UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA
XXII CAFQI VIRTUAL
aaiFQ ASOCIACION ARGENTINA DE INVESTIGACION FISICOQUIMICA
XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
LA PLATA 2021

DESCRIPCIÓN DEL EQUILIBRIO ENTRE FASES FLUIDAS DE SISTEMAS AGUA + N-ALCANO

Escobar García David J., Rodriguez-Reartes S. Belén, Díaz M. S., 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

La descripción, a través de modelos, del equilibrio entre fases fluidas de sistemas agua + n-alcano en rangos suficientemente amplios de condiciones, es difícil debido a la gran asimetría del sistema (muy bajas solubilidades mutuas). Se ha recurrido para ello a ecuaciones de estado (EDEs) cúbicas en el volumen molar (**v**) (EDEs de la familia de van der Waals), acopladas a reglas de mezclado flexibles, aunque inconsistentes[1,2]. Utilizar EDEs que no son cúbicas en **v** no es deseable debido a otras potenciales inconsistencias, como la multiplicidad de loops de Maxwell a una dada temperatura[3]. El propósito del presente trabajo es capturar el comportamiento experimental de estos sistemas binarios sin abandonar la simplicidad relativa de las EDEs cúbicas en **v**. Para ello se propone recurrir a reglas de mezclado cúbicas (RMCs=CMRs) con respecto a la fracción molar[4], las cuales son consistentes[2] y suficientemente flexibles como para capturar el comportamiento de sistemas altamente asimétricos[4].

Resultados y Conclusiones

La EDE cúbica seleccionada es la RK-PR[4]. Se utilizaron RMCs tanto para el parámetro atractivo como para el repulsivo. En el primer caso se permitió que los parámetros de interacción dependan de la temperatura. El ajuste se realizó con base en el criterio de iso-fugacidad. La Fig. 1 ilustra los resultados obtenidos. El sistema es propano + agua, el cual presenta azeotropía heterogénea. Se concluye que una EDE cúbica en **v**, como la RK-PR, es capaz de representar muy bien el comportamiento de fases fluidas de sistemas agua + n-alcano, si se la combina con RMCs.

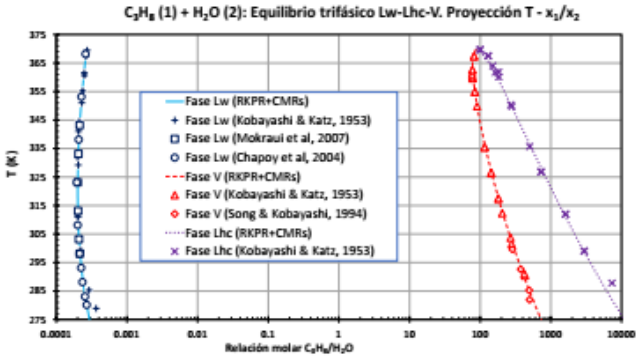

Figura 1. Sistema: propano(1) + agua(2). Equilibrio líquido-líquido-vapor. Proyección: temperatura-composición. Lw=fase líquida acuosa. V=fase vapor. Lhc: fase líquida orgánica. Marcadores: datos experimentales. Líneas de puntos (...), guiones (---), o sólida (-): modelo RK-PR+RMCs

Referencias

1) A. Chapoy et al., *Fluid Phase Equilibria*, 226, **2004**, 213-220
2) M.S. Zabaloy, J.H. Vera, *Fluid Phase Equilibria*, 119, 1–2, **1996**, 27-49
3) R. Span, Multiparameter Equations of State. *Springer*. Berlín, **2000**
4) Cismondi M. et al., *Ind. Eng. Chem. Res.* **2012**, 51, 6232−6250