



ID de la contribución : 344

Tipo : Oral parallel contribution

Determinación de las propiedades interfaciales líquido-líquido de una mezcla de agua + alcoholes mediante simulación computacional

lunes, 17 de julio de 2017 15:30 (15)

El conocimiento preciso de las propiedades interfaciales líquido-líquido de una mezcla acuosa de alcoholes es clave en los de la química, petroquímica e ingeniería ambiental. Las operaciones unitarias de transferencia de masa interfacial como la extracción de líquido o las reacciones químicas interfaciales en ingeniería química, la humectabilidad o la presión capilar en ingeniería petroquímica, o la eliminación de contaminantes en acuíferos y la remediación de las aguas subterráneas en ingeniería ambiental, son sólo unos pocos ejemplos de la importancia y la amplitud de aplicaciones para los cuales el conocimiento de las propiedades interfaciales líquido-líquido juegan un papel fundamental.

En este trabajo, se ha empleado la simulación mediante dinámica molecular para predecir las propiedades interfaciales de agua + alcoholes primarios que exhiben un comportamiento con fase inmiscible líquido-líquido. El agua ha sido modelada usando el conocido modelo de agua TIP4P/2005 y los alcoholes (desde el 1-butanol hasta el 1-octanol) han sido descritos usando el modelo TraPPE original. En particular, se ha considerado la dependencia de la temperatura en las propiedades interfaciales más importantes de las mezclas, incluyendo los perfiles de densidad, los diagramas de coexistencia de fases, el espesor interfacial y la tensión interfacial en función de la temperatura a una presión fijada.

En este trabajo nos hemos centrado particularmente en la predicción de la tensión interfacial conforme varía la temperatura. La tensión superficial aumenta con la temperatura y alcanza un valor máximo (relacionado con el máximo "tie line" en el equilibrio líquido-líquido). A mayores temperaturas, la tensión interfacial decrece con la temperatura. Además, la tensión superficial aumenta con el peso molecular de las cadenas. En este estudio las predicciones mediante simulación son comparadas con datos experimentales extraídos de la literatura.

Primary author(s) : Sr. AMADOR LUNA, David (Departamento de Ciencias Integradas, Universidad de Huelva)

Presenter(s) : Sr. AMADOR LUNA, David (Departamento de Ciencias Integradas, Universidad de Huelva)

Clasificación de la sesión : Thermodynamics

Clasificación de temáticas : Thermodynamics