MÉTODO UNIFAC EN EXCEL

Por Br. Marcell A.Maldonado, yo3141562@hotmail.com

RESUMEN

Los modelos de composición local se basan en una simple premisa, la presencia de dos líquidos no aleatorios. Esto significa que son dos líquidos conocidos que coexisten dentro de un sistema cerrado, concepto introducido por G. M. Wilson en 1964. Conforme evolucionó el concepto, se llega al método UNIFAC (del inglés **UNI**versal **F**unctional-group **A**ctivity **C**oeffients). Es la revolución sobre los modelos de composición local, ya que se basa en la definición de los grupos funcionales presentes en cada una de las moléculas.

DESCRIPTORES

Termodinámica. Equilibrio de fases. Equilibrio líquido vapor. Ley de Raoult modificada. Coeficiente de Actividad.

ABSTRACT

The models of local composition are based on a simple premise: Two non random liquids. This means that they are two well-known liquids that coexist inside a closed system, concept introduced by G. M. Wilson in 1964. As you evolved it arrives to the method UNIFAC (**UNI**versal **F**unctional-group **A**ctivity **C**oeffients). It is the revolution of local composition models concept, since it is based on definition of functional groups present in each molecules.

KEYWORDS

Thermodynamic. Phase equilibrium. Liquid vapor equilibrium. Modified Law of Raoult. Coefficient of Activity.

MÉTODO UNIFAC EN EXCEL

INTRODUCCION

Todos los procesos que incluyen la ley de Raoult, se pueden perfeccionar empleando la ley de Rault modificada:

Ley de Raoult $$P = \sum_{i=1}^{n} x_i P_i^{sat}$$

Ley de Raoult modificada

$$P = \sum_{i=1}^{n} x_i \gamma_i P_i^{sat}$$

En esta modificación se agrega el termino γ (gama) que para el sistema ideal posee el valor 1. Este término es el coeficiente de actividad. Por su definición, esta no es su única aplicación y se utiliza para determinar los diversos equilibrios de fases.

CORRELACIONES PARA EL EQUILIBRIO LÍQUIDO VAPOR

Sistemas de composición local. Todos iniciaron con las constantes y las ecuaciones de Wilson. Más tarde apareció el Modelo NRTL (**N**on **R**andom **T**wo **L**iquids) el cual se basa en datos experimentales de sistemas conocidos y relativamente comunes. Posteriormente apareció el Modelo UNIQUAC (**UNI**versal **QUA**si **C**hemical) el cual se basa en coeficiente de los compuestos pero no poseen ninguna explicación química.

Finalmente se desarrolló el Modelo el UNIFAC el cual en base a los grupos funcionales da constantes, las que dan inicio a un algoritmo el cual da los coeficientes de actividad en función de la composición y temperatura. Este algoritmo consiste en una serie de sumatorias de los grupos funcionales de cada molécula, y luego como interactúan entre ellas. El proceso de cálculo es tardado, por se agiliza el proceso creando un programa por computadora, por ejemplo en hojas de Excel®

En el presente trabajo se recreo el algoritmo presentado en el apéndice H de Termodinámica Química del texto de Smith,/van Ness &Abbott [[1]]

PROCEDIMIENTO

1. Descargar el programa http://www.tec.url.edu.gt/boletin/URL_11_QUI01.xls
2. Abrir el archivo.
3. Ingresar en las celdas en verde los valores correspondientes.

[1] **NOTA DEL EDITOR**. Se sugiere consultar los artículos "Estimación del Equilibrio Líquido Vapor Utilizando el Modelo Unifac" y "Estimación del Equilibrio Líquido Vapor utilizando los Coeficientes Phi-Gama" en los números 3 y 5 de esta revista, respectivamente.

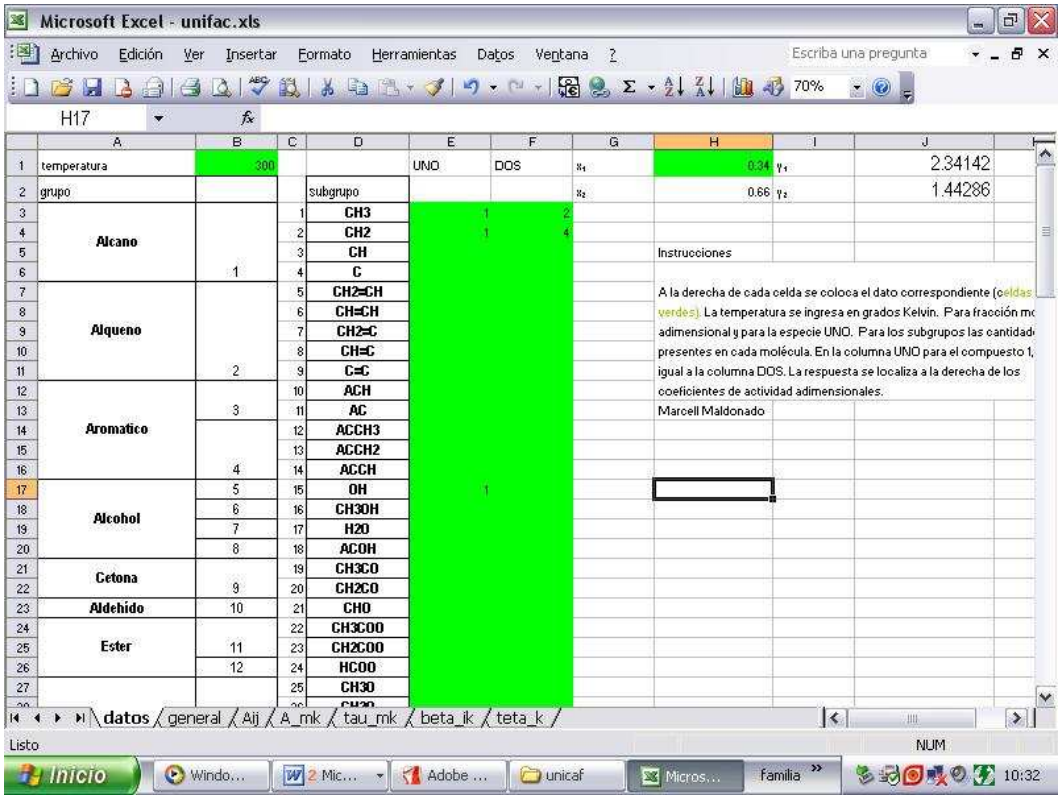
4. Automáticamente el programa evalúa el coeficiente de actividad γ.

ILUSTRACIÓN

Sistema: etanol (1) / n-hexano (2), a 300ºK y composición x_1=0.34

Respuesta:

$\gamma_1 = 2.34142$
$\gamma_2 = 1.44286$



REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

SMITH, J.M.; VAN NESS, HENDRICK C; ABBOTT, MICHAEL. (2005). Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. McGraw-Hill Series. 7th. Edition. New York

SALAZAR, FEDERICO G. (2008). Constantes del método UNIFAC, Consultado en: http://www.fsalazar.bizland.com/

MALDONADO GÁLVEZ, MARCELL ARIAN

Estudiante de del séptimo semestre de la Carrera de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Rafael Landívar. Pertenece al Club de Ciencias de esta universidad, aficionado a la astronomía trabaja con un equipo de sus compañeros en el diseño de un radiotelescopio y participa actualmente en la organización del Año Internacional de la Astronomía 2009.