

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO
FACULTAD DE INGENIERÍA DE PROCESOS
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“EVALUACION DEL EQUILIBRIO LIQUIDO VAPOR DEL SISTEMA BINARIO
LINALOL-HEXANOL”**

Tesis para optar al Título Profesional de Ingeniero Químico

Presentado por:

Br. PINTO HUANACO David Alex

Asesor: Dr. BUENO LAZO Antonio.

Co-Asesora: Dra. JARA MORANTE Eliana.

Cusco. 2021

RESUMEN

El Objetivo de la presente investigación fue de evaluar el equilibrio líquido vapor del sistema binario hexanol (1) – linalol (2) a presión constante de 15.73 kPa. Para ello se desarrollaron 13 pruebas de equilibrio líquido vapor isobárico del sistema binario hexanol (1) – linalol (2), utilizando diferentes mezclas de ambos componentes. Con los datos obtenidos se realizaron gráficos de equilibrio T-X-Y y X-Y. Los datos obtenidos se analizaron para verificar su consistencia termodinámica utilizando el test de consistencia termodinámica Wisniak-Tamir.

Mediante el uso de la herramienta Solver, se determinó los valores de los parámetros de interacción binaria A_{12} y A_{21} para los modelos de Van Laar (-0.5811, -1.1307) Margules (-0.4241; -1.0480) y los parámetros de interacción binaria B_{12} , B_{21} con $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ para los modelos de Wilson [-1768.3667 , -60.0636], NRTL con $\alpha_{12} = 0.47$, [4942.9848 , -4476.6208] y finalmente UNIQUAC [3155.9788 , -2475.4350] con unidades de J.mol^{-1} en los tres casos.

Seguidamente los datos de equilibrio se ajustaron a los modelos termodinámicos de Van Laar, Margules, Wilson, NRTL y UNIQUAC usando el test de Fredenslund, seleccionándose los modelos que cumplen con los test de consistencia termodinámica: Directo de Van Ness, y Punto-Punto de Van Ness modificado por Fredenslund. Los resultados indican que los datos de ELV para el sistema hexanol (1) – linalol (2) son consistentes termodinámicamente.

Para el modelo de Van Laar y Margules los coeficientes A_{12} y A_{21} son negativos, lo que indica que el sistema hexanol (1) – linalol (2) presenta desviaciones negativas de la Ley de Raoult. Para el caso del modelo de Wilson los parámetros de interacción binaria B_{12} y B_{21} también son negativos, lo que sugiere que hay mayor energía entre moléculas del mismo tipo que entre moléculas distintas, condición que coincide para un sistema que presenta desviación positiva de la Ley de Raoult. En el caso de los modelos NRTL y UNIQUAC los parámetros de interacción binaria muestran que la energía de interacción entre moléculas de linalol es más débil que la energía de interacción entre las moléculas de hexanol y hexanol-linalol, sin embargo la energía de interacción entre moléculas hexanol-linalol es más débil que entre moléculas de hexanol.

Del ajuste de los datos experimentales resultó que todos los modelos evaluados cumplieron con los test de consistencia termodinámica de Punto-Punto de Van Ness modificado por Fredenslund al presentar $\text{AMD-yi} < 0.01$ y Directo de Van Ness al tener un índice de consistencia de 10; Por tanto los modelos: Van Laar, Margules, Wilson, NRTL y UNIQUAC representan satisfactoriamente el sistema de ELV del sistema binario hexanol (1) – linalol (2),

sin embargo los modelos con mejores resultados al momento de predecir el comportamiento del sistema en ELV fueron Van Laar y Wilson.

Palabras clave

Equilibrio liquido vapor, modelos termodinámicos, linalol, hexanol, consistencia termodinámica, Solver.