



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

CÁLCULO EN AMPLIOS RANGOS DE PRESIÓN DE LÍNEAS DE EQUILIBRIO TRIFÁSICO BINARIO CONSIDERANDO FASES FLUIDAS Y SOLUCIONES SÓLIDAS

Porras Giraldo Andrés F., Rodríguez-Reartes S. Belén, Zabaloy Marcelo S.

Dpto. de Ing. Química UNS - PLAPIQUI (UNS-CONICET)

Camino La Carrindanga, Km 7, (8000) Bahía Blanca, Argentina - mzabaloy@plapiqui.edu.ar

Introducción

Los algoritmos de cálculo de líneas de equilibrio trifásico binario, considerando amplios rangos de condiciones y la presencia de fases sólidas constituidas por compuestos puros, son complejos¹. El advenimiento de modelos para la descripción de soluciones sólidas² requiere disponer de algoritmos aún más sofisticados, que consideren a las fases sólidas no como compuestos puros sino como mezclas, lo cual es más realista. En consecuencia, el propósito del presente trabajo es la extensión de los algoritmos de la referencia¹ al caso en que las fases sólidas son soluciones sólidas. Una vez obtenido un primer punto convergido de una dada línea trifásica, se aplica un método de continuación numérica que tiene en cuenta en forma automatizada las no linealidades de la curva a calcular. En este trabajo se presentan estrategias para la obtención del primer punto convergido de distintos tipos de líneas trifásicas, y se aplican tests de estabilidad termodinámica para detectar los equilibrios verdaderos (no metaestables).

Resultados y Conclusiones

La Fig. 1 ilustra los complejos resultados obtenidos de la aplicación de los algoritmos de cálculo propuestos. El sistema es dióxido de carbono + n-tridecano. Las fases fluidas fueron modeladas con la ecuación de estado RK PR-EoS con reglas cúbicas de mezclado y parámetros tomados de la ref³. Para el líquido hipotético², que es referencia para el cálculo de las propiedades de las fases sólidas, se utilizaron

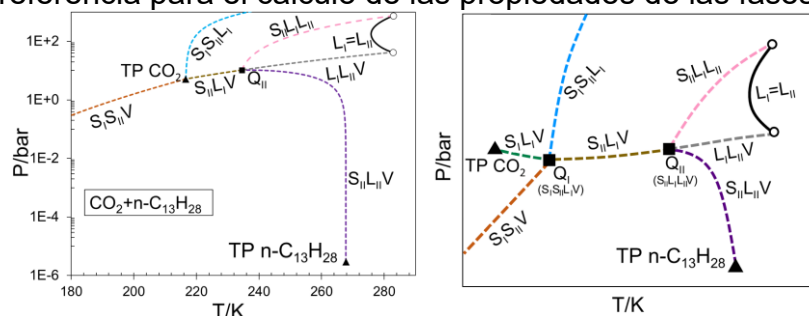


Figura 1. Izq.: Equilibrios trifásicos (líneas de guiones) computados para el sistema $\text{CO}_2(1) + n\text{-C}_{13}\text{H}_{28}(2)$. Der.: Gráfico cualitativo. TP=pto. triple (comp. puro, \blacktriangle). Q=pto. cuádruple (\blacksquare). círculo=pto. crit. terminal. V=vapor. L=líquido. S=sólido. $L_I=L_{II}$: Línea (fluida) crítica. L_I y L_{II} (S_I y S_{II}) son fases líquidas (sólidas) de distinta composición.

los mismos valores de parámetros que para las fases fluidas. Se concluye que los algoritmos propuestos son robustos y confiables.

Referencias

- 1) S.B. Rodríguez-Reartes et al., *J. Supercrit. Fluids*, **2011**, 57, 9–24.
- 2) A.F. Porras Giraldo et al. *T280. CBTermo*, 3-8/11/2019, Nova Friburgo, RJ, Brasil.
- 3) Cismondi M.; et al. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2012**, 51, 6232–6250