

TEMA: Estudio Termodinámico y espectroscópico de sistemas binarios que presentan interacciones por enlace de hidrógeno. Influencia del incremento de la cadena hidrocarbonada, de la ramificación y de la función.

TESISTA: Lic. Campos, Viviana del Valle

DIRECTOR: Dra. Gómez Marigliano, Ana Clelia

RESUMEN

El estudio termodinámico de sistemas líquidos no electrolíticos es relevante por cuanto a través de él es posible conocer macroscópicamente el proceso de mezcla. Esta información molecular es de interés tanto académico como tecnológico, particularmente es básica para el diseño de equipamientos de separación, reactores, desarrollo y/o verificación de modelos, etc. en Ingeniería Química. Por otro lado, proporciona la base de interpretación del comportamiento de mezclas en las que están involucradas especies químicas asociadas o con posibilidad de asociarse a través de enlace de hidrógeno.

Se conoce que el enlace de hidrógeno intermolecular altera las propiedades físicas y químicas de las sustancias que lo presentan, sin embargo, hay pocos trabajos publicados que correlacionen propiedades macroscópicas y microscópicas, obtengan conclusiones, resultados y predicciones de unas a partir de las otras. Este es el núcleo central de esta propuesta.

Los **objetivos generales** de este trabajo son:

- 1) "Caracterizar desde un punto de vista microscópico las interacciones moleculares por enlace de hidrógeno en líquidos puros y sus mezclas"
- 2) "Estudiar desde un punto de vista macroscópico las interacciones moleculares por enlace de hidrógeno en mezclas de líquidos no electrolíticos"
- 3) "Correlacionar el comportamiento macroscópico y microscópico de la mezcla"

A tal fin se propusieron los sistemas **binarios cuyo componente principal es la butilamina (asociada al estado puro), con cetonas y con éteres (ambos no asociados al estado puro) se determinaron** las propiedades termofísicas como la viscosidad, densidad, calor de mezcla, equilibrio líquido vapor, se realizaron los espectros IR y Raman, y además se simularon las estructuras moleculares utilizando el método computacional

A partir de los resultados experimentales de las propiedades termofísicas se calculó las propiedades de exceso y desviaciones de la idealidad. Se realizaron ajustes empíricos que permiten obtener las propiedades en el intervalo de temperaturas de (288,15 a 318,15 K) y en todo el rango de composición.

Por otro lado, los espectros teóricos obtenidos en las simulaciones computacionales se utilizaron como una guía para la asignación de las bandas vibracionales observadas en los espectros experimentales. Se obtuvieron las constantes de equilibrio para dímeros abiertos y trímeros cíclicos de la butilamina pura, los calores de formación de estas estructuras y se verificó que éstos son los tipos de autoasociación que prevalecen en la butilamina pura. También se obtuvieron las constantes de equilibrio de las mezclas y la entalpía de formación de los distintos agregados moleculares presentes. Se pudo correlacionar los resultados macroscópicos con los microscópicos, que era uno de los principales objetivos del presente trabajo.