



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
MAGISTER, MENCIÓN EN CIENCIAS FÍSICAS

Modelado del equilibrio entre fases en mezclas de CO_2 +líquidos iónicos.

Felipe Andres Urbina Parada

Profesor Guía: Dr. Claudio Faúndez
Departamento de Física
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Concepción

Tesis para ser presentada a la Dirección de Postgrado de la
Universidad de Concepción

MAYO
CONCEPCIÓN - CHILE 2011

Resumen

La importancia del estudio de las mezclas de fluidos es innegable. Vivimos en un mundo donde los fluidos y sus mezclas están presentes tanto en nuestra vida cotidiana como en un amplio número de aplicaciones prácticas en ingeniería. Sin embargo, y a pesar del desarrollo de técnicas muy avanzadas, la obtención de datos experimentales sobre alguna propiedad termodinámica resulta ser, en no pocas ocasiones, un proceso lento y costoso. En la actualidad la necesidad de contar con más y mejores datos y correlaciones, para estimar propiedades de diferentes tipos de mezcla, incluyendo líquidos iónicos, ha despertado nuestro interés en el estudio, análisis y proposición de métodos termodinámicos para determinar datos de equilibrio líquido-vapor en mezclas de CO_2 + líquidos iónicos, para su posterior uso en aplicaciones industriales, especialmente en técnicas de separación y procesos de captura de CO_2 .

Los denominados líquidos iónicos representan un nuevo tipo de fluidos con tremendo e insospechado potencial como solventes y agentes extractores en procesos de separación. Los líquidos iónicos son sales fundidas de tipo orgánico con puntos de fusión por debajo de los $100^0[C]$, muy baja presión de vapor, estructura química altamente asimétrica y que contienen aniones y cationes de tipo orgánico e inorgánico (Heintz, 2005; Rebelo et al., 2005). Aunque las mayores aplicaciones de los líquidos iónicos ha sido su uso como solventes, existen promisorias aplicaciones en diferentes áreas de los procesos de ingeniería: biocatálisis, aplicaciones como lubricantes, células fotovoltaicas, entre otras. Información detallada sobre la síntesis y aplicaciones de líquidos iónicos está disponible en la literatura (Welton, 1999; Selvan et al., 2000; Sheldon et al., 2002).

Numerosas razones han motivado el creciente interés por el estudio de líquidos iónicos: *i*) su casi indetectable presión de vapor, lo que sugiere su utilización como el solvente ideal del futuro en reemplazo de solventes convencionales; *ii*) debido a su alta polaridad han abierto una nueva forma de reacciones catalíticas químicas; *iii*) algunos líquidos iónicos presentan selectivas solubilidades para ciertos componentes en mezclas fluidas, siendo candidato interesantes para procesos de separación donde pueden ser utilizados como medio de extracción; *iv*) su potencial uso en lubricación, como termofluidos, plastificantes, y líquidos de conducción en electroquímica; *v*) las propiedades físicas y químicas de estos fluidos dependen directamente de la combi-