

**Título de la Tesis: “Estrategia de parametrización del modelo A-UNIFAC”**

**Magister en Ingeniería Química**

**Autor: Garriga, Marisa Bettina**

**Directores: Dra. Susana Bottini - Dra. Alicia Marchiaro**

## **Resumen**

La transformación de la biomasa en biocombustibles y compuestos químicos diversos implica el procesamiento de mezclas multicomponentes no-ideales, conteniendo derivados orgánicos oxigenados con capacidad de formar complejos de asociación y solvatación.

En este trabajo de tesis se utiliza el modelo A-UNIFAC para correlacionar y predecir las condiciones de equilibrio entre fases en mezclas conteniendo agua y tres familias de compuestos orgánicos típicos del procesamiento de la biomasa: alcanos, alcoholes y ácidos carboxílicos.

El Capítulo 1 de la tesis describe someramente la familia de productos derivados de la biomasa y resume los objetivos y alcances del trabajo desarrollado.

El Capítulo 2 analiza las teorías aplicadas en la descripción de los fenómenos de asociación y solvatación molecular.

En el Capítulo 3 se discuten las distintas contribuciones a la no-idealidad cuantificadas en el modelo A-UNIFAC.

El proceso de parametrización se presenta en el Capítulo 4 donde se obtienen los distintos parámetros para mezclas de compuestos de alcanos, alcoholes, ácidos carboxílicos y agua.

A partir de estos parámetros se predijeron las condiciones de equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido en sistemas binarios y ternarios y sólido-líquido en sistemas binarios. Los resultados se muestran en el Capítulo 5.

Finalmente, en el Capítulo 6 se presenta las conclusiones más importantes y una propuesta de continuación del trabajo.

**Título de la Tesis: “Estrategia de parametrización del modelo A-UNIFAC”**

**Magister en Ingeniería Química**

**Autor: Garriga, Marisa Bettina**

**Directores: Dra. Susana Bottini - Dra. Alicia Marchiaro**

### **Abstract**

The transformation of biomass in biofuels and a variety of chemical compounds, implies processing multicomponent non-ideal mixtures containing oxygenated organic derivatives which can self-associate and/or solvate with other compounds.

In this Thesis the A-UNIFAC model is used to correlate and predict phase equilibrium conditions of mixtures containing water and three families of organic compounds, typical of biomass processing: alkanes, alcohols and carboxylic acids.

Chapter 1 describes briefly the family of biomass derived products and summarizes the objectives and scope of this Thesis.

Chapter 2 analyses the theories applied in the description of association and solvation effects.

Chapter 3 discusses the different contributions to non-ideality quantified by the A-UNIFAC model.

The parameterization process is presented in Chapter 4, where the different parameters for mixtures of alkanes, alcohols, carboxylic acids and water are obtained.

From these parameters, vapor-liquid, liquid-liquid in binary and ternary systems and solid-liquid in binary systems equilibrium conditions are predicted. The results are shown in Chapter 5.

Finally, Chapter 6 contains the most important conclusions and proposes future work.