

Título de la Tesis: "Diseño molecular de solventes en procesos de separación"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Araya López, Patricio

Director: Dr. Esteban Brígnole

Resumen

La mayoría de los procesos de separación industriales están gobernados por las diferencias de composición entre dos fases en equilibrio. En algunos procesos, tales como extracción líquida y absorción, la segunda fase se obtiene con la adición de un agente de separación material o solvente. En otros procesos, tales como en las destilaciones azeotrópica y extractiva, el agregado de un solvente tiene por efecto aumentar el factor de separación del proceso de destilación.

A pesar de los continuos avances en procedimientos computacionales y en el conocimiento del equilibrio entre fases, la selección del solvente o mezcla de solventes adecuados para un dado problema de separación, sigue aún basándose en criterios de tipo heurístico.

El objetivo de este trabajo de tesis es el de desarrollar una estrategia sistemática para la síntesis, evaluación y selección de estructuras moleculares que cumplan con determinadas propiedades solventes.

La estrategia de síntesis hará uso del concepto de solución de grupos, tal como se emplea en el modelo UNIFAC de predicción de coeficientes de actividad en fase líquida por contribución grupal. Los grupos UNIFAC constituyen las unidades para la

Título de la Tesis: "Diseño molecular de solventes en procesos de separación"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Araya López, Patricio

Director: Dr. Esteban Brígnole

generación de estructuras moleculares cuya potencialidad solvente (selectividad, poder solvente, etc.) se evalúa a través del modelo termodinámico UNIFAC.

La formulación propuesta tiene la ventaja de no limitar la selección del/los solventes adecuados a un conjunto reducido de solventes, sino por el contrario evalúa una gran variedad de estructuras moleculares surgidas de la combinación de los grupos seleccionados.

La selección de solventes a través de la estrategia propuesta, involucra las siguientes etapas:

1. Selección de grupos
2. Caracterización de los mismos en función de las propiedades de enlace
3. Partición del problema combinatorio
4. Generación combinatoria de estructuras
5. Verificación de la factibilidad de las estructuras generadas
6. Evaluación de las propiedades solventes.

Esta metodología se instrumenta en una rutina de cómputo para la síntesis, evaluación y selección de solventes y los resultados se verifican frente a problemas de separación industrial.