

DETERMINACIÓN DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD EN MEZCLAS LÍQUIDAS A PARTIR DEL EXCESO DE ENERGÍA LIBRE DE GIBBS DE ACTIVACIÓN DE FLUJO VISCOZO

María del Carmen Grande¹, Facundo Nahuel García¹, Carmen Raquel Barrero¹, Jorge Álvarez Juliá² y Carlos Miguel Marschoff³

¹Departamento de Química, ²Departamento de Matemática, ³Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires. Avenida Paseo Colón 850, 1063, Buenos Aires, Argentina. E-mail: mgrande@fi.uba.ar

Introducción

Se correlaciona el exceso de energía libre de Gibbs de activación de flujo viscoso y los coeficientes de actividad teniendo en cuenta los trabajos de Cao et al. [1] quienes desarrollaron un nuevo modelo llamado de la "viscosidad termodinámica".

Metodología

Se puso a prueba este enfoque predictivo de los coeficientes de actividad de los componentes de una mezcla líquida con el método de cálculo a partir del exceso de energía libre de Gibbs calculada a partir de datos de presiones de vapor [2].

Conclusiones

Se obtienen buenos resultados en el intervalo en el que se acepta la aplicabilidad del método propuesto desde 25% de dilución molar hasta 100% puro. Se observa esto gráficamente en la Figura 1 para el sistema agua + acetonitrilo.

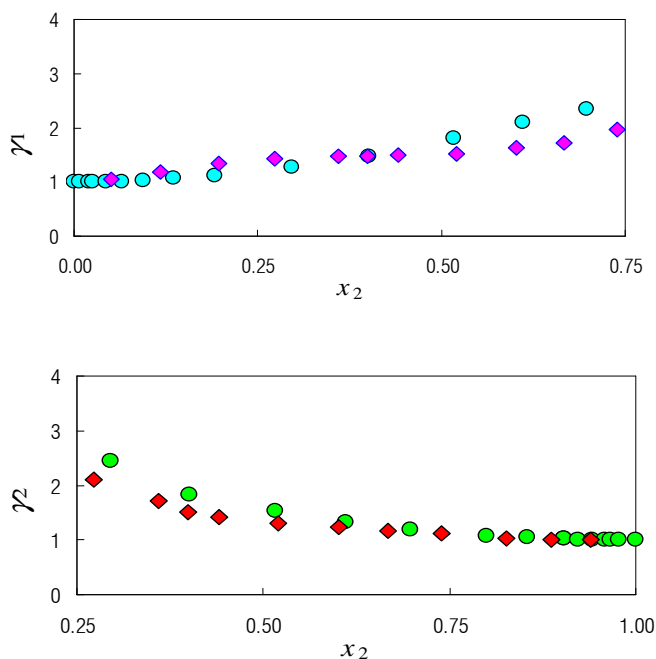


Figura 1. Coeficientes de actividad en la mezcla {agua(1) + AN(2)} a 298.15 K a partir de datos de: (\diamond), viscosidad y volumen molar; (\circ), presión de vapor [2].

Referencias

- [1] W. Cao, K. Knudsen, A. Fredensland, P. Rasmussen, "Simultaneous Correlation of Viscosity and Vapor-Liquid Equilibrium Data" *Ind & Eng. Chem. Res.* **32**, 2077 (1993)
- [2] H.T. French, "Vapour pressures and activity coefficients of (acetonitrile + water) at 308.15 K" *Journal of Chemical Thermodynamics* **19**, 1155 (1987)