



Universidad
Zaragoza



MEDIDA E INTERPRETACIÓN DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS EN SISTEMAS LÍQUIDOS MULTICOMPONENTE

TRABAJO DE FIN DE GRADO

CARMEN ALMODÓVAR MURILLO

Director: Héctor Artigas Lafaja
Departamento de Química Física

RESUMEN

Se ha realizado un estudio termofísico de dieciocho sistemas de mezclas binarias tipo éster de alquilo + alcohol, concretamente lactato de metilo y lactato de etilo con metanol, etanol, 1-propanol, 1-butanol, 2-butanol, isobutanol, terbutanol, 1-pentanol y 1-hexanol. Este estudio se ha centrado en la medida e interpretación de la tensión superficial y su desviación, con el objetivo de obtener nuevos datos relacionados con los fenómenos estructurales y energéticos que intervienen en el proceso de mezcla, ampliando de este modo la información sobre los sistemas líquidos. El análisis de las propiedades en estos sistemas permite relacionar los valores obtenidos con la longitud o las ramificaciones de la cadena hidrocarbonada de los compuestos que forman la mezcla.

ABSTRACT

A thermophysical study of eighteen mixture systems of alkyl ester + alcohol has been carried out, specifically methyl and ethyl lactate with methanol, ethanol, 1-propanol, 1-butanol, 2-butanol, isobutanol, tertbutanol, 1-pentanol and 1-hexanol. The study was centered on the measure and interpretation of the surface tension, with the objective of obtaining new data related with the energetic and structural phenomenons that take part on the mixing process and, doing so, expanding our knowledge about liquid systems. The analysis of this properties in these specific systems allows us to related the obtained values with the length and the ramifications of the hydro carbonated chain of the components that form them.

ÍNDICE

Introducción	pág 4
Procedimiento experimental	
Compuestos utilizados	pág 6
Tratamiento de las muestras	pág 7
Medida de la tensión superficial	pág 8
Resultados experimentales	
Tratamiento de los resultados experimentales	pág 10
Desviación de la tensión superficial	pág 10
Interpretación de los resultados experimentales	pág 14
Conclusiones	pág 17
Anexo	pág 18
Bibliografía	pág 22

1. INTRODUCCIÓN

La medida y el estudio de las propiedades termofísicas de sistemas líquidos orgánicos es de gran importancia e interés en diversos ámbitos relacionados con la química, ya que proporciona información útil de forma directa, así como una gran fuente de datos valiosa para múltiples aplicaciones. Gracias a estudios de este tipo, la aplicación de los datos experimentales ya conocidos aumenta considerablemente, debido a que se ofrece una información mucho más detallada y específica.

El trabajo llevado a cabo se ha centrado en la medida de una única propiedad en sistemas líquidos binarios, la tensión superficial, a la temperatura de 298,15 K. Cabe señalar que habría sido de interés, si se hubiese dispuesto de mayor cantidad de tiempo, medir dicha propiedad a diversas temperaturas, para poder llevar a cabo un análisis posterior de la variación de los resultados en función de éstas. O bien, haber medido otras propiedades de estas mismas mezclas para poder analizar después las relaciones existentes entre ellas. Por ello, se ha contrastado información con otros estudios ya realizados sobre estas mezclas, de manera que se pueda estimar la variación de otras propiedades y la influencia de la temperatura en este tipo de sistemas líquidos.

La base de este estudio reside en la medida de la tensión superficial de sistemas líquidos multicomponente o mezclas de líquidos, magnitud responsable de que la composición en la superficie difiera de la composición en el seno del líquido. Dicha diferencia, está relacionada con diversos factores físicos, como las tensiones superficiales y las estructuras de los componentes puros que conforman la mezcla. En este tipo de sistemas líquidos, la superficie tiende a enriquecerse del componente cuya tensión superficial sea menor, minimizando así su energía. Esta información puede ser muy útil a la hora de caracterizar un sistema líquido multicomponente.

En este trabajo se ha llevado a cabo el estudio de mezclas binarias líquidas de lactato + alcohol, midiendo su tensión superficial a 298,15 K mediante el método del volumen de gota. Concretamente, estas medidas recaen sobre mezclas de lactato de metilo + alcohol y lactato de etilo + alcohol, para todos los alcoholes lineales desde el 1-metanol hasta el 1-hexanol y para los cuatro isómeros alcohólicos del butanol. Posteriormente, los datos obtenidos de tensión superficial de las mezclas se transforman en desviaciones de la tensión superficial, y se correlacionan a un polinomio de Redlich-Kister [1].

El objetivo científico de este estudio es apreciar la influencia del tamaño del alcohol, de las ramificaciones del alcohol y del tamaño del lactato en las características termofísicas de las mezclas de líquidos, es decir, llevar a cabo un estudio a nivel molecular, tanto en términos energéticos como estructurales. Así como proveer datos experimentales valiosos de mezclas líquidas binarias.

La realización de este Trabajo de Fin de Grado ha sido mi primera experiencia personal trabajando en un laboratorio de investigación, donde he podido poner en

práctica capacidades, obtenidas a lo largo de todos los años de estudio del Grado, tanto a la hora de integrarme en todos los equipos de trabajo como a la hora de aplicar mis conocimientos para resolver y afrontar cualquier cuestión que pueda tener lugar en la ejecución de un proyecto. Además, he podido crecer profesionalmente en este campo y aprender a hacer un uso mucho más avanzado de la bibliografía y la documentación necesaria para realizar este TFG.

En cuanto al trabajo realizado en el laboratorio de investigación, ha sido de carácter completamente individual, siempre supervisado por el responsable del laboratorio en cada determinado momento. Nunca he tenido la necesidad de compartir o contrastar información con otros compañeros ni intercambiar el instrumento empleado para llevar a cabo las medidas, debido a que este estudio se ha centrado en la medida de una única propiedad, la tensión superficial.

Además, mi familiarización con el equipo de medida tuvo lugar con las mismas medidas de las tensiones superficiales de los compuestos puros, necesarias para ejecutar este TFG, ya que de éstos se poseen datos bibliográficos que se pueden contrastar de manera sencilla, como se muestra más adelante en la Tabla 1 de este trabajo.

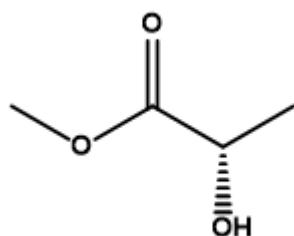
Para realizar correctamente todas las medidas y obtener los datos necesarios para calcular las desviaciones de las tensiones superficiales, utilicé una hoja de cálculo Excel, preparada previamente. Así, al añadir los datos de tensión superficial, densidad y volumen molar de los componentes puros, se procedía al cálculo sencillo de cada fracción molar exacta de cada mezcla y de la diferencia de densidades de la mezcla. Con el método de volumen de gota, se obtenía la tensión superficial. El ajuste de todos los resultados experimentales obtenidos se correlacionó a un polinomio de Redlich-Kister con el programa de ordenador *Microcal Origin 6.0* y, con este mismo programa, se obtuvieron las representaciones gráficas de desviación de tensión superficial frente a composición de las mezclas binarias, que aparecen en este trabajo posteriormente. También tuve que hacer uso del programa *Chem Draw* para realizar la estructura de algunos de los compuestos que forman parte de las mezclas binarias estudiadas.

2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

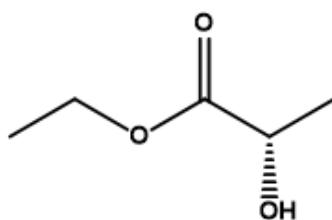
2.1 COMPUESTOS UTILIZADOS

Las mezclas binarias caracterizadas termofísicamente son del tipo **éster de alquilo + alcohol**. Los alcoholes utilizados son: metanol, etanol, 1-propanol, 1-butanol, 2-butanol, isobutanol, ter-butanol, 1-pentanol y 1-hexanol. Todos ellos han sido mezclados con lactato de metilo y con lactato de etilo.

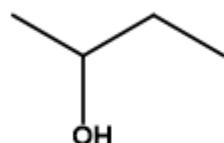
A continuación, se representan las estructuras de algunos de los compuestos citados anteriormente, ya que se considera un dato de interés y que influye directamente en los resultados experimentales obtenidos:



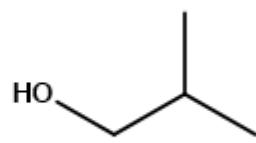
Lactato de metilo



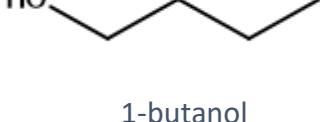
Lactato de etilo



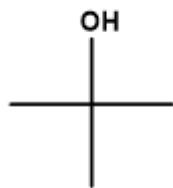
2-butanol



iso-butanol



1-butanol



ter-butanol

2-

Solo se ha representado la estructura del alcohol lineal 1-butanol, ya que todas las demás son muy similares a ésta. Solo se diferencian en el número de carbonos que posee la cadena hidrocarbonada.

En la siguiente tabla se muestran las tensiones superficiales obtenidas experimentalmente de los componentes puros empleados en este trabajo y se comparan con los datos de la literatura:

Tabla 1. Tensiones superficiales de los componentes puros a T = 298,15 K y p = 0,1 MPa y comparación con los datos de la literatura (referencia [2], salvo indicados)

Componente	$\sigma / \text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$	
	Experimental	Literatura
Lactato de metilo	32,84	----
Lactato de etilo	29,47	29,20 (a 20,0°C) ^a
Metanol	22,19	22,10
Etanol	22,00	21,89
1-Propanol	23,37	23,31
1-Butanol	24,78	24,90
2-Butanol	23,13	23,10
Isobutanol	22,38	20,10
Ter-butanol	20,57	22,37
1-Pentanol	25,28	25,40
1-Hexanol	25,77	25,90

^a: referencia [3]

El lactato de etilo [4] es un éster orgánico que puede usarse como aditivo alimentario o en perfumería, pero su principal aplicación es como disolvente. Su importancia recae principalmente en su baja tensión superficial, su baja presión de vapor, su punto de ebullición elevado y su elevado poder disolvente. Además, es económico a la hora de ser reciclado y no es un contaminante atmosférico peligroso. Se puede obtener de manera natural en la fermentación del maíz y a partir de materias primas renovables, por lo que está relacionado de manera directa con la Química Verde.

Los alcanoles [5,6] son disolventes polares versátiles, útiles en diversos procesos, económicos y fácilmente disponibles en pureza alta. Su principal característica estructural es la formación de multímeros de diferente tamaño, mediante puente de hidrógeno establecidos entre sus moléculas. La medida de sus propiedades termofísicas posee especial importancia cuando forman parte de mezclas líquidas, ya que en ellas las interacciones intermoleculares cambian y se alcanzan comportamientos no ideales, de manera que se puede conocer la desviación de las propiedades estudiadas. Por tanto, se considera interesante llevar a cabo el estudio de los cambios termodinámicos que se producen durante la dilución de un alcohol en un disolvente, lo cual incluye la medida de la tensión superficial entre otras.

2.2 TRATAMIENTO DE LAS MUESTRAS

En este estudio se ha trabajado con fracciones molares que se distribuyen en todo el rango de concentraciones de 0,10-0,90, con un intervalo de 0,10 entre ellas. Se han estudiado también las fracciones molares de 0,05 y 0,95 para que los extremos de

la curva estén mejor caracterizados. Como resultado se obtienen **once fracciones molares** de trabajo en total, para cada sistema, que es la cantidad mínima recomendada en este tipo de estudios.

Las muestras de las cuales se mide su tensión superficial no requieren una gran **preparación previa**. Basta con seleccionar el volumen final de la mezcla y pesar la cantidad adecuada de cada uno de manera sucesiva teniendo en cuenta la densidad de cada líquido, determinando así el volumen a tomar de cada líquido de la mezcla binaria. De esta forma, se anota primero el peso del recipiente vacío y del recipiente tras la adición de cada componente de la mezcla, con el fin de poder calcular cada una de las once fracciones molares a medir de forma precisa. Hay que tener en cuenta la variación de la densidad de la mezcla, a medida que varía su composición, ya que influye en la tensión superficial significativamente.

2.3 MEDIDA DE LA TENSIÓN SUPERFICIAL

La **tensión superficial** es una propiedad de las sustancias líquidas, que tiende a reducir su superficie externa con el fin de minimizar la energía del sistema. Esto se debe a que una molécula en el seno de la disolución experimenta fuerzas de cohesión con otras moléculas que se encuentran a su alrededor, de manera que todas estas fuerzas están equilibradas entre sí. Sin embargo, una molécula que se encuentra en la superficie experimenta una fuerza neta hacia el seno del líquido, ya que en la superficie no existen las citadas fuerzas de cohesión líquido-líquido dado que las situadas en la superficie están también en contacto con las del exterior (se denomina **tensión interfacial** cuando se produce entre dos líquidos no miscibles). Por lo tanto, una molécula en la superficie posee más energía que una molécula en el seno del líquido, por lo que, a menor superficie externa de un sistema líquido, menor energía para el sistema.

Para medir la tensión superficial en este estudio se ha empleado el **método del volumen de gota**, un método dinámico en el que la superficie del líquido varía con el tiempo. Se basa en el equilibrio de fuerzas existente entre el peso de una gota que se forma en el extremo de un capilar y la tensión superficial que la retiene, hasta que la gota cae de dicho capilar. Cuando el peso de la gota es lo suficientemente pequeño, la tensión superficial es capaz de soportarlo; por acción de una barrera mecánica, el volumen de gota va aumentando, hasta que llega al punto de que el peso de la gota no puede ser soportado por la tensión superficial y la gota cae. De esta manera, si se igualan la fuerza peso y la tensión superficial, se llega a la siguiente expresión:

$$\sigma = \frac{Vg\Delta\rho}{2\pi f} \quad (\text{Ecuación 1})$$

Donde σ es la tensión superficial del sistema líquido; V es el volumen de gota que se desprende del capilar; g es la constante de aceleración del campo gravitatorio

terrestre; $\Delta\rho$ es la diferencia de densidades entre el líquido y el aire de la cámara; r es el radio del capilar y f un factor de corrección necesario ya que la gota no cae directamente, sino que se va formando un cuello (factor de Harkins-Brown).

Además, se puede observar que existe una relación de proporcionalidad directa entre el volumen crítico de la gota y la tensión superficial. Sucede lo mismo con la diferencia de densidades. Por ello, se pueden relacionar directamente estas magnitudes de manera muy sencilla.

Para llevar a cabo las medidas de tensión superficial se ha utilizado un **tensiómetro de volumen de gota Lauda TVT-2** (Figura 1). Este instrumento, proporciona una exactitud de $\pm 0,5\%$ respecto del valor final de la tensión superficial y una reproducibilidad de $\pm 0,01\text{ mN/m}$. Consta de las siguientes partes:

- Una jeringuilla termostatizada, de la cual se desprenden las gotas. Esta jeringa va colocada en una cámara de polimetacrilato, por la cual circula el líquido termostatizante que procede de un baño externo incorporado al equipo.
- Un sistema motorizado, que controla el émbolo de la jeringuilla, mediante el movimiento de una barrera, haciendo que las gotas se formen y caigan posteriormente por el capilar.
- Una cámara termostatizada, que recoge las gotas que se desprenden del capilar.
- Una unidad de control electrónica (microprocesador), que conecta la parte mecánica con un ordenador, permitiendo así la manipulación mediante un programa de ordenador. Esta unidad, controla la formación de las gotas, la subida y bajada de la barrera a la velocidad adecuada y proporciona la información necesaria, como el volumen de gota y los resultados de tensión superficial. Desde el ordenador se seleccionan las condiciones de medida.
- Un interfaz RS-232-C, que transfiere los parámetros de entrada del ordenador al microprocesador. Así, se ejecuta posteriormente la orden de formas las gotas con ayuda del sistema mecánico.
- Un baño termostatizado externo, tipo Lauda E-204, que permite que la temperatura permanezca constante a 298,15 K. Para que el sistema líquido contenido en la jeringuilla alcance la temperatura de trabajo deseada, se debe esperar unos 5-10 minutos antes de realizar la medida.



Figura 1. Tensiómetro Lauda TVT-2

3. RESULTADOS EXPERIMENTALES

3.1 TRATAMIENTO DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

A partir de los valores medidos experimentalmente de tensión superficial, se pueden obtener las desviaciones de dicha tensión ($\Delta\sigma$) mediante la siguiente expresión:

$$\Delta\sigma = \sigma - \sum_i x_i \sigma_i \quad (\text{Ecuación 2})$$

Donde x_i es la fracción molar del componente i , σ_i es la tensión superficial del componente i y σ es la tensión superficial de la mezcla líquida.

La superficie de una mezcla líquida tiende a enriquecerse en el componente cuya tensión superficial es menor, para minimizar su energía. La isoterma de adsorción de Gibbs es una herramienta teórica que proporciona información cuantitativa acerca de dicho enriquecimiento a partir de la fracción molar superficial, que se define como:

$$x_i^\sigma = \frac{\Gamma_i^\sigma}{\sum_i \Gamma_i^\sigma} \quad (\text{Ecuación 3})$$

donde Γ_i^σ es la concentración de exceso del componente i en la superficie, es decir, la cantidad real que hay de i . Esta concentración está relacionada con la concentración de exceso relativa del componente i frente al componente j , llamada adsorción relativa. Pero esta herramienta, en este trabajo, queda pendiente de estudio.

3.2 DESVIACIÓN DE LA TENSIÓN SUPERFICIAL

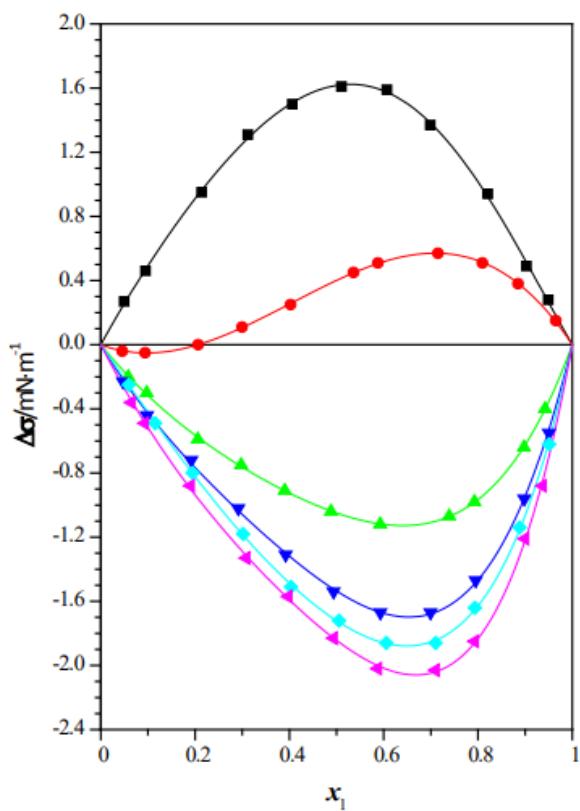
En este estudio, se han obtenido valores experimentales de tensión superficial de cada una de las mezclas de alcohol + lactato citadas anteriormente en el punto 2. Después, aplicando la ecuación 2 se calculan las desviaciones de la tensión superficial para cada mezcla. Estos datos se recogen en las tablas del anexo.

Los parámetros de ajuste del polinomio de Redlich-Kister, utilizado para transformar la tensión superficial medida experimentalmente en $\Delta\sigma$, se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 2. Parámetros de Redlich-Kister, A_i , y desviaciones estándar, $\sigma(\Delta\sigma)$ para las desviaciones de la tensión superficial, $\Delta\sigma$.

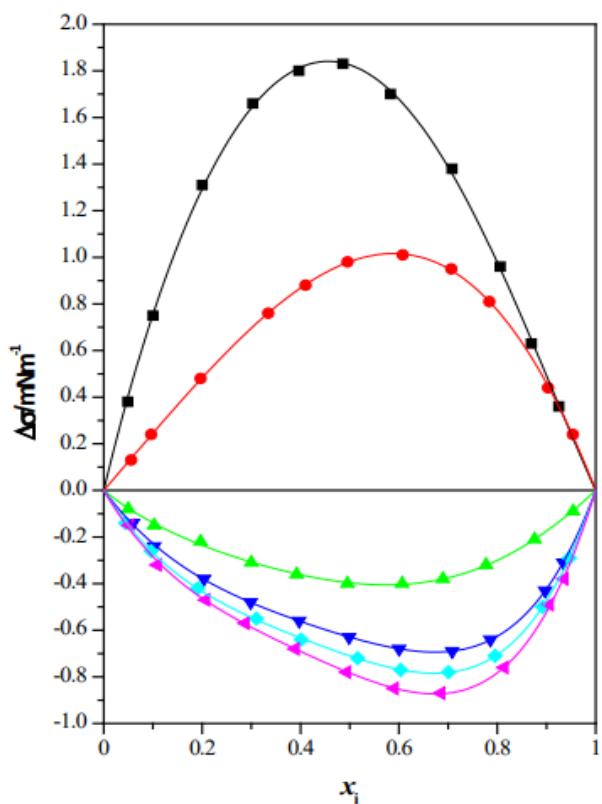
Sistema	A_0	A_1	A_2	A_3	$\sigma(\Delta\sigma)$
Lactato de metilo +					
metanol	6,47	0,93	-1,24	-1,07	0,02
etanol	1,60	2,76	0,05	0,01	0,01
1-propanol	-4,20	-2,03	-1,63	-0,18	0,01
1-butanol	-6,14	-3,72	-2,32	0,19	0,02
2-butanol	-7,00	-2,41	-3,93	-2,26	0,02
isobutanol	-7,13	-3,82	-4,54	-2,99	0,02
ter-butanol	-5,29	-2,23	-0,24	0,55	0,01
1-pentanol	-6,88	-3,84	-2,17	-0,99	0,01
1-hexanol	-7,37	-4,41	-3,56	-0,74	0,02
Lactato de etilo +					
metanol	7,30	-1,40	-0,57	-0,67	0,02
etanol	3,92	1,54	0,00	-0,07	0,01
1-propanol	-1,59	-0,45	-0,24	0,32	0,01
1-butanol	-2,52	-1,21	-1,71	-0,22	0,00
2-butanol	-2,80	-0,69	-1,76	-0,95	0,01
isobutanol	-2,89	-1,13	-1,89	-1,05	0,01
ter-butanol	-2,07	-0,69	-0,49	0,24	0,01
1-pentanol	-2,84	-1,40	-2,00	-0,03	0,00
1-hexanol	-3,13	-1,69	-2,11	0,07	0,01

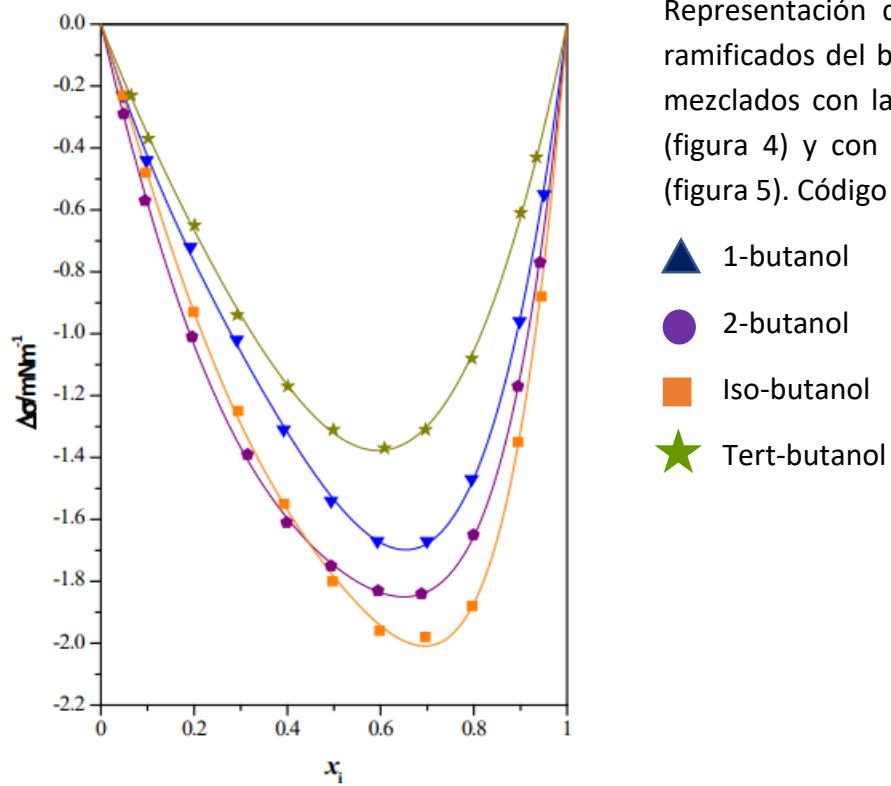
En las siguientes figuras se representa la desviación de la tensión superficial frente a la composición de las mezclas binarias estudiadas:



Representación de los seis alcoholes lineales estudiados a 298.15K, mezclados con lactato de metilo (figura 2) y con lactato de etilo (figura 3). Código de colores:

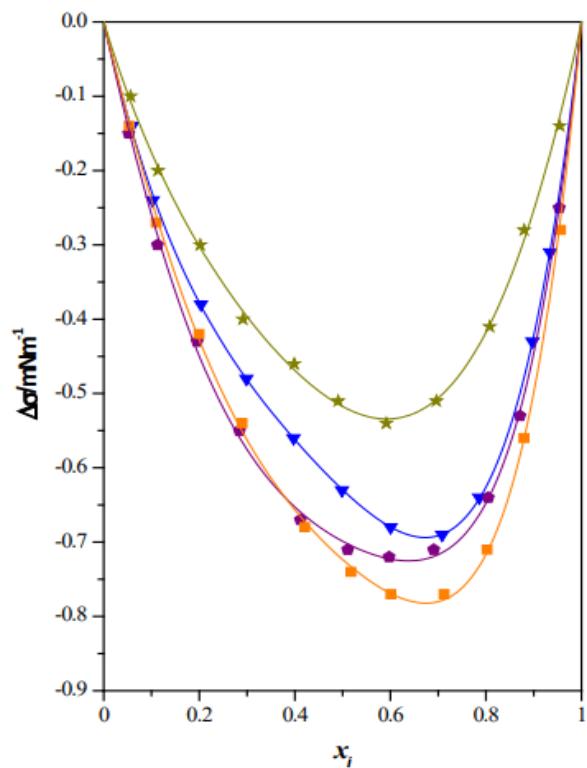
- Metanol
- Etanol
- ▲ 1-propanol
- △ 1-butanol
- 1-pentanol
- ◆ 1-hexanol





Representación de los isómeros ramificados del butanol 298.15K, mezclados con lactato de metilo (figura 4) y con lactato de etilo (figura 5). Código de colores:

- ▲ 1-butanol
- 2-butanol
- Iso-butanol
- ★ Tert-butanol



3.3 INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

Como ya se ha explicado en el punto 2 de este trabajo, la tensión superficial es una propiedad física de los sistemas líquidos que depende básicamente, de las fuerzas intermoleculares presentes entre la interfase que existe entre la superficie de un líquido y el aire. La desviación de la tensión superficial ofrece una medida del tipo de interacciones que se establecen en la superficie entre los distintos componentes que conforman una mezcla. Así mismo, permite detectar cambios en la tensión superficial, debidos a factores energéticos y estructurales.

La isoterma de adsorción de Gibbs, es la herramienta que permite detectar la tendencia de cada componente de una mezcla, a ser adsorbido en la superficie. Como también se ha citado anteriormente en este trabajo, la superficie de una mezcla líquida tiende a enriquecerse del componente cuya tensión superficial sea menor, debido a términos energéticos. Esto genera una diferencia de composición en la disolución que se encuentra en el seno del líquido, frente a la que se encuentra en la superficie del mismo.

Observando la representación de la desviación de la tensión superficial frente a la composición de los seis alcoholes lineales mezclados con lactato de metilo, se puede deducir que tanto metanol como etanol presentan una desviación positiva, mientras que la del resto de alcoholes, es negativa. Además, se observa que la variación de la desviación de la tensión para el caso del etanol es de tipo sigmoidal, alterando intervalos de crecimiento y decrecimiento. De esta representación, también se deduce que, a medida que aumenta la cadena lineal hidrocarbonada del alcohol, la desviación de la tensión superficial es menor o más negativa. Es decir, la estructura del alcohol influye de manera directa en los resultados.

En la representación de la desviación de la tensión de estos mismos alcoholes lineales mezclados con etanol, se puede ver claramente que, aunque la estructura del gráfico es muy similar que la obtenida empleando lactato de metilo (metanol y etanol poseen una desviación también positiva, frente a la del resto, que es negativa), aquí se obtienen valores de desviación de la tensión notablemente mayores para los seis alcoholes.

Si se analizan las representaciones gráficas de todos los tipos e isómeros de alcoholes de cuatro carbonos estudiados, mezclados con lactato de metilo y con lactato de etilo, se puede observar claramente que todas las desviaciones de la tensión obtenidas son negativas. En ambos casos, la desviación de la tensión superficial del tert-butanol es la mayor y la del iso-butanol, la menor. Es decir, las ramificaciones de la cadena hidrocarbonada del isómero estructural isobutanol, disminuyen la desviación de la tensión, mientras que un alcohol de estructura tipo terciaria (como el tert-butanol), aumenta la desviación de la tensión, frente a la del alcohol lineal. Además, se puede ver que la desviación de la tensión superficial del 2-butanol, el cual posee estructura secundaria, es menor que la del 1-butanol.

Es necesario añadir que, si se comparan ambos gráficos, se puede deducir que, al igual que en el caso de los seis alcoholes lineales, aquí también se obtienen unos valores de la desviación de la tensión superficial mucho menores si se usa lactato de etilo en lugar de lactato de metilo. Por lo que podemos deducir que la estructura del lactato utilizado en la mezcla influye considerablemente en los valores obtenidos.

Como ya se ha citado previamente en la introducción de este trabajo, se ha llevado a cabo la consulta de otros estudios ya realizados, con el fin de relacionar y ampliar la información que se ha obtenido en esta investigación. Ya que, este trabajo, se ha centrado en la medida de una sola propiedad a una única temperatura y es necesario que la visión del objetivo de esta investigación sea más amplia. Pese a que no se ha encontrado ningún documento publicado que lleve a cabo el estudio de mezclas de alcanoles y lactatos, se han utilizado artículos en los que se muestra el estudio realizado sobre alcanoles mezclados con otro tipo de sustancias. De esta manera, se han elegido los documentos ofrecidos por la bibliografía que más se asemejan a los compuestos empleados en este trabajo.

Uno de los estudios consultados [7], trata sobre la medida de la tensión superficial de mezclas binarias de etanol, 1-butanol y 2-butanol con hexano, en distintas temperaturas, que varían entre los 283,15 y los 313,15 K, también llevado a cabo con el método del volumen de gota.

Analizando los resultados de este documento, se puede comprobar que la desviación de la tensión superficial disminuye conforme aumenta la temperatura, en los tres casos objetos de estudio.

También se ha tenido en cuenta otra investigación [8] en la que se llevó a cabo el estudio de diversas propiedades termofísicas, para el 1-propanol y el 1-butanol, en mezclas binarias con N,N-dimetilacetamida a dos temperaturas diferentes, 298.15 y 283.15K.

Una de las propiedades analizadas fue el volumen de exceso a distintas temperaturas. La conclusión que se puede obtener de estos resultados es que el volumen de exceso es menor en el caso del 1-propanol y mayor para el 1-butanol, así como que esta propiedad disminuye conforme la temperatura aumenta, igual que sucedía en el estudio citado anteriormente. Aquí también se midió la desviación del índice de refracción, obteniéndose también valores menores a mayor temperatura; pero, a diferencia del volumen de exceso, la desviación del índice de refracción fue mayor para las mezclas de 1-propanol. Finalmente, en este estudio, se midió la variación de la desviación de la viscosidad, para esta propiedad los mayores resultados se obtuvieron a la temperatura más alta y los menores, a la temperatura más baja, siendo los de las mezclas con 1-propanol superiores a los con 1-butanol. Como conclusión del análisis de este documento, se puede afirmar que cada propiedad termofísica varía de manera distinta en este tipo de sistemas líquidos multicomponentes, pese a que están relacionadas entre sí.

Ambos documentos consultados permiten una pequeña estimación de la variación de otras propiedades y de la temperatura en función de la fracción molar de las mezclas binarias, ampliando la visión que se ofrece en la parte puramente experimental de este Trabajo de Fin de Grado y aportando una información adicional sobre el comportamiento que presentan este tipo de sistemas líquidos, conformados por alcanoles, que han sido objeto principal de estudio en mi investigación.

4. CONCLUSIONES

La medida experimental de la tensión superficial, mediante el método del volumen de gota, en mezclas líquidas binarias, alcohol + lactato, se ha llevado a cabo en este trabajo con el fin de poder conocer la variación de la desviación de dicha tensión superficial debida a la influencia de la composición de la mezcla (fracción molar) y de la estructura de los componentes que la conforman.

A la vista de los resultados obtenidos se puede pensar que los alcoholes lineales que poseen una cadena hidrocarbonada mayor y, por tanto menor polaridad, poseen una menor desviación de la tensión superficial.

Por otro lado, los resultados de los distintos isómeros del butanol, nos permiten afirmar que la posición del grupo OH es determinante en el valor de la desviación de la tensión superficial obtenido, así como la longitud de la cadena alquílica. Esto se concluye ya que la desviación de la tensión superficial es mayor para un alcohol terciario, como el terbutanol y menor para uno secundario.

Además, para un mismo alcohol, los resultados varían al cambiar de un éster de etilo a un éster de metilo, siendo los valores de la desviación de la tensión superficial considerablemente mayores en el caso de emplear lactato de etilo. Es decir, se produce una variación, en función de la composición, relevantemente mayor con el lactato de metilo.

Finalmente, con los datos obtenidos, se puede comprobar que los alcoholes cuya cadena hidrocarbonada es más corta (metanol y etanol) poseen desviaciones de la tensión superficial positivas, mientras que las del resto de alcoholes son negativas.

Por tanto, la estructura de los componentes puros influye en la desviación de la tensión superficial y en la propia tensión superficial. Lo que afecta de forma directa a las características del sistema en diversos niveles.

Comparando este estudio con otras investigaciones ya publicadas, como se ha comentado anteriormente en el apartado anterior de este trabajo, se ha podido estimar la variación de otras propiedades en este tipo de mezclas binarias en función de su composición, así como la influencia de la temperatura en sistemas líquidos de este tipo; y concluir también, que las variaciones difieren según la propiedad de la que se trate.

ANEXO

Tabla S1. Tensiones superficiales, σ , y desviaciones de la tensión superficial, $\Delta\sigma$, a $T = 298,15\text{ K}$ y $p = 0,1\text{ MPa}$ de las mezclas lactato de alquilo (1) + alcohol (2).

x_1	$\sigma / \text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$	$\Delta\sigma / \text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$	x_1	$\sigma / \text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$	$\Delta\sigma / \text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$
Lactato de metilo (1) + metanol (2)					
0,0000	22,19		0,6069	30,24	1,59
0,0495	22,99	0,27	0,6987	31,00	1,37
0,0950	23,66	0,46	0,8209	31,87	0,94
0,2139	25,42	0,95	0,9029	32,30	0,49
0,3121	26,82	1,31	0,9491	32,58	0,28
0,4063	28,02	1,50	1,0000	32,84	
0,5106	29,24	1,61			
Lactato de metilo (1) + etanol (2)					
0,0000	22,00		0,5878	28,88	0,51
0,0455	22,45	-0,04	0,7152	30,32	0,57
0,0940	22,97	-0,05	0,8096	31,29	0,51
0,2066	24,24	0,00	0,8851	31,97	0,38
0,2995	25,36	0,11	0,9653	32,61	0,15
0,4027	26,62	0,25	1,0000	32,84	
0,5361	28,26	0,45			
Lactato de metilo (1) + 1-propanol (2)					
0,0000	23,37		0,5928	27,86	-1,12
0,0582	23,72	-0,20	0,739	29,30	-1,07
0,0975	23,99	-0,30	0,7925	29,89	-0,98
0,2058	24,73	-0,59	0,8977	31,23	-0,64
0,2977	25,44	-0,75	0,9424	31,89	-0,40
0,3904	26,16	-0,91	1,0000	32,84	
0,4884	26,96	-1,04			
Lactato de metilo (1) + 1-butanol (2)					
0,0000	24,78		0,5932	27,89	-1,67
0,0473	24,93	-0,23	0,6994	28,75	-1,67
0,0979	25,13	-0,44	0,7952	29,72	-1,47
0,1920	25,61	-0,72	0,8984	31,06	-0,96
0,2915	26,11	-1,02	0,9507	31,89	-0,55
0,3920	26,63	-1,31	1,0000	32,84	
0,4939	27,22	-1,54			
Lactato de metilo (1) + 1-pentanol (2)					
0,0000	25,28		0,6055	28,00	-1,86
0,0591	25,48	-0,25	0,7101	28,79	-1,86
0,1153	25,66	-0,49	0,7935	29,64	-1,64

0,1947	25,95	-0,80	0,8885	30,86	-1,14
0,3019	26,38	-1,18	0,9511	31,85	-0,62
0,4034	26,82	-1,51	1,0000	32,84	
0,5052	27,38	-1,72			
Lactato de metilo (1) + 1-hexanol (2)					
0,0000	25,77		0,5876	27,90	-2,02
0,0646	25,87	-0,36	0,7100	28,76	-2,03
0,0931	25,94	-0,49	0,7932	29,53	-1,85
0,1905	26,24	-0,88	0,8998	30,92	-1,21
0,3082	26,62	-1,33	0,9372	31,52	-0,88
0,3978	27,01	-1,57	1,0000	32,84	
0,4934	27,43	-1,83			
Lactato de metilo (1) + 2-butanol (2)					
0,0000	23,13		0,5945	27,07	-1,83
0,0488	23,31	-0,29	0,6878	27,97	-1,84
0,0945	23,48	-0,57	0,799	29,24	-1,65
0,1958	24,02	-1,01	0,8945	30,65	-1,17
0,3147	24,80	-1,39	0,9421	31,51	-0,77
0,3987	25,39	-1,61	1,0000	32,84	
0,4937	26,17	-1,75			
Lactato de metilo (1) + isobutanol (2)					
0,0000	22,38		0,598	26,68	-1,96
0,0470	22,64	-0,23	0,696	27,68	-1,98
0,0962	22,91	-0,48	0,7961	28,83	-1,88
0,1989	23,53	-0,93	0,8949	30,39	-1,35
0,2945	24,21	-1,25	0,9451	31,39	-0,88
0,3930	24,94	-1,55	1,0000	32,84	
0,4969	25,78	-1,80			
Lactato de metilo (1) + ter-butanol (2)					
0,0000	20,57		0,6084	26,67	-1,37
0,0651	21,14	-0,23	0,6964	27,80	-1,31
0,1014	21,44	-0,37	0,7958	29,25	-1,08
0,2009	22,39	-0,65	0,9008	31,01	-0,61
0,2926	23,22	-0,94	0,9342	31,60	-0,43
0,4011	24,32	-1,17	1,0000	32,84	
0,4987	25,38	-1,31			
Lactato de etilo (1) + metanol (2)					
0,0000	22,19		0,5829	28,13	1,70
0,0490	22,93	0,38	0,7081	28,72	1,38
0,1001	23,67	0,75	0,8061	29,02	0,96
0,2005	24,96	1,31	0,8694	29,15	0,63

0,3031	26,06	1,66	0,9252	29,29	0,36
0,3966	26,88	1,80	1,0000	29,47	
0,4860	27,56	1,83			
Lactato de etilo (1) + etanol (2)					
0,0000	22,00		0,6080	27,55	1,01
0,0557	22,55	0,13	0,7064	28,23	0,95
0,0966	22,96	0,24	0,7838	28,66	0,81
0,1971	23,95	0,48	0,9033	29,19	0,44
0,3344	25,26	0,76	0,9537	29,36	0,24
0,4102	25,94	0,88	1,0000	29,47	
0,4957	26,68	0,98			
Lactato de etilo (1) + 1-propanol (2)					
0,0000	23,37		0,6067	26,67	-0,40
0,0498	23,59	-0,08	0,6895	27,20	-0,38
0,1026	23,85	-0,15	0,7771	27,79	-0,32
0,1970	24,35	-0,22	0,8759	28,50	-0,21
0,2999	24,89	-0,31	0,9540	29,10	-0,09
0,3921	25,40	-0,36	1,0000	29,47	
0,4954	25,99	-0,40			
Lactato de etilo (1) + 1-butanol (2)					
0,0000	24,78		0,6006	26,92	-0,68
0,0591	24,92	-0,14	0,7084	27,41	-0,69
0,1027	25,02	-0,24	0,7861	27,83	-0,64
0,2037	25,36	-0,38	0,8972	28,56	-0,43
0,2987	25,70	-0,48	0,9344	28,85	-0,31
0,3974	26,08	-0,56	1,0000	29,47	
0,4989	26,49	-0,63			
Lactato de etilo (1) + 1-pentanol (2)					
0,0000	25,28		0,6036	27,04	-0,77
0,0443	25,33	-0,14	0,7007	27,44	-0,78
0,0962	25,42	-0,26	0,7953	27,90	-0,71
0,1911	25,66	-0,42	0,8922	28,52	-0,5
0,3100	26,03	-0,55	0,9465	28,96	-0,29
0,4013	26,32	-0,64	1,0000	29,47	
0,5159	26,72	-0,72			
Lactato de etilo (1) + 1-hexanol (2)					
0,0000	25,77		0,5906	27,11	-0,85
0,0524	25,81	-0,15	0,6852	27,44	-0,87
0,1088	25,85	-0,32	0,8142	28,02	-0,76
0,2074	26,07	-0,47	0,906	28,63	-0,49
0,2877	26,26	-0,57	0,9359	28,85	-0,38

0,3893	26,53	-0,68	1,0000	29,47	
0,4938	26,82	-0,78			
Lactato de etilo (1) + 2-butanol (2)					
0,0000	23,13		0,5975	26,20	-0,72
0,0525	23,31	-0,15	0,6908	26,80	-0,71
0,1127	23,54	-0,30	0,8048	27,59	-0,64
0,1957	23,94	-0,43	0,871	28,12	-0,53
0,2842	24,38	-0,55	0,9533	28,92	-0,25
0,4119	25,07	-0,67	1,0000	29,47	
0,5107	25,66	-0,71			
Lactato de etilo (1) + isobutanol (2)					
0,0000	22,38		0,6012	25,87	-0,77
0,0535	22,62	-0,14	0,7124	26,66	-0,77
0,1101	22,89	-0,27	0,8023	27,36	-0,71
0,1998	23,38	-0,42	0,8795	28,06	-0,56
0,2897	23,89	-0,54	0,9562	28,88	-0,28
0,4209	24,68	-0,68	1,0000	29,47	
0,5175	25,31	-0,74			
Lactato de etilo (1) + ter-butanol (2)					
0,0000	20,57		0.5915	25.29	-0.54
0,0563	20,97	-0,10	0,6964	26,26	-0,51
0,1137	21,38	-0,20	0,8080	27,35	-0,41
0,2021	22,07	-0,30	0,8801	28,12	-0,28
0,2916	22,77	-0,40	0,9547	28,93	-0,14
0,3988	23,66	-0,46	1,0000	29,47	
0,4908	24,43	-0,51			

BIBLIOGRAFÍA

- [1] O. Redlich, A.T. Kister, Algebraic representation of thermodynamic properties and the classification of solutions, *Ind. Eng. Chem.* 40 (1984) 345–348.
- [2] TRC, Thermodynamic Tables Non-Hydrocarbons, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University: College Station, TX, 1974.
- [3] [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl lactate](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/ethyl_lactate)
- [4] Carla S. M. Pereira, Viviana M. T. M. Silva, Alírio E. Rodrigues. Ethyl lactate as a solvent: properties, applications and production processes – a review.
- [5] S. Karlapudi, R. L. Gardas, P. Venkateswarlu, K. Sivakumar, FT-IR studies on excess thermodynamic properties of binary liquid mixtures o-chlorotoluene with 1-propanol, 1-butanol, 1-pentanol, 1-hexanol and 1-heptanol at different temperatures, *J. Chem. Thermodyn.* 67 (2013) 203-209.
- [6] N.G. Tsierkezos, M.M. Palaiologou, I.E. Molinou, Densities and viscosities of 1-pentanol binary mixtures at 293.15 K, *J. Chem. Eng. Data* 45 (2000) 272-275.
- [7] B. Giner, A. Villares, S. Martín, H. Artigas, C. Lafuente, Study of the Temperature Dependence of Surface Tensions of Some Alkanol + Hexane Mixtures.
- [8] Sahar Mrad, Monia Hichri, Ismail Khattech, Carlos Lafuente. Thermophysical study of the binary mixtures of N,N-dimethylacetamide with 1-propanol and 1-butanol.
- J. A. Riddick, W. B. Bunger, T. K. Sakano, *Organic solvents. Physical Properties and Methods of Purification (Techniques of Chemistry vol. II)*, 3^a ed., Wiley Interscience, Nueva York (1986)