

Título de la Tesis: "Estudio del equilibrio líquido-vapor en mezclas de éteres aromáticos con solventes orgánicos"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Yañez Torres, María Angélica

Director: Dra. Susana Bottini

Resumen

Los éteres aromáticos de fórmula general $Ar-O-R$ (donde R es un grupo alquilo y Ar es un grupo fenilo), presentan algunas propiedades atractivas tales como una alta estabilidad térmica, baja volatilidad y cierto grado de polaridad, que los constituyen en solventes potenciales para procesos de destilación extractiva o azeotrópica. Para poder evaluar su capacidad solvente se requiere información sobre el equilibrio líquido-vapor de sus mezclas con otros compuestos. Esta se puede obtener a través de modelos teóricos de base molecular o grupal, o de determinaciones experimentales.

Hasta el presente es muy poca la información del equilibrio líquido-vapor que ha sido presentada en la literatura para los éteres aromáticos.

Por otra parte el cálculo del equilibrio líquido-vapor a través de un modelo predictivo de contribución de grupos, tal como el UNIFAC, da pobres predicciones para algunos sistemas con éteres aromáticos, tales como sus mezclas con parafinas, olefinas, metanol e hidrocarburos clorados.

Considerando estos antecedentes, se ha orientado esta tesis al estudio del equilibrio líquido-vapor de mezclas de éteres aromáticos con solventes orgánicos, con el objetivo de ampliar el conocimiento acerca del comportamiento de este tipo de soluciones.

En este trabajo se eligió al anisol (metil-fenil-éter) como representativo de los éteres aromáticos.

Título de la Tesis: "Estudio del equilibrio líquido-vapor en mezclas de éteres aromáticos con solventes orgánicos"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Yañez Torres, María Angélica

Director: Dra. Susana Bottini

Esta tesis aporta información experimental sobre siete isoterms, medidas para los sistemas binarios (n-hexano, n-propanol, n-butanol y metil etil cetona + anisol), en un rango de temperaturas entre 333-368(K) y presiones de 100-1000 (mbar). Además se informan tres isobaras para el sistema ternario (metil-etil-cetona+n-butanol+anisol). Estas se midieron a las presiones de 300, 600 y 900 (mbar), cubriendo un rango de temperaturas entre 319-387 (K).

A fin de mejorar las predicciones del modelo UNIFAC, en este trabajo se propone adicionar un nuevo grupo funcional éter a las tablas de parámetros de UNIFAC, característico de los éteres aromáticos. El nuevo grupo ha sido definido como ACOCH₂, el cual contempla como subgrupos a los siguientes: ACOC, ACOCH y ACOCH₃. Se han determinado los parámetros de interacción energética del nuevo grupo con los grupos: 'ACH', 'CH₂', 'C=C', 'OH', 'CH₃OH', 'CH₂CO', 'CCl', 'ClCC', 'ACCH₂', y 'CH₂O'.

El desempeño de otros cuatro modelos para coeficientes de actividad: Wilson, NRTL, UNIQUAC y Wang y Chao, fue además evaluado con los datos medidos.

Para la obtención de los parámetros de interacción binaria de todos estos modelos se empleó el principio de máxima verosimilitud, según el procedimiento sugerido por Skjold-Jorgensen.

Se verificó la capacidad predictiva de estos modelos en base a la correlación de los datos del sistema ternario (metil-etil-cetona+n-butanol+anisol), obteniéndose un acuerdo similar con todos ellos.