

Sección 05) Química Industrial, Química Tecnológica y Ciencia de los Materiales

REVISIÓN DE LOS PRINCIPALES LOGROS Y PERSPECTIVAS FUTURAS DE LA TERMODINÁMICA QUÍMICA APLICADA A LA MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE PROCESOS

Fernando R. Bonaterra¹, Luis A. Toselli, Mónica Guerrero, Virginia Bragagnini

1: Grupo de Investigación en Simulación para Ingeniería Química-GISIQ –
UTN-Facultad Regional Villa María, Av. Universidad 450, X5900HLR, Villa María,
Córdoba, frb@frvm.utn.edu.ar <http://www.frvn.utn.edu.ar>

El objetivo de este trabajo es hacer una revisión sistemática de los últimos 20 años de la Termodinámica Química Aplicada a la Simulación de Procesos Químicos, haciendo una mención de los hitos correspondientes a los años anteriores en un contexto puramente histórico.

Un esquema gráfico mostrará en una única visión, los principales momentos de la Termodinámica Aplicada relacionadas con las Ecuaciones de Estado (EOS) derivadas de la Ecuación de van der Waals (vdW EOS), las EOS empíricas, las aplicables a polímeros y las de origen puramente teóricas.

Se analizarán los métodos de estimación de propiedades desde los modelos ASOG y UNIFAC hasta COSMO-RS.

Se mostrará la evolución de los modelos de actividad de fases líquidas, desde Margules hasta UNIQUAC, como así también las modificaciones realizadas para describir electrolitos.

Se hace un análisis de las áreas actuales de vacancia en esta disciplina y aquellas cuestiones que presentan serias debilidades en especial en el área de los bioprocesos y la biotecnología.

Los polímeros es otra gran área que necesita una mayor atención en cuanto a las propiedades de microestructuras de los copolímeros en bloque, los copolímeros alternantes, la cristalinidad, el efecto de las ramificaciones, como así también la distribución de composiciones de los copolímeros.

Por último y a título de análisis de un proceso complejo y factible de ser modelado termodinámicamente se encuentran las células, que son una sofisticada instalación de producción, en la que hay numerosos productos químicos tales como glucosa, ácidos grasos, glicerol lactato, ATP, fosfolípidos, bicapas de fosfolípidos, proteínas, genes, mRNA, tRNA, rRNA, y otros, además de una multiplicidad de vías de reacción en varias unidades subcelulares que interactúan sincrónicamente.

Palabras Claves: Termodinámica Aplicada, simulación de procesos, ecuaciones de estado.