

Predicción de Equilibrio Líquido-Líquido de Sistemas Binarios y Ternarios conteniendo Líquidos Iónicos usando el Método ASOG

Pedro A. Robles^a, Teófilo A. Graber^a, Martín Aznar^b

^aDepartamento de Ingeniería Química, Universidad de Antofagasta, Angamos 601, Casilla 170, Antofagasta, Chile, 96112865, parobles@uantof.cl

^bFaculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Cx. Postal 6066, Campinas-SP, 13083-970, Brasil.

Resumen

Los líquidos iónicos son sales líquidas a temperatura ambiente que presentan presión de vapor despreciable, lo cual los ubica en un sitio preferencial como solventes verdes, en cuanto a la polución del aire se refiere. Están formados por cationes orgánicos grandes y aniones inorgánicos relativamente pequeños. Tienen características físicas favorables, tales como volatilidad insignificante y amplio rango de existencia líquida. Por otra parte, se pueden utilizar numerosos cationes y aniones en su síntesis, con lo que se pueden obtener líquidos iónicos con características especiales para aplicaciones específicas [1-5].

Una de las aplicaciones más interesantes de los líquidos iónicos es su uso como solvente extractivo para la separación de compuestos de soluciones inmiscibles. En estos procesos, el análisis de la composición de las dos fases en equilibrio suministra una considerable información para cálculos del equilibrio, fenómenos de transferencia de materia, optimización y diseño de los procesos de la separación. En este contexto, datos del equilibrio líquido-líquido son esenciales para el diseño y operación de estos procesos. Por ello, parte de las investigaciones en líquidos iónicos se ha centrado en generar nuevos datos de equilibrio.

El objetivo de este trabajo es modelar datos de equilibrio líquido-líquido existentes en la literatura para diferentes sistemas con líquidos iónicos, usando el método de contribución de grupos ASOG [6]. Para ello se trabajó con sistemas binarios y ternarios formados por líquidos iónicos con alcanos, alcoholes, cetonas, éteres, ésteres y compuestos aromáticos. Los parámetros de los pares de grupo CH₂/CO₃, CH₂/SO₄, CH₂/OMs, CH₂/TfO, CH₂/MDEG, OH/Imid, OH/Cl, OH/SO₄, OH/OMs, OH/TfO, CO/SO₄, COO/SO₄, CO₃/Imid, CO₃/SO₄, O/Imid, O/OMs, O/TfO, ArCH/I, ArCH/SO₄, ArCH/MDEG, Imid/Cl, Imid/I, Imid/SO₄, Imid/OMs, Imid/TfO, Imid/MDEG y SO₄/MDEG se determinaron usando datos de 7 sistemas binarios y 18 sistemas ternarios a 101.3 kPa y a diferentes temperaturas.

Para determinar los parámetros de interacción, el procedimiento se basa en el método Simplex [7], y consiste en la minimización de una función objetivo basada en la concentración [8].

Los resultados, obtenidos en términos de desviación media entre las composiciones experimentales y calculadas, son satisfactorios.

Palabras claves: predicción, equilibrio líquido-líquido, líquidos iónicos, ASOG

Nomenclatura

CO₃ : carbonato
SO₄ : sulfato
TfO : trifluorometanosulfonato
MDEG : dietilenglicol monometil éter
Imid : imidazolio
OMs : metanosulfonato

Referencias

- [1] M. Aznar, Braz. J. Chem. Eng. 24 (2007) 143-149.
- [2] R. M. Maduro, M. Aznar, Fluid Phase Equilib. 265 (2008) 129-138.
- [3] J. O. Valderrama, P. A. Robles, Ind. Eng. Chem. Res. 46 (2007) 1338-1344.
- [4] A. Arce, O. Rodríguez, A. Soto, J. Chem. Eng. Data 49 (2004) 514-517.

- [5] J. Lachwa, P. Morgado, J. M. Esperança, H. J. Guedes, J. N. Canongia Lopes, L. P. Rebelo, *J. Chem. Eng. Data* 51 (2006) 2215-2221.
- [6] K. Kojima, K. Tochigi, *Prediction of Vapor-liquid Equilibria by the ASOG Method*, Elsevier, Tokyo, 1979.
- [7] J. A. Nelder, R. Mead, *Computer J.* 7 (1965) 308-313.
- [8] J. M. Sørensen, T. Magnussen, P. Rasmussen, Aa. Fredenslund, *Fluid Phase Equilib.* 3 (1979) 47-82.