = 0,5$						
288,15	14,9339	-14,3347	-125,7669	71,2018	56,0266	0,0052
293,15	15,0166	-14,3685	-127,0517	71,9229	56,5505	0,0052
298,15	15,1036	-14,4032	-128,3659	72,6578	57,0866	0,0052
303,15	15,1927	-14,4399	-129,7052	73,4058	57,6345	0,0052
308,15	15,2856	-14,4785	-131,0723	74,1669	58,1951	0,0052
$x_1 = 0,9$						
288,15	1,9140	-20,3597	-138,1903	128,1632	11,2053	0,0013
293,15	1,9263	-20,4261	-139,5946	129,4612	11,3101	0,0013
298,15	1,9397	-20,4949	-141,0274	130,7840	11,4173	0,0013
303,15	1,9527	-20,5668	-142,4850	132,1304	11,5269	0,0013
308,15	1,9665	-20,6420	-143,9692	133,5005	11,6390	0,0013

Fonte: Autor.

Tabela D7 - Derivadas parciais do volume molar excesso em relação à composição, densidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial x_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_1}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial \rho_2}$	$\frac{\partial V_m^E}{\partial T}$
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$x_1 = 0,1$						
288,15	37,4268	-4,0258	-131,9993	14,2404	118,5179	0,0026
293,15	37,5374	-4,0246	-133,2257	14,3846	119,5752	0,0026
298,15	37,6538	-4,0225	-134,4811	14,5316	120,6553	0,0026
303,15	37,7746	-4,0215	-135,7624	14,6812	121,7600	0,0026
308,15	37,9007	-4,0209	-137,0713	14,8334	122,8892	0,0026
$x_1 = 0,5$						
288,15	16,3499	-15,6256	-135,5826	71,2018	65,8433	0,0057
293,15	16,4230	-15,6451	-136,9402	71,9229	66,4307	0,0057
298,15	16,4994	-15,6650	-138,3275	72,6578	67,0307	0,0057
303,15	16,5782	-15,6870	-139,7420	73,4058	67,6444	0,0057
308,15	16,6594	-15,7111	-141,1833	74,1669	68,2718	0,0057
$x_1 = 0,9$						
288,15	2,7192	-23,1273	-140,9419	128,1632	13,1687	0,0017
293,15	2,7339	-23,1788	-142,3711	129,4612	13,2861	0,0017
298,15	2,7496	-23,2322	-143,8290	130,7840	13,4061	0,0017
303,15	1,9527	-23,2893	-145,3115	132,1304	13,5289	0,0017
308,15	2,7800	-23,3497	-146,8201	133,5005	13,6544	0,0017

Fonte: Autor.

Tabela D8 - Massas dos componentes puros, derivadas parciais da fração molar em relação à massa de cada componente e incertezas na fração molar para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{m_1}{\text{g}}$	$\frac{m_2}{\text{g}}$	$\frac{\partial x_1}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_1}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_1$	$\frac{\partial x_2}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_2}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_2$
$x_1 = 0,1$								
288,15	3,5029	6,0013	0,02673	-0,0156	$\pm 0,0556$	-0,0267	0,0156	$\pm 0,0556$
293,15	3,5029	6,0013	0,02673	-0,0156	$\pm 0,0556$	-0,0267	0,0156	$\pm 0,0556$
298,15	3,5029	6,0013	0,02673	-0,0156	$\pm 0,0556$	-0,0267	0,0156	$\pm 0,0556$
303,15	3,5029	6,0013	0,02673	-0,0156	$\pm 0,0556$	-0,0267	0,0156	$\pm 0,0556$
308,15	3,5029	6,0013	0,02673	-0,0156	$\pm 0,0556$	-0,0267	0,0156	$\pm 0,0556$
$x_1 = 0,5$								
288,15	10,0805	2,0092	0,0248	-0,1244	$\pm 0,4981$	-0,0248	0,12443	$\pm 0,4981$
293,15	10,0805	2,0092	0,0248	-0,1244	$\pm 0,4981$	-0,0248	0,12443	$\pm 0,4981$
298,15	10,0805	2,0092	0,0248	-0,1244	$\pm 0,4981$	-0,0248	0,12443	$\pm 0,4981$
303,15	10,0805	2,0092	0,0248	-0,1244	$\pm 0,4981$	-0,0248	0,12443	$\pm 0,4981$
308,15	10,0805	2,0092	0,0248	-0,1244	$\pm 0,4981$	-0,0248	0,12443	$\pm 0,4981$
$x_1 = 0,9$								
288,15	13,0382	0,3111	0,0073	-0,3061	$\pm 1,4937$	-0,0073	0,30605	$\pm 1,4937$
293,15	13,0382	0,3111	0,0073	-0,3061	$\pm 1,4937$	-0,0073	0,30605	$\pm 1,4937$
298,15	13,0382	0,3111	0,0073	-0,3061	$\pm 1,4937$	-0,0073	0,30605	$\pm 1,4937$
303,15	13,0382	0,3111	0,0073	-0,3061	$\pm 1,4937$	-0,0073	0,30605	$\pm 1,4937$
308,15	13,0382	0,3111	0,0073	-0,3061	$\pm 1,4937$	-0,0073	0,30605	$\pm 1,4937$

Fonte: Autor.

Tabela D9 - Massas dos componentes puros, derivadas parciais da fração molar em relação à massa de cada componente e incertezas na fração molar para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{m_1}{\text{g}}$	$\frac{m_2}{\text{g}}$	$\frac{\partial x_1}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_1}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_1$	$\frac{\partial x_2}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_2}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_2$
$x_1=0,1$								
288,15	4,7742	10,0123	0,0222	-0,0106	$\pm 0,0581$	-0,0222	0,0106	$\pm 0,0581$
293,15	4,7742	10,0123	0,0222	-0,0106	$\pm 0,0581$	-0,0222	0,0106	$\pm 0,0581$
298,15	4,7742	10,0123	0,0222	-0,0106	$\pm 0,0581$	-0,0222	0,0106	$\pm 0,0581$
303,15	4,7742	10,0123	0,0222	-0,0106	$\pm 0,0581$	-0,0222	0,0106	$\pm 0,0581$
308,15	4,7742	10,0123	0,0222	-0,0106	$\pm 0,0581$	-0,0222	0,0106	$\pm 0,0581$
$x_1=0,5$								
288,15	10,5327	3,2145	0,0237	-0,0777	$\pm 0,2699$	-0,0237	0,0777	$\pm 2,6995$
293,15	10,5327	3,2145	0,0237	-0,0777	$\pm 0,2699$	-0,0237	0,0777	$\pm 2,6995$
298,15	10,5327	3,2145	0,0237	-0,0777	$\pm 0,2699$	-0,0237	0,0777	$\pm 2,6995$
303,15	10,5327	3,2145	0,0237	-0,0777	$\pm 0,2699$	-0,0237	0,0777	$\pm 2,6995$
308,15	10,5327	3,2145	0,0237	-0,0777	$\pm 0,2699$	-0,0237	0,0777	$\pm 2,6995$
$x_1=0,9$								
288,15	14,4974	0,4083	0,0056	-0,1989	$\pm 0,9667$	-0,0056	0,1989	$\pm 0,9667$
293,15	14,4974	0,4083	0,0056	-0,1989	$\pm 0,9667$	-0,0056	0,1989	$\pm 0,9667$
298,15	14,4974	0,4083	0,0056	-0,1989	$\pm 0,9667$	-0,0056	0,1989	$\pm 0,9667$
303,15	14,4974	0,4083	0,0056	-0,1989	$\pm 0,9667$	-0,0056	0,1989	$\pm 0,9667$
308,15	14,4974	0,4083	0,0056	-0,1989	$\pm 0,9667$	-0,0056	0,1989	$\pm 0,9667$

Fonte: Autor.

Tabela D10 - Massas dos componentes puros, derivadas parciais da fração molar em relação à massa de cada componente e incertezas na fração molar para o sistema {dielil malonato (1) + 1-propanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{m_1}{\text{g}}$	$\frac{m_2}{\text{g}}$	$\frac{\partial x_1}{\partial m_1}$ g ⁻¹	$\frac{\partial x_1}{\partial m_2}$ g ⁻¹	$10^5 \Delta x_1$	$\frac{\partial x_2}{\partial m_1}$ g ⁻¹	$\frac{\partial x_2}{\partial m_2}$ g ⁻¹	$10^5 \Delta x_2$
$x_1 = 0,1$								
288,15	3,6301	12,0044	0,0252	-0,0076	$\pm 0,0879$	-0,0252	0,0076	$\pm 0,0879$
293,15	3,6301	12,0044	0,0252	-0,0076	$\pm 0,0879$	-0,0252	0,0076	$\pm 0,0879$
298,15	3,6301	12,0044	0,0252	-0,0076	$\pm 0,0879$	-0,0252	0,0076	$\pm 0,0879$
303,15	3,6301	12,0044	0,0252	-0,0076	$\pm 0,0879$	-0,0252	0,0076	$\pm 0,0879$
308,15	3,6301	12,0044	0,0252	-0,0076	$\pm 0,0879$	-0,0252	0,0076	$\pm 0,0879$
$x_1 = 0,5$								
288,15	13,0259	4,8035	0,0192	-0,0520	$\pm 0,1643$	-0,0192	0,0520	$\pm 0,1643$
293,15	13,0259	4,8035	0,0192	-0,0520	$\pm 0,1643$	-0,0192	0,0520	$\pm 0,1643$
298,15	13,0259	4,8035	0,0192	-0,0520	$\pm 0,1643$	-0,0192	0,0520	$\pm 0,1643$
303,15	13,0259	4,8035	0,0192	-0,0520	$\pm 0,1643$	-0,0192	0,0520	$\pm 0,1643$
308,15	13,0259	4,8035	0,0192	-0,0520	$\pm 0,1643$	-0,0192	0,0520	$\pm 0,1643$
$x_1 = 0,9$								
288,15	13,0164	0,5602	0,0071	-0,1648	$\pm 0,7885$	-0,0071	0,1648	$\pm 0,7885$
293,15	13,0164	0,5602	0,0071	-0,1648	$\pm 0,7885$	-0,0071	0,1648	$\pm 0,7885$
298,15	13,0164	0,5602	0,0071	-0,1648	$\pm 0,7885$	-0,0071	0,1648	$\pm 0,7885$
303,15	13,0164	0,5602	0,0071	-0,1648	$\pm 0,7885$	-0,0071	0,1648	$\pm 0,7885$
308,15	13,0164	0,5602	0,0071	-0,1648	$\pm 0,7885$	-0,0071	0,1648	$\pm 0,7885$

Fonte: Autor.

Tabela D11 - Massas dos componentes puros, derivadas parciais da fração molar em relação à massa de cada componente e incertezas na fração molar para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{m_1}{\text{g}}$	$\frac{m_2}{\text{g}}$	$\frac{\partial x_1}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_1}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_1$	$\frac{\partial x_2}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_2}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_2$
$x_1 = 0,1$								
288,15	3,1662	13,0120	0,0287	-0,0070	$\pm 0,1087$	-0,0287	0,0070	$\pm 0,1087$
293,15	3,1662	13,0120	0,0287	-0,0070	$\pm 0,1087$	-0,0287	0,0070	$\pm 0,1087$
298,15	3,1662	13,0120	0,0287	-0,0070	$\pm 0,1087$	-0,0287	0,0070	$\pm 0,1087$
303,15	3,1662	13,0120	0,0287	-0,0070	$\pm 0,1087$	-0,0287	0,0070	$\pm 0,1087$
308,15	3,1662	13,0120	0,0287	-0,0070	$\pm 0,1087$	-0,0287	0,0070	$\pm 0,1087$
$x_1 = 0,5$								
288,15	7,1131	3,2646	0,0351	-0,0766	$\pm 0,2072$	-0,0351	0,0766	$\pm 0,2072$
293,15	7,1131	3,2646	0,0351	-0,0766	$\pm 0,2072$	-0,0351	0,0766	$\pm 0,2072$
298,15	7,1131	3,2646	0,0351	-0,0766	$\pm 0,2072$	-0,0351	0,0766	$\pm 0,2072$
303,15	7,1131	3,2646	0,0351	-0,0766	$\pm 0,2072$	-0,0351	0,0766	$\pm 0,2072$
308,15	7,1131	3,2646	0,0351	-0,0766	$\pm 0,2072$	-0,0351	0,0766	$\pm 0,2072$
$x_1 = 0,9$								
288,15	13,0171	0,5243	0,0057	-0,1405	$\pm 0,6742$	-0,0057	0,1405	$\pm 0,6742$
293,15	13,0171	0,5243	0,0057	-0,1405	$\pm 0,6742$	-0,0057	0,1405	$\pm 0,6742$
298,15	13,0171	0,5243	0,0057	-0,1405	$\pm 0,6742$	-0,0057	0,1405	$\pm 0,6742$
303,15	13,0171	0,5243	0,0057	-0,1405	$\pm 0,6742$	-0,0057	0,1405	$\pm 0,6742$
308,15	13,0171	0,5243	0,0057	-0,1405	$\pm 0,6742$	-0,0057	0,1405	$\pm 0,6742$

Fonte: Autor.

Tabela D12 - Massas dos componentes puros, derivadas parciais da fração molar em relação à massa de cada componente e incertezas na fração molar para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{m_1}{\text{g}}$	$\frac{m_2}{\text{g}}$	$\frac{\partial x_1}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_1}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_1$	$\frac{\partial x_2}{\partial m_1}$ g^{-1}	$\frac{\partial x_2}{\partial m_2}$ g^{-1}	$10^5 \Delta x_2$
$x_1 = 0,1$								
288,15	2,7123	13,0304	0,0340	-0,0071	$\pm 0,1346$	-0,0340	0,0071	$\pm 0,1346$
293,15	2,7123	13,0304	0,0340	-0,0071	$\pm 0,1346$	-0,0340	0,0071	$\pm 0,1346$
298,15	2,7123	13,0304	0,0340	-0,0071	$\pm 0,1346$	-0,0340	0,0071	$\pm 0,1346$
303,15	2,7123	13,0304	0,0340	-0,0071	$\pm 0,1346$	-0,0340	0,0071	$\pm 0,1346$
308,15	2,7123	13,0304	0,0340	-0,0071	$\pm 0,1346$	-0,0340	0,0071	$\pm 0,1346$
$x_1 = 0,5$								
288,15	6,5103	3,5200	0,0384	-0,0710	$\pm 0,1631$	-0,0384	0,0710	$\pm 0,1631$
293,15	6,5103	3,5200	0,0384	-0,0710	$\pm 0,1631$	-0,0384	0,0710	$\pm 0,1631$
298,15	6,5103	3,5200	0,0384	-0,0710	$\pm 0,1631$	-0,0384	0,0710	$\pm 0,1631$
303,15	6,5103	3,5200	0,0384	-0,0710	$\pm 0,1631$	-0,0384	0,0710	$\pm 0,1631$
308,15	6,5103	3,5200	0,0384	-0,0710	$\pm 0,1631$	-0,0384	0,0710	$\pm 0,1631$
$x_1 = 0,9$								
288,15	13,0066	0,7738	0,0068	-0,1138	$\pm 0,5350$	-0,0068	0,1138	$\pm 0,5350$
293,15	13,0066	0,7738	0,0068	-0,1138	$\pm 0,5350$	-0,0068	0,1138	$\pm 0,5350$
298,15	13,0066	0,7738	0,0068	-0,1138	$\pm 0,5350$	-0,0068	0,1138	$\pm 0,5350$
303,15	13,0066	0,7738	0,0068	-0,1138	$\pm 0,5350$	-0,0068	0,1138	$\pm 0,5350$
308,15	13,0066	0,7738	0,0068	-0,1138	$\pm 0,5350$	-0,0068	0,1138	$\pm 0,5350$

Fonte: Autor.

Tabela D13 - Incertezas do volume molar excesso para diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	T / K				
	288,15	293,15	298,15	303,15	308,15
$x_1=0,1$					
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,00004$				
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00006$				
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00008$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00009$				
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00011$	$\pm 0,00011$
$x_1=0,5$					
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00008$				
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00008$				
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00010$
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00010$				
$x_1=0,9$					
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,00017$	$\pm 0,00018$	$\pm 0,00018$	$\pm 0,00018$	$\pm 0,00018$
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00017$				
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00016$	$\pm 0,00017$	$\pm 0,00017$	$\pm 0,00017$	$\pm 0,00017$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00017$				
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00016$				

Fonte: Autor.

Tabela D14 - Velocidade do som nos componentes puros a diferentes temperaturas.

	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$				
	288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
Metanol	1136,13	1119,59	1103,08	1086,98	1071,25
Etanol	1177,08	1160,11	1142,99	1126,18	1109,50
1-Propanol	1240,53	1223,48	1206,22	1189,14	1172,14
1-Butanol	1273,83	1257,05	1240,09	1223,25	1206,50
1-Pentanol	1309,53	1292,81	1275,85	1259,04	1242,31
Dietil Malonato	1338,74	1319,49	1300,04	1280,65	1259,79

Fonte: Autor.

Tabela D15 - Velocidade do som nas soluções para diferentes sistemas a diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	$u / \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$				
	288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
	$x_1=0,1$				
DEM (1) + metanol (2)	1191,54	1174,61	1157,91	1141,84	1126,79
DEM (1) + etanol (2)	1214,84	1197,35	1179,67	1162,06	1144,49
DEM (1)+ 1-propanol (2)	1252,05	1234,58	1216,90	1199,35	1181,87
DEM (1) + 1-butanol (2)	1275,62	1258,46	1241,07	1223,83	1206,65
DEM (1) + 1-pentanol (2)	1303,25	1286,17	1268,86	1251,70	1234,62
	$x_1=0,5$				
DEM (1) + metanol (2)	1290,95	1272,70	1254,22	1235,75	1217,34
DEM (1) + etanol (2)	1282,91	1264,60	1246,04	1227,51	1209,00
DEM (1)+ 1-propanol (2)	1294,13	1275,84	1257,29	1238,87	1220,53
DEM (1) + 1-butanol (2)	1297,97	1279,96	1261,67	1243,54	1225,48
DEM (1) + 1-pentanol (2)	1305,76	1287,87	1269,72	1251,72	1233,80
	$x_1=0,9$				
DEM (1) + metanol (2)	1333,01	1313,86	1294,50	1275,20	1255,98
DEM (1) + etanol (2)	1331,68	1312,40	1292,80	1273,50	1254,39
DEM (1)+ 1-propanol (2)	1331,13	1312,05	1292,72	1273,57	1254,54
DEM (1) + 1-butanol (2)	1332,72	1313,65	1294,34	1275,22	1256,21
DEM (1) + 1-pentanol (2)	1331,48	1312,48	1293,29	1274,25	1255,33

Fonte: Autor.

Tabela D16 - Derivadas parciais do desvio da compressibilidade isentrópica em relação à composição, densidade, velocidade do som e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + metanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1}$	$10^9 \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2}$	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2}$	$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T}$
	Pa ⁻¹	Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·K ⁻¹
					$x_1 = 0,1$				
288,15	-5,2611	-0,9728	-8,0095	4,9607	1,0994	-1,3444	7,8598	1,5413	-1,2608
293,15	-5,4431	-1,0077	-8,2888	5,1583	1,1456	-1,4113	8,2503	1,6201	-1,2608
298,15	-5,6358	-1,0443	-8,5787	5,3681	1,1943	-1,4818	8,6701	1,7041	-1,2608
303,15	-5,8375	-1,0820	-8,8731	5,5888	1,2449	-1,5542	9,1165	1,7917	-1,2608
308,15	-6,0636	-1,1208	-9,1653	5,8353	1,2974	-1,6268	9,6264	1,8832	-1,2608
					$x_1 = 0,5$				
288,15	-5,2611	-0,9728	-5,9547	24,8037	0,6108	-0,9225	39,2990	0,8563	-1,2855
293,15	-5,4431	-1,0077	-6,1591	25,7913	0,6364	-0,9679	41,2515	0,9001	-1,2855
298,15	-5,6358	-1,0443	-6,3759	26,8403	0,6635	-1,0167	43,3506	0,9467	-1,2855
303,15	-5,8375	-1,0820	-6,6034	27,9440	0,6916	-1,0687	45,5825	0,9954	-1,2855
308,15	-6,0636	-1,1208	-6,8418	29,1765	0,7208	-1,1241	48,1321	1,0462	-1,2855
					$x_1 = 0,9$				
288,15	-5,2611	-0,9728	-5,3439	44,6467	0,1222	-0,8018	70,7381	0,1713	-0,11808
293,15	-5,4431	-1,0077	-5,5289	46,4244	0,1273	-0,8416	74,2527	0,1800	-0,25408
298,15	-5,6358	-1,0443	-5,7249	48,3126	0,1327	-0,8845	78,0311	0,1893	-0,39008
303,15	-5,8375	-1,0820	-5,9301	50,2992	0,1383	-0,9301	82,0485	0,1991	-0,52608
308,15	-6,0636	-1,1208	-6,1449	52,5177	0,1442	-0,9785	86,6378	0,2092	-0,66208

Fonte: Autor.

Tabela D17 - Derivadas parciais do desvio da compressibilidade isentrópica em relação à composição, densidade, velocidade do som e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1}$	$10^9 \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2}$	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2}$	$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T}$
	Pa^{-1}	Pa^{-1}	$\text{kg}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$	$\text{kg}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$	$\text{kg}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$	$\text{kg}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$	$\text{Pa}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}$	$\text{Pa}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}$	$\text{Pa}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
	$x_1 = 0,1$								
288,15	-5,2611	-9,0936	-7,8377	4,9607	1,0312	-1,2903	7,8598	1,3906	-0,5564
293,15	-5,4431	-9,4120	-8,1120	5,1583	1,0730	-1,3550	8,2503	1,4603	-0,5564
298,15	-5,6358	-9,7490	-8,4029	5,3681	1,1175	-1,4246	8,6701	1,5353	-0,5564
303,15	-5,8375	-10,0978	-8,7077	5,5888	1,1639	-1,4987	9,1165	1,6140	-0,5564
308,15	-6,0636	-10,4620	-9,0277	5,8353	1,2126	-1,5776	9,6264	1,6973	-0,5564
	$x_1 = 0,5$								
288,15	-5,2611	-9,0936	-6,1788	24,8037	0,5729	-0,9632	39,2990	0,7726	-0,8372
293,15	-5,4431	-9,4120	-6,3927	25,7913	0,5961	-1,0110	41,2515	0,8113	-0,8372
298,15	-5,6358	-9,7490	-6,6199	26,8403	0,6208	-1,0626	43,3506	0,8529	-0,8372
303,15	-5,8375	-10,0978	-6,8583	27,9440	0,6466	-1,1174	45,5825	0,8966	-0,8372
308,15	-6,0636	-10,4620	-7,1086	29,1765	0,6737	-1,1760	48,1321	0,9430	-0,8372
	$x_1 = 0,9$								
288,15	-5,2611	-9,0936	-5,3662	44,6467	0,1146	-0,8059	70,7381	0,1545	0,0748
293,15	-5,4431	-9,4120	-5,5531	46,4244	0,1192	-0,8463	74,2527	0,1623	-0,0822
298,15	-5,6358	-9,7490	-5,7522	48,3126	0,1242	-0,8899	78,0311	0,1706	-0,2392
303,15	-5,8375	-10,0978	-5,9586	50,2992	0,1293	-0,9358	82,0485	0,1793	-0,3962
308,15	-6,0636	-10,4620	-6,1736	52,5177	0,1347	-0,9843	86,6378	0,1886	-0,5532

Fonte: Autor.

Tabela D18 - Derivadas parciais do desvio da compressibilidade isentrópica em relação à composição, densidade, velocidade do som e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-propanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1}$	$10^9 \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2}$	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2}$	$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T}$
	Pa ⁻¹	Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·K ⁻¹
					$x_1 = 0,1$				
288,15	-5,2611	-8,0459	-7,4706	4,9607	0,8966	-1,1933	7,8598	1,1675	-0,1284
293,15	-5,4431	-8,3125	-7,7226	5,1583	0,9309	-1,2511	8,2503	1,2230	-0,1284
298,15	-5,6358	-8,5950	-7,9897	5,3681	0,9674	-1,3131	8,6701	1,2826	-0,1284
303,15	-5,8375	-8,8885	-8,2682	5,5888	1,0055	-1,3788	9,1165	1,3455	-0,1284
308,15	-6,0636	-9,1953	-8,5597	5,8353	1,0455	-1,4485	9,6264	1,4121	-0,1284
					$x_1 = 0,5$				
288,15	-5,2611	-8,0459	-6,1183	24,8037	0,4981	-0,9456	39,2990	0,6486	-0,1820
293,15	-5,4431	-8,3125	-6,3277	25,7913	0,5172	-0,9919	41,2515	0,6794	-0,2650
298,15	-5,6358	-8,5950	-6,5502	26,8403	0,5374	-1,0419	43,3506	0,7126	-0,3480
303,15	-5,8375	-8,8885	-6,7823	27,9440	0,5586	-1,0949	45,5825	0,7475	-0,4310
308,15	-6,0636	-9,1953	-7,0251	29,1765	0,5808	-1,1512	48,1321	0,7845	-0,5140
					$x_1 = 0,9$				
288,15	-5,2611	-8,0459	-5,3946	44,6467	0,0996	-0,8105	70,7381	0,1297	0,0935
293,15	-5,4431	-8,3125	-5,5809	46,4244	0,1034	-0,8507	74,2527	0,1359	-0,0525
298,15	-5,6358	-8,5950	-5,7786	48,3126	0,1075	-0,8940	78,0311	0,1425	-0,1985
303,15	-5,8375	-8,8885	-5,9845	50,2992	0,1117	-0,9398	82,0485	0,1495	-0,3445
308,15	-6,0636	-9,1953	-6,1996	52,5177	0,1162	-0,9883	86,6378	0,1569	-0,4905

Fonte: Autor.

Tabela D19 - Derivadas parciais do desvio da compressibilidade isentrópica em relação à composição, densidade, velocidade do som e temperatura para o sistema {diétil malonato (1) + 1-butanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1}$	$10^9 \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2}$	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2}$	$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T}$
	Pa ⁻¹	Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·K ⁻¹
					$x_1 = 0,1$				
288,15	-5,2611	-7,5774	-7,2233	4,9607	8,3851	-1,1325	7,8598	1,0707	0,0192
293,15	-5,4431	-7,8174	-7,4576	5,1583	8,6910	-1,1852	8,2503	1,1194	0,0292
298,15	-5,6358	-8,0706	-7,7056	5,3681	9,0150	-1,2418	8,6701	1,1715	0,0392
303,15	-5,8375	-8,3341	-7,9637	5,5888	9,3538	-1,3014	9,1165	1,2264	0,0492
308,15	-6,0636	-8,6087	-8,2333	5,8353	9,7089	-1,3646	9,6264	1,2843	0,0592
					$x_1 = 0,5$				
288,15	-5,2611	-7,5774	-6,1502	24,8037	4,6584	-0,9477	39,2990	0,5949	-0,0714
293,15	-5,4431	-7,8174	-6,3568	25,7913	4,8283	-0,9933	41,2515	0,6219	-0,0714
298,15	-5,6358	-8,0706	-6,5761	26,8403	5,0083	-1,0425	43,3506	0,6508	-0,0714
303,15	-5,8375	-8,3341	-6,8045	27,9440	5,1966	-1,0944	45,5825	0,6813	-0,0714
308,15	-6,0636	-8,6087	-7,0434	29,1765	5,3938	-1,1495	48,1321	0,7135	-0,0714
					$x_1 = 0,9$				
288,15	-5,2611	-7,5774	-5,3760	44,6467	0,9317	-0,8068	70,7381	0,1190	-0,0217
293,15	-5,4431	-7,8174	-5,5613	46,4244	0,9657	-0,8467	74,2527	0,1244	-0,0217
298,15	-5,6358	-8,0706	-5,7578	48,3126	1,0017	-0,8897	78,0311	0,1302	-0,0217
303,15	-5,8375	-8,3341	-5,9623	50,2992	1,0393	-0,9351	82,0485	0,1363	-0,0217
308,15	-6,0636	-8,6087	-6,1760	52,5177	1,0788	-0,9833	86,6378	0,1427	-0,0217

Fonte: Autor.

Tabela D20 - Derivadas parciais do desvio da compressibilidade isentrópica em relação à composição, densidade, velocidade do som e temperatura para o sistema {diethyl malonato (1) + 1-pentanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_1}$	$10^9 \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial x_2}$	$10^{10} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial \rho_2}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u}$	$10^{14} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_1}$	$10^{12} \frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial u_2}$	$\frac{\partial(\Delta\kappa)}{\partial T}$
	Pa ⁻¹	Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	kg ⁻¹ ·Pa ⁻¹	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·m ⁻¹ ·s	Pa ⁻¹ ·K ⁻¹
					$x_1 = 0,1$				
288,15	-5,2611	-7,1274	-6,9273	4,9607	7,8403	-1,0631	7,8598	0,9797	0,0858
293,15	-5,4431	-7,3455	-7,1455	5,1583	8,1161	-1,1111	8,2503	1,0227	0,0858
298,15	-5,6358	-7,5760	-7,3763	5,3681	8,4086	-1,1627	8,6701	1,0688	0,0858
303,15	-5,8375	-8,3341	-7,6160	5,5888	8,7137	-1,2169	9,1165	1,1173	0,0858
308,15	-6,0636	-8,0643	-7,8658	5,8353	9,0330	-1,2742	9,6264	1,1684	0,0858
					$x_1 = 0,5$				
288,15	-5,2611	-7,1274	-6,1289	24,8037	4,3557	-0,9388	39,2990	0,5443	0,0800
293,15	-5,4431	-7,3455	-6,3318	25,7913	4,5090	-0,9833	41,2515	0,5682	0,0800
298,15	-5,6358	-7,5760	-6,5471	26,8403	4,6715	-1,0313	43,3506	0,5938	0,0800
303,15	-5,8375	-8,3341	-6,7711	27,9440	4,8410	-1,0819	45,5825	0,6207	0,0800
308,15	-6,0636	-8,0643	-7,0051	29,1765	5,0183	-1,1355	48,1321	0,6491	0,0800
					$x_1 = 0,9$				
288,15	-5,2611	-7,1274	-5,4144	44,6467	0,8711	-0,8133	70,7381	0,1089	-0,0140
293,15	-5,4431	-7,3455	-5,6005	46,4244	0,9018	-0,8534	74,2527	0,1136	-0,0130
298,15	-5,6358	-7,5760	-5,7974	48,3126	0,9343	-0,8965	78,0311	0,1188	-0,0120
303,15	-5,8375	-8,3341	-6,0026	50,2992	0,9682	-0,9421	82,0485	0,1241	-0,0110
308,15	-6,0636	-8,0643	-6,2169	52,5177	1,0037	-0,9905	86,6378	0,1298	-0,0100

Fonte: Autor.

Tabela D21 - Incertezas do desvio da compressibilidade isentrópica para diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	T / K				
	288,15	293,15	298,15	303,15	308,15
	$x_1 = 0,1$				
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,0063$				
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,0028$				
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,0006$				
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,0001$	$\pm 0,0001$	$\pm 0,0002$	$\pm 0,0002$	$\pm 0,0003$
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,0004$				
	$x_1 = 0,5$				
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,0064$				
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,0042$				
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,0009$	$\pm 0,0013$	$\pm 0,0017$	$\pm 0,0022$	$\pm 0,0026$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,0004$				
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,0004$				
	$x_1 = 0,9$				
DEM (1) + metanol (2)	$\pm 0,0006$	$\pm 0,0013$	$\pm 0,0020$	$\pm 0,0026$	$\pm 0,0033$
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,0004$	$\pm 0,0004$	$\pm 0,0012$	$\pm 0,0020$	$\pm 0,0028$
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,0005$	$\pm 0,0003$	$\pm 0,0010$	$\pm 0,0017$	$\pm 0,0025$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,0001$				
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00006$	$\pm 0,00006$	$\pm 0,00005$	$\pm 0,00005$

Fonte: Autor.

Tabela D22 - Viscosidade dos componentes puros a diferentes temperaturas.

	$\eta / \text{mPa}\cdot\text{s}$				
	288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
Etanol	1,2120	1,1971	1,1300	1,0629	0,9831
1-Propanol	2,4939	2,1923	1,9291	1,7123	1,5243
1-Butanol	3,3575	2,9566	2,5942	2,2811	2,0104
1-Pentanol	4,6174	4,0590	3,5140	3,0579	2,6682
Dietil Malonato	2,3811	2,1774	1,9828	1,8092	1,6561

Fonte: Autor.

Tabela D23 - Viscosidade das soluções para diferentes sistemas a diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	$\eta / \text{mPa}\cdot\text{s}$				
	288,15 K	293,15 K	298,15 K	303,15 K	308,15 K
	$x_1 = 0,1$				
DEM (1) + etanol (2)	1,1188	1,1049	1,0560	0,9935	0,9274
DEM (1) + 1-propanol (2)	1,9302	1,1440	1,5587	1,3968	1,2557
DEM (1) + 1-butanol (2)	2,4887	2,2241	1,9733	1,7573	1,5701
DEM (1) + 1-pentanol (2)	3,2392	2,8759	2,5234	2,2236	1,9685
	$x_1 = 0,5$				
DEM (1) + etanol (2)	1,4542	1,3957	1,3146	1,2273	1,1414
DEM (1) + 1-propanol (2)	1,7595	1,6065	1,4551	1,3236	1,2082
DEM (1) + 1-butanol (2)	1,9072	1,7300	1,5606	1,4142	1,2872
DEM (1) + 1-pentanol (2)	2,1335	1,9219	1,7260	1,5580	1,4097
	$x_1 = 0,9$				
DEM (1) + etanol (2)	2,1707	2,0229	1,8525	1,7083	1,5744
DEM (1) + 1-propanol (2)	2,1982	2,0054	1,8178	1,6571	1,5175
DEM (1) + 1-butanol (2)	2,2454	2,0446	1,8524	1,6864	1,5418
DEM (1) + 1-pentanol (2)	2,2601	2,0525	1,8598	1,6918	1,5440

Fonte: Autor.

Tabela D24 - Derivadas parciais da viscosidade em relação à composição, viscosidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + etanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}$
	mPa·s	mPa·s	--	--	--	mPa·s·K ⁻¹
$x_1 = 0,1$						
288,15	-2,3811	-1,2120	1,0000	-0,1206	-0,8794	0,0077
293,15	-2,1774	-1,1971	1,0000	-0,1206	-0,8794	0,0073
298,15	-1,9828	-1,1300	1,0000	-0,1206	-0,8794	0,0069
303,15	-1,8092	-1,0629	1,0000	-0,1206	-0,8794	0,0065
308,15	-1,6561	-0,9831	1,0000	-0,1206	-0,8794	0,0061
$x_1 = 0,5$						
288,15	-2,3811	-1,2120	1,0000	-0,4852	-0,5148	0,0192
293,15	-2,1774	-1,1971	1,0000	-0,4852	-0,5148	0,0182
298,15	-1,9828	-1,1300	1,0000	-0,4852	-0,5148	0,0172
303,15	-1,8092	-1,0629	1,0000	-0,4852	-0,5148	0,0162
308,15	-1,6561	-0,9831	1,0000	-0,4852	-0,5148	0,0152
$x_1 = 0,9$						
288,15	-2,3811	-1,2120	1,0000	-0,9108	-0,0892	0,0056
293,15	-2,1774	-1,1971	1,0000	-0,9108	-0,0892	0,0050
298,15	-1,9828	-1,1300	1,0000	-0,9108	-0,0892	0,0044
303,15	-1,8092	-1,0629	1,0000	-0,9108	-0,0892	0,0038
308,15	-1,6561	-0,9831	1,0000	-0,9108	-0,0892	0,0032

Fonte: Autor.

Tabela D25 - Derivadas parciais da viscosidade em relação à composição, viscosidade e temperatura para o sistema {diethyl malonato (1) + 1-propanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}$
	mPa·s	mPa·s	--	--	--	mPa·s·K ⁻¹
$x_1 = 0,1$						
288,15	-2,3811	-2,4939	1,0000	-0,1019	-0,8981	0,0245
293,15	-2,1774	-2,1923	1,0000	-0,1019	-0,8981	0,0205
298,15	-1,9828	-1,9291	1,0000	-0,1019	-0,8981	0,0165
303,15	-1,8092	-1,7123	1,0000	-0,1019	-0,8981	0,0125
308,15	-1,6561	-1,5243	1,0000	-0,1019	-0,8981	0,0085
$x_1 = 0,5$						
288,15	-2,3811	-2,4939	1,0000	-0,5043	-0,4957	-0,0072
293,15	-2,1774	-2,1923	1,0000	-0,5043	-0,4957	-0,0102
298,15	-1,9828	-1,9291	1,0000	-0,5043	-0,4957	-0,0132
303,15	-1,8092	-1,7123	1,0000	-0,5043	-0,4957	-0,0162
308,15	-0,9274	0,0000	1,0000	-0,5043	-0,4957	-0,0192
$x_1 = 0,9$						
288,15	-2,3811	-2,4939	1,0000	-0,8971	-0,1029	-0,0013
293,15	-2,1774	-2,1923	1,0000	-0,8971	-0,1029	-0,0008
298,15	-1,9828	-1,9291	1,0000	-0,8971	-0,1029	-0,0003
303,15	-1,8092	-1,7123	1,0000	-0,8971	-0,1029	0,0002
308,15	-1,1414	0,0000	1,0000	-0,8971	-0,1029	0,0007

Fonte: Autor.

Tabela D26 - Derivadas parciais da viscosidade em relação à composição, viscosidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-butanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}$
	mPa·s	mPa·s	--	--	--	mPa·s·K ⁻¹
$x_1 = 0,1$						
288,15	-2,3811	-3,3575	1,0000	-0,1012	-0,8988	0,0464
293,15	-2,1774	-2,9566	1,0000	-0,1012	-0,8988	0,0434
298,15	-1,9828	-2,5942	1,0000	-0,1012	-0,8988	0,0404
303,15	-1,8092	-2,2811	1,0000	-0,1012	-0,8988	0,0374
308,15	-1,6561	-2,0104	1,0000	-0,1012	-0,8988	0,0344
$x_1 = 0,5$						
288,15	-2,3811	-3,3575	1,0000	-0,5021	-0,4979	0,0153
293,15	-2,1774	-2,9566	1,0000	-0,5021	-0,4979	0,0123
298,15	-1,9828	-2,5942	1,0000	-0,5021	-0,4979	0,0093
303,15	-1,8092	-2,2811	1,0000	-0,5021	-0,4979	0,0063
308,15	-1,6561	-2,0104	1,0000	-0,5021	-0,4979	0,0033
$x_1 = 0,9$						
288,15	-2,3811	-3,3575	1,0000	-0,9199	-0,0801	0,0124
293,15	-2,1774	-2,9566	1,0000	-0,9199	-0,0801	0,0114
298,15	-1,9828	-2,5942	1,0000	-0,9199	-0,0801	0,0104
303,15	-1,8092	-2,2811	1,0000	-0,9199	-0,0801	0,0094
308,15	-1,6561	-2,0104	1,0000	-0,9199	-0,0801	0,0084

Fonte: Autor.

Tabela D27 - Derivadas parciais da viscosidade em relação à composição, viscosidade e temperatura para o sistema {dietil malonato (1) + 1-pentanol (2)} para diferentes composições e temperaturas.

T / K	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial x_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_1}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial \eta_2}$	$\frac{\partial(\Delta\eta)}{\partial T}$
	mPa·s	mPa·s	--	--	--	mPa·s·K ⁻¹
$x_1 = 0,1$						
288,15	-2,3811	-4,6174	1,0000	-0,1028	-0,8972	0,0278
293,15	-2,1774	-4,0590	1,0000	-0,1028	-0,8972	0,0278
298,15	-1,9828	-3,5140	1,0000	-0,1028	-0,8972	0,0278
303,15	-1,8092	-3,0579	1,0000	-0,1028	-0,8972	0,0278
308,15	-1,6561	-2,6682	1,0000	-0,1028	-0,8972	0,0278
$x_1 = 0,5$						
288,15	-2,3811	-4,6174	1,0000	-0,5044	-0,4956	0,0316
293,15	-2,1774	-4,0590	1,0000	-0,5044	-0,4956	0,0316
298,15	-1,9828	-3,5140	1,0000	-0,5044	-0,4956	0,0316
303,15	-1,8092	-3,0579	1,0000	-0,5044	-0,4956	0,0316
308,15	-1,6561	-2,6682	1,0000	-0,5044	-0,4956	0,0316
$x_1 = 0,9$						
288,15	-2,3811	-4,6174	1,0000	-0,9024	-0,0976	0,0081
293,15	-2,1774	-4,0590	1,0000	-0,9024	-0,0976	0,0081
298,15	-1,9828	-3,5140	1,0000	-0,9024	-0,0976	0,0081
303,15	-1,8092	-3,0579	1,0000	-0,9024	-0,0976	0,0081
308,15	-1,6561	-2,6682	1,0000	-0,9024	-0,0976	0,0081

Fonte: Autor.

Tabela D28 - Incertezas do desvio da viscosidade para diferentes composições e temperaturas.

Sistemas	T / K				
	288,15	293,15	298,15	303,15	308,15
$x_1 = 0,1$					
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00014$	$\pm 0,00012$	$\pm 0,00011$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00008$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00024$	$\pm 0,00023$	$\pm 0,00021$	$\pm 0,00020$	$\pm 0,00018$
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00015$				
$x_1 = 0,5$					
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00011$	$\pm 0,00011$	$\pm 0,00011$	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00010$
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00011$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00006$
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00017$				
$x_1 = 0,9$					
DEM (1) + etanol (2)	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$
DEM (1) + 1-propanol (2)	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$\pm 0,00007$	$0,00007$
DEM (1) + 1-butanol (2)	$\pm 0,00010$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00009$	$\pm 0,00008$	$0,00008$
DEM (1) + 1-pentanol (2)	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$\pm 0,00008$	$0,00008$

Fonte: Autor.