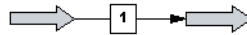




PROPIEDADES DE MEZCLAS

Ya hemos visto anteriormente que CHEMCAD permite obtener propiedades de compuestos puros consultando la base de datos. Sin embargo, no posee herramientas para calcular fácilmente propiedades de mezclas. Una manera de generar este tipo de información consiste en crear una simulación con únicamente una entrada y una salida conectadas, emplear esa corriente para definir la mezcla y así poder obtener algunas de sus propiedades.



Es importante que la corriente definida no conste de una mezcla líquido – vapor, ya que entonces la composición de las fases líquida y vapor son las de equilibrio, y ninguna de las dos corresponde a la composición global definida.

Emplear Report → Stream properties → All streams para que CHEMCAD genere un reporte con las propiedades de todas las corrientes de la simulación. Alternativamente, se puede seleccionar una corriente y emplear Report → Stream properties → Select streams. Para seleccionar qué propiedades reportará CHEMCAD emplear Report → Stream properties → Select properties. Entre las propiedades que se pueden calcular de esta manera, se encuentran densidad, factor de compresibilidad, calor específico, entalpía, entropía, energía libre de Gibbs, viscosidad, conductividad térmica, y tensión superficial. En el caso de entalpía, entropía y energía de Gibbs, el valor reportado por CHEMCAD es el producto de la propiedad intensiva por el flujo que tenga la corriente.

También se pueden graficar algunas de las propiedades de la mezcla en función de la temperatura, empleando el menú Plot → Stream properties. Entre las propiedades que se pueden graficar están presión de vapor, densidad, viscosidad, conductividad térmica, tensión superficial de líquido, y calor específico. Es necesario proporcionar el rango de temperatura para la gráfica.

Hay que tener en mente que estas propiedades de mezclas son generalmente calculadas a partir de reglas de mezclado empíricas. No están respaldadas por datos experimentales y no hay manera de ajustarlas por regresión (a diferencia de los datos de equilibrio). Más aún, la documentación en el archivo de ayuda sobre estas reglas de mezclado es escasa o nula.

Generalmente las predicciones de propiedades de mezclas son buenas para moléculas no polares y compuestos simples, y tienen mayor incertidumbre para moléculas polares, compuestos complejos, o mezclas de sustancias de naturaleza química muy diferente.



EJERCICIO 5
DENSIDAD DE MEZCLAS LÍQUIDAS

Generar una gráfica de la densidad de líquido (en kg/m^3) de mezclas de diclorometano (CH_2Cl_2) y tetracloruro de carbono (CCl_4) a 20°C , en función de la fracción mol de diclorometano.

