

Propiedades físicas de solventes eutécticos de baja viscosidad y de sus mezclas binarias con 1-butanol

Physical properties of low viscosity deep eutectic solvents, and its binary mixtures with 1-butanol

Gajardo N.F.¹, Lubben M.J.², Winnert J.M.², Leiva A.¹, Brennecke J.F.², Canales R.I.¹

¹Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Escuela de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Chile.

²Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Texas en Austin.

Gajardo N.F.¹, Lubben M.J.², Winnert J.M.², Leiva A.¹, Brennecke J.F.², Canales R.I.¹

¹Department of Chemical Engineering and Bioprocesses, School of Engineering, Pontificia Universidad Católica de Chile.

²Department of Chemical Engineering, University of Texas at Austin.

RESUMEN

La extracción líquido-líquido y la destilación extractiva son operaciones unitarias comunes para la separación de mezclas con similar punto de ebullición o con presencia de azeótropo. Dentro de estos procesos, los líquidos iónicos y los Deep Eutectic Solvents (DES) han despertado interés como extractante alternativo debido a su baja volatilidad y alta selectividad. Los DESs son usualmente una alternativa biodegradable, no tóxica y de bajo costo a los líquidos iónicos debido a que estos compuestos se obtienen principalmente desde metabolitos primarios. Los DES no han sido estudiados extensivamente en la literatura, en consecuencia, las propiedades fisicoquímicas de los compuestos puros y el equilibrio de las distintas fases son necesarios para analizar la factibilidad en el uso de operaciones de separación. Propiedades como temperatura de descomposición, tensión superficial, densidad, viscosidad fueron medidas para DES puros y, densidad, viscosidad y entalpía de fueron medidas para mezclas binarias de DES con 1-butanol. Con esto, las propiedades de exceso fueron calculadas para entender el comportamiento de los DES en la mezcla. Los resultados indican que los DES se forman debido a fuertes fuerzas intermoleculares entre sus constituyentes y no se presenta ninguna reacción. Esto genera una mayor estabilidad térmica de los DES frente a sus donadores de puentes de hidrógeno. Además, ante la adición de 1-butanol al DES, la mezcla se contrajo debido a la creación de nuevas redes de puentes de hidrógeno y acomodación de sitios intersticiales. Como resultado de esto, las propiedades de exceso muestran una desviación negativa de la idealidad. Las propiedades termofísicas fueron ajustadas por distintos modelos tanto empíricos como predictivos obteniendo errores menores al 5% para compuestos puros. La obtención de datos experimentales y cálculo de propiedades del proceso permitió entender la magnitud de las interacciones que ocurren al mezclar un DES con un solvente orgánico. Esto contribuye a tener una mejor comprensión del efecto de las fuerzas electrostáticas sobre las propiedades termodinámicas en procesos de separación. Posteriormente, estos datos y parámetros pueden ser incorporados en modelos que sean capaces de predecir propiedades fisicoquímicas para aplicaciones industriales.

ABSTRACT

Liquid-liquid extraction and extractive distillation are common unitary operations for separation of mixtures with similar boiling points or azeotropes. Among these processes, ionic liquids and Deep Eutectic Solvents (DES) are considered interesting extracting alternatives due to their low volatility and selectivity. DES are usually a biodegradable, non-toxic and low cost alternative to ionic liquids, since these compounds are typically obtained from primary metabolites. DES have not been extensively studied in the literature; therefore, the physicochemical properties of pure compounds and their different phase equilibria are needed to analyze their potential use in separation operations. Properties such as degradation temperature, superficial tension, density, and viscosity were measured for pure DES, while density, viscosity, and enthalpy were measured for binary mixtures with 1-butanol. Later, the excess properties were calculated in order to understand the behavior of DES within the mixture. Results indicate that DES are formed due to strong intermolecular forces between their constituents and no chemical reactions occur, leading to greater thermal stability of DES compared to their hydrogen bond donors. Furthermore, upon 1-butanol addition, the network was contracted due to the creation of new arrays of hydrogen bonds and relocation of the interstitial sites. As a result, the excess properties show a negative deviation from ideal behavior. The thermophysical properties were adjusted by different empirical and predictive models, with errors below 5% for pure compounds. Experimental data and the calculations of process properties allowed the magnitude comprehension of the interactions between a DES with an organic solvent. This contributes to further understanding the effect of electrostatic forces on thermodynamic properties in separation processes. Later on, these data could be included in predictive models for physicochemical properties for industrial use.