



**UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA**



**SIMULACIÓN MACROESCALA DE PROCESOS DE ABSORCIÓN DE GASES
FLUORADOS UTILIZANDO LÍQUIDOS IÓNICOS**

POR

María Fernanda Recabal Recabal

Memoria de título presentada a la Facultad de Ingeniería de la Universidad de
Concepción para optar al título profesional de Ingeniera Civil Química

Profesor Guía
José Matías Garrido

Profesional Supervisor
Bastían González-Barramuño

Profesor Supervisor
Fernando Márquez

Marzo 2023
Concepción (Chile)

© 2023 María Fernanda Recabal Recabal

© 2023 María Fernanda Recabal Recabal

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento.

Resumen

El impacto de los gases fluorados en el calentamiento global ha creado la necesidad de diseñar procesos industriales y químicos capaces de mitigar el daño medioambiental que generan. La utilización de líquidos iónicos en la industria química ha resultado ser una de las soluciones más atractivas a este problema, debido a sus buenas propiedades químicas como solventes en procesos de separación. El objetivo de este trabajo es simular los procesos de absorción y desorción de gases fluorados mediante un modelo molecular implementado en simulador de macroescala como Aspen Plus. Los gases que se quieren absorber corresponden a 1,1,1,2-Tetrafluoroetano "R – 134a" y difluorometano "R – 32" para los cuales se utilizan como solvente 6 líquidos iónicos fluorados distintos. Los resultados establecieron que el líquido iónico fluorado con mejor comportamiento para la absorción de la mezcla R-134a y R-32 es $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ a un condición de operación óptima correspondiente a 10 bar y L/G=6 para la columna de absorción y una presión de 0,1 bar en la columna de desorción, obteniendo resultados de recuperación del 98 % de HFC. Los resultados por componente demuestran una mayor absorción del refrigerante R-134a en comparación de R-32, lo cual concuerda con otros estudios que demuestran que 1,1,1,2-Tetrafluoroetano posee una mejor solubilidad con los líquidos iónicos. Además, se obtiene que a bajas presiones se recomienda utilizar el líquido $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ y a altas presiones $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$ para la absorción de R-134a, con porcentajes de recuperación cercanos a 27 % y 100 % respectivamente, mientras que para R-32 se recomienda la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ alcanzando un 97 % de recuperación, independiente de la presión de operación. Finalmente se realiza el mismo proceso para una mezcla de R-134a, R-32 y R-22, obteniendo similares conclusiones a las mencionadas anteriormente, demostrando una consistencia del comportamiento ante este proceso.

Abstract

The impact of fluorinated gases has created the need to design industrial and chemical process requirements capable of mitigate the environmental damage they generate. The use of ILs in chemical industry has turned out to be one of the most attractive solutions to this problem due to exceptional chemical properties as solvents in separation processes. The aim of this work is to simulate an absorption and desorption processes of fluorinated gases using COSMO model in Aspen Plus. Gases to be asorbed are 1,1,1,2-tetrafluoroethane "R – 134a" and difluoromethane "R – 32" for which 6 different fluorinated ionic liquids are used as solvents. Results indicated that the best performance for mixture R-134a and R-32 absorption are $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ at an optimum operating condition of 10 bar and L/G=6 for the absorption column and 0,1 bar in the stripping column, obtaining HFC 98 % recovery results. Components results show a higher absorption of the R-134a refrigerant than R-32, which is corroborated by other publications about a better solubility of 1,1,1,2-tetrafluoroethane at the FILs presence. Moreover, it is obtained that at low pressures it is recommended to use $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ and at high pressures $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$ for R-134a absorption, with recovery rates close to 27 % and 100 % respectively, meanwhile for R-32 it's recommended to use $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ reaching 97 % recovery, regardless of operating pressure. Finally, same process is carried out for a mixture of R-134a, R-32 and R-22, obtaining similar conclusions as mentioned above, demonstrating a consistency of behavior about this process.

Agradecimientos

A mis padres, por haberme acompañado incondicionalmente en todas las decisiones que he tomado. A mi padre, por enseñarme a superar mis límites y mostrarme más allá de lo teórico lo bonito que puede ser la ingeniería, gracias por mostrarme el camino que escogí y que tanto me hace feliz. A mi madre, mi compañera incondicional que me enseñó desde pequeña a confiar en mí misma y a empoderarme para lograr todos mis sueños.

Gracias a todas las personas que me ayudaron a sacar adelante esta memoria. A mis amigos por amenizar los momentos con infinitas risas, y a mi profesor guía por la enorme ayuda y disposición en cada una de mis preguntas.

Índice general

Índice de Figuras	VI
Índice de Tablas	X
Lista de Abreviaciones	XII
1. Introducción	1
1.1. Objetivos	3
2. Marco Teórico	5
2.1. Líquidos iónicos (ILs)	5
2.2. Modelos COSMO	7
2.3. Simulación de procesos Aspen Plus	12
2.4. Equipos de absorción y desorción	13
3. Metodología	15
3.1. Elección paquete termodinámico e ingreso de componentes	17
3.2. Diseño de simulación	17
3.2.1. Columna de absorción	18
3.2.2. Columna de desorción	18
3.3. Bomba e Intercambiador de calor	19
3.4. Corrientes de entrada absorbedor	20
4. Resultados y Discusión	21
4.1. Resultados caso base de operación	21
4.2. Análisis de sensibilidad	22
4.2.1. Variación de la presión en columna de absorción	22
4.2.2. Variación de la proporción de alimentación de líquidos y gases hacia la columna de absorción	23
4.2.3. Variación de la presión de operación en la columna de desorción	30

4.3.	Análisis de resultados por componentes	31
4.3.1.	Análisis de absorción de R-134a y R-32 para el caso base L/G=5 . . .	31
4.3.2.	Análisis de absorción de R-134a y R-32 para el caso a condiciones óptimas L/G=6	33
4.4.	Resultados de absorción para mezcla R-134a, R-32 y R-22	37
4.5.	Análisis de resultados por componentes R-134a, R-32 y R-22	39
4.5.1.	Análisis de absorción de R-134a, R-32 y R-22 para el caso base L/G=5	39
4.5.2.	Análisis de absorción de R-134a, R-32 y R-22 para el caso a condicio- nes óptimas L/G=6	42
5.	Conclusiones	46
	Bibliografía	48
6.	Anexos	50
6.1.	Anexo A: Perfiles y propiedades moleculares de FILS en la metodología ASPEN/COSMO-SAC	50
6.2.	Anexo B: Resultados simulación mezcla R-134a y R-32	52
6.2.1.	Resultados caso base	52
6.2.2.	Resultados análisis de variación de presión en columna de absorción	52
6.2.3.	Resultados análisis de variación de L/G en columna de absorción . .	53
6.2.4.	Resultados análisis de variación de presión en columna de desorción	56
6.2.5.	Resultados de análisis por componentes de la mezcla R-134a y R-32 .	56
6.3.	Anexo C: Resultados simulación mezcla R-134a, R-32 y R-22	63
6.3.1.	Resultados de recuperación en función de L/G y presión en colum- na de absorción	63
6.3.2.	Resultados de análisis por componentes de la mezcla R-134a, R-32 y R-22	66

Índice de Figuras

1.1. Proyección de emisiones globales de gases fluorados hasta el 2050, según el tipo de gas fluorado y su procedencia industrial [7].	2
2.1. Distribución de la carga polarizada en la interfase soluto disolvente según el método COSMO [13].	8
2.2. Perfil sigma para el agua [13].	9
2.3. Estrategia de estudio de líquidos iónicos a nivel multiescala para la obtención de resultados en simulaciones de procesos químicos [24].	13
2.4. Columna de relleno con flujo contracorriente [25].	14
3.1. Simulación del proceso de absorción y recuperación de gases fluorados utilizando líquidos iónicos fluorados en Aspen Plus.	17
4.1. Porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, considerando una tasa L/G=5 y una presión de 5 bar en torre de absorción.	22
4.2. Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla de R-134a y R-32, considerando una tasa L/G=5 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	23
4.3. Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=2 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	25
4.4. Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=3 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	26
4.5. Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=4 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	27
4.6. Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	28

4.7. Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	29
4.8. Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	29
4.9. Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	30
4.10. Recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32 en función de la variación de presión en columna de desorción	31
4.11. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.	32
4.12. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.	32
4.13. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.	33
4.14. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.	34
4.15. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.	34
4.16. Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.	35
4.17. Comparación de recuperación de componentes R-134a y R-32 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de L/G=5 y una presión de 5 bar de operación en columna de absorción.	36
4.18. Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 1 bar en columna de absorción.	37
4.19. Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 5 bar en columna de absorción.	38
4.20. Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 10 bar en columna de absorción.	38
4.21. Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.	40
4.22. Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.	40

4.23. Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa $L/G=5$ a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.	41
4.24. Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa $L/G=6$ a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.	42
4.25. Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa $L/G=6$ a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.	43
4.26. Comparación de recuperación de componentes R-134a, R-32 y R-22 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de $L/G=6$ y una presión de 1 bar de operación en columna de absorción.	44
4.27. Comparación de recuperación de componentes R-134a, R-32 y R-22 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de $L/G=5$ y una presión de 5 bar de operación en columna de absorción.	45
6.1. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	60
6.2. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	60
6.3. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	61
6.4. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	61
6.5. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	62
6.6. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	62
6.7. Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	64
6.8. Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	65

6.9. Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	65
6.10. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	68
6.11. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	69
6.12. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	69
6.13. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	70
6.14. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	70
6.15. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	71
6.16. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.	71
6.17. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.	72
6.18. Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.	72

Índice de Tablas

1.1. Índices GWP de una serie de F-gases, basados en la información preparada para la Comisión Europea.	1
3.1. :Estructura y masa molecular de líquidos iónicos utilizados en este trabajo .	15
3.2. Estructura y masa molecular de líquidos iónicos fluorados utilizados en este trabajo.	16
3.3. Condiciones de operación y diseño de columna de absorción	18
3.4. Condiciones de operación y diseño de columna de desorción	19
3.5. Condiciones de operación y diseño de bomba e intercambiador de calor . .	19
3.6. Parámetros y condiciones de corrientes de entrada.	20
4.1. Casos para el análisis del cambio del flujo de alimentación y presión en la columna de absorción.	24
6.1. Propiedades y perfiles sigma (sv) de los diferentes líquidos iónicos fluorados.	51
6.2. Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 a condiciones de L/G=5 y 5 bar en columna de absorción.	52
6.3. Comparación de porcentaje de recuperación total de mezcla R-134a y R-32 considerando una tasa L/G=5 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.	53
6.4. Resultados de recuperación total de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=2 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.	54
6.5. Resultados de recuperación total de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=3 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.	54
6.6. Resultados de recuperación de flujos másicos de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=4 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.	55
6.7. Resultados de recuperación de flujos másicos de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=6 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.	55
6.8. Resultados de recuperación de flujos másicos de la mezcla R-134a y R-32 en función de la variación de presión en columna de desorción.	56

6.9. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 1 bar. 57

6.10. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 5 bar. 57

6.11. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 10 bar. 58

6.12. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 1 bar. 58

6.13. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 5 bar. 59

6.14. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 10 bar. 59

6.15. Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 1 bar en columna de absorción. 63

6.16. Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 5 bar en columna de absorción. 63

6.17. Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 10 bar en columna de absorción. 64

6.18. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 1 bar. . 66

6.19. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 5 bar. . 66

6.20. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 10 bar. 67

6.21. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=6 y una presión de 1 bar. . 67

6.22. Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=6 y una presión de 5 bar. . 68

Lista de Abreviaciones

GHG	Green House Gases (Gases de efecto invernadero)
GWP	Global Warming Potential (Potencial de calentamiento global)
HFC	HidroFluoroCarbono
PFC	PerFluoroCarbono
HFO	Hidrofluoroolefina
ILs	Ionic Liquids (Líquidos iónicos)
FILs	Fluorinated Ionic Liquids (Líquidos iónicos fluorados)
F-Gases	Fluorinated Gases (Gases fluorados)
UNIFAC	Uniquac de Functional-group Activity Coefficients
COSMO	Conductor Screening Model
R	Refrigerant (Refrigerante)
NBP	Normal Boiling Point (Punto de ebullición normal)
CSACVL	COSMO molecular Volume (Volumen molecular COSMO)

Lista de símbolos

m	metros
x	Fracción molar solutos
T	Temperatura [K]
P	Presión [bar]
D	Debyes o momento dipolar
MW	Masa molar [g/mol]
ρ	Densidad [g/cm ³]
R	Constante de los gases [J/(mol K)]
σ	Densidad de carga polarizada soluto
σ'	Densidad de carga polarizada disolvente
$\sigma - profiles$ o $p(\sigma)$	Perfiles sigma
Å	Ångström
e	Electrón
$P_S(\sigma)$	Perfil sigma mezclas
$P^{x_i}(\sigma)$	Perfil sigma componentes
E	Energía de interacción
a_{eff}	Área molecular efectiva
μ	Potencial químico
μ_S^X	Potencial químico de una molécula X en solvente S
$\mu_{C,S}^X$	Potencial de contribucion combinatoria de una molécula X en solvente S
μ_X^X	Potencial una molécula X en un estado puro de referencia

1. Introducción

Los desafíos medioambientales para mitigar el avance del calentamiento global han recaído en la importancia de disminuir la emanación de gases de efecto invernadero “GreenHouse Gases” (GHG). La emisión de dióxido de carbono (CO_2) ha sido uno de los principales focos de preocupación en este tema, concentrando la mayor cantidad de recursos para disminuir y restringir la cantidad de emisiones hacia la atmósfera [1]. No obstante, existen otros gases de efecto invernadero con mayor índice potencial de calentamiento global (o GWP, por sus siglas en inglés) los que corresponden, en particular, a los gases fluorados (F-gases)[2] . Aunque estos gases solo se encuentran en un 3 % de la totalidad de emisiones de GHG hacia el año 2020 [3], poseen indicadores de GWP de 140 a 23.000 veces más perjudiciales en comparación con el dióxido de carbono, tal como se muestra en la Tabla 1.1. El aumentado indicador GWP se debe a que estos gases poseen una mayor capacidad para captar calor en una determinada cantidad de masa, induciendo grandes efectos en la temperatura global del planeta [4].

TABLA 1.1: Índices GWP de una serie de F-gases, basados en la información preparada para la Comisión Europea.

	R134a	R404A	R407A	R407C	R407F
GWP	1.43	3.94	2.11	1.77	1.82
	R410A	R32	R417A	R422A	R422D
GWP	2.09	0.67	2.35	3.14	2.73
	R507	R508	R413A	R427A	R434A
GWP	4.00	13.16	2.05	2.14	3.25

Los gases fluorados están conformados por hidrofluorocarbonos (HFC), perfluorocarbonos (PFC) y hexafluoruro de azufre (SF_6), los cuales no poseen propiedades tóxicas e inflamables, y son utilizados para sustituir sustancias que dañan directamente a la capa de ozono [5]. La emisión y utilización de estos gases fluorados ha aumentado globalmente en un 60 % desde 1990 hasta 2020 [5, 6] y se proyecta, al año 2050, emisiones equivalentes a 4 Gton equivalentes de dióxido de carbono, debido a una mayor demanda en aplicaciones industriales como sistemas de refrigeración, aire acondicionado, bombas de calor y agentes sopladores de espuma, tal como se muestra en la Figura 1.1.

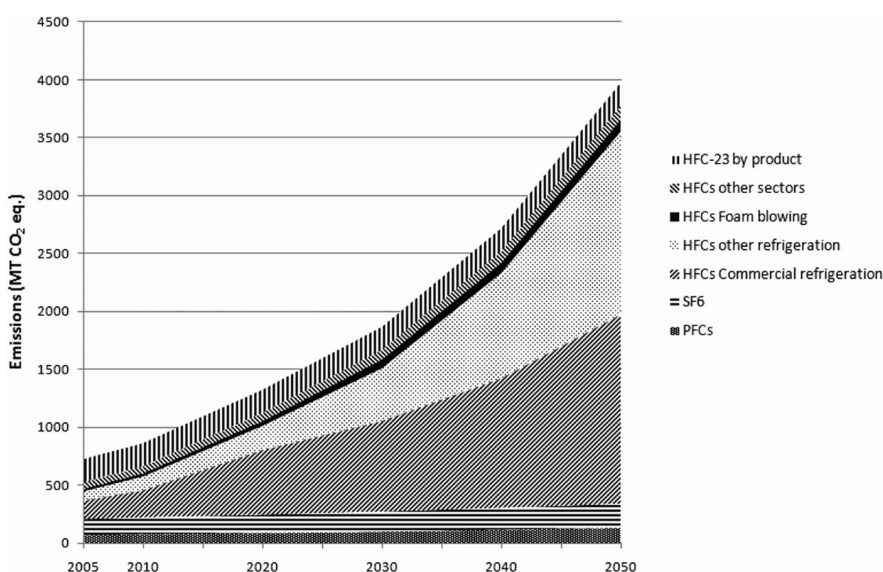


FIGURA 1.1: Proyección de emisiones globales de gases fluorados hasta el 2050, según el tipo de gas fluorado y su procedencia industrial [7].

Debido a las problemáticas anteriores, se ha creado la necesidad de incorporar legislaciones que establezcan parámetros de disminución de la emanación de gases fluorados hacia la atmósfera. De aquí, se tiene la enmienda de Kigali que añade a los hidrofluorocarbonos (HFCs) en el protocolo de Montreal (protocolo medioambiental destinado a regular el consumo de sustancias que agotan la capa de ozono [8]) para disminuir gradualmente en un 80 % y 85 % la emisión de HFC hacia fines de 2040 [9]. Para lograr este objetivo, se ha considerado la recuperación y reutilización de estos gases como una técnica viable para obtener las disminuciones de HFC requeridas e impuestas. Esta técnica permitiría la

generación de otros refrigerantes con menores índices de GWP como lo son las hidrofluoroolefinas (HFOs), desarrollando así, una economía circular y sostenible. Para la recuperación de estos gases se han considerado procesos como la crioc condensación o separación por membranas, sin embargo, son procesos costosos y solo recuperan parcialmente estos gases [2]. Ante la búsqueda de procesos innovadores y factibles, surge la utilización de líquidos iónicos (ILs) como alternativa a los solventes convencionales para procesos de separación [5].

Los líquidos iónicos corresponden a sales en estado líquido, en los cuales dentro de sus propiedades se encuentra que no son volátiles ni inflamables, poseen una alta conductividad térmica y estabilidad electroquímica, una baja presión de vapor, además de poseer elevadas constantes de Henry, lo cual los vuelve idóneos en la absorción de algunos refrigerantes [5, 10-12]. Dentro de los ILs, se conforman los líquidos iónicos fluorados (FILs), los cuales corresponden a líquidos iónicos con cadenas de alquilo perfluoradas que presentan propiedades no tóxicas y son altamente solubles [5]. Además, se ha demostrado que los FILs con cadenas alquilo fluoradas con cuatro o más átomos de carbono en el componente del anión presentan una mayor capacidad de absorción siendo atractivos para distintos procesos de separación [5, 11].

En este trabajo se desea estudiar una simulación a macroescala utilizando el modelo COSMO-SAC en Aspen Plus sobre los procesos de absorción de gases fluorados utilizando líquidos iónicos, para evaluar y analizar las condiciones idóneas de recuperación de estos gases, con el objetivo de generar una alternativa de economía circular ante este impacto ambiental debido a los F-gases.

1.1. Objetivos

Objetivo general

Simulación de un proceso multiescala en Aspen Plus para la absorción selectiva de gases fluorados y sus mezclas en líquidos iónicos.

Objetivo específicos

- Definir una metodología COSMO-SAC/Aspen Plus para simular líquidos iónicos.

- Analizar la regeneración del solvente en el proceso de absorción de gases.
- Correlacionar la capacidad de absorción con las propiedades moleculares de los líquidos iónicos.
- Definir set de condiciones óptimas en la absorción/desorción de gases fluorados.

2. Marco Teórico

2.1. Líquidos iónicos (ILs)

Los líquidos iónicos (ILs) son compuestos formados por iones, los cuales se caracterizan por poseer puntos de fusión por debajo de los 100 °C, encontrándose generalmente en estado líquido a temperatura ambiente [13, 14].

La generación de estos ILs se basa en las distintas posibilidades de combinación entre los cationes y aniones de cada molécula, logrando la conformación de cantidades cercanas a 10^6 combinaciones de ILs. Cada uno de estos ILs posee propiedades físicas y químicas diferentes, las cuales deben ser estudiadas para ser aplicadas en distintos procesos químicos e industriales. Los cationes que dan lugar a estos líquidos iónicos generalmente corresponden a sustancias de origen orgánico, mientras que los aniones pueden provenir de especies orgánicas, inorgánicas e incluso atómicas [13].

Existe un gran interés en la utilización de estos líquidos iónicos ya que son considerados como solventes potenciales debido a sus buenas propiedades en comparación con los solventes orgánicos tradicionales. Así, algunas de las propiedades destacables son:

- Poseen una presión de vapor considerablemente baja, lo que significa que estos solventes son clasificados como no volátiles a condiciones normales. Esto se debe a que los ILs tienen interacciones coulómbicas relativamente débiles entre los iones de la molécula, limitando así, la formación de pares iónicos necesarios para producir la volatilización de las sales. Esto implica la no vaporización de los ILs a altas temperaturas, lo que permite desarrollar sistemas de vacío sin pérdidas significativas de disolvente, provocando un mayor interés en procesos y técnicas de separación como

destilación o sublimación, tomando ventaja en comparación con solventes tradicionales [13-15].

- Son altamente polares, sus valores se encuentran en 0,6-0,7 [D] [13].
- Poseen una alta estabilidad térmica y corresponden a compuestos no inflamables. Se observa que mientras menor sea el carácter nucleófilo del anión, más estable son los ILs a temperaturas entre 300°C y 400 °C [14].
- Tienen bajos puntos de fusión, debido al gran tamaño y escasa simetría que poseen los cationes y aniones de los ILs, dificultando la compactación de la red cristalina de la molécula. La presencia de grandes cadenas de cationes o aniones conducen a una disminución del punto de fusión de estos líquidos iónicos [14, 16].
- Tienen una viscosidad considerablemente mayor en comparación con otros líquidos utilizados generalmente en la industria química. Esto se debe como consecuencia de la fuerte interacción entre cationes y aniones (Interacciones de tipo electrostáticas, fuerzas de Van der Waals y enlaces de hidrógeno) [14, 16].
- A temperatura y presión ambiental los líquidos iónicos poseen valores de densidad entre 1,0 y 1,6 g/cm³, los cuales son valores ligeramente superiores en comparación con el agua. Además, su densidad disminuye a medida que existe una mayor cantidad de cadenas alquilo del catión [13].
- Los ILs poseen una relativa miscibilidad en agua, ya que depende particularmente de la hidrofobicidad del anión. Un aumento de la cadena alquílica del catión disminuye la miscibilidad con el agua debido al carácter hidrófobo presente en esta cadena, por lo tanto, esta propiedad depende directamente del tipo de anión y catión [13].

Dentro de este grupo de ILs, existe un subgrupo denominado líquidos iónicos fluorados "FILs", los cuales poseen cadenas de alquilo perfluoradas y tienen un comportamiento más soluble y con menos propiedades tóxicas en comparación a los líquidos iónicos convencionales. La conformación de estos FILs proviene de biomateriales altamente fluorados que otorgan inercia química y biológica y de los ILs que cuentan con las remarcables propiedades que fueron mencionadas anteriormente. Estos líquidos han demostrado una mayor capacidad de absorción de los F-gases presentando cadenas alquilo perfluoradas

en el anión. Debido a esto, es cada vez más frecuente encontrar mayor interés en ILs/FILs como disolventes, despertando grandes expectativas tanto a nivel de laboratorio como industrial [17].

2.2. Modelos COSMO

Para utilizar y simular diferentes solventes o mezclas de ellos aplicados a procesos industriales se debe disponer de información y datos fisicoquímicos como densidades, viscosidades, temperatura de ebullición, entre otros. La mayoría de esta información se encuentra disponible bibliográficamente, sin embargo, no siempre se podrán encontrar las propiedades críticas para algunos líquidos ni existirán datos experimentales específicos de la molécula, implicando que sea necesario determinar esta información a través de una estimación mediante modelización de estos componentes. En el caso de los líquidos iónicos, pese a que la cantidad de información y datos experimentales ha aumentado en el último tiempo, sigue siendo insuficiente. Esto se debe a la posibilidad de generar una gran cantidad de ILs a partir de distintas combinaciones entre aniones y cationes presentes en las moléculas [13, 14].

Para realizar la modelización de estos componentes se considera en primera instancia la utilización del método UNIFAC, el cual se basa en la determinación y estimación de propiedades críticas mediante un efecto aditivo de los valores correspondientes según la contribución de grupos funcionales de dicha molécula. Por lo tanto, se realiza un ajuste multivariado con respecto a una base de datos experimentales para obtener los parámetros de cada uno de los grupos funcionales que componen la molécula. Así, la utilización de la técnica UNIFAC depende directamente de la disposición de datos similares al grupo de interés, en caso contrario, de no poseer los datos con respecto a todos los grupos funcionales, se dificulta su utilización. Para el caso de los líquidos iónicos la contribución de grupo es limitada, ya que poseen una variada deslocalización de cargas en la molécula, requiriendo así, la disponibilidad de definiciones de grupos funcionales específicos y difíciles de obtener [13, 18, 19].

Debido a esto, se considera otra alternativa de modelización correspondiente a la metodología COSMO. Este método permite determinar propiedades termodinámicas relacionadas con el potencial químico, requiriendo solamente la constitución química y topología

de las moléculas sin la necesidad de datos experimentales [20], obteniendo resultados mediante cálculos de estructura y propiedades de las moléculas individuales que componen al sistema [18].

La utilización de esta metodología COSMO ha permitido resolver diversos problemas relacionados a la industria química, ya que desarrolla el estudio de propiedades estructurales y comportamiento de las moléculas que son útiles en aplicaciones como agentes extractores, absorbentes, entrainers en destilación, entre otros [13].

El método COSMO es un modelo termodinámico estadístico basado en química cuántica que permite la predicción de las propiedades termodinámicas de fluidos y mezclas líquidas [18]. Consiste en un modelo dieléctrico continuo y considera individualmente la estructura de la molécula, la cual se encuentra inserta en el seno de un medio disolvente (moléculas restantes), es decir, se encuentra encerrada dentro de una cavidad [14, 18]. Esta distribución se aprecia en la Figura 2.1, donde se descompone un líquido en distintas cavidades (disolvente), sobre la cual tiene inserto átomos (soluto) de la molécula que lo conforman.

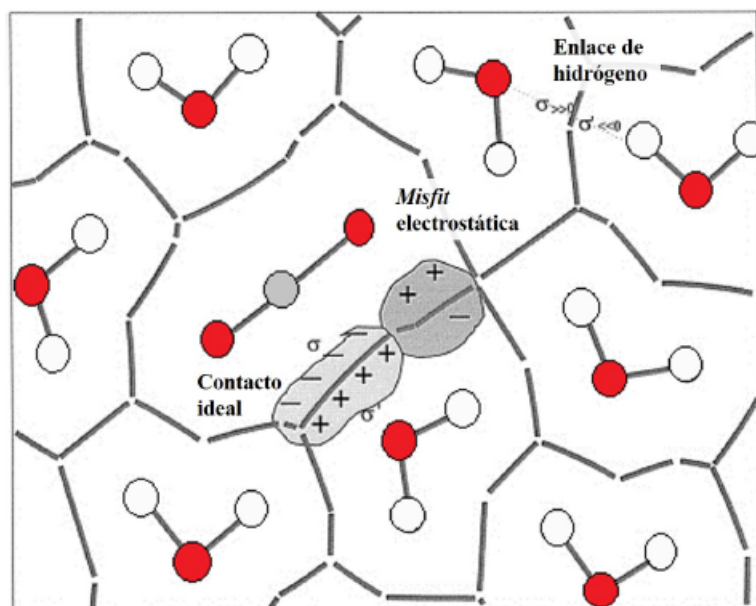


FIGURA 2.1: Distribución de la carga polarizada en la interfase soluto disolvente según el método COSMO [13].

La metodología COSMO considera que existen segmentos en la molécula que corresponden a regiones de la superficie con cavidades, los cuales poseen una densidad de carga polarizada llamada potencial " σ ". La distribución de esta carga polarizada permite obtener perfiles moleculares, denominados " σ -profiles", que entregan como resultado la suma de la cantidad relativa de carga polarizada en toda la superficie para una molécula [13, 20]. Este perfil se ve representado en un histograma de frecuencias, donde la variable independiente corresponde a " σ " y la variable dependiente corresponde al perfil " $p^X(\sigma)$ " evaluado en cada uno de estos intervalos de carga, como se muestra de ejemplo en la Figura 2.2 [13].

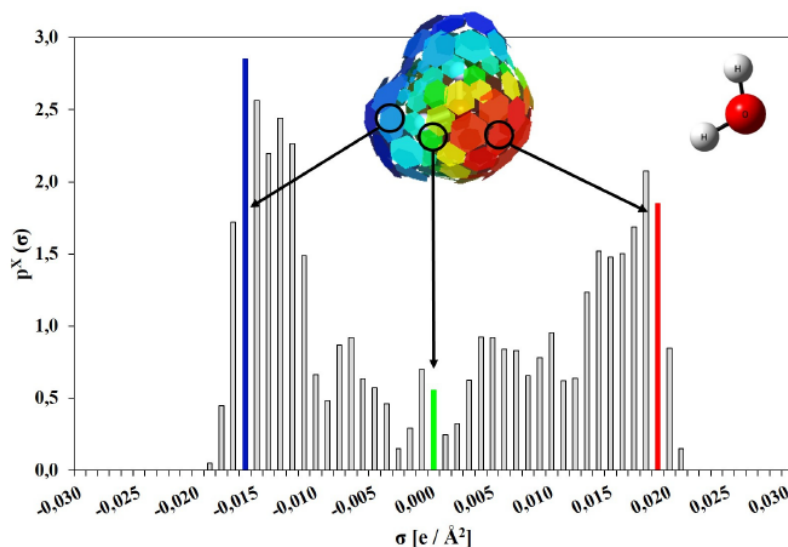


FIGURA 2.2: Perfil sigma para el agua [13].

El modelo COSMO-RS es una variante basada en el modelo COSMO, sin embargo, COSMO-RS plantea que se puede tratar al solvente como un conjunto de segmentos que interactúan de a par, logrando una estadística monodimensional en lugar de la interacción en tres dimensiones generada entre moléculas reales [13, 14, 20]. A partir de este nuevo perfil sigma, es posible obtener el potencial químico asociado a la interacción entre segmentos llamado potencial sigma " σ - potential" o " $\mu(\sigma)$ " [13].

La aplicación de estos métodos en sistemas conformados por una sola sustancia es directa, debido a que solo implica un único perfil y potencial sigma. Sin embargo, en el caso de mezclas se debe considerar el perfil y potencial sigma de cada uno de los componentes,

generando un perfil sigma promedio para la mezcla, como se muestra en la ecuación 2.1 [13].

$$P_s(\sigma) = \sum_{i \in S} x_i P^{x_i}(\sigma) \quad (2.1)$$

Donde x_i son las fracciones molares de los solutos presentes en la disolución y $P^{x_i}(\sigma)$ es la distribución de carga de polarización de cada uno de los componentes sobre la superficie molecular. A partir de este perfil sigma, el método COSMO-RS permite calcular el potencial químico de la mezcla [13].

Para obtener el potencial químico se realiza un procedimiento termoestadístico, en donde se calcula la energía de interacción $E(\sigma, \sigma')$ (correspondiente a interacciones de tipo electrostática, enlace de hidrógeno y Van der Waals) entre las densidades de carga polarizadas de las moléculas de soluto " σ " y del disolvente " σ' " en un área molecular efectiva " a_{eff} ". Luego de calcular la energía de interacción soluto-disolvente, se puede obtener el potencial químico " $\mu_S(\sigma)$ " del área de contacto evaluado anteriormente a_{eff} , mediante la ecuación 2.2. Este potencial se interpreta como la afinidad del solvente "S" por la superficie de polaridad σ [13, 18].

$$\mu_S(\sigma) = -\frac{RT}{a_{eff}} \ln \left(\int P_S(\sigma') * \exp \left\{ \frac{a_{eff} * (\mu_S(\sigma') - E(\sigma, \sigma'))}{RT} \right\} * d\sigma' \right) \quad (2.2)$$

La resolución de esta ecuación se debe realizar a través de un cálculo iterativo debido a que el mismo potencial se encuentra en la integral definida, generalmente se toma $\mu_S(\sigma) = 0$ para iniciar la iteración. Luego de este cálculo, es posible obtener el potencial químico de una molécula X en el solvente "S".

A partir de la ecuación 2.2 se puede determinar el potencial químico de una molécula X en el solvente S según la ecuación 2.3.

$$\mu_S^x = \mu_{C,S}^x + \int P^x(\sigma) * \mu_S(\sigma) * d\sigma \quad (2.3)$$

Donde $\mu_{C,S}^x$ corresponde a una contribución combinatoria, la cual añade un área y volumen debido a los diferentes tamaños y formas en la molécula [18, 21]. Para una mezcla se deriva la ecuación 2.4 donde x corresponde a la fracción molar del compuesto de la mezcla [20, 22]

$$\mu_S^x = \mu_{C,S}^x + \int P^x(\sigma) * \mu_S(\sigma) * d\sigma - RT \ln(x) \quad (2.4)$$

Finalmente, a partir de los cálculos anteriores se podrá determinar el potencial químico de cualquier soluto de la mezcla a una temperatura determinada. Este potencial químico, permite obtener la información necesaria con respecto a las propiedades termodinámicas en equilibrio del fluido tales como coeficientes de actividad, solubilidades, entropías de solvatación, entre otras.

Por ejemplo, para determinar el coeficiente de actividad " γ_S^x " del componente X en el disolvente S se considera la ecuación 2.5, donde μ_X^X es el potencial del componente X en un estado puro de referencia [13, 18, 21].

$$\gamma_S^x = \exp\left(\frac{\mu_S^x - \mu_X^X}{RT}\right) \quad (2.5)$$

Una vez calculados los coeficientes de actividad de los componentes de la mezcla, se podrá acceder a una descripción completa del estado y propiedades termodinámicas del soluto X en la disolución S [13]

A partir de los resultados obtenidos mediante cálculos teóricos realizados a nivel molecular mediante la metodología COSMO, se crea una oportunidad para incluir esta información sobre propiedades físicas en programas de simulación de procesos, ampliando así su base de datos.

2.3. Simulación de procesos Aspen Plus

La utilización de simuladores de procesos tiene como objetivo estimar la viabilidad de un proyecto, diseñar nuevos procesos químicos, obtener el funcionamiento completo de un proceso, estimar costos asociados a equipos y optimizar procesos existentes, permitiendo la resolución de problemas complejos que se tornan imposibles de resolver teórica y manualmente.

Los simuladores funcionan en un modo secuencial, donde los flujos de salida dependen de los flujos y condiciones de entrada, obteniendo una respuesta correlativa a los parámetros de diseño deseados e ingresados inicialmente. Algunos de los simuladores más comunes corresponden a Aspen Plus y Aspen HYSYS. Ambos softwares vienen incluidos en el mismo programa, siendo buenas herramientas para procesos que incluyen hidrocarburos, reacciones químicas, polímeros, sólidos, entre otros. La diferencia de estos programas es que Aspen Plus permite el trabajo de procesos químicos en estado estacionario, en cambio, Aspen HYSYS permite la realización de simulaciones en estado estacionario y dinámico [23].

Una simulación corresponde a un diseño de un sistema operativo cuyo propósito es comprender el comportamiento del sistema y/o evaluar alternativas al funcionamiento de este proceso. La finalidad de esta simulación es modelar el funcionamiento del proceso con una precisión cercana al comportamiento real. La precisión y calidad de los resultados dependerá directamente de la base de datos existente y de los parámetros de modelos termodinámicos utilizados, siendo esta una de las partes más complejas a la hora de iniciar la simulación, puesto que, la mayoría de las veces no siempre se contará con una base de datos sobre las propiedades y equilibrio de fase de las moléculas.

Para el caso de líquidos iónicos se considera un enfoque multiescala, donde se utilizan simultáneamente la simulación molecular y simulación de procesos utilizando modelos basados en COSMO como COSMO-RS o COSMO-SAC. Dentro de Aspen Plus se encuentra integrado el modelo COSMO-SAC, el cual permite simular y comprender el comportamiento de los ILs en distintos procesos químicos. Para la utilización de COSMO-SAC en Aspen Plus es necesario ingresar manualmente información molecular que es obtenida mediante el modelo COSMO-RS. Esta información consiste en el ingreso de CSACVL (volumen molecular de los compuestos medidos en Angstrom), densidad molecular, peso

molecular, punto de ebullición normal (NBP) y 5 perfiles sigma con 12 segmentos cada uno. Por lo tanto, para obtener resultados de procesos químicos como la absorción utilizando FILs, se realiza un análisis molecular con COSMO-RS, para posteriormente utilizar COSMOSAC en Aspen Plus y finalmente obtener resultados para seleccionar el mejor líquido como solvente, como se muestra en la Figura 2.3 [14, 24]

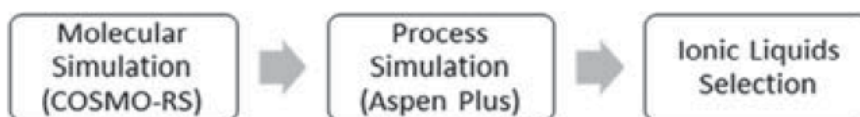


FIGURA 2.3: Estrategia de estudio de líquidos iónicos a nivel multiescala para la obtención de resultados en simulaciones de procesos químicos [24].

2.4. Equipos de absorción y desorción

La columna de absorción consiste en un equipo de contacto líquido-gas que tiene como finalidad utilizar solventes líquidos que sean capaces de eliminar impurezas, contaminantes o recuperar compuestos químicos que se desean reutilizar. Por otro lado, la columna de desorción (stripping) se encarga de recuperar o remover los componentes absorbidos. En estas columnas el gas y líquido fluyen a contracorriente, donde el gas fluye hacia arriba a través de la columna, mientras que el líquido cae por gravedad, generando así, el contacto entre ambos componentes. Las columnas se pueden clasificar como columnas de plato, relleno, spray, de burbujas o de contacto centrífugo [25].

La columna de empaquetamiento o de relleno (figura 2.4) ha demostrado poseer una mayor eficiencia y rendimiento con una menor caída de presión en comparación con la columna de platos, siendo atractivo este tipo de columna en operaciones a baja presión [26].

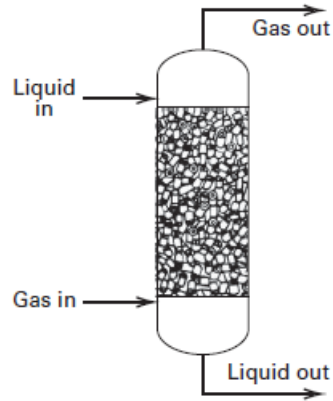


FIGURA 2.4: Columna de relleno con flujo contracorriente [25].

En estas columnas se considera que la altura de relleno equivale a una etapa teórica (HETP) lo cual queda definida mediante la ecuación 2.6 [25].

$$HETP = \frac{\text{Altura de relleno}}{\text{Número de etapas de equilibrio equivalentes}} = \frac{H_T}{N_T} \quad (2.6)$$

3. Metodología

El proceso consiste en la absorción de gases fluorados de tipo 1,1,1,2-Tetrafluoroetano "R – 134a" y difluorometano "R – 32". El componente R-134a corresponde a un refrigerante utilizado comúnmente en automóviles y en equipos industriales que realizan procesos de refrigeración. El gas R-32 también es un refrigerante utilizado usualmente en el mantenimiento de bombas de calor y en equipos electrodomésticos. Para realizar el proceso de absorción se utilizan seis tipos de líquidos iónicos fluorados distintos, con el objetivo de comparar y escoger el líquido con mejores propiedades de absorción. Los gases HFC y los FILs a utilizar se especifican en las tablas 3.1 y 3.2 respectivamente.

TABLA 3.1: :Estructura y masa molecular de líquidos iónicos utilizados en este trabajo

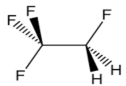
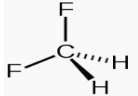
HFC	Masa molecular (g/mol)	Estructura molecular
R-134a	102	
R-32	52	

TABLA 3.2: Estructura y masa molecular de líquidos iónicos fluorados utilizados en este trabajo.

Líquido iónico fluorado (FIL)	Masa molecular g/mol	Estructura molecular
1-Ethyl-3-methylimidazolium perfluoropentanoate [C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	374,2	
1-Ethyl-3-methylimidazolium perfluorobutanesulfonate [C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	410,26	
1-Ethyl-3-methylimidazolium triflate [C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	260,24	
1-Ethyl-3-methylimidazolium bis(pentafluoroethylsulfonyl)imide [C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	491,33	
1-Ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide [C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	391,31	
1-Ethyl-3-methylpyridinium perfluorobutanesulfonate [C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	421,28	

Para este proceso se consideran dos principales equipos, una columna de absorción, encargada de absorber la mayor cantidad de F-gases mediante FILs, y una de desorción, encargada de recuperar estos gases y recircular los líquidos iónicos para su reutilización. Estos equipos se diseñan y simulan utilizando el programa Aspen Plus, permitiendo la obtención de resultados relacionados con el rendimiento y efectividad de recuperación de

gases fluorados en diferentes condiciones operativas.

3.1. Elección paquete termodinámico e ingreso de componentes

Para ingresar líquidos iónicos al simulador Aspen, se utiliza el modelo correspondiente a COSMO-SAC, el cual permite ingresar estos solventes como pseudocomponentes e ingresar manualmente las propiedades recopiladas a partir de los cálculos de COSMORS, como se menciona anteriormente. Estas propiedades corresponden al peso molecular, densidad, viscosidad, volumen molecular Cosmo (CSACVL) y perfiles sigma (σ) que se encuentran en el anexo 6.1 [5]. Para el caso de los gases fluorados R-134a y R-32 se ingresan como componentes convencionales, obteniendo sus propiedades directamente desde la base de datos de Aspen Plus.

3.2. Diseño de simulación

Para este proceso se consideran 2 unidades importantes, las cuales corresponden a las columnas de absorción y desorción. Además, se consideran equipos para el acondicionamiento y recirculación de los líquidos iónicos como una bomba, un intercambiador de calor y un mezclador.

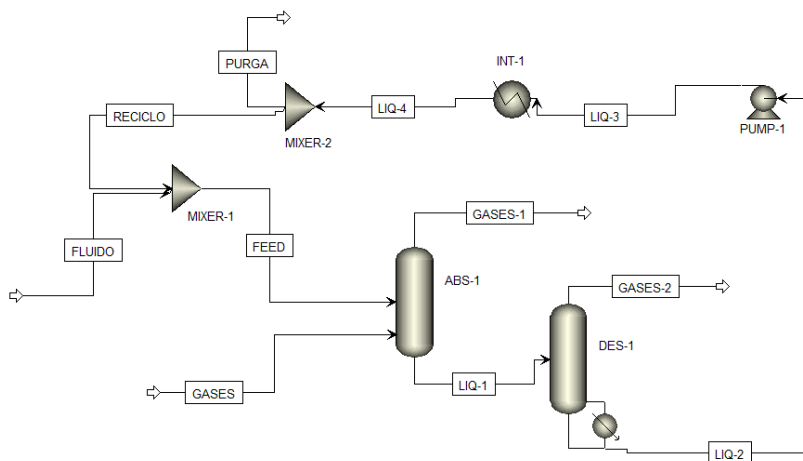


FIGURA 3.1: Simulación del proceso de absorción y recuperación de gases fluorados utilizando líquidos iónicos fluorados en Aspen Plus.

3.2.1. Columna de absorción

Se considera que la columna de absorción posee una presión de 5 bar, un número de 5 etapas y una altura de empaquetamiento de 10 m, lo que implicaría una altura de 2 m por etapa según la ecuación 2.6. De estas etapas, se especifica que la corriente de gases entra por la etapa 5 y la corriente de líquido por la 1. Para esta columna se utiliza el modelo de cálculo *Rate-based*, el cual permite obtener resultados considerando la modelación y cálculo mediante los coeficientes de transferencia de energía y materia a través de la columna [25, 27]. Además, se considera una columna con una capacidad máxima de acercamiento de líquido y gas del 80 %. En la siguiente tabla se presentan todas las consideraciones de diseño relacionadas con esta columna.

TABLA 3.3: Condiciones de operación y diseño de columna de absorción

Parámetro	Condición de operación
Presión	10 bar
Temperatura	298,15 K
Número de etapas	5
Entrada gases	Etapas 5
Entrada líquido	Etapas 1
Salida gases	Etapas 1
Salida líquido	Etapas 5
Empaquetamiento	FLEXIPAC KOCH Metal (700Y)
Altura columna (m)	10
Diámetro (m)	1

3.2.2. Columna de desorción

Se considera la columna de desorción con un número de 5 etapas, una presión de operación de 0,1 bar y una temperatura de 423,15 K para la corriente de fondo de la columna (se considera esta temperatura para asegurar que el fluido recuperado se encuentre en estado líquido y con estabilidad en sus propiedades). De estas etapas se especifica que la corriente de entrada conformada por una mezcla de R-134a, R-32 y el líquido iónico ingresan

por la etapa 1 de la columna. Se utiliza el modelo de cálculo *Rate-based*, el cual permite obtener resultados considerando la modelación y cálculo mediante los coeficientes de transferencia de energía y materia a través de la columna [25, 27]. Al igual que la columna de absorción, se considera una capacidad máxima de acercamiento de líquido y gas del 80 %. En la siguiente tabla se presentan todas las consideraciones de diseño relacionadas con esta columna.

TABLA 3.4: Condiciones de operación y diseño de columna de desorción

Parámetro	Condición de operación
Presión	0,1 bar
Tipo de rehervidor	Kettle
Temperatura rehervidor	423,15 K
Número de etapas	5
Entrada líquido	Etapas 1
Salida gases	Etapas 1
Salida líquido	Etapas 5
Empaquetamiento	FLEXIPAC KOCH Metal (700Y)
Altura columna (m)	10
Diámetro (m)	1,3

3.3. Bomba e Intercambiador de calor

Estos equipos permiten el acondicionamiento de la corriente de reciclo, el cual tiene como finalidad reutilizar los líquidos iónicos nuevamente en la columna de absorción.

TABLA 3.5: Condiciones de operación y diseño de bomba e intercambiador de calor

	Presión (bar)	Temperatura (°C)
Bomba	10	-
Intercambiador de calor	10	25

3.4. Corrientes de entrada absorbedor

Para una simulación inicial, se utiliza una alimentación de gases fluorados correspondientes a un flujo másico de 10.000 kg/h, de los cuales, se tiene una composición másica del 50 % de R-134a y R-32 cada uno. El flujo de entrada de líquido iónico fluorado "FEED" en la columna de absorción varía según la razón de proporción definida como L/G, para el caso inicial se considera una relación de L/G=5, por lo tanto, corresponde a un flujo de 50.000 kg/h, estos valores se toman para simular condiciones industriales reales de operación. Este flujo líquido, depende directamente de la corriente de reciclo que corresponde al FIL que se recircula para ser utilizados nuevamente en la columna de absorción.

TABLA 3.6: Parámetros y condiciones de corrientes de entrada.

Corriente	Flujo másico (kg/h)	Composición másica		Temperatura (°C)	Presión (bar)
Gases	10.000	R-134a	50 %	25	10
		R-32	50 %		
Feed	50.000	FIL	100 %	25	10

4. Resultados y Discusión

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos sobre la absorción de gases fluorados utilizando los seis líquidos iónicos fluorados mencionados anteriormente. En primera instancia se considera un caso base de operación, relacionado a la absorción de una mezcla conformada por R-134a y R-32 a las condiciones mencionadas en el capítulo anterior. Luego, se realiza un análisis de sensibilidad para encontrar las condiciones de operación óptimas, modificando la presión en la columna de absorción y la proporción de entrada de gases y líquidos en dicha columna, además, de estudiar la variación de presión en la columna de desorción. Por último, se realiza el análisis de sensibilidad del proceso de absorción de una segunda mezcla conformada por tres gases fluorados R-134a, R-32 y R-22, con el objetivo de evaluar en dos escenarios distintos la funcionalidad de los seis líquidos iónicos fluorados utilizados.

4.1. Resultados caso base de operación

Como se mencionó anteriormente, para este caso se considera una condición de 5 bar y 0,1 bar para la columna de absorción y desorción respectivamente. Además, de una relación de proporción para la alimentación del proceso de líquidos y gases de $L/G=5$. Los resultados obtenidos en la figura 4.1 muestran que existe una mayor absorción de F-gases utilizando el líquido iónico fluorado $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$, alcanzando un porcentaje de recuperación del 58% con respecto a la alimentación de entrada. Los flujos masicos obtenidos para cada uno de los casos se encuentran en el Anexo [6.2](#)

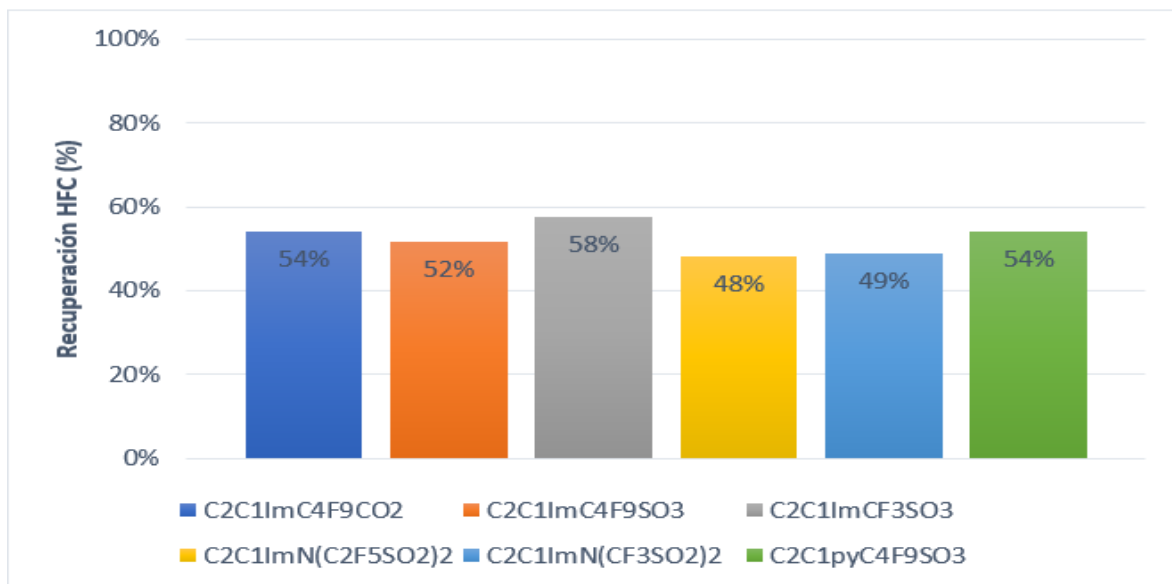


FIGURA 4.1: Porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, considerando una tasa L/G=5 y una presión de 5 bar en torre de absorción.

4.2. Análisis de sensibilidad

Este análisis tiene como finalidad encontrar las condiciones de operación que permitan un mayor porcentaje de absorción de estos gases fluorados. Como se menciona anteriormente, se varía la presión de operación en ambas columnas y L/G a la entrada de la columna de absorción.

4.2.1. Variación de la presión en columna de absorción

Para el análisis de esta variable se consideran 3 presiones distintas para la columna de absorción, 1 bar, 5 bar (caso inicial) y 10 bar. Los flujos máxicos obtenidos se encuentran en el Anexo [6.3](#).

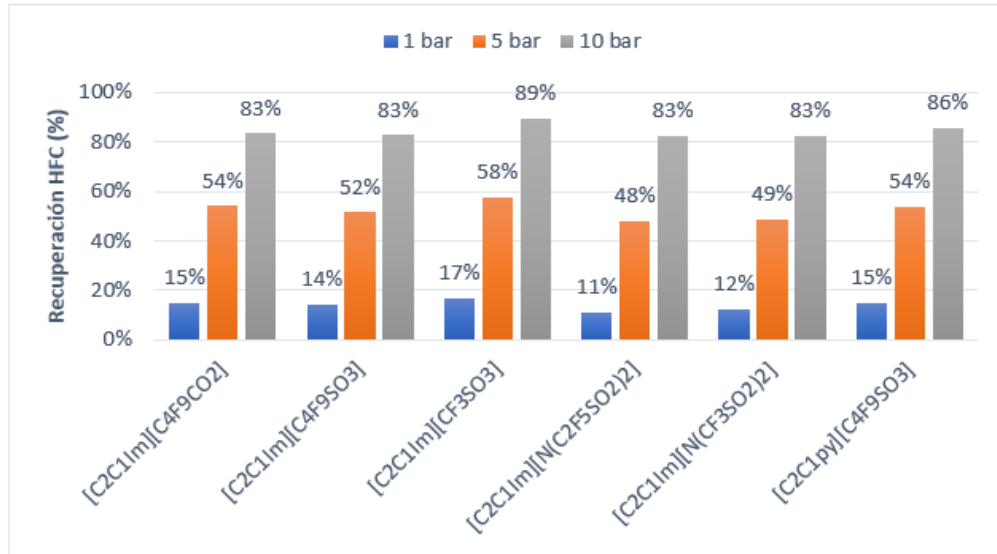


FIGURA 4.2: Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla de R-134a y R-32, considerando una tasa L/G=5 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

Desde la figura 4.2 se analiza que a mayor presión existe una mayor absorción y recuperación de HFC. Para una presión de 10 bar se logra un mayor porcentaje de absorción de la mezcla de gases R-134a y R-32 con un porcentaje de recuperación utilizando el líquido [C₂C₁Im][CF₃SO₃].

4.2.2. Variación de la proporción de alimentación de líquidos y gases hacia la columna de absorción

Para este análisis se considera un cambio en la proporción de líquidos y gases de entrada hacia la columna de absorción: L/G=2, L/G=3, L/G=4, L/G=5 (caso base) y L/G=6. Para la obtención de estos resultados se mantiene fija la cantidad de gases R-134a y R-32 que entran a la columna, correspondiente a un flujo másico de 10.000 kg/h, variando así, solamente la cantidad de flujo que entra de líquido iónico a la columna.

Para cada uno de estos casos también se consideró la variación de la presión de operación de la columna de absorción, para la obtención de resultados representativos con respecto al análisis anterior. La cantidad de estos casos fueron resumidos en la tabla 4.1.

TABLA 4.1: Casos para el análisis del cambio del flujo de alimentación y presión en la columna de absorción.

Nº Casos	Flujo alimentación columna absorción (L/G)	Presión columna absorción (bar)
1	2	1
		5
		10
2	3	1
		5
		10
3	4	1
		5
		10
4	5	1
		5
		10
5	6	1
		5
		10

■ Caso 1

Para una variación de $L/G=2$ se obtiene que mediante la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ se logran porcentajes mayores de recuperación de HFC, correspondiente al 44 %, 26 % y 7 % para presiones de 10 bar, 5 bar y 1 bar respectivamente. Los flujos másicos resultantes se encuentran en el Anexo 6.4.

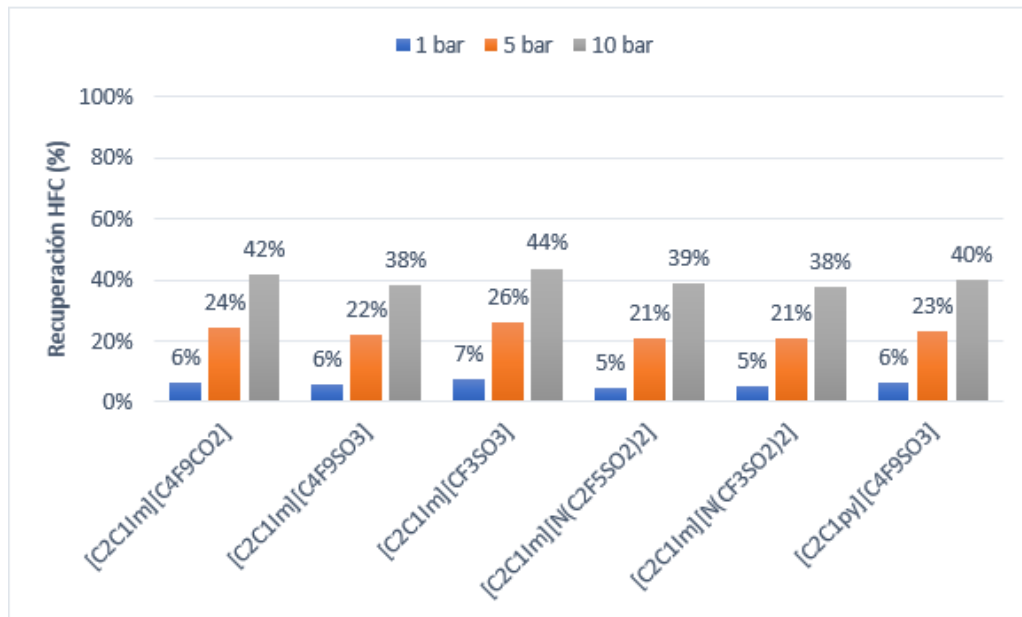


FIGURA 4.3: Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa $L/G=2$ a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

■ Caso 2

Para una variación de $L/G=3$ se observa un aumento en la recuperación de HFC en comparación con $L/G=2$. Además, se tiene que el líquido $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ posee una mayor capacidad de absorción y recuperación, con un aumento del 17 % de la obtención de gases en comparación con el caso de $L/G=2$ para una presión de 10 bar. Los flujos másicos resultantes se encuentran en Anexo 6.5.

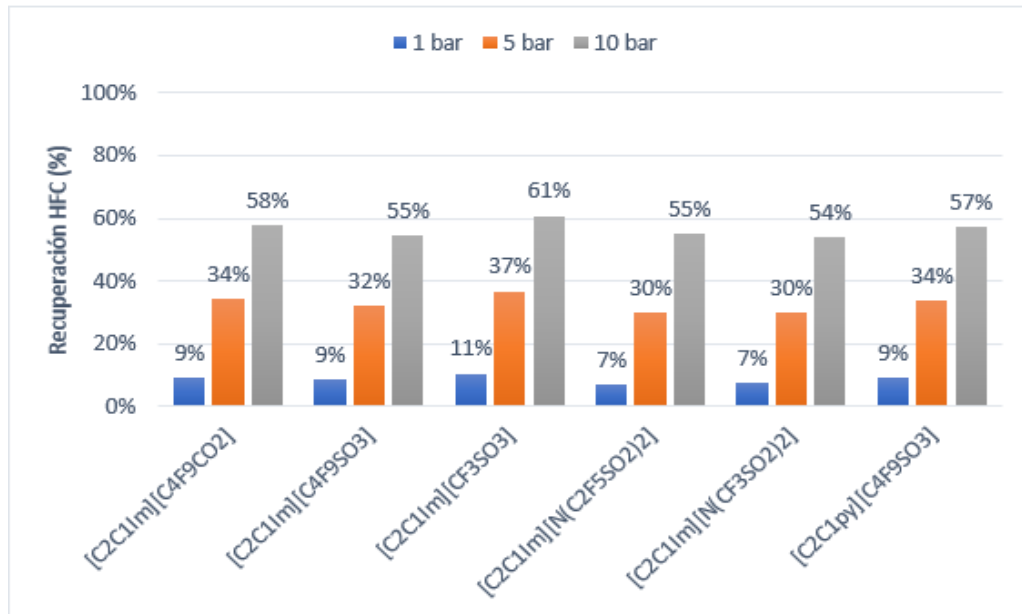


FIGURA 4.4: Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=3 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

■ Caso 3

Para una variación de L/G=4 se obtiene, de igual manera, que mediante la utilización de [C₂C₁Im][CF₃SO₃] se logran porcentajes mayores de recuperación de HFC, correspondientes al 76 %, 47 % y 14 % para presiones de 10 bar, 5 bar y 1 bar respectivamente. Los flujos másicos resultantes se encuentran en Anexo 6.6.

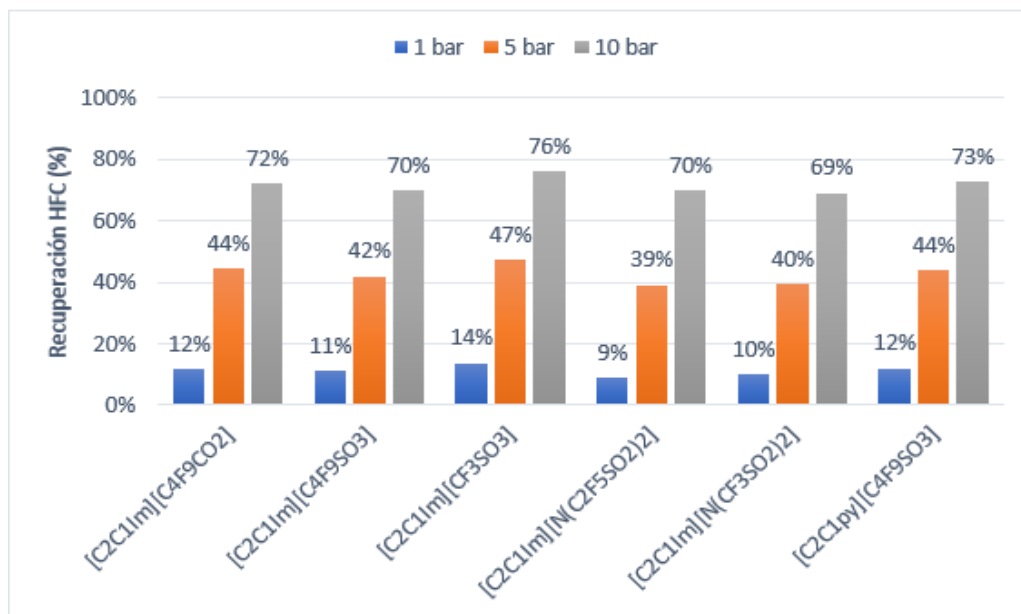


FIGURA 4.5: Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=4 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

■ Caso 5

Por último, para una variación de L/G=6 se muestra en la figura 4.6 un alto porcentaje de recuperación de gases HFC en comparación con todos los casos anteriores. Además, se observa que mediante la utilización de [C₂C₁Im][CF₃SO₃] se sigue logrando una mayor efectividad de recuperación de HFC, alcanzando porcentajes de 98%, 67% y 20% para presiones de 10 bar, 5 bar y 1 bar respectivamente. Los flujos másicos resultantes se encuentran en el Anexo 6.7.

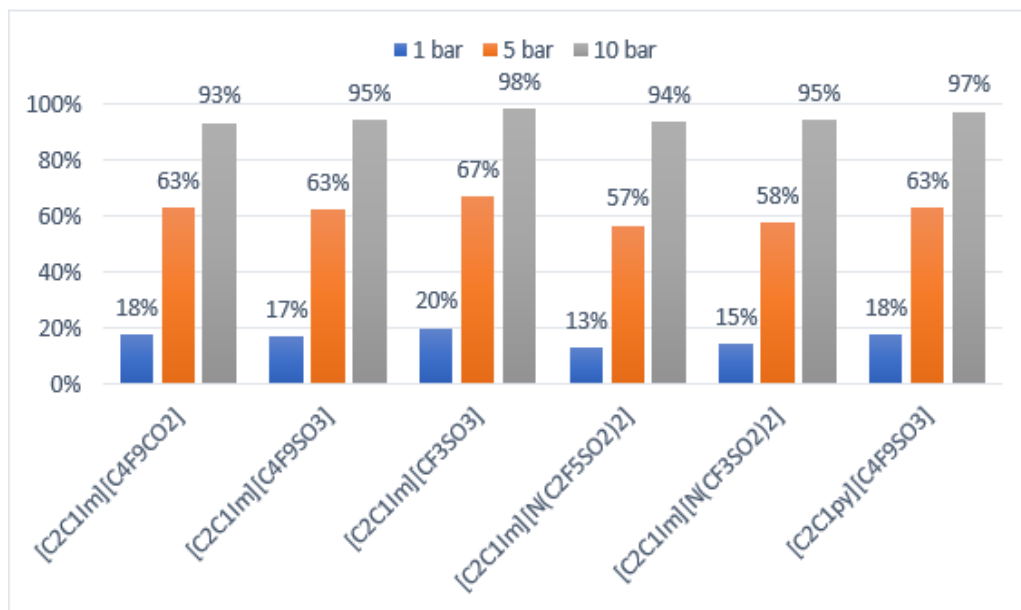


FIGURA 4.6: Comparación de porcentaje de recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32, utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

De los resultados de cada uno de los casos anteriores, se obtiene que al aumentar la razón de líquido y gases L/G, existe una mayor efectividad para la recuperación de los gases hidrofluorcarbonos. Esto se puede analizar con más detalle en las figuras 4.7, 4.8, 4.9, mostrando que la recuperación de HFC tiene un comportamiento proporcional a medida que aumenta la razón de L/G del sistema. Esto se debe a que existe una mayor cantidad de solvente dentro del sistema, logrando así, una mayor probabilidad de generar contacto e interacción entre las partículas líquidas con las gaseosas, permitiendo un aumento en el porcentaje de absorción.

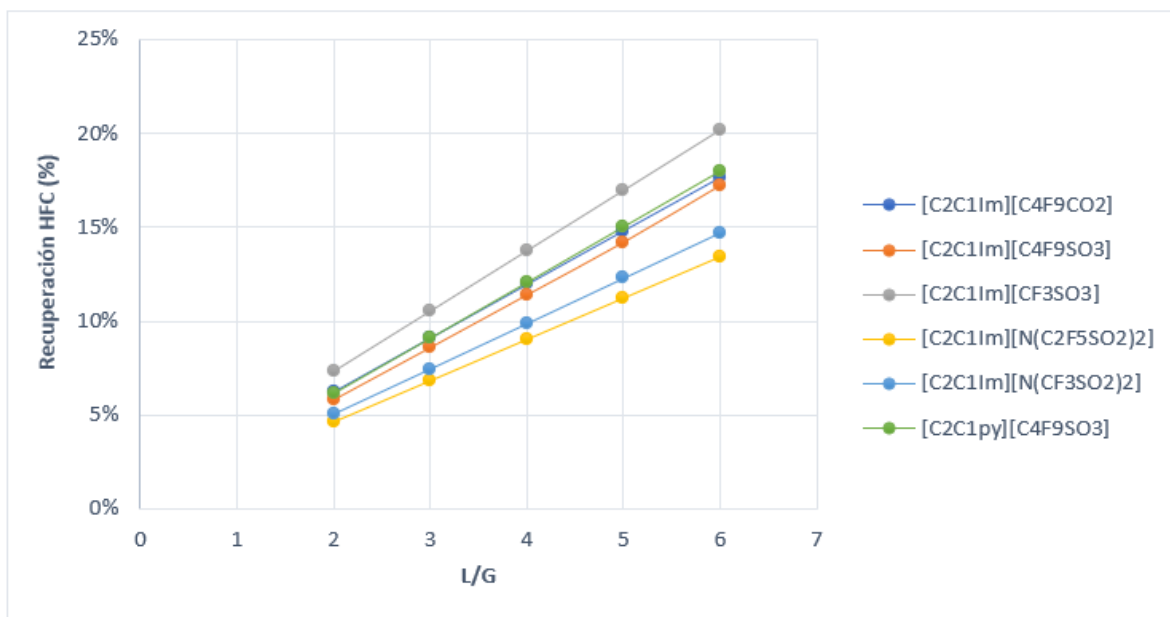


FIGURA 4.7: Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

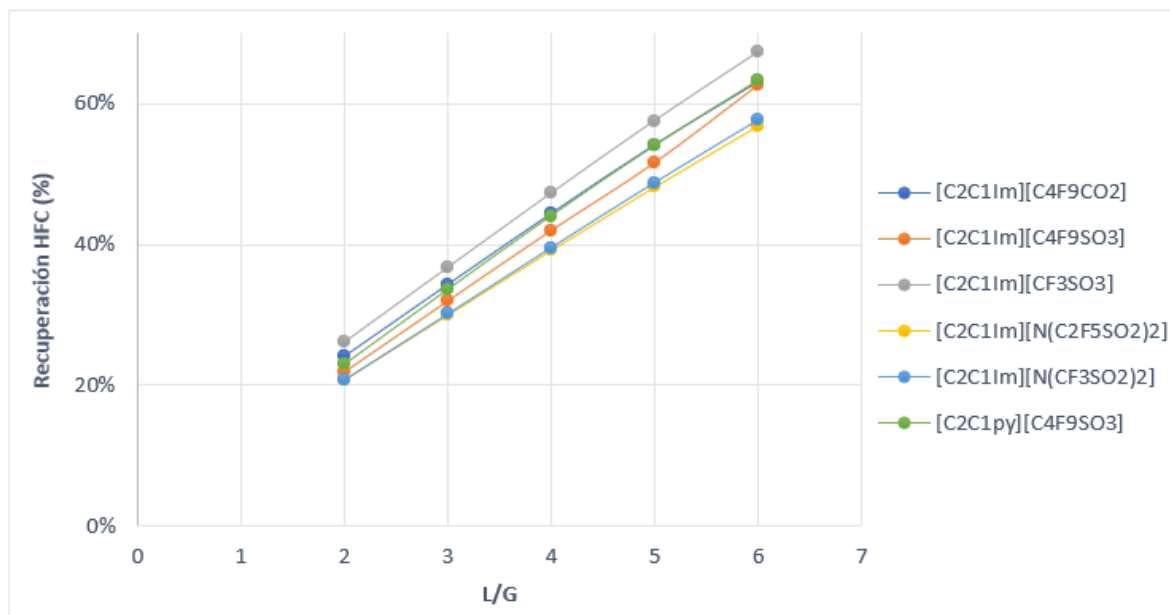


FIGURA 4.8: Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

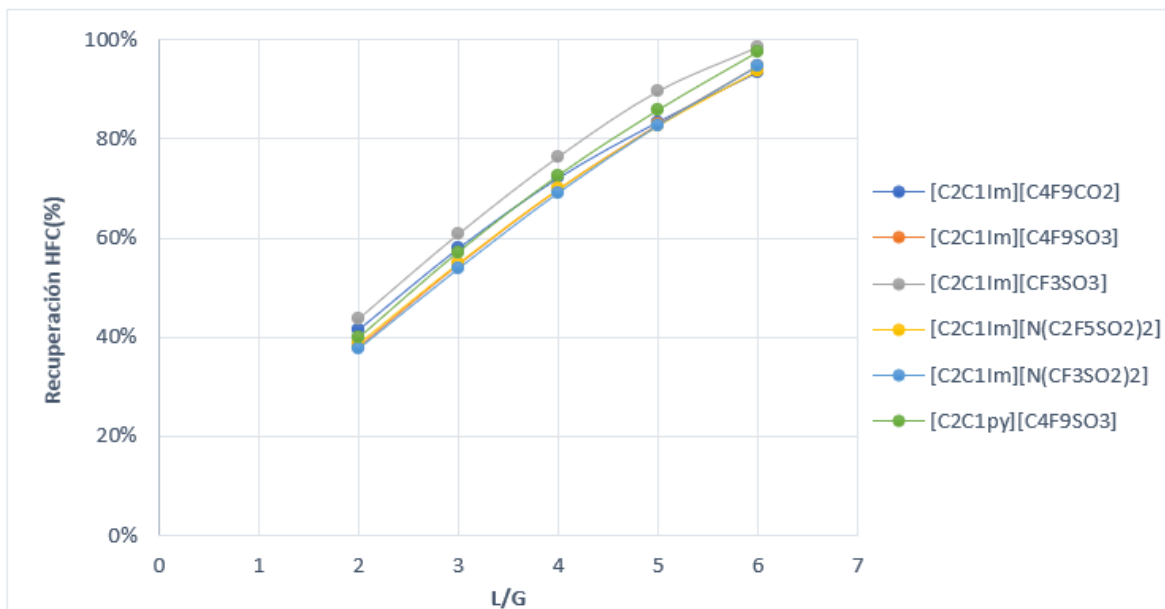


FIGURA 4.9: Porcentaje de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en función de L/G, a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

Finalmente, según los análisis de sensibilidad realizados anteriormente, las condiciones de operación óptimas corresponderían a una presión de 10 bar y una proporción de L/G=6 para la columna de absorción, obteniendo resultados de recuperación mayores al 90 % de HFC en los seis casos distintos de FILs, destacando el $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ con un porcentaje de 98 %.

4.2.3. Variación de la presión de operación en la columna de desorción

De igual manera, se analizan las condiciones de operación de la columna de desorción evaluando la presión óptima para obtener el mayor porcentaje de recuperación de HFC. En este caso se considera la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ con una presión de 10 bar y una relación de L/G=6 en la columna de absorción, debido al alto porcentaje de recuperación que presentaron estas condiciones en los resultados anteriores. Los flujos másicos resultantes se encuentran en el Anexo 6.8.

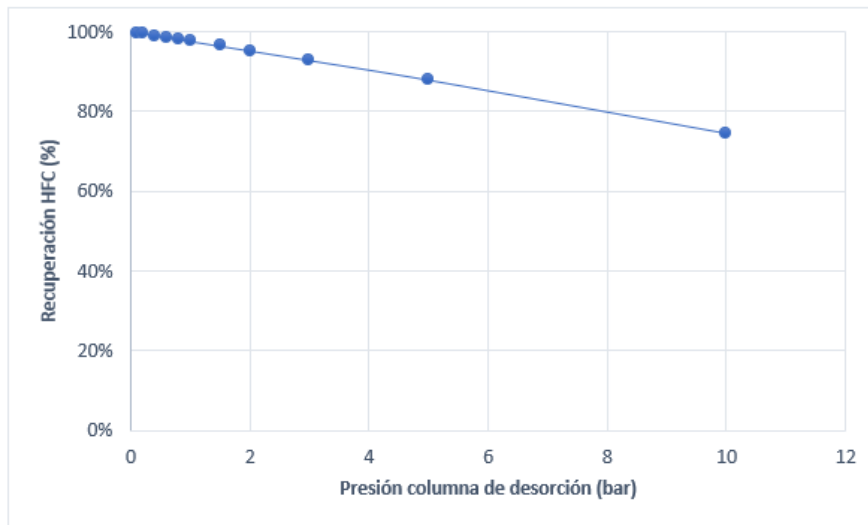


FIGURA 4.10: Recuperación de HFC para mezcla R-134a y R-32 en función de la variación de presión en columna de desorción

De la figura 4.10 se puede observar que la mayor cantidad de recuperación de la mezcla R-134a y R-32 se obtiene a una condición de 0,1 bar en la columna de desorción como se presentó en el caso base.

4.3. Análisis de resultados por componentes

Como el proceso consiste en la absorción de una mezcla conformada por dos gases fluorados R-134a y R-32, se analiza también la capacidad de absorción de los ILs por componente. Este análisis se realiza con respecto al caso base "L/G=5" y el escenario correspondiente a las condiciones operativas óptimas resultantes de las observaciones anteriores "L/G=6", en ambos casos se considera la variación de presión en la columna de absorción: 1 bar, 5 bar y 10 bar. Esto se realiza considerando que el flujo másico de alimentación de cada uno de estos gases corresponde a 5.000 kg/h.

4.3.1. Análisis de absorción de R-134a y R-32 para el caso base L/G=5

Para este análisis se consideran 3 condiciones de operación de presión para la columna de absorción: 1 bar, 5 bar y 10 bar, donde los flujos másicos obtenidos se encuentran en los

Anexos [6.9](#), [6.10](#), [6.11](#) respectivamente.

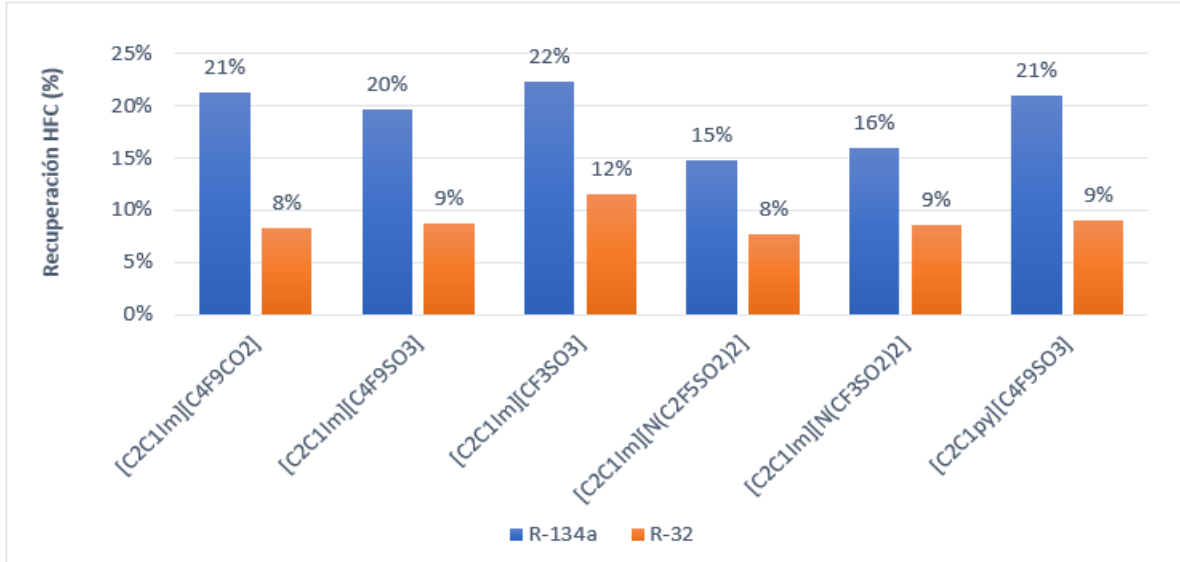


FIGURA 4.11: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.

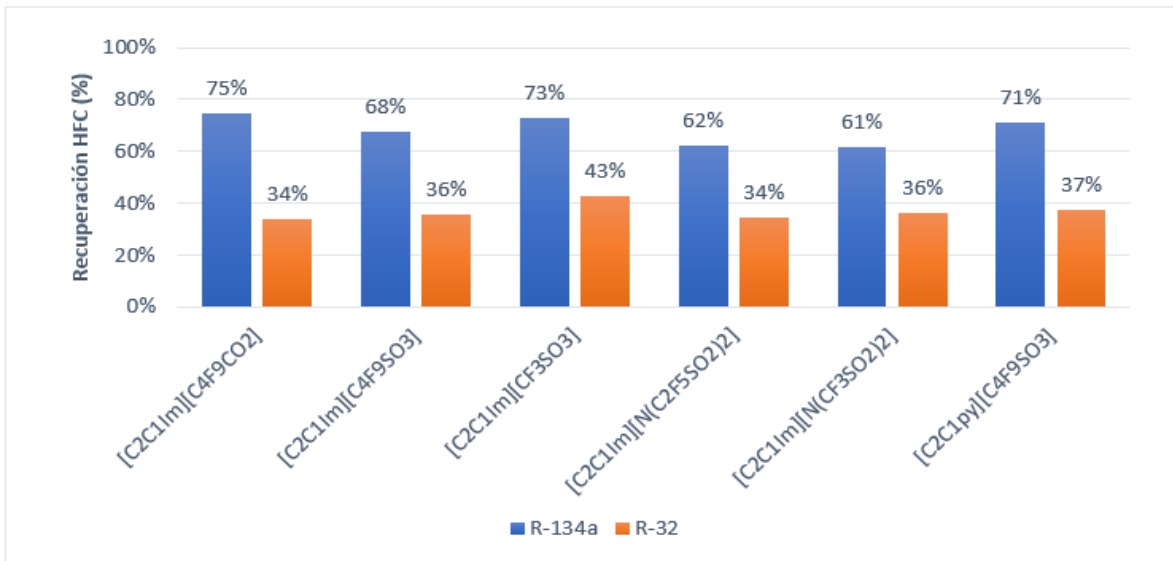


FIGURA 4.12: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.

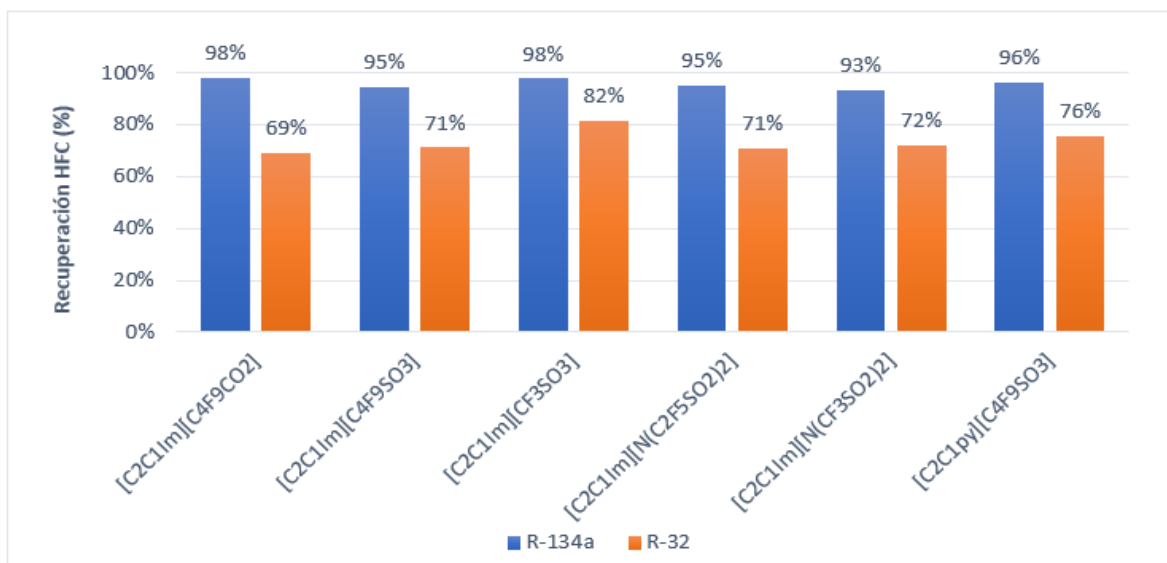


FIGURA 4.13: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.

De los gráficos 4.11, 4.12 y 4.13 se observa que el refrigerante R-134a se absorbe en mayor cantidad en comparación con R-32. Los solventes $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$ y $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ tienen un mejor comportamiento para absorber R-134a, incluso llegando a valores cercanos al 99 % de recuperación para condiciones de L/G=5 y 10 bar. Por otro lado, el refrigerante R-32 se absorbe en mayor proporción utilizando $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ alcanzando porcentajes de 82 % según la figura 4.13.

4.3.2. Análisis de absorción de R-134a y R-32 para el caso a condiciones óptimas L/G=6

De igual forma se consideran presiones de operación en columna de absorción de: 1 bar, 5 bar y 10 bar, donde los flujos máxicos obtenidos se encuentran en los Anexos [6.12](#), [6.13](#) y [6.14](#) respectivamente.

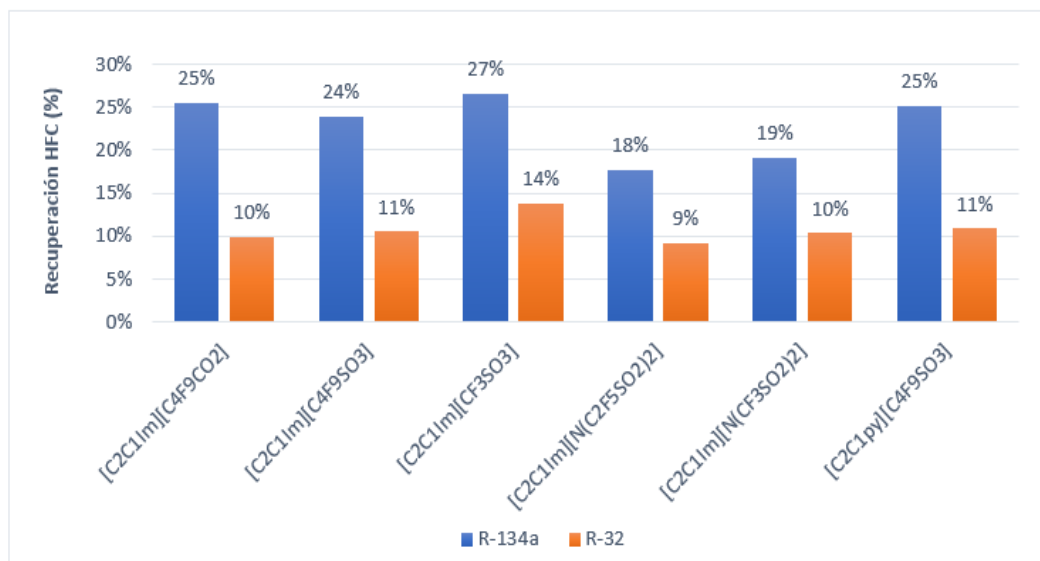


FIGURA 4.14: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.

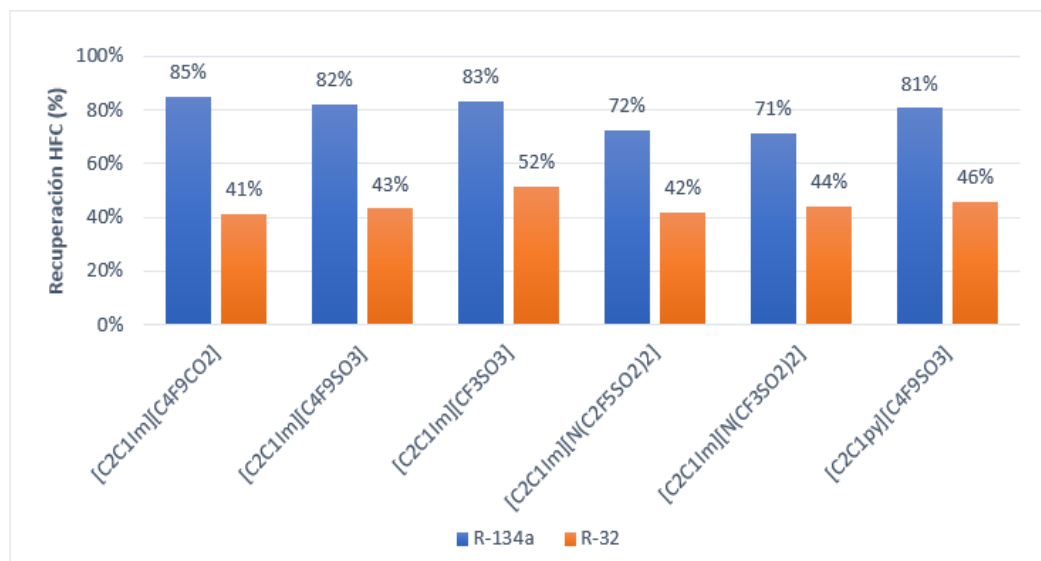


FIGURA 4.15: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.

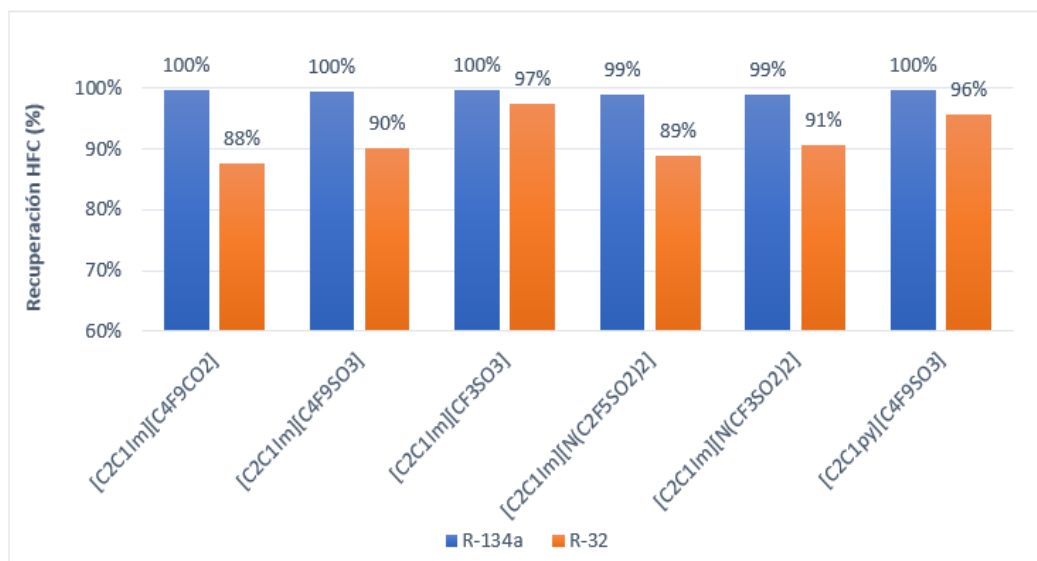


FIGURA 4.16: Comparación de recuperación entre R-134a y R-32 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.

De ambos análisis, se obtiene que a bajas presiones el refrigerante R-134a se absorbe mayormente utilizando [C₂C₁Im][CF₃SO₃], mientras que a altas presiones, el mejor solvente correspondería a [C₂C₁Im][C₄F₉CO₂]. La implicancia de esto correspondería a que el líquido [C₂C₁Im][CF₃SO₃] posee una mayor superficie polar (65,6 Å²), en una de las extremidades de la molécula debido a la presencia de un grupo sulfonato, en cambio, [C₂C₁Im][C₄F₉CO₂] posee un área polar menor (40,1 Å²), generando así, una buena absorción solamente a presiones mayores, lo cual facilitaría la interacción con el gas R-134a. A pesar de esta diferencia, ambos líquidos iónicos fluorados se consideran como buenos absorbentes para el refrigerante R-134a, ya que existe una diferencia mínima cercana al 2% de recuperación entre ambos. Esto se puede apreciar en detalle y gráficamente en las figuras del Anexo [6.1](#), [6.2](#) y [6.3](#) los cuales evalúan el porcentaje de recuperación en función de L/G para las distintas presiones mencionadas anteriormente.

Para el gas R-32 se obtiene que, independiente de la presión en la columna de absorción, el mejor solvente para su absorción, con un porcentaje de recuperación del 97%, corresponde al [C₂C₁Im][CF₃SO₃] en comparación de los FILs restantes, como se muestra gráficamente en las figuras del Anexo [6.4](#), [6.5](#) y [6.6](#).

Comparando los resultados por componentes con los resultados de mezcla, se observa que, pese a que el gas R-134a obtiene una mayor efectividad de absorción utilizando el líquido iónico fluorado $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$, para la mezcla de R-32 y R-134a, sigue siendo una buena alternativa la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$. Este último líquido resulta tener una mayor eficiencia en la recuperación de R-32, excediendo con un porcentaje del 10 % más de absorción de difluorometano en comparación con el resto de los líquidos, generando así, una diferencia en la totalidad de la mezcla de HFC absorbida utilizando este FIL. Esto se puede observar con más claridad en la figura 4.17, la cual muestra los flujos máxicos de recuperación a través de componentes R-134a y R-32 en comparación con la totalidad de recuperación de la mezcla de hidrofluorcarbonos.

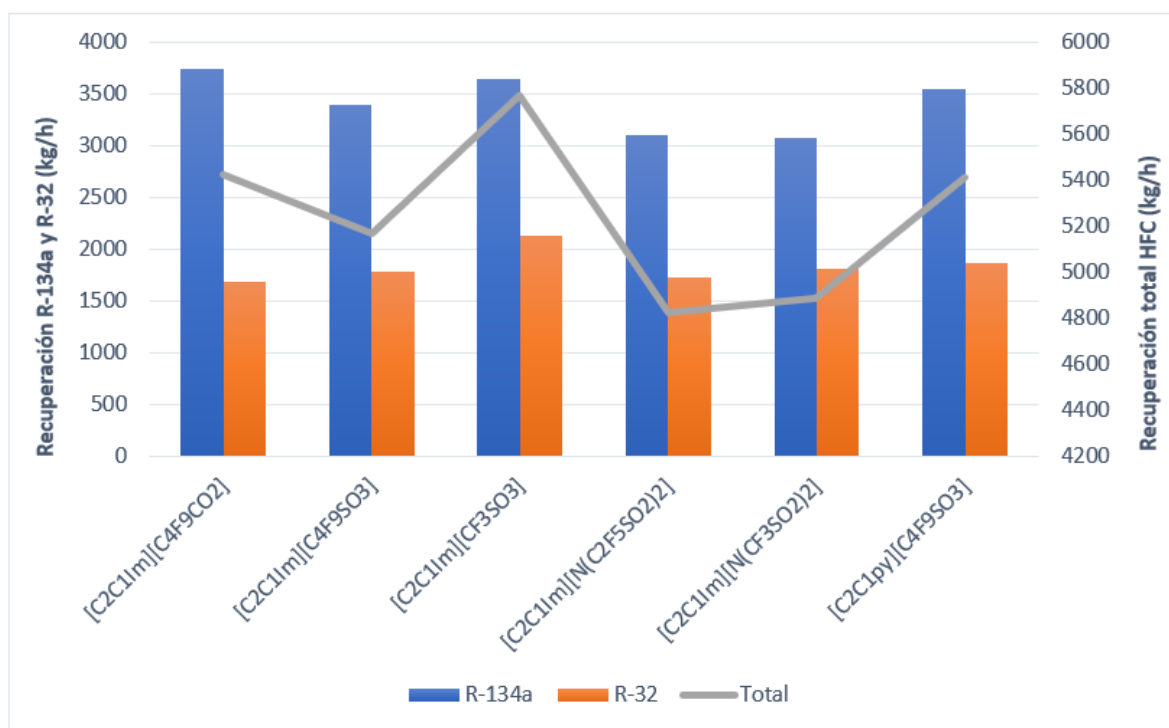


FIGURA 4.17: Comparación de recuperación de componentes R-134a y R-32 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de L/G=5 y una presión de 5 bar de operación en columna de absorción.

4.4. Resultados de absorción para mezcla R-134a, R-32 y R-22

Además, para realizar un análisis exhaustivo del comportamiento de absorción y recuperación de estos líquidos iónicos, se realiza el proceso con una mezcla de tres componentes de gases fluorados R-134a, R-32 y R-22. Se consideran de igual manera los dos análisis de variación en las condiciones de operación, los cuales corresponden a la razón de alimentación "L/G" y la presión en la columna de absorción en 1 bar, 5 bar y 10 bar. Los resultados obtenidos de flujos máxicos se encuentran en los Anexos 6.15, 6.16, 6.17 respectivamente.

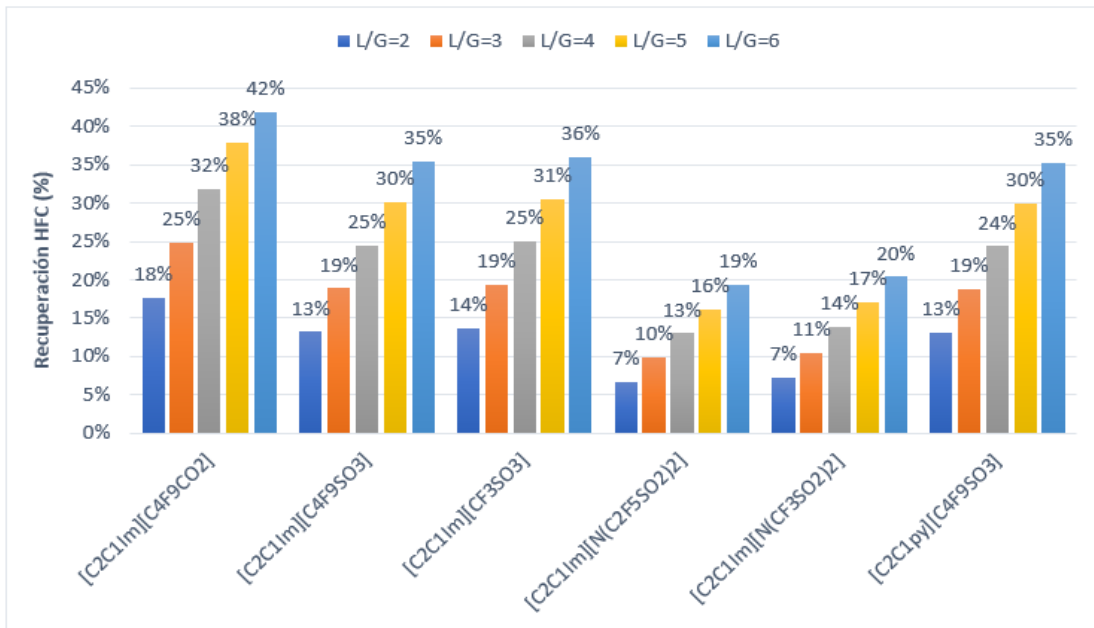


FIGURA 4.18: Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 1 bar en columna de absorción.

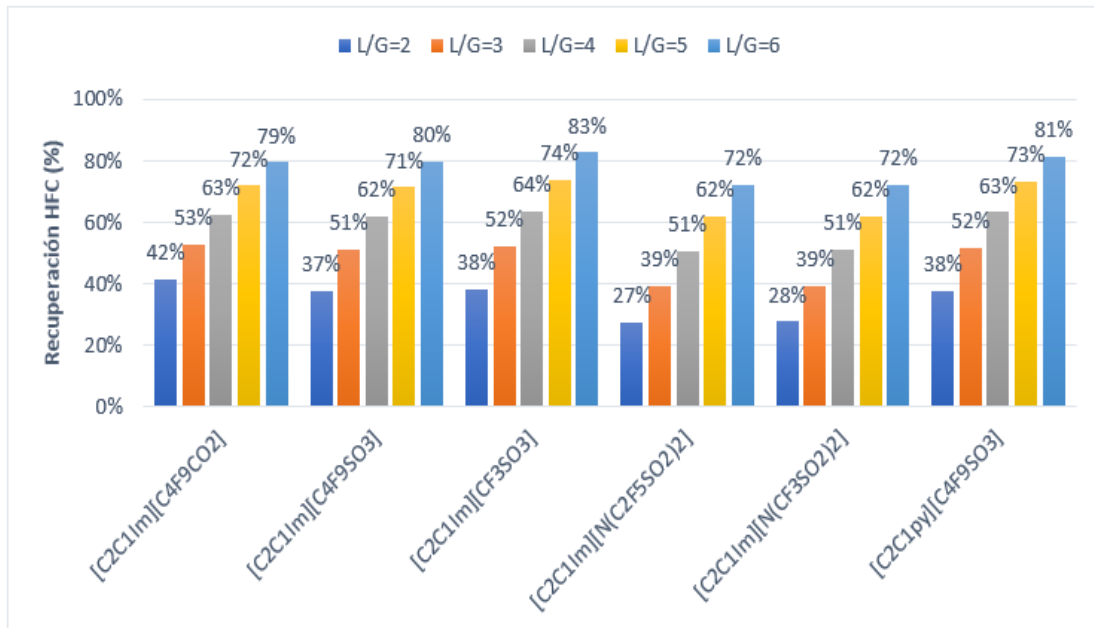


FIGURA 4.19: Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 5 bar en columna de absorción.

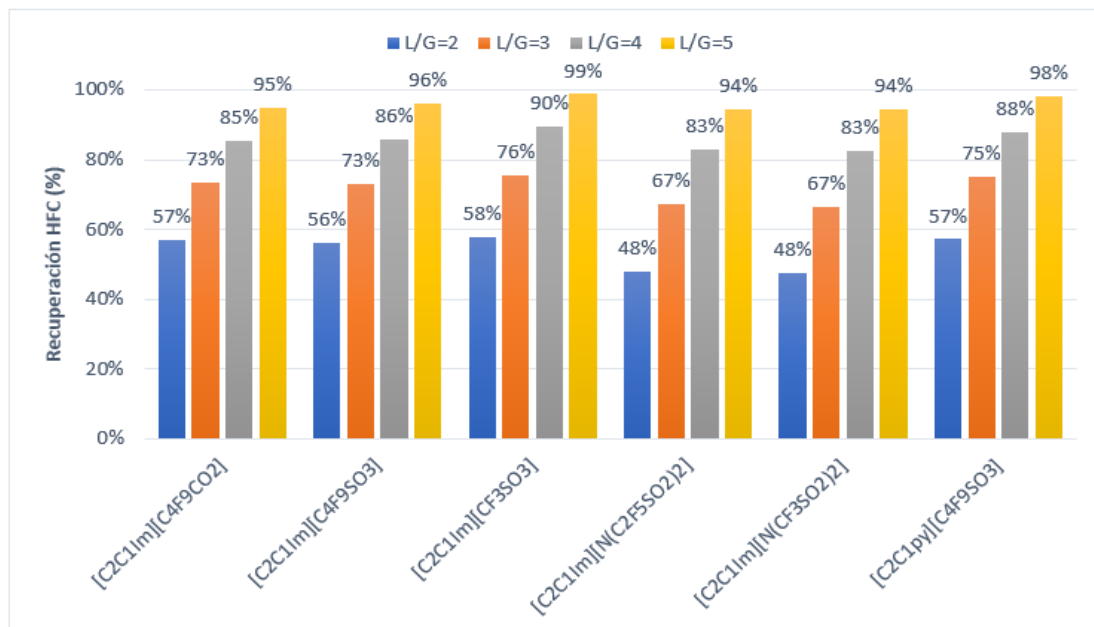


FIGURA 4.20: Recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de la relación L/G a una presión de 10 bar en columna de absorción.

Al igual que los análisis previos se obtiene que, para un aumento de la presión, existe una mayor cantidad de absorción y recuperación de la mezcla HFC. Además, como se menciona anteriormente, se aprecia la existencia de una proporción directa de recuperación de HFC a medida que aumenta L/G, como se observa en las figuras del Anexo [6.7](#), [6.8](#) y [6.9](#).

Para el caso correspondiente a una baja presión (1 bar) se logra una mayor capacidad de absorción con el FIL $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$. Sin embargo, para altas presiones (5 y 10 bar) se consigue el mismo resultado que los análisis anteriores, una mayor cantidad de recuperación de HFC utilizando el líquido $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ (para el caso de presión de 10 bar, se considera hasta L/G=5, debido a que con estas condiciones se alcanza el máximo de absorción, generando así, errores de convergencia y operación para el escenario de L/G=6).

4.5. Análisis de resultados por componentes R-134a, R-32 y R-22

Debido a que en el proceso simulado considera una mezcla de tres refrigerantes R-134a, R-32 y R-22, se analiza de la misma manera, las propiedades de absorción de los FILs por componentes. Se considera que el total de flujo másico es de 10.000 kg/h y que cada uno de estos gases tiene un flujo correspondiente a 3333,3 kg/h. Se analiza el caso base de L/G=5, con los tres casos de variación de presión en columna de absorción, y el caso óptimo, correspondiente a L/G=6 con una presión de 1 bar y 5 bar.

4.5.1. Análisis de absorción de R-134a, R-32 y R-22 para el caso base L/G=5

Para este análisis se consideran 3 condiciones de operación de presión para la columna de absorción: 1 bar, 5 bar y 10 bar, donde los flujos másicos de cada uno de los componentes resultantes se encuentran en los Anexos [6.18](#), [6.19](#), [6.20](#) respectivamente.

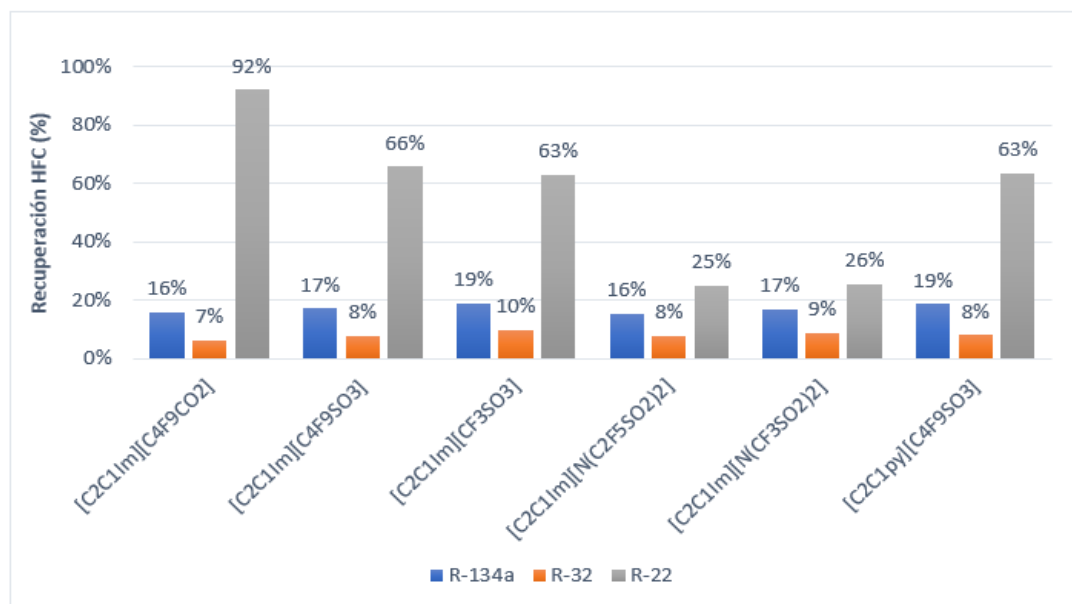


FIGURA 4.21: Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.

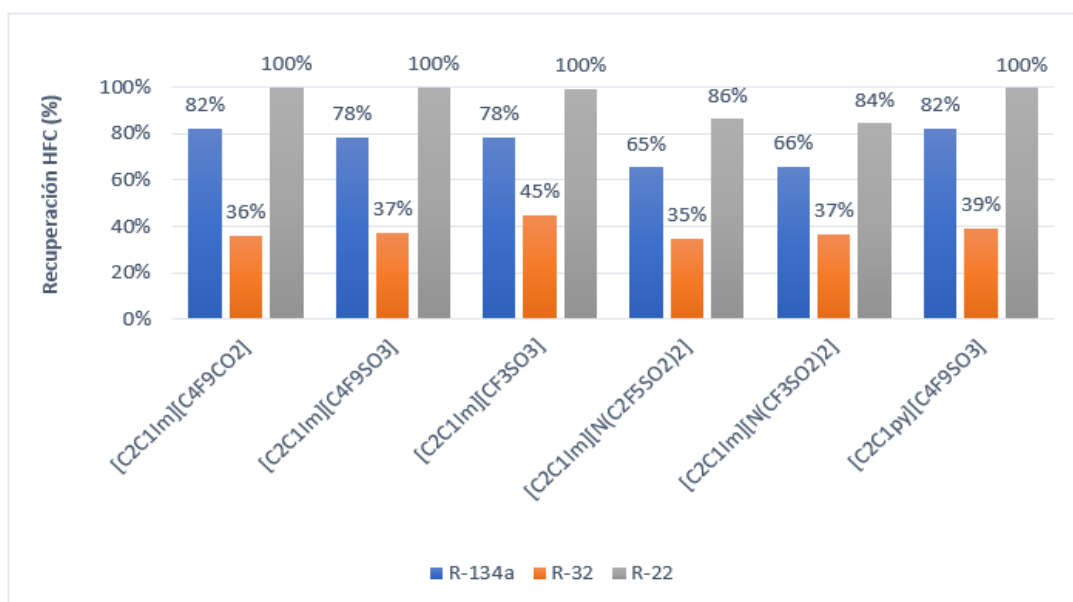


FIGURA 4.22: Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.

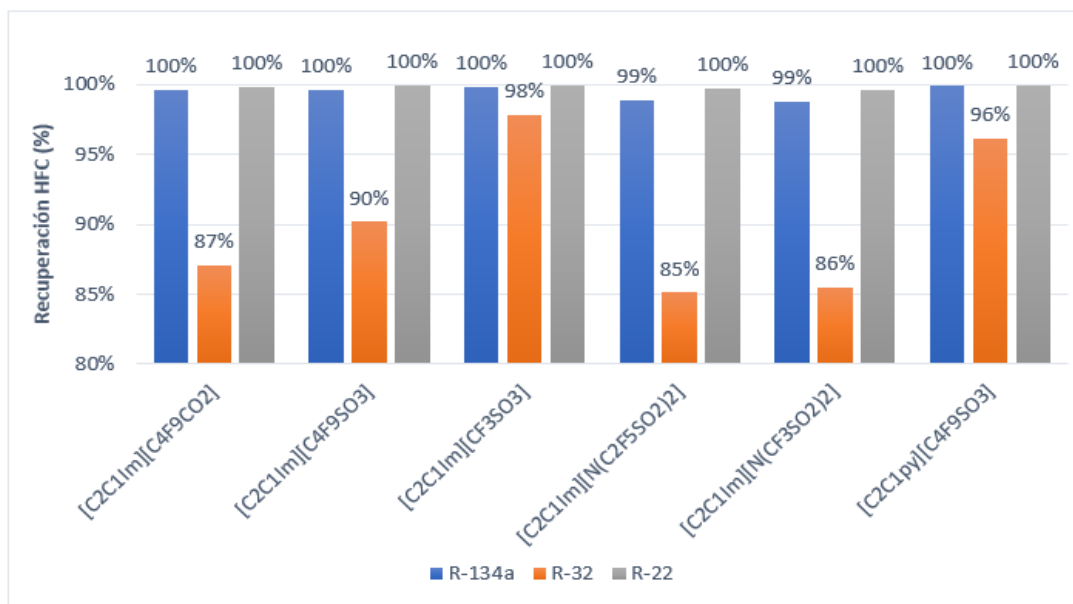


FIGURA 4.23: Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=5 a 10 bar de presión de operación en columna de absorción.

De este análisis, se tiene que para el componente R-22, se logra un alto porcentaje de recuperación a bajas presiones en comparación a los otros dos refrigerantes presentes en la mezcla. La diferencia radica en que el gas R-22 posee en su estructura molecular un átomo de cloro, generando una estructura asimétrica y provocando una desestabilización de la molécula, lo que implica un aumento de las posibilidades de interactuar con el solvente, alcanzando así, una gran cantidad de recuperación inclusive a condiciones de operación bajas. Se observa también, que tiene una mayor interacción con el solvente $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$.

Con respecto a los otros dos refrigerantes, se siguen obteniendo los resultados con respecto al análisis de la mezcla anterior. Donde el R-134a, a bajas presiones, tiene una mayor interacción con $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ y, a altas presiones, con $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$. De igual manera, para el R-32 se tiene que la mejor alternativa de solvente corresponde al líquido $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$.

4.5.2. Análisis de absorción de R-134a, R-32 y R-22 para el caso a condiciones óptimas L/G=6

Para este análisis se consideran las presiones de operación en la columna de absorción de: 1 bar y 5 bar, donde los flujos máscicos de cada uno de los componentes obtenidos se encuentran en los Anexos 6.21 y 6.22 respectivamente.

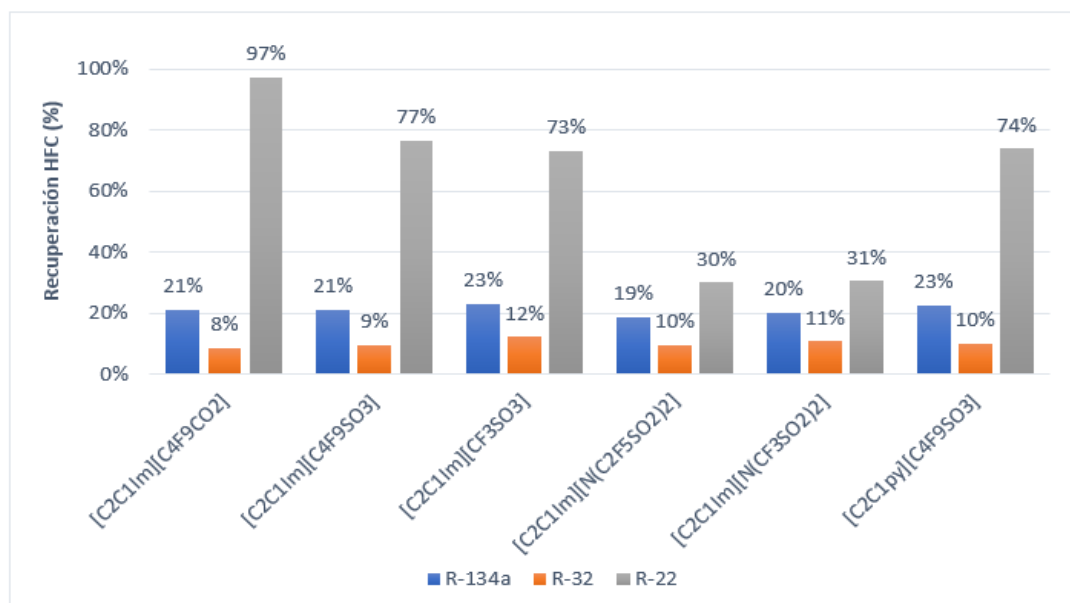


FIGURA 4.24: Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 1 bar de presión de operación en columna de absorción.

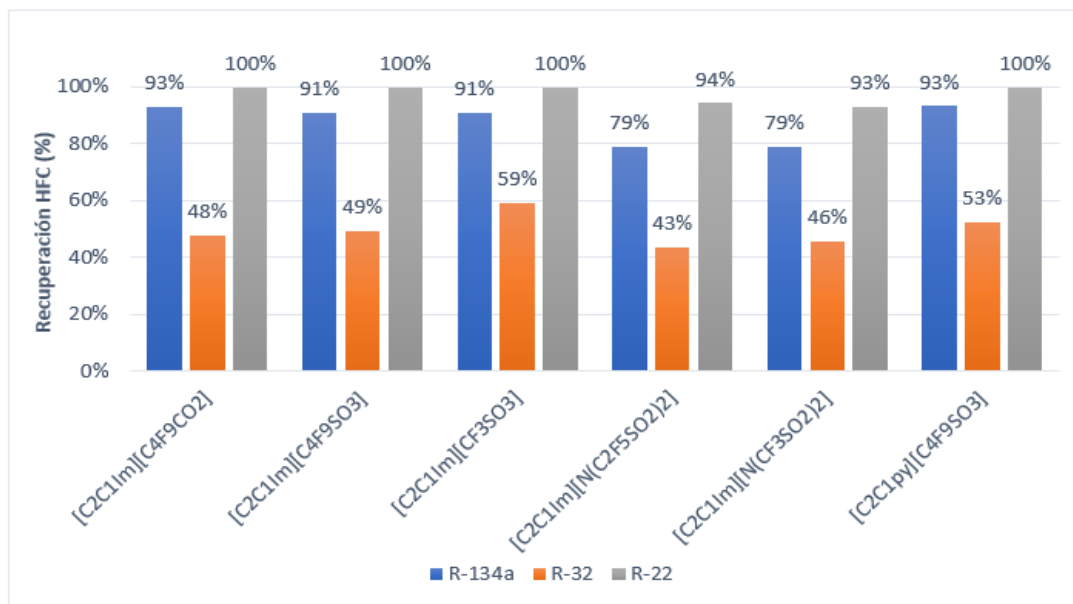


FIGURA 4.25: Comparación de recuperación entre R-134a, R-32 y R-22 utilizando distintos líquidos iónicos. Se considera una tasa L/G=6 a 5 bar de presión de operación en columna de absorción.

Del análisis de estos resultados y del detalle gráfico de las figuras del Anexo [6.10](#), [6.11](#) y [6.12](#) se obtiene que para el gas R-22 se logra una mayor recuperación utilizando el líquido [C₂C₁Im][C₄F₉CO₂], además, se puede observar que a presiones bajas (1 bar) se logra un alto porcentaje de absorción en comparación a los otros gases dentro de la mezcla.

En relación a los otros dos gases restantes, de los análisis presentados y de los gráficos del Anexo figuras [6.13](#), [6.14](#), [6.15](#), [6.16](#), [6.17](#) y [6.18](#) se siguen obteniendo los mismos resultados que en el caso L/G=5.

Si se compara los resultados por componentes y los de la mezcla, se observa que a presiones y condiciones de L/G bajas la absorción de la mezcla HFC queda sujeta al solvente [C₂C₁Im][C₄F₉CO₂], únicamente porque el refrigerante R-22 tiene una recuperación excesivamente mayor en comparación a los otros gases como se muestra en la figura 4.26. No se sugiere utilizar esta combinación de condiciones si el objetivo corresponde a la absorción de R-32 y R-134a.

Por otro lado, a presiones y L/G mayores, existe una estabilidad de absorción de R-22, esto hace que el foco de observación para una mayor recuperación de HFC dependa de

la cantidad de absorción de los componentes R-134a y R-32, lo que implica un cambio de solvente, recomendando la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$, como se muestra en la figura 4.27.

Al igual que la mezcla anterior, los gases R-134a y R-32 siguen teniendo una mayor afinidad utilizando líquidos iónicos que incluyen sulfonatos.

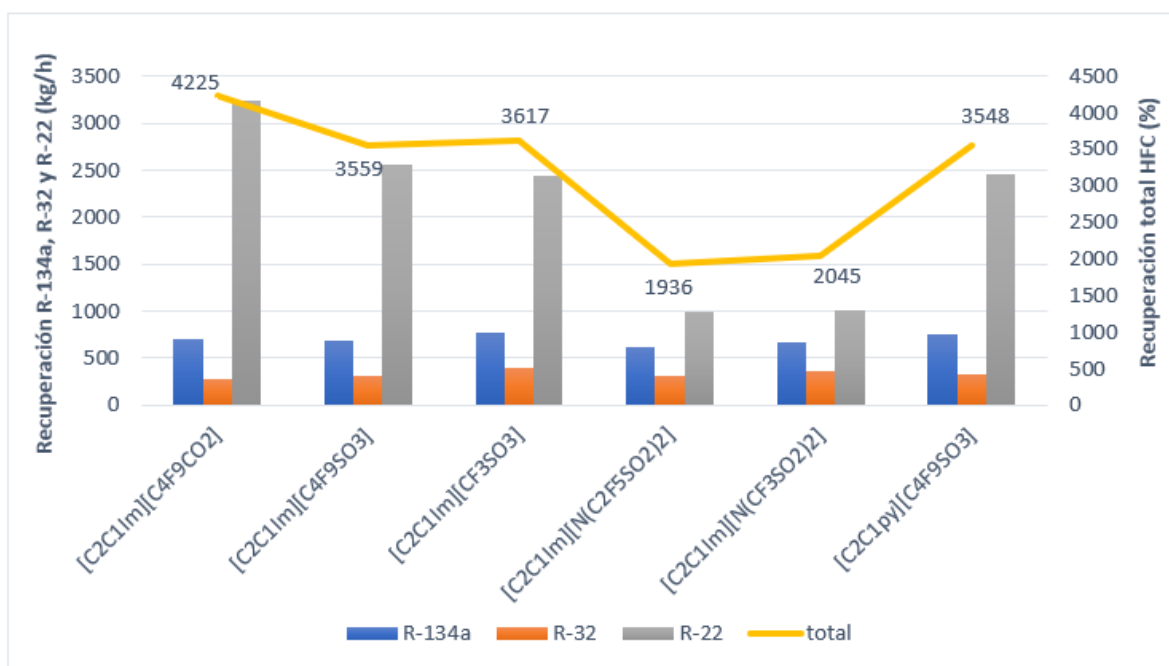


FIGURA 4.26: Comparación de recuperación de componentes R-134a, R-32 y R-22 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de L/G=6 y una presión de 1 bar de operación en columna de absorción.

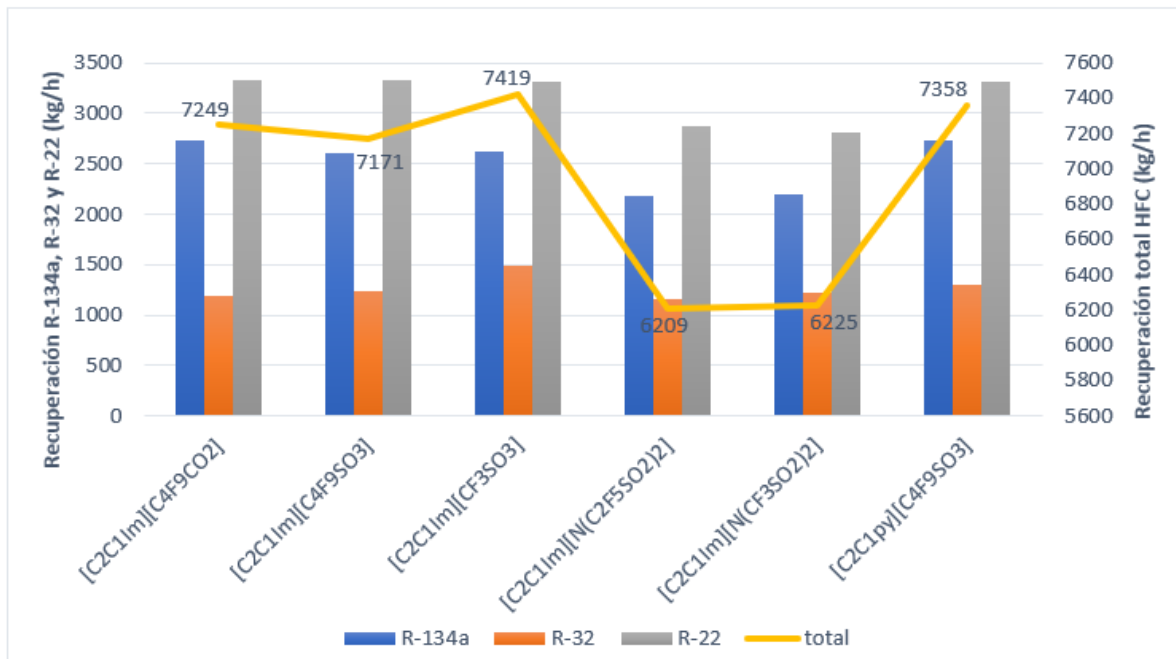


FIGURA 4.27: Comparación de recuperación de componentes R-134a, R-32 y R-22 con recuperación total de la mezcla HFC a una condición de L/G=5 y una presión de 5 bar de operación en columna de absorción.

5. Conclusiones

Los líquidos iónicos sin duda corresponden a solventes de gran interés en la actualidad. Las propiedades como su nula volatilidad, su estabilidad térmica y química, los convierte en solventes altamente interesantes para distintos procesos químicos, especialmente en procesos de separación como absorción.

Del estudio del proceso de absorción y desorción de gases hidrofluorocarbono utilizando líquidos iónicos fluorados y del análisis de sensibilidad, se obtiene que a una mayor presión y una mayor relación L/G en la columna de absorción se logra una mayor eficiencia en el proceso, dicho esto, las condiciones óptimas de operación ocurren para el caso de 10 bar y L/G=6 logrando porcentajes de absorción de la mezcla R-134a y R-32 cercanos al 98 %, de los cuales, se absorbe en una mayor cantidad el componente gaseoso R-134a en comparación de R-32, debido a la mayor cantidad de flúor en su estructura molecular, logrando una mayor solubilidad con los FILs, concordando con estudios anteriores de solubilidad de HFC[17].

Para la columna de desorción, se recomienda una presión de operación de 0,1 bar para lograr un alto porcentaje de recuperación, siendo estos líquidos iónicos fluorados una buena alternativa para trabajar a presiones casi de vacío debido a su bajísima presión de vapor.

De los seis líquidos utilizados se tiene que aquellos que poseen grupos sulfonatos y aniones carboxilato tienen una mayor efectividad a la hora de absorber los gases HFC, ya que poseen una mayor superficie polar en sus extremidades, generando una fácil y eficaz interacción entre las moléculas. Dentro de los líquidos que poseen estas propiedades, $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ resulta ser la mejor alternativa para la recuperación de la mezcla de estos gases. Por otro lado, se observa que los FILs con una mayor cantidad de flúor en

su estructura molecular, alcanzan una menor capacidad de absorción debido a un incremento en su peso molecular, generando una limitada y lenta interacción con los componentes gaseosos. Se analiza también, que la variación del catión en los FILs no produce una gran diferencia en la capacidad de absorción, como se observa con los líquidos $[C_2C_1Im][C_4F_9SO_3]$ y $[C_2C_1py][C_4F_9SO_3]$, los cuales poseen un rango de diferencia entre [1 %-2 %] de recuperación de HFC.

De los análisis por componentes se recomienda la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ a bajas presiones y $[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$ a altas presiones como solventes para la absorción de R-134a. Mientras que, para la absorción del gas R-32 se recomienda la utilización de $[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$ independiente de las condiciones a las cuales se quiera operar.

La mezcla R-134a, R-32 y R-22 se utilizó para verificar las propiedades de interacción y absorción de estos líquidos cuando existe un componente gaseoso adicional. Se concluyen los mismos resultados mencionados anteriormente, obteniendo una consistencia de los datos presentados. Además, se debe destacar que el gas R-22 posee una absorción considerablemente mayor en comparación con R-134a y R-32, debido a que presenta en su estructura un átomo de cloro, provocando el desplazamiento de las cargas de electrones hacia los átomos de flúor, dejando a la molécula inestable, con una mayor facilidad de interaccionar con los solventes del sistema. Como el refrigerante R-22 es uno de los gases que presentan un elevado potencial contaminante y se ha restringido su uso y producción, para efectos de este trabajo, se toma el proceso de absorción como una alternativa o herramienta para la recuperación y captura de procesos existentes que aún utilicen este refrigerante.

El proceso de absorción de gases fluorados utilizando FILs logra el objetivo de obtener altos porcentajes de recuperación de HFCs, siendo una alternativa de aplicabilidad en procesos industriales para mitigar los daños que provocan en el medioambiente.

Bibliografía

- (1) Gür, T. M. *Progress in Energy and Combustion Science* **2022**, *89*, DOI: 10.1016/j.pecs.2021.100965.
- (2) Sosa, J. E.; Malheiro, C.; Ribeiro, R. P.; Castro, P. J.; Piñeiro, M. M.; Araújo, J. M.; Plantier, F.; Mota, J. P. y Pereiro, A. B. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology* **2020**, *95*, 1892-1905, eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jctb.6371>.
- (3) EPA, U. Overview of Greenhouse Gases.
- (4) Sovacool, B. K.; Griffiths, S.; Kim, J. y Bazilian, M. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2021**, *141*, 110759.
- (5) Sosa, J. E.; Santiago, R.; Hospital-Benito, D.; Costa Gomes, M.; Araújo, J. M. M.; Pereiro, A. B. y Palomar, J. *Environmental Science & Technology* **2020**, *54*, 12784-12794.
- (6) Greenhouse gases data viewer, E. Overview of Greenhouse Gases.
- (7) Gschrey, B.; Schwarz, W.; Elsner, C. y Engelhardt, R. *Greenhouse Gas Measurement and Management* **2011**, *1*, 85-92, eprint: <https://doi.org/10.1080/20430779.2011.579352>.
- (8) Barnes, P. W.; Bornman, J. F.; Pandey, K. K.; Bernhard, G. H.; Bais, A. F.; Neale, R. E.; Robson, T. M.; Neale, P. J.; Williamson, C. E.; Zepp, R. G.; Madronich, S.; Wilson, S. R.; Andrady, A. L.; Heikkilä, A. M. y Robinson, S. A. *Global Change Biology* **2021**, *27*, 5681-5683, eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/gcb.15841>.
- (9) Heath, E. A. **2017**, *56*, 193-205.
- (10) Esaki, T. y Kobayashi, N. *Chemical Engineering Research and Design* **2021**, *171*, 340-348.
- (11) Jovell, D.; Pou, J. O.; Llovel, F. y Gonzalez-Olmos, R. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **2022**, *10*, 71-80.

- (12) Pereiro, A. B.; Araújo, J. M. M.; Martinho, S.; Alves, F.; Nunes, S.; Matias, A.; Duarte, C. M. M.; Rebelo, L. P. N. y Marrucho, I. M. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **2013**, *1*, 427-439.
- (13) Del Olmo Morales, L. **2016**.
- (14) Lorenzo, R. S. Advanced systems based on ionic liquids for gas capture and conversion, Universidad autónoma de Madrid, 2019.
- (15) Forsyth, S. A.; Pringle, J. M. y MacFarlane, D. R. *Ionic liquids - An overview*, 2004.
- (16) Aparicio, S.; Atilhan, M. y Karadas, F. *Industrial Engineering Chemistry Research* **2010**, *49*, 9580-9595.
- (17) Sosa, J. E.; Ribeiro, R. P.; Castro, P. J.; Mota, J. P.; Araújo, J. M. y Pereiro, A. B. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **2019**, *58*, 20769-20778.
- (18) Diedenhofen, M. y Klamt, A. *Fluid Phase Equilibria* **2010**, *294*, 31-38.
- (19) Dong, Y.; Huang, S.; Guo, Y. y Lei, Z. *AIChE Journal* **2020**, *66*, DOI: 10.1002/aic.16787.
- (20) Padiuszyński, K. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2017**, *19*, 11835-11850.
- (21) Diedenhofen, M.; Eckert, F. y Klamt, A. *Journal of Chemical and Engineering Data* **2003**, *48*, 475-479.
- (22) Klamt, A. The COSMO and COSMO-RS solvation models, 2011.
- (23) Haydary, J., *Chemical process design and simulation : Aspen Plus and Aspen HYSYS applications*, 391.
- (24) Santiago, R.; Bedia, J.; Moreno, D.; Moya, C.; de Riva, J.; Larriba, M. y Palomar, J. *Separation and Purification Technology* **2018**, *204*, 38-48.
- (25) .
- (26) Wang, G. Q.; Yuan, X. G. y Yu, K. T. Review of mass-transfer correlations for packed columns, 2005.
- (27) Almoslh, A.; Alobaid, F.; Heinze, C. y Epple, B. *Applied Sciences* **2020**, *10*, 2362.

6. Anexos

6.1. Anexo A: Perfiles y propiedades moleculares de FILS en la metodología ASPEN/COSMO-SAC

Se presentan las propiedades de los seis líquidos iónicos fluorados utilizados, los cuales se ingresan manualmente como pseudocomponentes en el programa ASPEN plus v11 utilizando el modelo COSMOSAC.

TABLA 6.1: Propiedades y perfiles sigma (sv) de los diferentes líquidos iónicos fluorados.

Fluido	[C ₂ C ₁ Im][C ₄ F ₉ CO ₂]	[C ₂ C ₁ Im][C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₂ C ₁ Im][CF ₃ SO ₃]	[C ₂ C ₁ Im][N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	[C ₂ C ₁ Im][N(CF ₃ SO ₂) ₂]	[C ₂ C ₁ py][C ₄ F ₉ SO ₃]	
MW	374,2	410,26	260,24	491,33	391,31	421,28	
Densidad g/ml	1,41	1,45	1,35	1,48	1,42	1,46	
CSACVL	374,75	399,96	282,13	463,18	385,34	411,7	
NBP K	1152,38	1315,23	1201,73	1271,44	1084,43	1357,4	
Viscosidad 1(A)	-8,62	-8,94	-5,83	-	-7,33	-12,79	
MULAND 2 (B)	3954,74	4174,95	2852,84	-	3238,71	5408,33	
SGPRF1-1	1	0	0	0	0	0	
	2	0	0	0	0	0	
	3	0	0	0	0	0	
	4	0	0	0	0	0	
	5	0	0	0	0	0	
	6	0	0	0	0	0	
	7	0	0	0	0	0	
	8	0	0	0	0	0	
	9	0	0	0	0	0	
	10	0	0	0	0	0	
	11	0	0	0,01	0,03	0,02	0,11
	12	0,48	0,58	0,52	0,61	0,56	0,76
SGPRF2-1	1	1,93	2,25	2,03	2,43	2,22	1,63
	2	3,73	3,93	3,75	4,24	4,04	2,73
	3	4,47	4,35	4,22	4,6	4,31	5,29
	4	5,76	6,15	5,66	6,31	5,39	7,71
	5	9,73	10,77	9,8	10,23	8,86	8,21
	6	12,16	13	11,88	11,98	10,07	10,45
	7	12,14	13,42	11,89	13,29	10,3	14,71
	8	13,79	16,87	14,5	0,02	14,4	16,89
	9	16,98	20,12	17,94	20,61	18,89	17,81
	10	18,11	17,75	17,57	18,38	18,69	18,16
	11	14,9	12,13	13,35	12,76	15,41	17,3
	12	12,1	11,01	9,63	12,26	13,83	17,93
SGPRF3-1	1	15,59	16,64	9,36	19,57	16,85	22,37
	2	24,78	28,28	11,95	33,57	24,33	30,89
	3	34,06	39,51	14,69	46,98	33,13	38,92
	4	33	34,87	16,93	41,48	31,19	33,58
	5	21,32	17,25	16,19	20,57	15,81	16,65
	6	12,22	6,15	9,83	8,32	5,79	6,02
	7	7,68	4,14	3,95	5,23	4,58	4,09
	8	3,8	3,22	1,88	3,35	4,48	3,62
	9	2,12	1,68	1,63	3,64	5,47	2,59
	10	1,76	1,08	2,35	5,09	6,27	1,71
	11	1,58	1,6	3,25	8,52	7,95	1,97
	12	1,8	2,11	4,11	12,7	11,56	2,89
SGPRF4-1	1	2,21	3,25	5,3	12,87	12,4	4,89
	2	1,98	6,17	6,83	8,52	8,09	8,06
	3	1,95	9,57	8,15	3,52	2,79	9,93
	4	2,46	10,58	8,56	0,94	0,3	9,31
	5	3,6	7,61	6,17	0,28	0	6,07
	6	4,82	3,08	2,16	0,05	0	1,95
	7	4,67	0,54	0,19	0	0	0,12
	8	3,5	0,01	0	0	0	0
	9	2,08	0	0	0	0	0
	10	0,84	0	0	0	0	0
	11	0,19	0	0	0	0	0
	12	0	0	0	0	0	0
SGPRF5-1	1	0	0	0	0	0	
	2	0	0	0	0	0	
	3	0	0	0	0	0	
	4	0	0	0	0	0	
	5	0	0	0	0	0	
	6	0	0	0	0	0	
	7	0	0	0	0	0	
	8	0	0	0	0	0	
	9	0	0	0	0	0	
	10	0	0	0	0	0	
	11	0	0	0	0	0	
	12	0	0	0	0	0	

6.2. Anexo B: Resultados simulación mezcla R-134a y R-32

6.2.1. Resultados caso base

Se presenta los resultados de los flujos máxicos correspondientes a la recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 en comparación con el flujo de alimentación del sistema.

TABLA 6.2: Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a y R-32 a condiciones de L/G=5 y 5 bar en columna de absorción.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC (kg/h)	Recuperación HFC (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	10.000	5.422	54 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	10.000	5.168	52 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	10.000	5.769	58 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	10.000	4.827	48 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	10.000	4.887	49 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	10.000	5.412	54 %

6.2.2. Resultados análisis de variación de presión en columna de absorción

Flujos máxicos resultantes de la recuperación de HFC de la mezcla R-134a y R-32 según el análisis de sensibilidad al variar la presión en la columna de absorción.

TABLA 6.3: Comparación de porcentaje de recuperación total de mezcla R-134a y R-32 considerando una tasa L/G=5 a presiones de 1 bar, 5 bar y 10 bar en columna de absorción.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC a 1 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 5 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 10 bar (kg/h)
$[C_2C_1Im] [C_4F_9CO_2]$	10.000	1.483	5.422	8.356
$[C_2C_1Im] [C_4F_9SO_3]$	10.000	1.420	5.168	8.297
$[C_2C_1Im] [CF_3SO_3]$	10.000	1.698	5.769	8.965
$[C_2C_1Im] [N(C_2F_5SO_2)_2]$	10.000	1.123	4.827	8.280
$[C_2C_1Im] [N(CF_3SO_2)_2]$	10.000	1.231	4.887	8.279
$[C_2C_1py] [C_4F_9SO_3]$	10.000	1.505	5.412	8.588

6.2.3. Resultados análisis de variación de L/G en columna de absorción

Se presentan resultados relacionados a los flujos máxicos de recuperación de HFC de la mezcla R-134a y R-32 según el análisis de sensibilidad al variar L/G en la columna de absorción.

TABLA 6.4: Resultados de recuperación total de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=2 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC a 1 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 5 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 10 bar (kg/h)
$[C_2C_1Im] [C_4F_9CO_2]$	10.000	624	2.426	4.160
$[C_2C_1Im] [C_4F_9SO_3]$	10.000	580	2.191	3.805
$[C_2C_1Im] [CF_3SO_3]$	10.000	733	2.620	4.376
$[C_2C_1Im] [N(C_2F_5SO_2)_2]$	10.000	460	2.073	3.871
$[C_2C_1Im] [N(CF_3SO_2)_2]$	10.000	503	2.077	3.783
$[C_2C_1py] [C_4F_9SO_3]$	10.000	614	2.301	3.983

TABLA 6.5: Resultados de recuperación total de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=3 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC a 1 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 5 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 10 bar (kg/h)
$[C_2C_1Im] [C_4F_9CO_2]$	10.000	911	3.443	5.802
$[C_2C_1Im] [C_4F_9SO_3]$	10.000	858	3.202	5.471
$[C_2C_1Im] [CF_3SO_3]$	10.000	1.054	3.681	6.085
$[C_2C_1Im] [N(C_2F_5SO_2)_2]$	10.000	681	2.999	5.496
$[C_2C_1Im] [N(CF_3SO_2)_2]$	10.000	744	3.017	5.395
$[C_2C_1py] [C_4F_9SO_3]$	10.000	910	3.365	5.718

TABLA 6.6: Resultados de recuperación de flujos máxicos de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=4 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC a 1 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 5 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 10 bar (kg/h)
$[C_2C_1Im] [C_4F_9CO_2]$	10.000	911	3.443	5.802
$[C_2C_1Im] [C_4F_9SO_3]$	10.000	858	3.202	5.471
$[C_2C_1Im] [CF_3SO_3]$	10.000	1.054	3.681	6.085
$[C_2C_1Im] [N(C_2F_5SO_2)_2]$	10.000	681	2.999	5.496
$[C_2C_1Im] [N(CF_3SO_2)_2]$	10.000	744	3.017	5.395
$[C_2C_1py] [C_4F_9SO_3]$	10.000	910	3.365	5.718

TABLA 6.7: Resultados de recuperación de flujos máxicos de la mezcla R-134a y R-32 a un L/G=6 y una variación de presión de 1 bar, 5 bar y 10 bar.

ILs	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC a 1 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 5 bar (kg/h)	Recuperación HFC a 10 bar (kg/h)
$[C_2C_1Im] [C_4F_9CO_2]$	10.000	1.768	6.314	9.362
$[C_2C_1Im] [C_4F_9SO_3]$	10.000	1.723	6.274	9.485
$[C_2C_1Im] [CF_3SO_3]$	10.000	2.021	6.745	9.858
$[C_2C_1Im] [N(C_2F_5SO_2)_2]$	10.000	1.345	5.700	9.396
$[C_2C_1Im] [N(CF_3SO_2)_2]$	10.000	1.475	5.779	9.475
$[C_2C_1py] [C_4F_9SO_3]$	10.000	1.803	6.337	9.765

6.2.4. Resultados análisis de variación de presión en columna de desorción

Resultados relacionados a los flujos máxicos de recuperación de HFC según un análisis de sensibilidad al variar la presión en la columna de desorción.

TABLA 6.8: Resultados de recuperación de flujos máxicos de la mezcla R-134a y R-32 en función de la variación de presión en columna de desorción.

Presión (bar)	Entrada HFC (kg/h)	Recuperación HFC (kg/h)	Recuperación HFC (%)
0,1	9.882	9.858	99,8 %
0,2	9.902	9.855	99,5 %
0,4	9.944	9.849	99,1 %
0,6	9.985	9.844	98,6 %
0,8	10.027	9.837	98,1 %
1	10.070	9.831	97,6 %
1,5	10.177	9.815	96,4 %
2	10.286	9.798	95,3 %
3	10.512	9.761	92,9 %
5	11.001	9.675	87,9 %
10	12.558	9.369	74,6 %

6.2.5. Resultados de análisis por componentes de la mezcla R-134a y R-32

Se presentan los resultados relacionados a los flujos máxicos de recuperación por componentes R-134a y R-32 obtenidos para los dos casos considerados L/G=5 y L/G=6.

TABLA 6.9: Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 1 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	1.067	21 %	416	8 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	986	20 %	435	9 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	1.119	22 %	580	12 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	738	15 %	385	8 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	800	16 %	431	9 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	1.051	21 %	454	9 %

TABLA 6.10: Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 5 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3.734	75 %	1.688	34 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3.391	68 %	1.777	36 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	3.640	73 %	2.128	43 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	3.103	62 %	1.724	34 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	3.074	61 %	1.813	36 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3.549	71 %	1.863	37 %

TABLA 6.11: Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=5 y una presión de 10 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	4.900	98 %	3.456	69 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.736	95 %	3.561	71 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	4.889	98 %	4.076	82 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	4.744	95 %	3.536	71 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	4.674	93 %	3.605	72 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.810	96 %	3.778	76 %

TABLA 6.12: Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 1 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	1.272	25 %	496	10 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	1.197	24 %	526	11 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	1.331	27 %	691	14 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	884	18 %	461	9 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	958	19 %	517	10 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	1.259	25 %	544	11 %

TABLA 6.13: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 5 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	4.255	85 %	2.060	41 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.115	82 %	2.159	43 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	4.168	83 %	2.578	52 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	3.614	72 %	2.086	42 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	3.574	71 %	2.205	44 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.037	81 %	2.299	46 %

TABLA 6.14: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a y R-32 a un L/G=6 y una presión de 10 bar.

ILs	Recuperación	Recuperación	Recuperación	Recuperación
	R-134a (kg/h)	R-134a (%)	R-32 (kg/h)	R-32 (%)
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ CO ₂]	4.980	99,6 %	4.382	88 %
[C ₂ C ₁ Im] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.977	99,5 %	4.508	90 %
[C ₂ C ₁ Im] [CF ₃ SO ₃]	4.990	99,8 %	4.869	97 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	4.948	99,0 %	4.447	89 %
[C ₂ C ₁ Im] [N(CF ₃ SO ₂) ₂]	4.943	98,9 %	4.532	91 %
[C ₂ C ₁ py] [C ₄ F ₉ SO ₃]	4.985	99,7 %	4.779	96 %

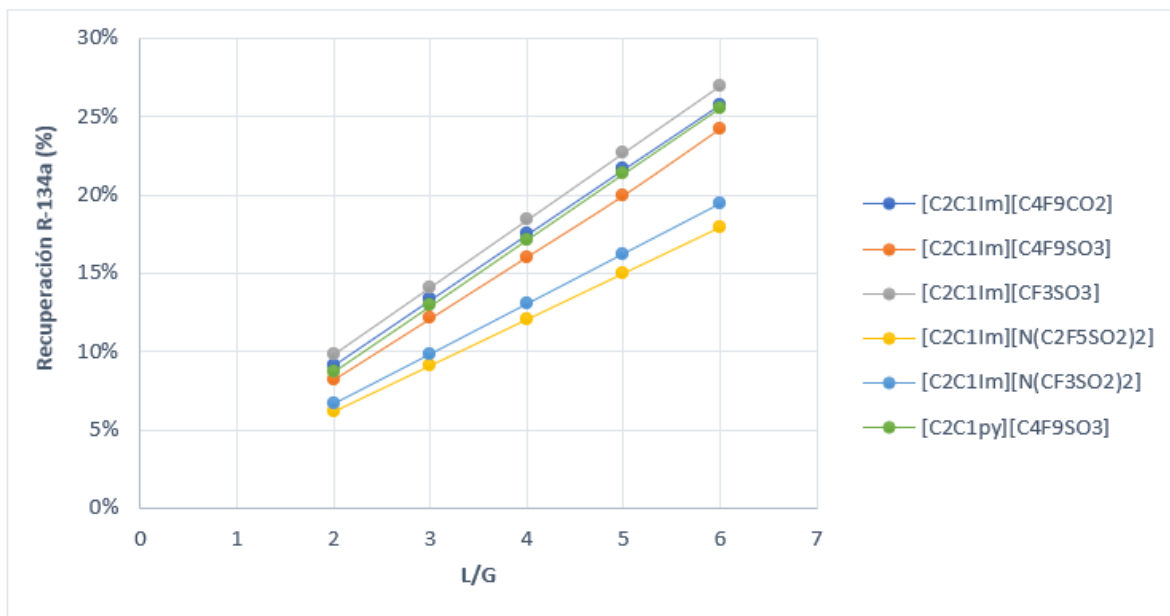


FIGURA 6.1: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

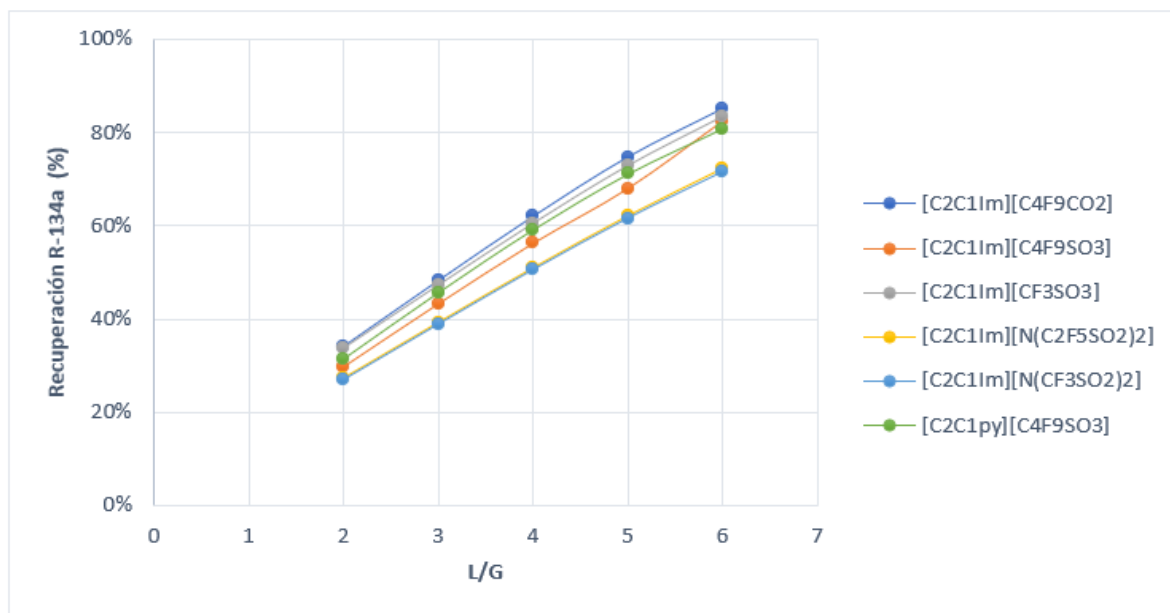


FIGURA 6.2: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

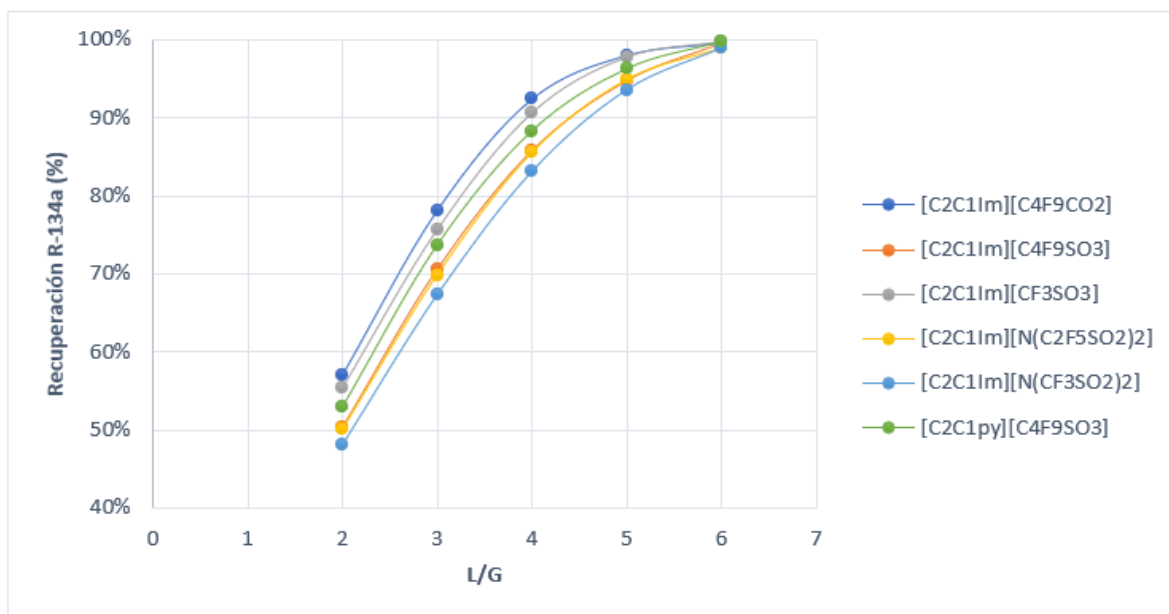


FIGURA 6.3: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

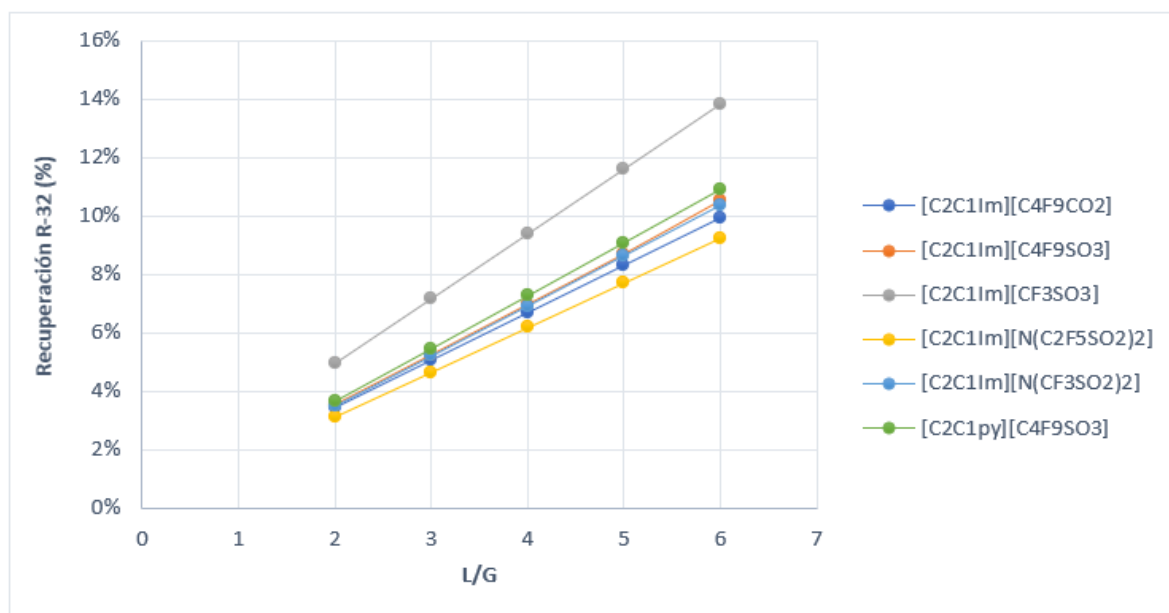


FIGURA 6.4: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

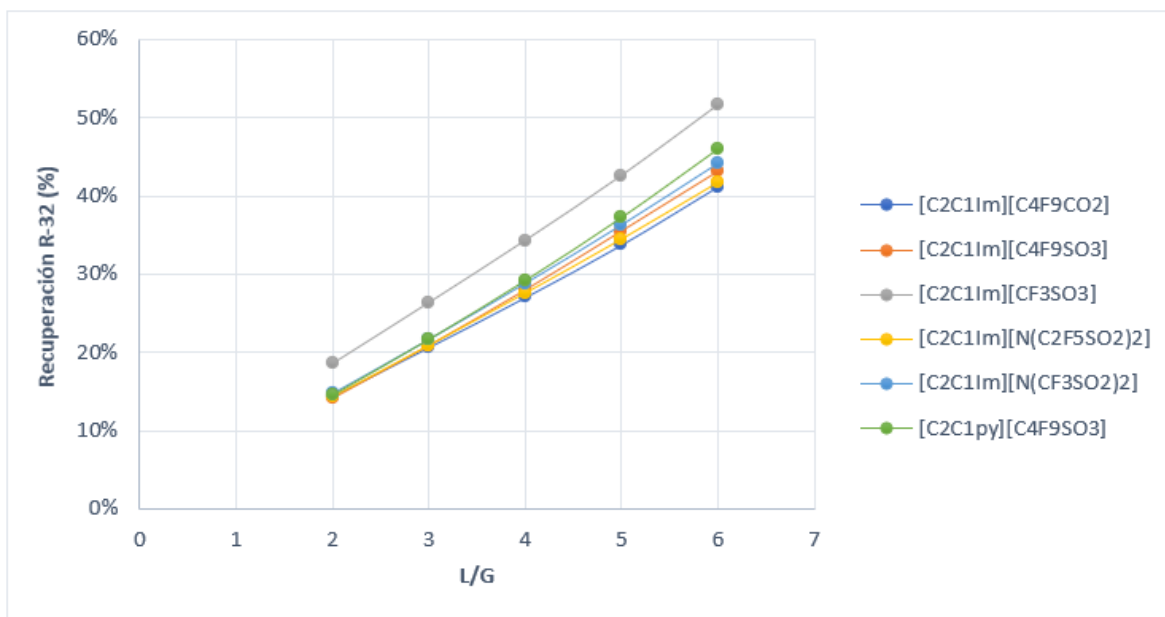


FIGURA 6.5: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

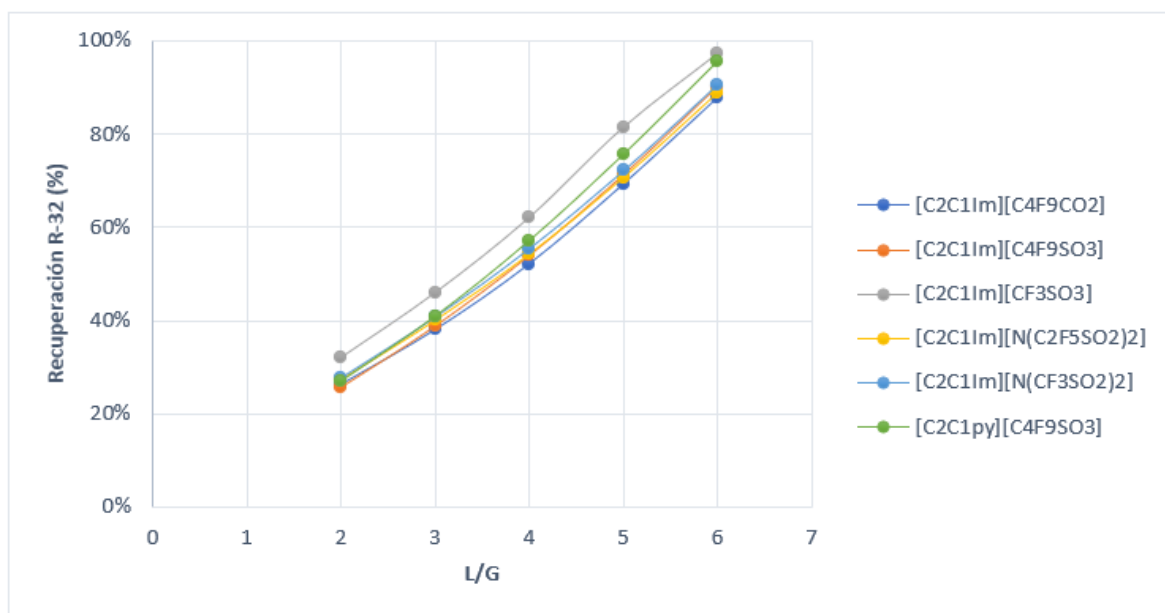


FIGURA 6.6: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a y R-32 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

6.3. Anexo C: Resultados simulación mezcla R-134a, R-32 y R-22

Se presentan los resultados y análisis de sensibilidad de la simulación correspondiente a la mezcla R-134a, R-32 y R-22.

6.3.1. Resultados de recuperación en función de L/G y presión en columna de absorción

TABLA 6.15: Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 1 bar en columna de absorción.

ILs	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9CO_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[CF_3SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(C_2F_5SO_2)_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(CF_3SO_2)_2]$	$[C_2C_1py]$ $[C_4F_9SO_3]$
L/G=2	1.763	1.324	1.373	672	723	1.309
L/G=3	2.493	1.894	1.940	988	1.053	1.878
L/G=4	3.199	2.462	2.507	1.304	1.383	2.445
L/G=5	3.812	3.022	3.070	1.620	1.714	3.006
L/G=6	4.225	3.559	3.617	1.936	2.046	3.548

TABLA 6.16: Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 5 bar en columna de absorción.

ILs	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9CO_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[CF_3SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(C_2F_5SO_2)_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(CF_3SO_2)_2]$	$[C_2C_1py]$ $[C_4F_9SO_3]$
L/G=2	4.171	3.754	3.832	2.724	2.775	3.779
L/G=3	5.289	5.110	5.223	3.913	3.945	5.194
L/G=4	6.309	6.197	6.383	5.087	5.105	6.351
L/G=5	7.250	7.172	7.420	6.210	6.226	7.360
L/G=6	8.018	7.998	8.322	7.223	7.253	8.182

TABLA 6.17: Resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a 10 bar en columna de absorción.

ILs	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9CO_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[C_4F_9SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[CF_3SO_3]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(C_2F_5SO_2)_2]$	$[C_2C_1Im]$ $[N(CF_3SO_2)_2]$	$[C_2C_1py]$ $[C_4F_9SO_3]$
L/G=2	5.728	5.615	5.806	4.789	4.767	5.728
L/G=3	7.368	7.327	7.582	6.738	6.670	7.515
L/G=4	8.583	8.627	8.990	8.316	8.274	8.811
L/G=5	9.554	9.660	9.922	9.462	9.467	9.867

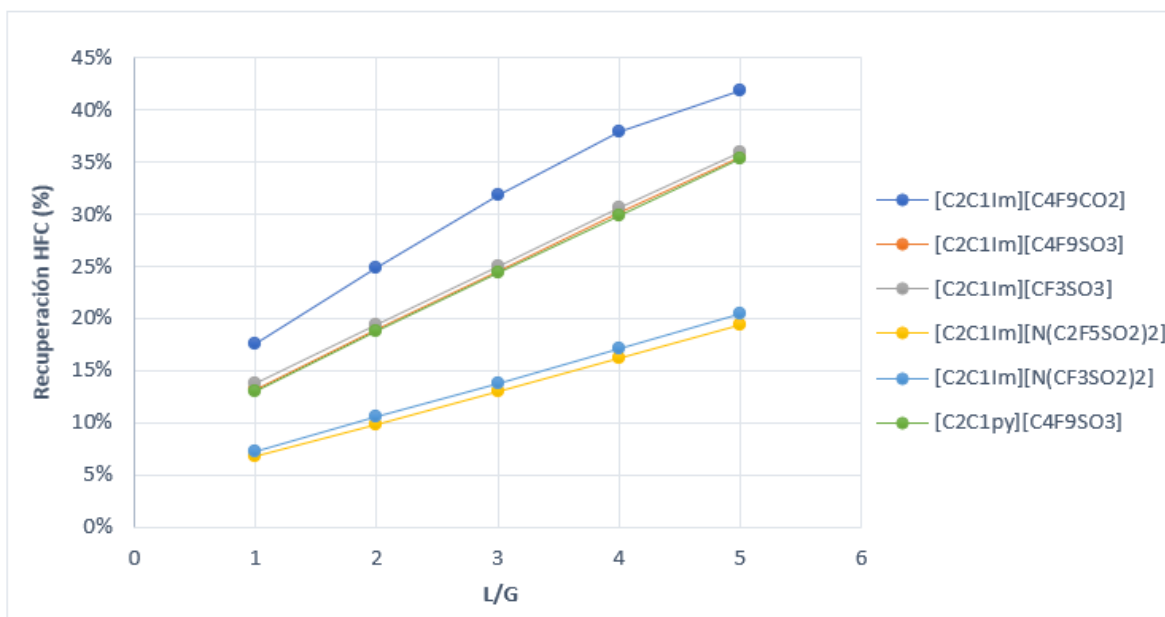


FIGURA 6.7: Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

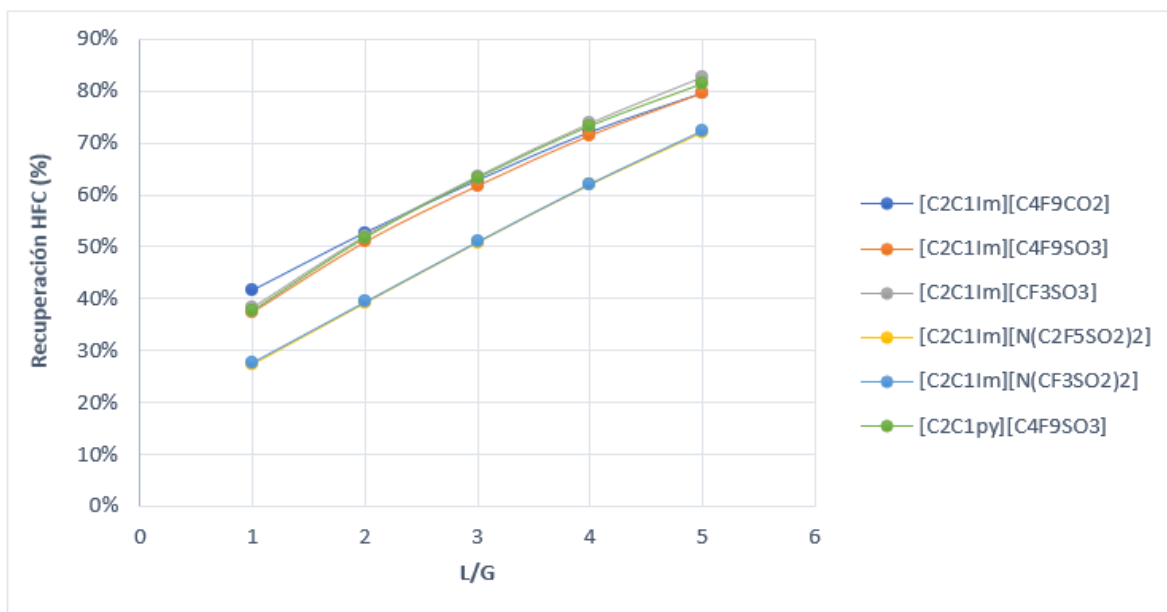


FIGURA 6.8: Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

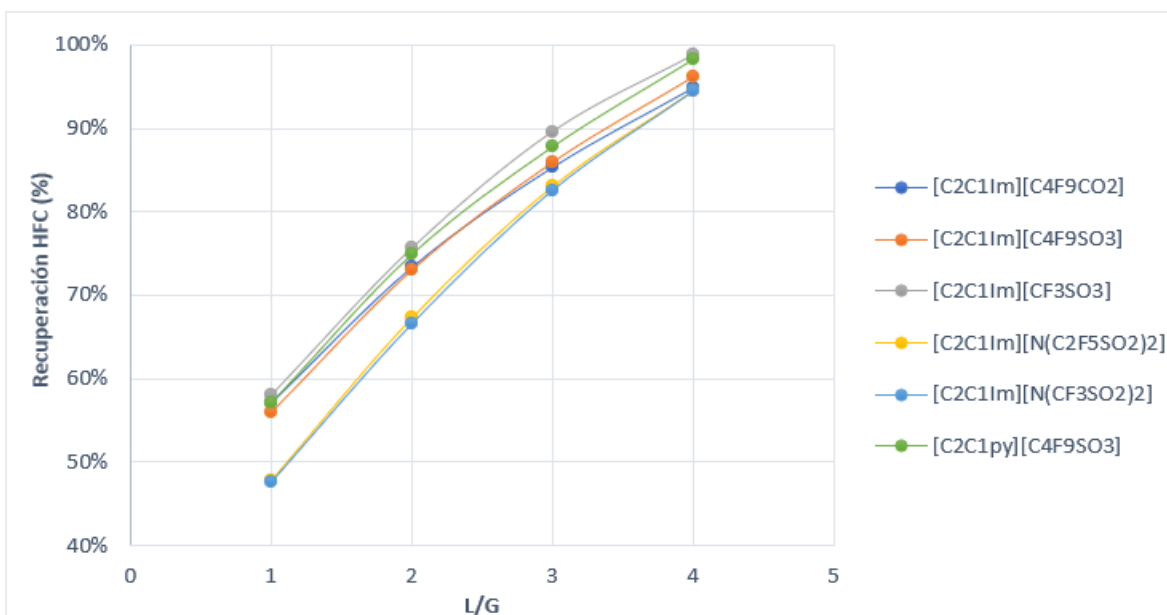


FIGURA 6.9: Relación gráfica de los resultados de recuperación de HFC para la mezcla R-134a, R-32 y R-22 en función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

6.3.2. Resultados de análisis por componentes de la mezcla R-134a, R-32 y R-22

TABLA 6.18: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 1 bar.

ILs	Recuperación R-134a (kg/h)	Recuperación R-32 (kg/h)	Recuperación R-22 (kg/h)
$[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$	527	217	3.067
$[C_2C_1Im][C_4F_9SO_3]$	575	257	2.190
$[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$	639	336	2.094
$[C_2C_1Im][N(C_2F_5SO_2)_2]$	518	266	836
$[C_2C_1Im][N(CF_3SO_2)_2]$	563	299	853
$[C_2C_1py][C_4F_9SO_3]$	624	272	2.109

TABLA 6.19: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 5 bar.

ILs	Recuperación R-134a (kg/h)	Recuperación R-32 (kg/h)	Recuperación R-22 (kg/h)
$[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$	2.731	1.192	3.326
$[C_2C_1Im][C_4F_9SO_3]$	2.609	1.240	3.322
$[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$	2.616	1.486	3.317
$[C_2C_1Im][N(C_2F_5SO_2)_2]$	2.179	1.155	2.875
$[C_2C_1Im][N(CF_3SO_2)_2]$	2.196	1.218	2.811
$[C_2C_1py][C_4F_9SO_3]$	2.732	1.305	3.321

TABLA 6.20: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=5 y una presión de 10 bar.

ILs	Recuperación R-134a (kg/h)	Recuperación R-32 (kg/h)	Recuperación R-22 (kg/h)
$[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$	3.322	2.902	3.329
$[C_2C_1Im][C_4F_9SO_3]$	3.321	3.006	3.331
$[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$	3.329	3.260	3.331
$[C_2C_1Im][N(C_2F_5SO_2)_2]$	3.297	2.837	3.325
$[C_2C_1Im][N(CF_3SO_2)_2]$	3.291	2.851	3.322
$[C_2C_1py][C_4F_9SO_3]$	3.330	3.204	3.331

TABLA 6.21: Resultados correspondientes a flujos máxicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=6 y una presión de 1 bar.

ILs	Recuperación R-134a (kg/h)	Recuperación R-32 (kg/h)	Recuperación R-22 (kg/h)
$[C_2C_1Im][C_4F_9CO_2]$	698	280	3.246
$[C_2C_1Im][C_4F_9SO_3]$	695	310	2.554
$[C_2C_1Im][CF_3SO_3]$	768	403	2.446
$[C_2C_1Im][N(C_2F_5SO_2)_2]$	619	318	999
$[C_2C_1Im][N(CF_3SO_2)_2]$	672	357	1.017
$[C_2C_1py][C_4F_9SO_3]$	754	328	2.465

TABLA 6.22: Resultados correspondientes a flujos másicos obtenidos de la recuperación por componentes R-134a, R-32 y R-22 a un L/G=6 y una presión de 5 bar.

ILs	Recuperación R-134a (kg/h)	Recuperación R-32 (kg/h)	Recuperación R-22 (kg/h)
[C ₂ C ₁ Im][C ₄ F ₉ CO ₂]	3.098	1.593	3.326
[C ₂ C ₁ Im][C ₄ F ₉ SO ₃]	3.024	1.647	3.326
[C ₂ C ₁ Im][CF ₃ SO ₃]	3.032	1.964	3.325
[C ₂ C ₁ Im][N(C ₂ F ₅ SO ₂) ₂]	2.631	1.449	3.141
[C ₂ C ₁ Im][N(CF ₃ SO ₂) ₂]	2.634	1.519	3.099
[C ₂ C ₁ py][C ₄ F ₉ SO ₃]	3.104	1.751	3.326

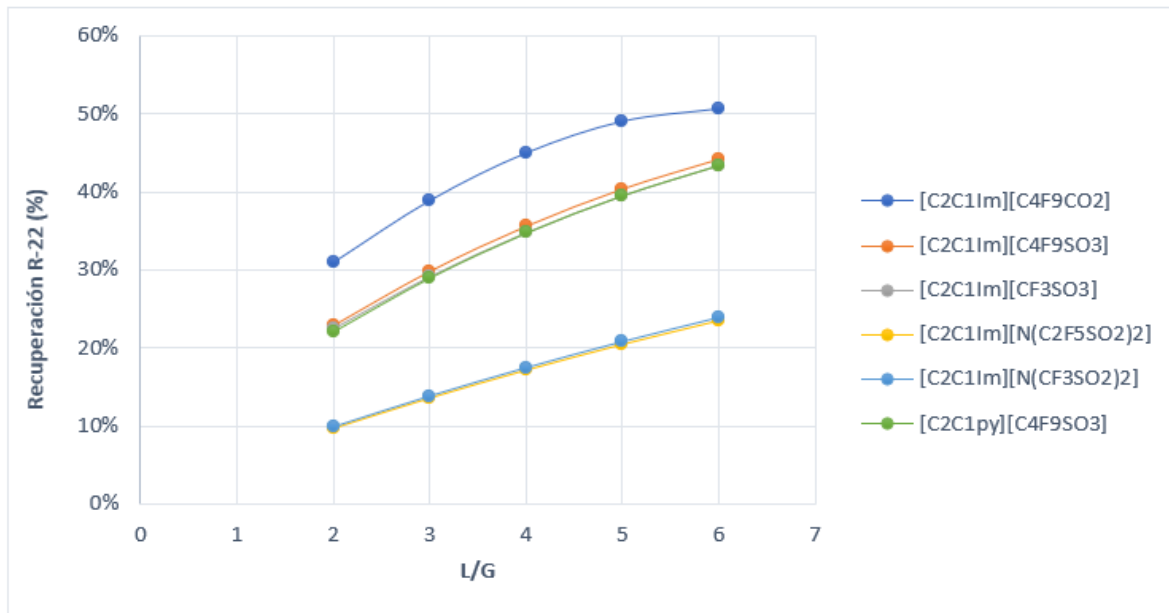


FIGURA 6.10: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

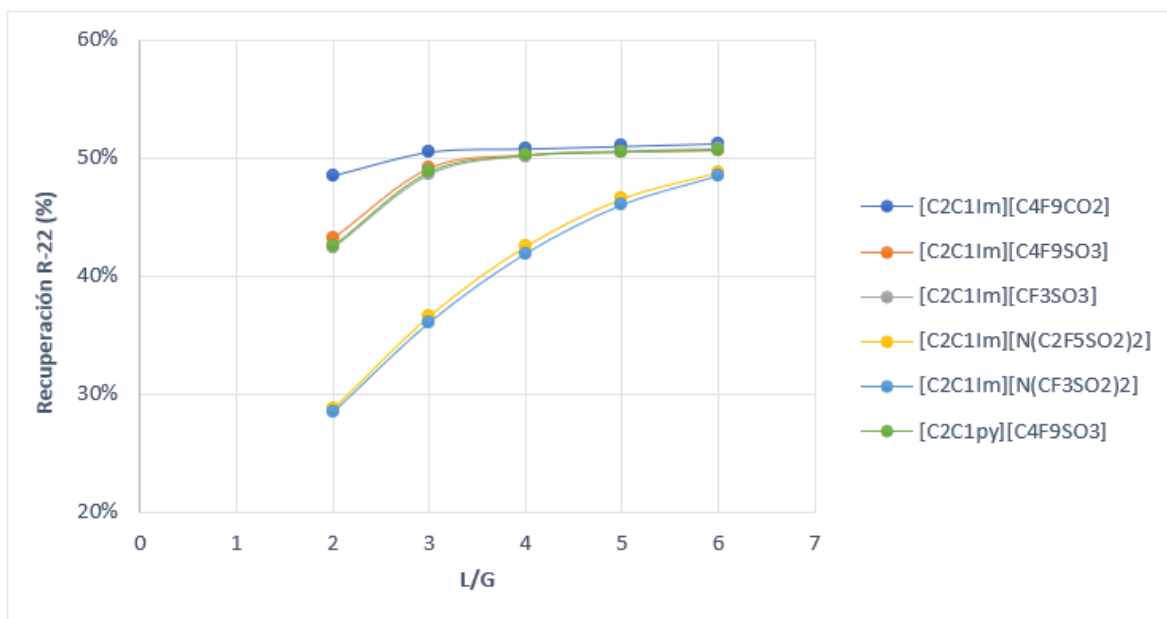


FIGURA 6.11: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

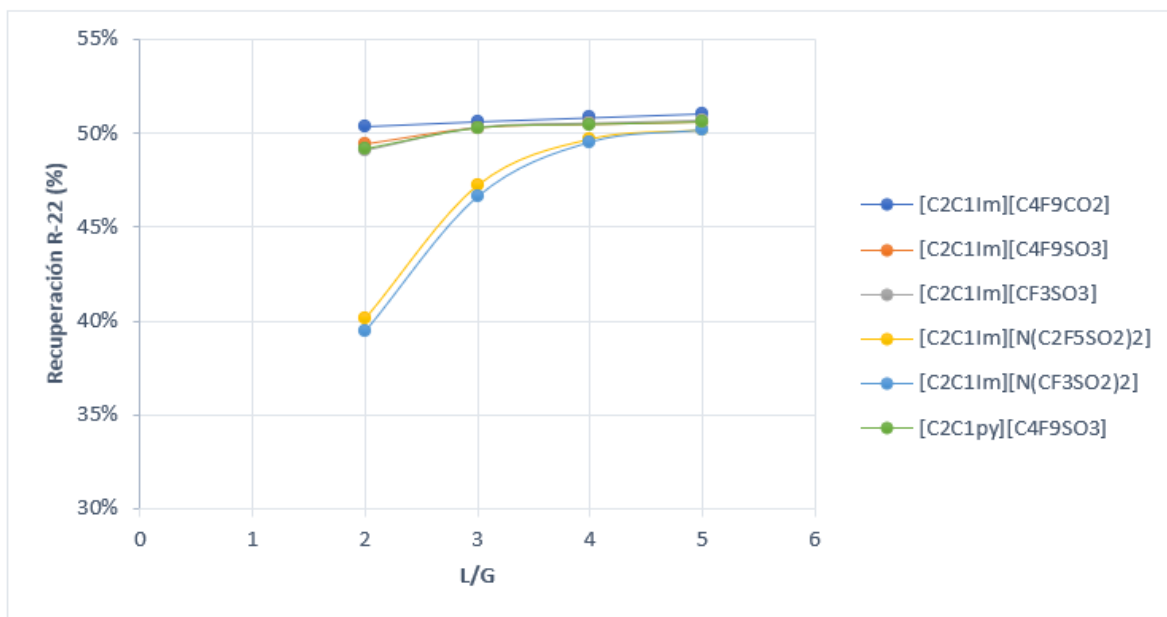


FIGURA 6.12: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-22 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

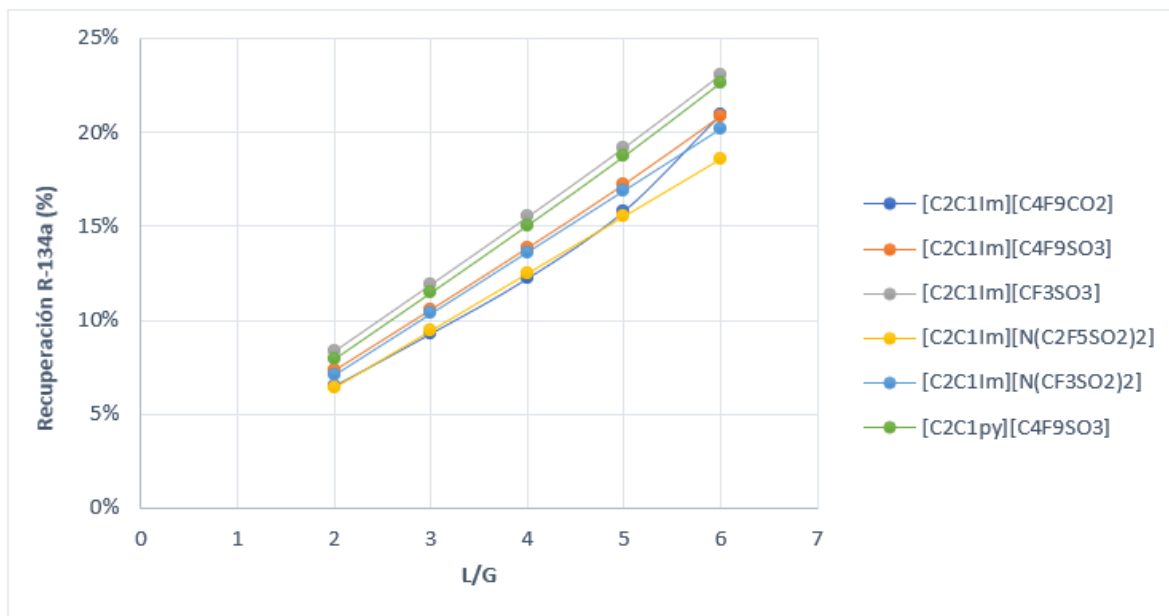


FIGURA 6.13: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

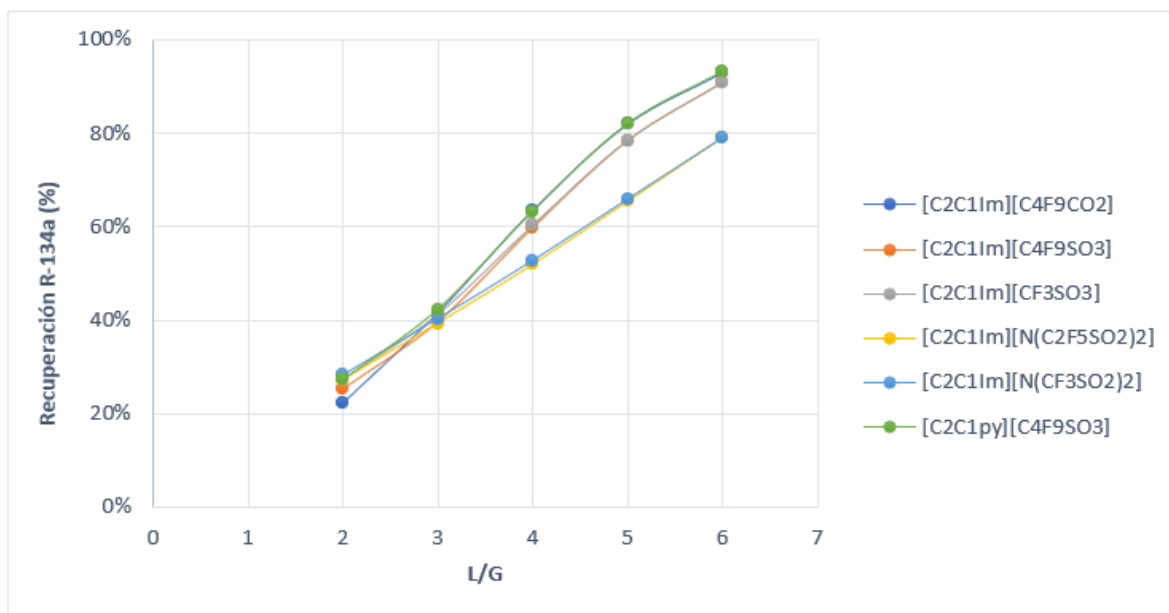


FIGURA 6.14: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

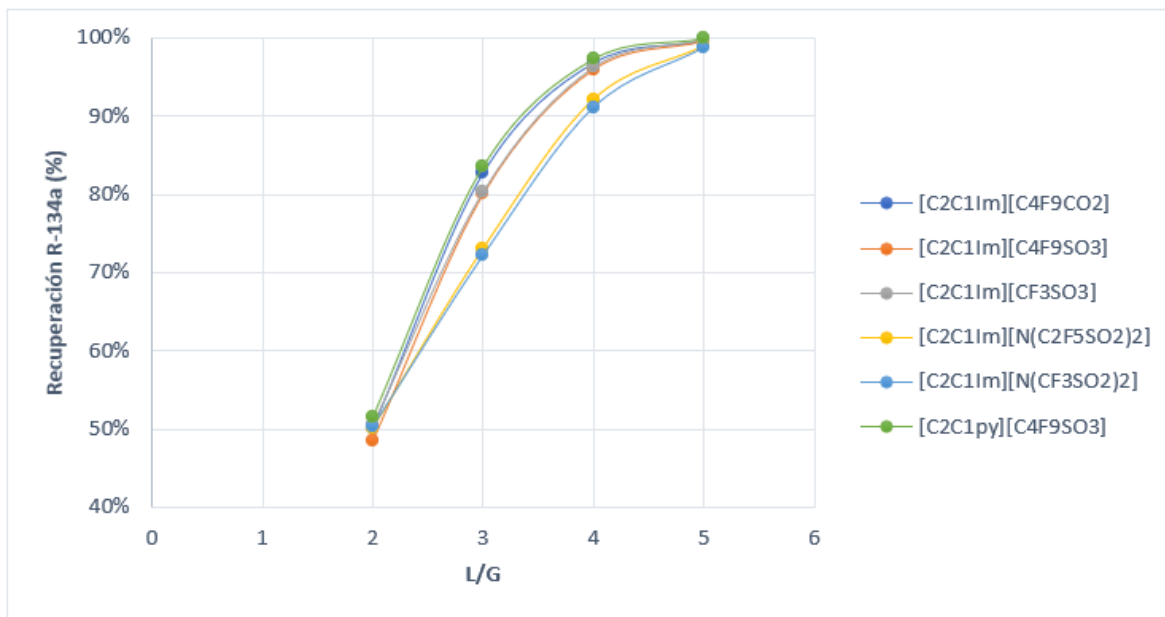


FIGURA 6.15: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-134a dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.

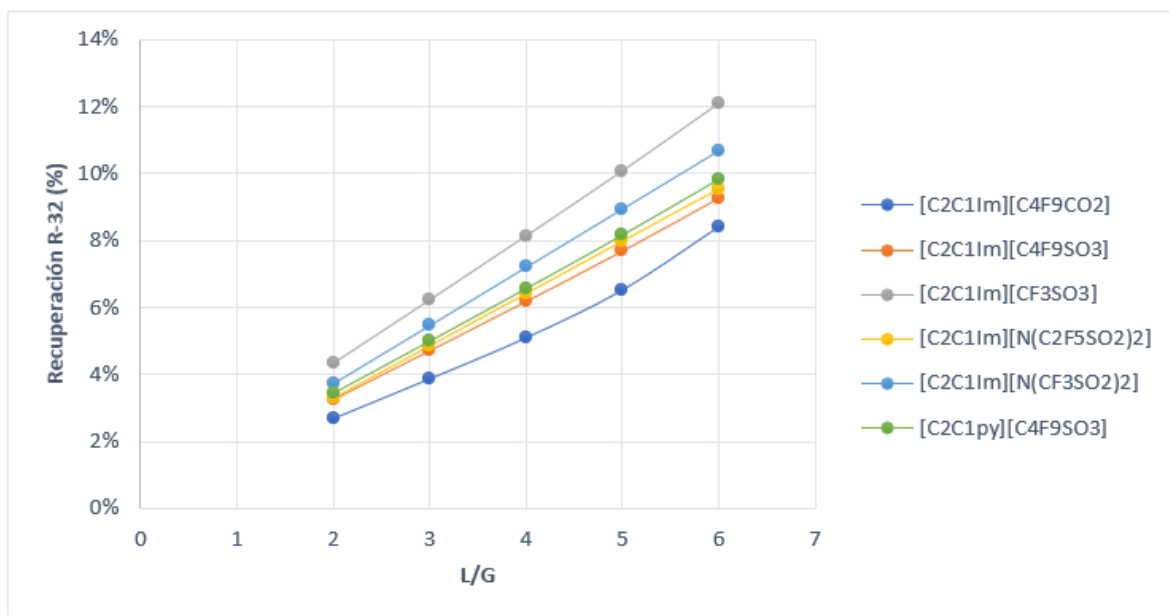


FIGURA 6.16: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 1 bar en la columna de absorción.

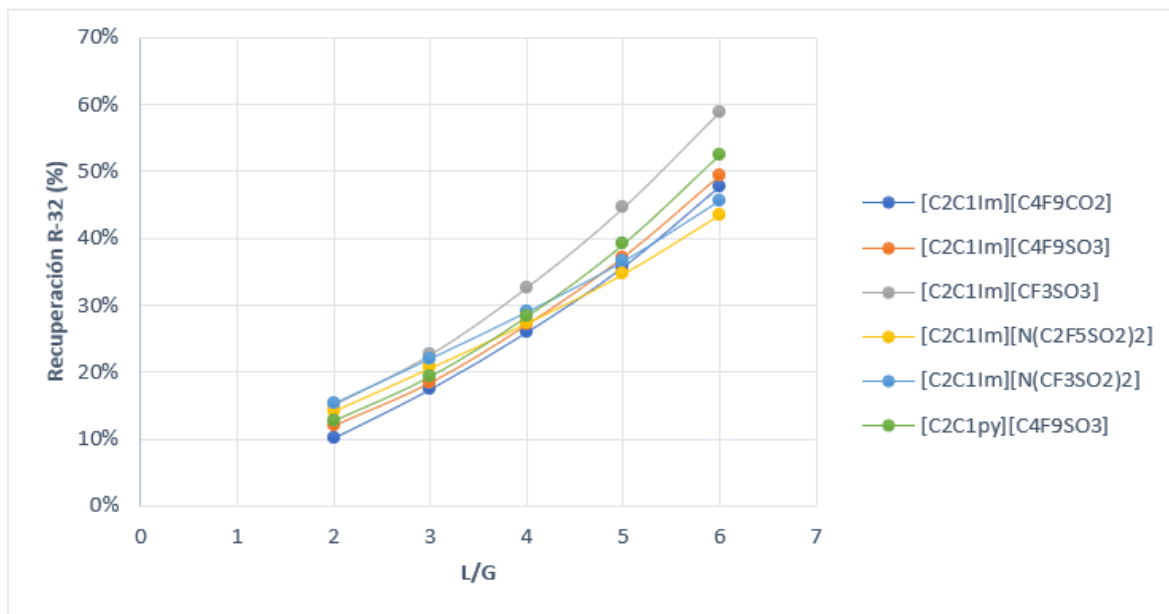


FIGURA 6.17: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 5 bar en la columna de absorción.

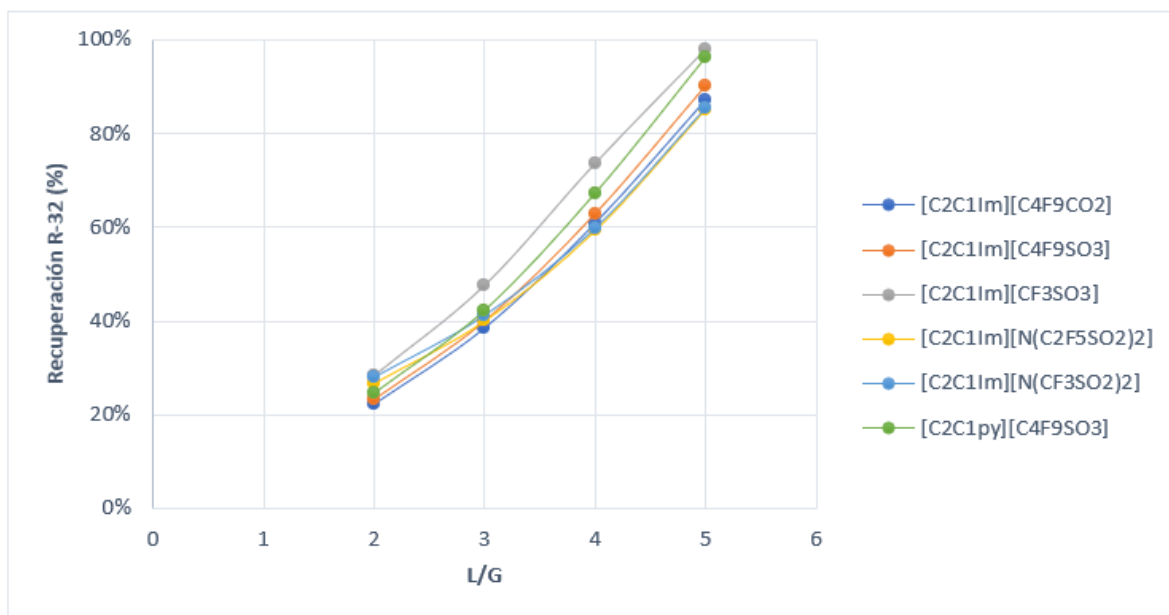


FIGURA 6.18: Relación gráfica de los resultados de recuperación del componente R-32 dentro de la mezcla R-134a, R-32 y R-22 función de L/G a una presión de 10 bar en la columna de absorción.