

TENSIÓN SUPERFICIAL DE 16 ÉTERES. SELECCIÓN DE DATOS Y CORRELACIONES DE REFERENCIA

Ángel Mulero^{a*}, Isidro Cachadiña^a, Antonio Becerra^a

^a*Departamento de Física Aplicada. Universidad de Extremadura. 06006 Badajoz.*

*E-mail: mulero@unex.es

Palabras clave: tensión superficial, ésteres, correlaciones.

En este trabajo se estudia la dependencia de la tensión superficial respecto a la temperatura para 16 éteres. Esta propiedad resulta útil cuando se utilizan los éteres como oxigenantes en combustibles para reducir las emisiones de monóxido de carbono y aumentar su octanaje y su eficiencia [1]. También en su uso como aditivos en la producción de biocombustibles, refrigerantes, pinturas y productos farmacéuticos [2-5].

En trabajos anteriores [6-8] se han recopilado los datos disponibles en diversas fuentes para la tensión superficial de fluidos de distintas familias, encontrando serias discrepancias, en algunos casos, o falta de actualización de las bases de datos consultadas, en otros. Siguiendo en la misma línea, se han recopilado recientemente los valores de tensión superficial disponibles para 82 éteres a distintas temperaturas [9]. Como principales fuentes de datos se han utilizado las bases de datos de DIPPR [10] y DETHERM [11], así como el libro de Wohlfarth y Wohlfarth y sus actualizaciones [12]. A éstas, se han añadido los valores disponibles en artículos publicados en los últimos años y otros que no habían sido incluidos en las fuentes mencionadas. Finalmente, se han descartado aquellos datos que discrepan claramente de los obtenidos en la mayoría de otras fuentes.

Para este trabajo se han seleccionado los 16 éteres para los que se dispone de más de 25 datos y dichos datos cubren al menos el 50% del rango de temperaturas entre el punto triple y el punto crítico de cada sustancia.

Siguiendo este proceso, se han añadido 665 datos a los 702 disponibles en las bases de datos, y del total han sido descartados 328. Así, el número final de datos utilizado para los 16 éteres estudiados ha sido de 1039, disponiendo para cada fluido entre 32 (di-n-Propyl Ether) y 158 (Dimethyl Ether) valores para la tensión superficial.

Para modelar estos datos se ha utilizado la correlación de Guggenheim-Katayama, usada actualmente en el programa REFPROP [6-9,13]:

$$\sigma(T) = \sum_{i=1}^k s_i \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{n_i}$$

donde s_i y n_i son coeficientes obtenidos mediante ajuste a los datos considerados y T_c es la temperatura crítica. En este trabajo se han considerado 1 o 2 términos del desarrollo, es decir, se han obtenido 2 o 4 coeficientes ajustables para cada fluido [9].

Las desviaciones absolutas medias entre estos datos y los valores obtenidos a partir de las correlaciones son inferiores al 1.7%, excepto para Anethole (2.14%) y el Methyl tert-Pentyl Ether (4.20%). En el caso del Anethole se encuentran discrepancias entre los valores proporcionados en DIPPR y DETHERM a temperaturas intermedias, sin que pueda establecerse cuáles son los más adecuados [9]. A temperaturas altas solo existen valores en DIPPR y la correlación propuesta los reproduce con pequeñas desviaciones.

En el caso del Methyl tert-Pentyl Ether los datos obtenidos por diferentes autores a temperaturas intermedias discrepan claramente entre sí, sin que exista un criterio para seleccionarlos. Esto provoca una desviación máxima del 9.42% a 328.15 K [9].

Las desviaciones máximas obtenidas son inferiores al 9.5% excepto para Diethyl Ether, donde se alcanza un 15.4% a 453.15 K, que es la temperatura más alta para la que se dispone de datos [9]. Para este fluido se han seleccionado un total de 144 valores procedentes de diversas fuentes, y justo a esa temperatura existen discrepancias entre dos fuentes de datos incluidas en el libro de Wohlfarth y Wohlfarth [12]. Como es una temperatura alta, la tensión superficial toma valores cercanos a cero y cualquier desviación absoluta conlleva una alta desviación relativa (porcentual).

En conclusión, los modelos de correlación propuestos son suficientemente precisos como para poder utilizarse en diversas aplicaciones y poder incorporarse en futuras versiones del programa REFPROP [13] u otros similares.

Referencias

- [1] K. Watanabe, N. Yamagiwa, and Y. Torisawa. Cyclopentyl methyl ether as a new and alternative process solvent. *Organic Process Research and Development*, **11**, 251-258 (2007).
- [2] A. S. Ramadhas, S. Jayaraj, and C. Muraleedharan. Experimental investigations on diethyl ether as fuel additive in biodiesel engine. *International Journal of Global Energy Issues*, **29**, 329-336 (2008).
- [3] J. Fan, X. Zhao, and Z. Guo, Surface tension of ethyl fluoride (HFC161) from (233 to 373) K, *Fluid Phase Equilibria* **316**, 98-101 (2012).
- [4] J. Bieleman, J. Hajas, and K. Dören, Flow-levelling and coalescing agents, *Additives for Coatings*, 163-200 (2000).
- [5] S. Schreier, S. V. P. Malheiros, and E. de Paula, Surface active drugs: self-association and interaction with membranes and surfactants. physicochemical and biological aspects, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes* **1508**, 210-234 (2000).
- [6] A. Mulero, I. Cachadiña, and D. Bautista, Recommended correlations for the surface tension of n-alkanes, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **50**, 023104 (2021).
- [7] A. Mulero, I. Cachadiña, and A. Vegas, Recommended correlations for the surface tension of 80 esters”, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **50**, 033106 (2021).
- [8] A. Mulero, I. Cachadiña, and A. Vegas, Recommended correlations for the surface tension of aromatic, polyfunctional, and glyceride esters, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **51**, 023102 (2022).
- [9] A. Mulero, I. Cachadiña, and A. Becerra, Recommended correlations for the surface tension of ethers, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **52**, 013103 (2023).
- [10] R. L. Rowley, W. V. Wilding, J. L. Oscarson, and N.F. Giles. DIPPR Data Compilation of Pure Chemical Properties Design Institute for Physical Properties; <http://dippr.byu.edu>, Brigham Young University, Provo, Utah (2018).
- [11] DECHEMA. Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. DETHERM. Thermophysical Properties of Pure Substances and Mixtures. <http://i-systems.dechema.de> (2015).
- [12] Ch. Wohlfarth and B. Wohlfarth. Surface Tension of Pure Liquids and Binary Liquid Mixtures. Springer (1997). Vol. 24, Supplement to IV/16 (2008). Supplement to Volume IV/24 (2015).
- [13] E. W. Lemmon, M. L. Huber, and M. O. McLinden. REFPROP: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties, NIST Standard Reference Database 23, Version 10, National Institute of Standards and Technology (2019).