

Laboratorio de Físico-Química

Profesor: Francisco Yáñez

Preparadora: Daniela Márquez

MEZCLAS TERNARIAS

Realizado por:

Chen Chen, William

C.I. : 16.113.714

Díaz Jennyfer

C.I. : 15.518.763

Caracas, 24 de Mayo de 2004.

SUMARIO

Este informe contempla el estudio del equilibrio líquido – líquido de un sistema ternario a temperatura constante. Dicho sistema está constituido por agua, tolueno y etanol. El objetivo fundamental fue la construcción del diagrama triangular que represente la curva de solubilidad y las líneas de equilibrio de fases para el sistema planteado. Para ello, fue necesario determinar varios puntos de equilibrio que nos permitieran construir la curva de solubilidad mediante las composiciones.

En primera instancia, por la naturaleza del sistema, cabe esperar una sola curva de solubilidad, dispuesta entre el extremo del tolueno y el agua del diagrama triangular, ya que el tolueno es muy poco soluble en agua, pero, ambos, son solubles en etanol.

Los puntos de equilibrio de fases se obtuvieron a partir de mezclas binarias de los compuestos menos solubles del sistema ternario. Se tomó una muestra de 20 ml de tolueno, a la cual se le fueron añadiendo volúmenes controlados de agua. Estos dos compuestos no son miscibles, por tanto, constituyen dos fases que, al ir titulando con etanol hasta que se obtenga una sola fase, se consigue el volumen de etanol para el cual hay equilibrio. De manera análoga se repite el procedimiento pero, ahora, se toma una muestra de 20 ml de agua y se le agregan volúmenes controlados de tolueno y se titula nuevamente con etanol. Con estos volúmenes, es posible determinar la fracción molar de cada uno de los componentes presentes en cada muestra para cuando está en equilibrio, es decir, cuando existe una sola fase. Cada una de estas composiciones se le relaciona con el índice de refracción de la luz, el cual es medido a través de un refractómetro después de cada titulación. Con el índice de refracción se construye una línea de calibración para ambas muestras de estudio, la rica en tolueno y la rica en agua, la cual relaciona dicho parámetro con la concentración. De esta forma, al medir el

Índice de refracción de cualquier extracto o refinado de mezclas ternarias de los componentes estudiados, se puede determinar la composición por regresión sobre los datos experimentales obtenidos con anterioridad, sabiendo que, además, se trata de un punto de equilibrio y, que, por tanto, se ubica sobre la línea de solubilidad, determinan las líneas de amarre o líneas de equilibrio extracto – refinado. Las cuales, para el sistema estudiado, confirman que el etanol es más soluble en agua que en tolueno, ya que la composición de etanol en el extracto, fase rica en agua, es siempre mayor que en el refinado, fase rica en tolueno.

ÍNDICE

	PÁG.
Introducción	4
Datos Experimentales	5
Resultados Experimentales	7
Discusión de Resultados	11
Conclusiones	13
Cálculos Típicos	14
Bibliografía	17

INTRODUCCIÓN

La experiencia del laboratorio se orientó al estudio del equilibrio líquido – líquido del sistema ternario agua, tolueno y etanol a temperatura constante.

Ello se logra determinando las concentraciones en varios puntos de equilibrio que nos permitan construir la curva de solubilidad en un diagrama triangular.

Los puntos de equilibrio de fases se obtienen a partir de mezclas binarias de los compuestos menos solubles del sistema ternario. Con una muestra de 20 ml de tolueno, a la cual se le añade volúmenes controlados de agua, se obtiene un sistema que constituye dos fases, ya que estos dos compuestos no son miscibles, por tanto que, al ir titulando con etanol hasta que se obtenga una sola fase, se consigue el volumen de etanol para el cual hay equilibrio.

Cada una de estas composiciones se le relaciona un el índice de refracción de la luz, el cual es medido a través de un refractómetro después de cada titulación. Con éste se construye una línea de calibración la cual relaciona dicho parámetro con la concentración.

De esta forma, al medir el índice de refracción de cualquier extracto o refinado de mezclas ternarias de los componentes estudiados, se puede determinar la composición por regresión sobre los datos experimentales, determinando así, las líneas de amarre o líneas de equilibrio extracto – refinado, para así, construir el diagrama triangular que represente la curva de solubilidad y las líneas de equilibrio de fases para el sistema planteado.

DATOS EXPERIMENTALES

Tabla # 1: Fase rica en Tolueno (en 20 ml de Tolueno).

Volumen de Agua¹ (ml)	Volumen de Etanol (± 0.1ml)	Índice de Refracción (± 0.0005)(adim.)
0,3	5	1.4870
0,5	6	1.4740
1	10	1.4655
2	13,9	1.4250
3,5	19,4	1.4105
5,5	27,1	1.4000
8,5	39,1	1.3900
12,5	44,8	1.3855
17,5	57,5	1.3840

Tabla # 2: Fase rica en Agua (en 20 ml de Agua).

Volumen de Tolueno²	Volumen de Etanol (± 0.1ml)	Índice de Refracción (± 0.0005)(adim.)
0,3	16,3	1.3590
0,5	21,7	1.3630
1	26,1	1.3705
2	31,3	1.3595
3,5	39	1. 3630
5,5	45,7	1.3690
8,5	54,9	1.3710
12,5	58,8	1.3790
17,5	62,5	1.3855

¹ No tiene apreciación porque no es constate.

² No tiene apreciación porque no es constate.

Tabla # 3: Índices de refracción para cada una de las tres mezclas.

Mezcla	Composición Molar de la mezcla	ÍNDICE DE REFRACCIÓN (± 0.0005)(ADIM.)	
		Fase Rica en Tolueno	Fase Rica en Agua
1	35% Tolueno 35% Agua 30% Etanol	1.4805	1.3690
2	40% Tolueno 35% Agua 25% Etanol	1.4815	1.3665
3	40% Tolueno 40% Agua 20% Etanol	1.4855	1.3610

RESULTADOS EXPERIMENTALES

Se determinó las composiciones de las distintas mezclas para cada fase y se obtuvieron los siguientes resultados:

Tabla # 4: Composiciones de las mezclas ricas en Tolueno.

Mezcla N°	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Comp. Agua	0,058	0,088	0,134	0,207	0,273	0,319	0,355	0,421	0,453
Comp. Tolueno	0,646	0,588	0,451	0,348	0,262	0,195	0,140	0,113	0,087
Comp. Etanol	0,296	0,324	0,414	0,444	0,466	0,485	0,504	0,466	0,459

Tabla # 5: Composiciones de las mezclas ricas en Agua.

Mezcla N°	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Comp. Agua	0,798	0,747	0,709	0,667	0,613	0,571	0,521	0,497	0,474
Comp. Tolueno	0,002	0,003	0,006	0,011	0,018	0,026	0,037	0,052	0,070
Comp. Etanol	0,200	0,250	0,285	0,322	0,369	0,402	0,441	0,451	0,457

Posteriormente se dibujaron las curvas de calibración, tanto para la fase rica en Tolueno como para la fase rica en agua, Índice de Refracción Vs. Comp. Etanol:

Tabla # 6: Valores de Índice de refracción y comp. de etanol para la fase rica en tolueno.

I.R.	1.4870	1.4740	1.4655	1.4250	1.4105	1.4000	1.3900	1.3855	1.3840
Comp. Etanol	0,296	0,324	0,414	0,444	0,466	0,485	0,504	0,466	0,459

Gráfica # 1: Curva de calibración para la fase rica en Tolueno.

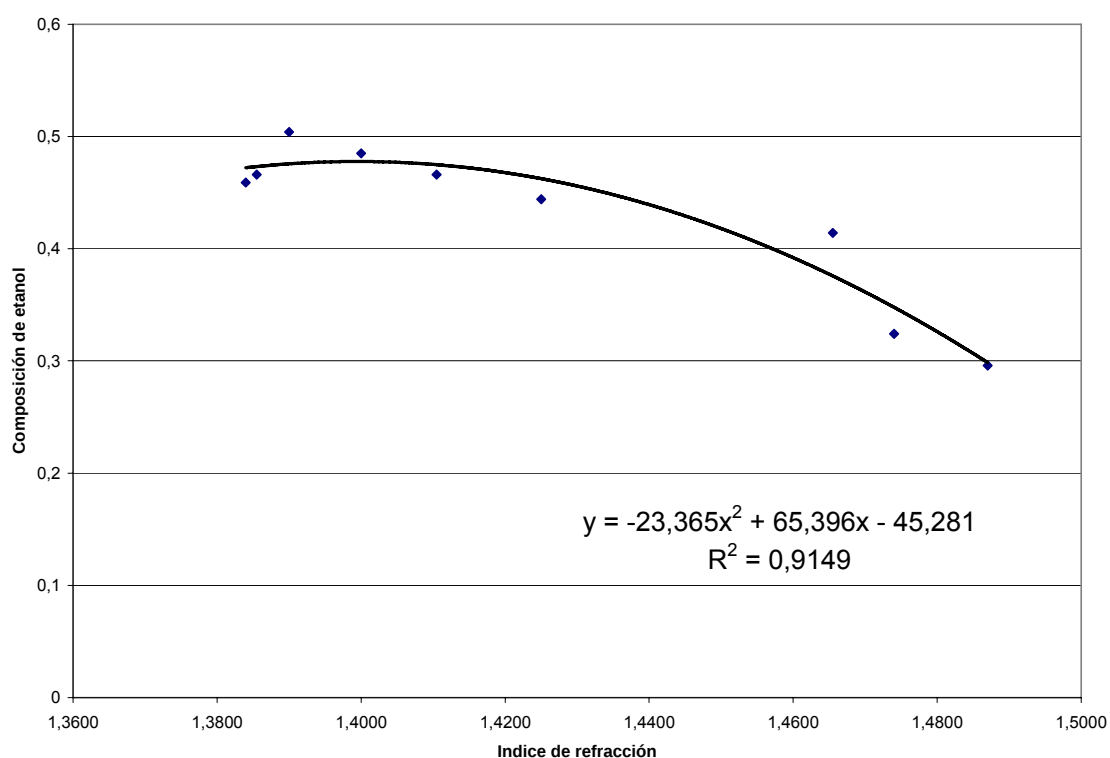
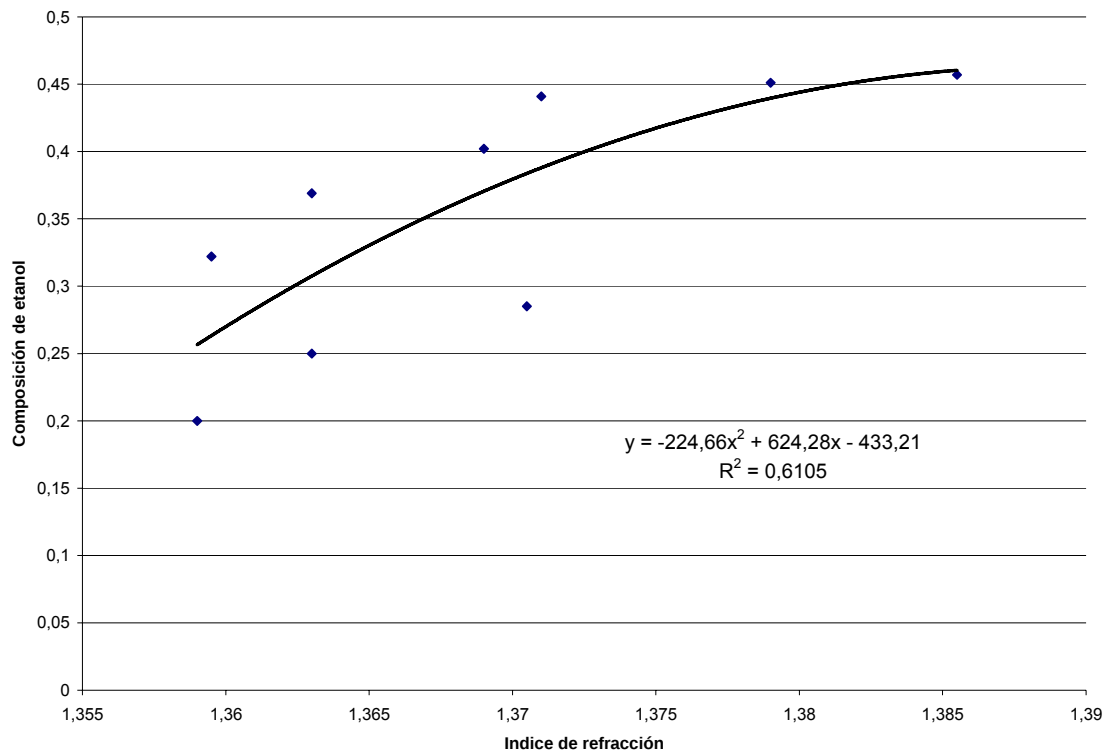


Tabla # 7: Valores de Índice de refracción y comp. de etanol para la fase rica en agua.

I.R.	1,3590	1,3630	1,3705	1,3595	1,3630	1,3690	1,3710	1,3790	1,3855
Comp. Etanol	0,200	0,250	0,285	0,322	0,369	0,402	0,441	0,451	0,457

Gráfica # 2: Curva de calibración para la fase rica en Agua.



Si se grafican los puntos de las tablas #4 y #5 en un diagrama triangular, leyendo cada composición en su recta de composiciones respectiva para cada componente de la mezcla, se obtienen lo siguiente: *(Ver Gráfica #3)

Finalmente, se calculó la composición de etanol para las tres mezclas que se encontraban en equilibrio a partir del índice de refracción de ambas fases en equilibrio para cada mezcla. Este cálculo se realizó sustituyendo el índice de refracción en la curva de calibración, tanto para la fase rica en benceno como para la fase rica en agua, y se obtiene la composición de etanol.

Tabla # 8: Composiciones de Etanol en las mezclas en equilibrio

Mezcla N°	1		2		3	
	<i>F. Rica Tolueno</i>	<i>F. Rica Agua</i>	<i>F. Rica Tolueno</i>	<i>F. Rica Agua</i>	<i>F. Rica Tolueno</i>	<i>F. Rica Agua</i>
Composición de Etanol	0.3245	0.3803	0.3207	0.3560	0.3050	0.2926

*(Ver Gráfica #3)

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Se ha obtenido una sola curva de solubilidad para el sistema estudiado (*Gráfico # 3*), esto nos indica que dicho sistema está constituido por dos componentes parcialmente solubles y ambos solubles en el componente restante. Estos es, especificando, que tanto el agua como el tolueno son solubles en etanol y, el agua y el tolueno, son parcialmente solubles entre sí. Este constituye el comportamiento esperado para este sistema. Si analizamos las solubilidades de cada uno de los componentes en agua y en alcohol, como lo es el etanol, tenemos que, en primer lugar, que el tolueno es prácticamente insoluble en agua, en cambio, es soluble en alcohol. El etanol, por su parte, es infinitamente soluble en agua.

Analizando la inclinación de la curva de solubilidad del sistema estudiado, se aprecia que, argumentando análogamente con las diferencias de solubilidades, el etanol es mucho mas soluble en agua que en tolueno, a pesar de que la solubilidad del tolueno en el etanol es alta. Esto explica que la curva tienda a pronunciarse más hacia el extremo que representa la mezcla etanol – agua que hacia el extremo de la mezcla etanol – tolueno.

Para comparar estos valores de equilibrio, tanto del extracto como del refinado, se necesitarían valores teóricos tabulados de la curva de solubilidad, los cuales no son fáciles de encontrar ya que para cada sistema ternario existente, existe una curva de solubilidad a un T variable que afecta dicha curva. Por esta razón no se compararon los valores experimentales con valores teóricos.

Por otra parte, se deben tomar en cuenta todos los errores de lectura gráficos ocasionados por el redondeo de los valores puntuales dibujados en el diagrama del *Gráfico # 3*, es decir, los valores de composiciones de los componentes poseen 4 decimales pero para ubicarlos en la grafica solo se pueden

utilizar 2 decimales, por consecuente se redondearon lo cual afectó la ubicación exacta del punto en el diagrama.

Por otra parte, comparando las gravedades específicas de los compuestos que conforman el sistema ternario, se hace evidente que la fase que se deposita en el fondo del embudo de decantación es la fase rica en agua, dado que ésta posee la gravedad específica mayor. Esto está confirmado también por los índices de refracción obtenidos para el extracto o fase más pesada los cuales están siempre dentro del rango de valores conseguidos a partir del análisis de la muestra rica en agua

En contraparte, los valores de los índices de refracción para el refinado o fase más liviana, están contenidos en el rango de los índices de refracción recopilados para la muestra rica en tolueno. El tolueno es más liviano que el agua por poseer una gravedad específica menor a la del agua y, además, ser un compuesto muy poco soluble en agua, lleva a deducir que la fase liviana o refinado es la fase rica en tolueno.

Las líneas de equilibrio para extracto y refinado obtenidas a partir del seguimiento de los índices de refracción para las fases involucradas, rica en tolueno para el refinado y rica en agua para el extracto, marcan una pendiente con crecimiento hacia el extremo del diagrama constituido por la mezcla etanol – agua, lo cual corrobora lo planteado anteriormente, el etanol es más soluble en agua, por tanto, el extracto tiene una mayor composición de etanol que el refinado, rico en tolueno.

CONCLUSIONES

- Se ha obtenido una sola curva de solubilidad para el sistema estudiado, esto nos indica que tanto el agua como el tolueno son solubles en etanol y, el agua y el tolueno, son parcialmente solubles entre sí.
- El etanol es mucho más soluble en agua que en tolueno, a pesar de que la solubilidad del tolueno en el etanol es alta. Este hecho físico es el que genera que la curva de solubilidad obtenida tienda a pronunciarse más hacia el extremo que representa la mezcla etanol – agua que hacia el hacia el extremo de la mezcla etanol – tolueno.
- Las líneas de equilibrio para extracto y refinado, marcan una pendiente que también indica que siempre el etanol es más soluble en agua, ya que los extractos tienen una mayor composición de etanol que los refinados.
- La fase pesada o extracto del sistema estudiado es la fase rica en agua. El agua posee la gravedad específica mayor, por tanto, es el componente más pesado del sistema. Además, los índices de refracción obtenidos para esta fase están siempre dentro del rango de los valores conseguidos para la muestra rica en agua.
- De igual forma, se concluye que el tolueno constituye en mayoría la fase que es más liviana. Este tiene una gravedad específica menor a la del agua, es muy poco soluble en agua y los índices de refracción del refinado siguen el comportamiento de la muestra rica en tolueno.

CÁLCULOS TÍPICOS

- Cálculo de las composiciones molares de las mezclas a partir de los volúmenes de cada componente:

Se calculó el número de moles de cada componente con la siguiente ecuación:

$$n_i = \frac{V_i \cdot \rho_i}{PM_i} \quad (\text{Ecu 1})$$

donde i es un compuesto en específico, n es el número de moles, V es el volumen del componente, PM es el peso molecular del componente y ρ es la densidad del componente.

Luego para calcular la composición molar se utilizó la siguiente ecuación:

$$X_i = \frac{n_i}{\sum_{n=1} n_i} \quad (\text{Ecu 2})$$

donde X_i es la composición molar del componente i.

Ej: para la primera mezcla rica en benceno: 20ml tolueno, 0,3ml de agua y 5ml de etanol.

$$\begin{aligned} n_{\text{tolueno}} &= \frac{V_{\text{tolueno}} \cdot \rho_{\text{tolueno}}}{PM_{\text{tolueno}}} = \frac{20\text{ml} \cdot 0.86 \frac{\text{g}}{\text{ml}}}{92.14 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.1867 \text{ moles} \\ n_{\text{agua}} &= \frac{V_{\text{agua}} \cdot \rho_{\text{AGUAo}}}{PM_{\text{agua}}} = \frac{0.3\text{ml} \cdot 1 \frac{\text{g}}{\text{ml}}}{18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.0167 \text{ moles} \\ n_{\text{e tan ol}} &= \frac{V_{\text{e tan ol}} \cdot \rho_{\text{e tan olo}}}{PM_{\text{be tan ol}}} = \frac{5\text{ml} \cdot 0.7893 \frac{\text{g}}{\text{ml}}}{46.07 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.0857 \text{ moles} \end{aligned}$$

luego

$$X_{tolueno} = \frac{n_{tolueno}}{n_{agua} + n_{etanol} + n_{tolueno}} = \frac{0.1867}{0.0167 + 0.0857 + 0.1867} = 0.646$$

los otros resultados son reportados en la tabla # 4 y # 5.

- Obtención de las curvas de calibración para la fase rica en Tolueno y rica en Agua:

Para realizar los ajustes de Índice de Refracción Vs. Composición de Etanol se utilizó una herramienta de *Microsoft* llamada EXCEL.

Los ajustes obtenidos fueron:

a) Para la fase rica en Tolueno:

$$y = -23,365x^2 + 65,396x - 45,281 \quad R^2 = 0,9149 \quad (\text{Ecu 3})$$

b) Para la fase rica en Agua:

$$y = -224,66x^2 + 624,28x - 433,21 \quad R^2 = 0,6105 \quad (\text{Ecu 4})$$

donde X es el índice de refracción e Y es la composición de Etanol en ambas ecuaciones.

- Cálculo de la composición de etanol en las mezclas en equilibrio:

Se sustituye el Índice de Refracción observado, para cada fase de cada mezcla en equilibrio, en el ajuste respectivo.

Ej: para la mezcla N° 1:

- Para la fase rica en Tolueno: IR=1,4820

$$y = -23,365*(1,4805)^2 + 65,396*(1,4805) - 45,281 = 0,3245$$

- Para la fase rica en Agua: IR=1,3710

$$y = -224,66*(1,3690)^2 + 624,28*(1,3690) - 433,21 = 0,3803$$

análogo para las otras dos mezclas. Los resultados están en la tabla # 8.

BIBLIOGRAFÍA

- BARROW, Gordon. “Química Física”, 2° edición, vol.2. Edit. Reverté S.A.. Barcelona, España, 1968. 893pp.
 - CROCKFORD, H. D. y Samuel Knight. “Fundamentos de Fisicoquímica”. 1° edición en español de la 2° edición en inglés. Compañía Editorial Continental, SA. México, 1978. 469pp.
 - DANIELS, Farrington y Robert Alberty. “Fisicoquímica”, 1° edición en español de la 2° edición en inglés. Compañía Editorial Continental, SA. México, 1963. 834pp
 - Elman, Hinda. “Guía de Extracción Líquido-Líquido. Procesos de Separación”, Escuela de Ing. Química UCV. Semestre 3-2001.
 - HENLEY, Ernest y J. D. Seader. “Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering”. John Wiley & Sons, Inc. Estados Unidos de América, 1981. 742pp.
 - KING, Judson. “Procesos de Separación”. Editorial Reverté, SA. Barcelona, España, 1980. 914pp
 - PERRY, Robert y Don Green. “Perry’s Chemical Engineers’ Handbook”, 7° edición, versión en CD. McGraw-Hill. USA, 1999.
 - SIEGERT, Germán. “Laboratorio Básico de Química”, Fundación Ediciones y Publicaciones Vicerrectorado Académico U.C.V.. Caracas, Venezuela, 1998. 218pp.
-