

# SELECCIÓN DE MODELOS TERMODINÁMICOS ELECTROLÍTICOS Y SU APLICACIÓN PARA SISTEMAS DE MEZCLAS DE SOLVENTES Y SALES INORGÁNICAS DISUELTAS

SELECTION OF ELECTROLYTIC THERMODYNAMIC MODELS AND THEIR APPLICATION FOR SOLVENT MIXING SYSTEMS AND DISSOLVED INORGANIC SALTS

Reinaldo Valoyes Escobar\*  
Laura Alexandra Nieto Cortés\*\*

Recibido: 19 de marzo de 2018

Aceptado: 2 de octubre de 2018

## Resumen

Este artículo presenta una descripción cualitativa de las curvas de composición pseudobinaria, que son una herramienta topológica termodinámica utilizada para determinar el grado de alteración del equilibrio de fases de un sistema de dos componentes causado por la adición de una tercera sustancia. Los casos de estudio corresponden a los sistemas ternarios agua-etanol-sal inorgánica (cloruro de calcio, yoduro de potasio y cloruro de calcio). El uso de sustancias iónicas sugiere la aplicación de un modelo termodinámico electrolítico, el cual fue seleccionado mediante un árbol de decisión y cuyo desarrollo matemático fue llevado a cabo por medio del simulador comercial Aspen Plus 8.6<sup>®</sup> y el software Microsoft Office Excel 2013<sup>®</sup>.

**Palabras claves:** modelos termodinámicos, electrolito, árbol de decisión, equilibrio pseudobinario, topología termodinámica.

## Abstract

In this paper is presented a qualitative description of pseudobinary composition curves, a thermodynamic topological tool used to describe the phase equilibria variation degree in a binary system when is added a third compound, study case is ethanol-water-inorganic salt (calcium chloride, potassium iodide and sodium chloride) ternary system. Ionic substances usage requires employing an electrolytic thermodynamic model that was selected with a decision tree. The commercial simulator Aspen Plus 8.6<sup>®</sup> and the software Microsoft 2013<sup>®</sup> was used to perform mathematical development.

**Keywords:** thermodynamic model, electrolyte, decision tree, pseudobinary equilibrium, thermodynamic topology.

---

\* Estudiante de Ingeniería Química. Semillero de investigación Procesos de Separación no Convencionales (GPS), línea de investigación Procesos de Separación sin Reacción, Fundación Universidad de América, Bogotá D. C., Colombia. reinaldo.valoyes@estudiantes.uamerica.edu.co

\*\* Estudiante de Ingeniería Química. Semillero de investigación Procesos de Separación no Convencionales (GPS), línea de investigación Procesos de Separación sin Reacción, Fundación Universidad de América, Bogotá D. C., Colombia. laura.nieto@estudiantes.uamerica.edu.co

## INTRODUCCIÓN

Para lograr un diseño y modelamiento adecuado de procesos industriales, como la separación por membrana de intercambio o la destilación extractiva salina, se hace necesario identificar el comportamiento físico y químico de las especies dentro del sistema en cuestión.

Al comparar un sistema en el que solo se presentan especies moleculares con uno en el que intervienen especies electrolíticas, se encuentra una mayor no idealidad en el último, debido a que las especies iónicas presentan interacciones eléctricas y químicas más fuertes que aquellas que son propias de compuestos eléctricamente neutros, lo que indica que se debe proporcionar un tratamiento matemático y termodinámico diferente a la hora de reproducir y simular estos sistemas con la precisión requerida en la industria.

A pesar de que el estudio de los sistemas termodinámicos ha tenido menos atención que el de los sistemas moleculares (Kontogeorgis y Folas, 2009), el conocimiento de sus características físicas data desde hace más de un siglo. Con el paso del tiempo se han ido desarrollando y perfeccionando ecuaciones matemáticas capaces de modelar estas nociones físicas; incluso, desde no hace más de cuarenta años ya se contaba con modelos capaces de predecir y modelar las interacciones moleculares (como, por ejemplo, las interacciones iónicas) con un alto grado de precisión con respecto a los resultados experimentales. Este proceso se aceleró con la introducción de softwares de modelamiento y simulación de procesos químicos industriales y de programación de modelos matemáticos, lo cual ha incentivado la mejora de los modelos ya existentes y la aparición de nuevos. Con la existencia de un mayor número de estos modelos, se debe pensar en el desarrollo de criterios que permitan seleccionar de manera apropiada el modelo que mejor represente un sistema. En este sentido, un árbol de decisión, como el que se presenta en este artículo, el cual está basado en información y nociones experimentales y teóricas de varios autores, puede llegar a ser una herramienta útil a la hora de considerar este tipo de sistemas.

Al tener claro el modelo termodinámico a utilizar, se puede modelar de forma certera sistemas resultantes de procesos de fermentación biológica, como el agua-etanol, el cual es producido por microorganismos con la degradación de grandes cadenas de azúcares y almidones. Para lograr un proceso de purificación para separar el alcohol, este sistema entra en contacto con una sal de tipo inorgánico, que es capaz de modificar el equilibrio de fases y romper el azeótropo formado por la mezcla binaria, lo que genera un mayor grado de pureza del alcohol; sin embargo, para modelar dicho equilibrio se requiere el conocimiento de la termodinámica del sistema.

Por otro lado, el etanol es una sustancia de alto valor comercial, conocida como oxigenante de la gasolina, que reduce notablemente los peligros biológicos y ambientales de la producción y quema de combustibles provenientes de fuentes del petróleo. Las consideraciones citadas confirman el interés de conocer el comportamiento de dichos sistemas. En este sentido, las curvas de equilibrio pseudoequilibrio son una manera de corroborar el grado de alteración y modificación que la sal podría generar en un sistema, lo que es el punto de partida para el desarrollo de un equipo de purificación como la destilación extractiva salina.

## METODOLOGÍA

### Caso de estudio

El sistema binario utilizado corresponde al sistema agua-etanol, el cual tiene la particularidad de formar un azeótropo a 78.15 °C a 1 atmósfera de presión y 95.57 % (p/p) de etanol. Con esta limitación termodinámica no es posible obtener por destilación simple etanol a concentraciones superiores a 99 % (p/p) (Orozco y Sáenz, 2010).

Para la elección de las sales inorgánicas se utilizó como criterio de selección la disponibilidad de parámetros termodinámicos. Ahora, para efectos de comparación, se escogieron tres agentes salinos inorgánicos: cloruro de calcio, cloruro de sodio y yoduro de potasio. De la primera sal se dispone de los datos de equilibrio experimental presentados por Nishi (1974), y de la segunda, los reportados por Burns y Furter (1979).

## Software

Los datos de equilibrio líquido vapor para el sistema agua-etanol y agua-etanol-sal inorgánica presentados en este artículo se obtuvieron inicialmente por medio del simulador comercial Aspen Plus 8.6®; posteriormente, fueron llevados al software Microsoft office Excel 2013®, en el que fueron tabulados y graficados.

## Selección del modelo termodinámico

Los modelos termodinámicos que involucran sustancias termodinámicas presentan un denominador común: se componen de una parte que involucra las interacciones iónicas de largo alcance y de otra que modela las fuerzas intermoleculares de corto alcance. Por ende, el coeficiente de actividad y la energía de Gibbs involucran dos términos independientes.

$$\frac{G}{RT} = \frac{G^{Largo\ alcance}}{RT} + \frac{G^{Corto\ alcance}}{RT} \quad (1)$$

$$\ln(\gamma) = \ln(\gamma)^{Largo\ alcance} + \ln(\gamma)^{Corto\ alcance} \quad (2)$$

Los modelos de largo alcance han sido estudiados desde principios del siglo pasado partiendo de los postulados de Debye y Hückel, quienes introdujeron el concepto de interacción electrostática. Este modelo depende matemáticamente de la ley de Coulomb, el campo eléctrico y los enunciados de Gauss. Su desarrollo parte del acoplamiento de dos ecuaciones: la ecuación de Poisson, que relaciona el potencial electrostático ( $\Psi$ ) en función de la distancia para una densidad de carga determinada ( $\rho_r$ ), y la ecuación de Boltzmann, que describe el cambio de una distribución iónica promedio de interacciones (Kontogeorgis y Folas, 2009). La ecuación resultante es conocida como la ecuación Poisson-Boltzmann.

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\Psi_r}{dr} \right) \right] = \kappa^2 \Psi_r \quad (3)$$

La resolución de dicha ecuación supone herramientas matemáticas como el cambio de variables, la introducción de una serie de Taylor, el uso de teoremas para la resolución de ecuaciones diferenciales, el acoplamiento de la energía de Gibbs en exceso y el coeficiente de actividad. Adicionalmente, se introduce una suposición importante dentro del modelo al considerar los iones con un radio infinitesimal. La resolución conduce a la ecuación original de Debye-Hückel, la cual introduce dos conceptos adicionales: el concepto iónico, presentado inicialmente por Lewis, y una constante adicional, conocida como *distance of closest approach*, que es un factor de corrección que tiene en cuenta el tamaño del ion (Wright, 2007). Dicha ecuación original ha sido modificada a lo largo del tiempo en cuanto se ha considerado efectos físicos y matemáticos que anteriormente no habían sido tenidos en cuenta. Sin embargo, los fundamentos y concepto prevalecen en los modelos termodinámicos modernos para electrolitos.

Por otro lado, las interacciones de corto y mediano alcance tienen en cuenta la energía potencial generada por interacciones de hidrógeno, ion-dipolo y dipolo-dipolo y las fuerzas de dispersión de

London de las especies moleculares o una combinación entre especies moleculares y especies iónicas. El estudio de estas interacciones puede ser trazado hasta las ecuaciones de estado que incluían reglas clásicas de mezclado.

En términos generales, existen tres enfoques para el desarrollo matemático de las fuerzas de corto alcance, los cuales se han acoplado con ecuaciones de largo alcance con el fin de predecir sistemas que involucran especies iónicas: a) modelos semiempíricos, b) modelos de composición local y c) ecuaciones de estado

A su vez, los dos últimos grupos pueden ser divididos en: a) modelos que emplean en su modelamiento matemático funciones de energía libre de Gibbs en exceso y b) modelos basados en ecuaciones de energía de Helmholtz residual (Gómez y Ibarra, 2015).

Los modelos semiempíricos son producto de observaciones de tipo experimental y de testear teóricamente el comportamiento físico de las ecuaciones matemáticas mediante pruebas de análisis de sensibilidad. Dentro de este grupo de sistemas puede mencionarse la correlación de Bromley, que es un modelo termodinámico para soluciones diluidas que tiene en cuenta el efecto del cambio de la longitud iónica con respecto al coeficiente de actividad reducido, así como la ecuación de Pitzer, la cual acopla una serie de funciones empíricas en una ecuación de tipo virial con una ecuación de Debye-Huckel modificada para modelar las interacciones de largo alcance. Este último ha sido uno de los modelos termodinámicos más utilizados en aplicaciones de tipo industrial (Kontogeorgis y Folas, 2010; Levine, 2004; Thomsen, 2009)

Los modelos de composición están basados matemáticamente en la energía de Gibbs residual, a diferencia de las ecuaciones de estado, que usan reglas de mezclado de van der Waals, y de los modelos de actividad como Margules y van Laar, que utilizan el concepto de composición general o promedio. Los modelos de composición emplean un concepto físico diferente que tiene en cuenta la no aleatoriedad de las moléculas de un sistema; efecto que es mucho más real que el de las ecuaciones y modelos ya citados, lo que supone una mayor precisión con respecto a los datos experimentales.

Las ecuaciones de estado están basadas matemáticamente en la energía de Helmholtz en exceso y tienen en cuenta el cambio de los coeficientes de actividad con respecto a la presión y a la temperatura. Varios de estos modelos emplean el enfoque MSA (*mean spherical approximation*) para las interacciones de largo alcance, mientras que ecuaciones de estado, como Peng-Robinson, son usadas para las contribuciones de corto alcance. En muchos casos se utiliza la ecuación de Born para tener en cuenta el efecto de la solvatación o hidratación de iones y moléculas. En gran medida, varias de estas ecuaciones utilizan parámetros específicos para iones, por lo que sus aplicaciones en muchos casos son limitadas para algunos sistemas. Es relevante decir que en muchos casos estos sistemas posibilitan el cálculo de densidades de mezcla para soluciones de tipo electrolíticas. (Gómez y Ibarra, 2015).

Varios autores han consolidado y recopilado gran cantidad de información acerca del desarrollo matemático, histórico y teórico de los sistemas termodinámicos para electrolitos (Kontogeorgis y Folas, 2010; Levine, 2004; Thomsen, 2009; Wright, 2007), así como han evidenciado la gran variedad y versatilidad de modelos que se han desarrollado a través del tiempo y las características más relevantes de cada uno de ellos. Autores como Chen et ál. (1982-2004) han consolidado nuevas características del modelo NRTL para electrolitos, llegando incluso a predecir procesos de asociación y polimerización. Otros autores han aplicado modelos de composición local, como Wilson, UNIFAC y UNIQUAC (Gómez y Ibarra, 2015), que, acoplándolos con funciones matemáticas como la Debye-Huckel, han llegado a modelar sistemas capaces de simular todo tipo de sistemas en los que intervienen sustancias iónicas. Todo esto indica la necesidad de sintetizar una herramienta enfocada en la selección del modelo termodinámico apropiado.

Turton, Bailie, Whiting, Shaeiwitz y Bhattacharyya (2003) definieron algunos parámetros que se deben considerar a la hora de seleccionar un modelo termodinámico electrolítico: a) sistema acuoso,

b) presencia de electrolitos fuertes en el sistema, c) presencia de mezcla de solventes en el sistema, d) concentración del soluto y e) temperatura máxima esperada.

Al respecto, se propuso un árbol de decisión que tuviera en cuenta dichas características (figura 1). La condición de temperatura no fue tomada en cuenta debido a que los autores no reportan de forma concreta características específicas de los modelos en cuanto a este parámetro.

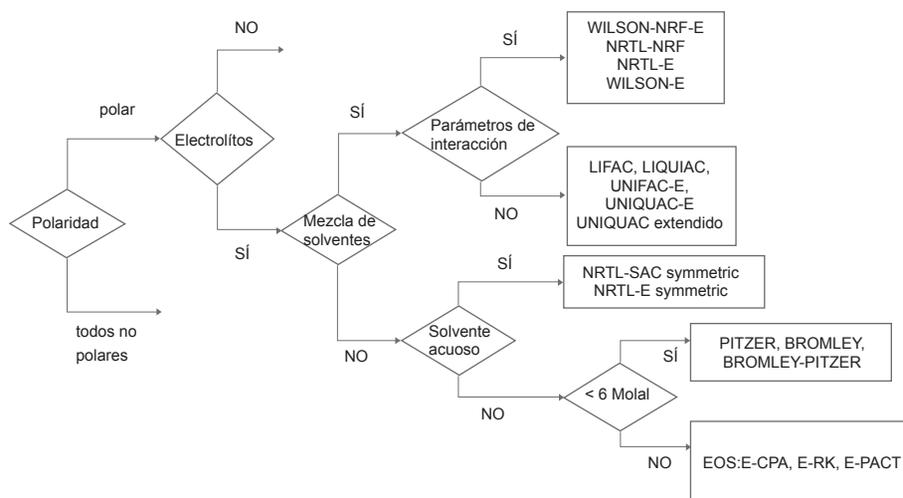


Figura 1. Árbol de decisión para sistemas electrolíticos.

Según el árbol de decisión (figura 1), sistemas de modelamiento predictivos como LIFAC, LIQUAC o UNIFAC-E podrían ser aplicables. Autores como Llano-Restrepo y Aguilar-Arias (2003), Mock, Evans, y Chen (1986) y Orozco y Sáenz (2010) presentan parámetros de interacción de tipo energético y de no aleatoriedad del modelo NRTL-E para los sistemas ya mencionados; por consiguiente, se aplicará dicho modelo a lo largo del artículo.

## Desarrollo matemático

La expresión para el cálculo del coeficiente de actividad de un solvente  $m$  dentro de un sistema en presencia de una sal con el modelo NRTL-E fue originalmente dada por Chen y Evans (1986) y Llano-Restrepo y Aguilar-Arias (2003). Este modelo es presentado como una expresión amplia de la energía de Gibbs en exceso para representar la no idealidad de la fase líquida en presencia de electrolitos; igualmente, el modelo abarca desde solventes puros hasta soluciones saturadas de sales (Chen y Song, 2004). En este modelo los subíndices  $k$  y  $j$  hacen referencia a las especies en la mezcla, ya sean iones o solventes, y los subíndices  $a$  y  $c$  corresponden a los aniones y cationes, respectivamente (Llano-Restrepo y Aguilar-Arias, 2003). La ecuación 4 corresponde a la forma generalizada de este modelo.

$$\begin{aligned}
 \ln \gamma_m = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} + \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} * \left( \tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\
 & + \sum_c \sum_{a'} \frac{X_{a'}}{\sum_{a''} X_{a''}} * \frac{X_c G_{mc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} * \left( \tau_{mc,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \\
 & + \sum_a \sum_{c'} \frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} * \frac{X_a G_{ma,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} * \left( \tau_{ma,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,c'a} \tau_{ka,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right)
 \end{aligned} \quad (4)$$

Para que se pueda realizar este modelo es necesario especificar nueve parámetros para cada una de las sales. En la tabla 1 se encuentran los parámetros de las sales seleccionadas:

**Tabla 1.** Parámetros de interacción NRTL-E para las sales seleccionadas

Parámetro	CaCl <sub>2</sub>	NaCl	KI
$\alpha_{ca,m1}$	0.0293	0.054	0.069
$\alpha_{ca,m2}$	0.2	0.2	0.2
$\alpha_{m1,m2}$	0.3	0.3	0.3
$\tau_{ca,m1}$	-25.4824	-8.778	-7.906
$\tau_{ca,m2}$	-5.848	-4.666	-4.332
$\tau_{m1,ca}$	51.4988	16.757	15.672
$\tau_{m2,ca}$	11.623	9.866	8.837
$\tau_{m1,m2}$	-0.1341	-0.1341	-0.1341
$\tau_{m2,m1}$	1.8224	1.8224	1.8224

*Fuente:* Mock, Evans y Chen (1986).

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

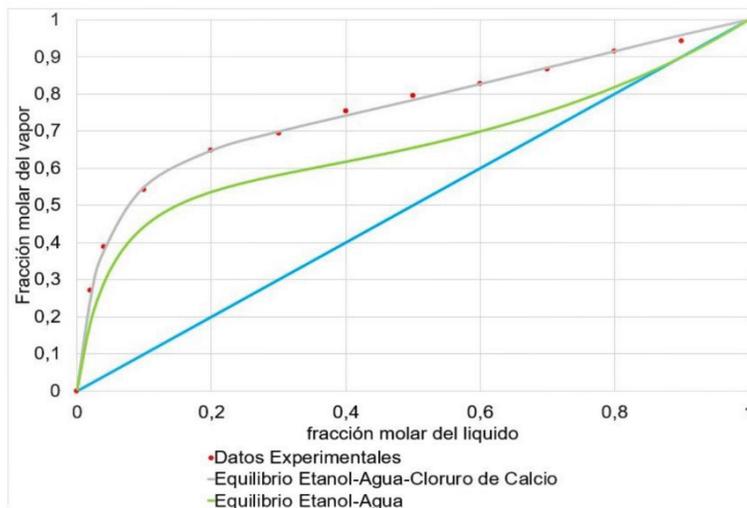
### Implementación en Excel

Se realizaron tres gráficas de equilibrio pseudobinario en Microsoft office Excel 2013® con base en los resultados obtenidos de las simulaciones en Aspen Plus 8.6® de los sistemas seleccionados. En la tabla 2 se encuentran los datos del equilibrio reportados por el simulador, considerando que se utilizó el cloruro de calcio como agente de separación a una concentración de 16.7 wt% y diferentes concentraciones de etanol en base libre de sal; adicionalmente, se evidencia el porcentaje de error respecto a los datos experimentales reportados por Nishi (1974). Los resultados reportados en la tabla 2 se muestran en la figura 2. Por su parte, en la tabla 3 y figura 3 se encuentra el equilibrio pseudobinario con cada una de las tres sales seleccionadas a la misma concentración (16.7 wt%). La figura 4 compara el equilibrio cuando la concentración de cloruro de sodio se disminuye a 7 wt%.

**Tabla 2.** Resultados obtenidos en Excel utilizando cloruro de calcio como agente de separación

X1' etanol	y1 (experimental)	y1 (Simulador)	Porcentaje de error (%)
0.02	0.271	0.245	9.60 %
0.04	0.389	0.377	3.10 %
0.1	0.542	0.55	1.50 %
0.2	0.647	0.648	0.20 %
0.3	0.694	0.699	0.70 %
0.4	0.753	0.742	1.50 %
0.5	0.795	0.784	1.40 %
0.6	0.828	0.827	0.10 %

0.7	0.867	0.871	0.50 %
0.8	0.915	0.915	0.00 %
0.9	0.942	0.959	1.80 %

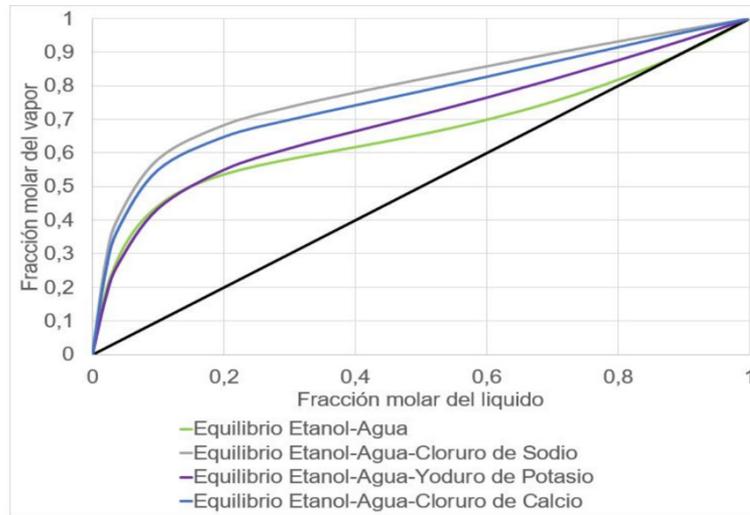


**Figura 2.** Equilibrio pseudobinario para el sistema etanol con y sin adición de cloruro de calcio de 16.7 wt% base libre de sal.

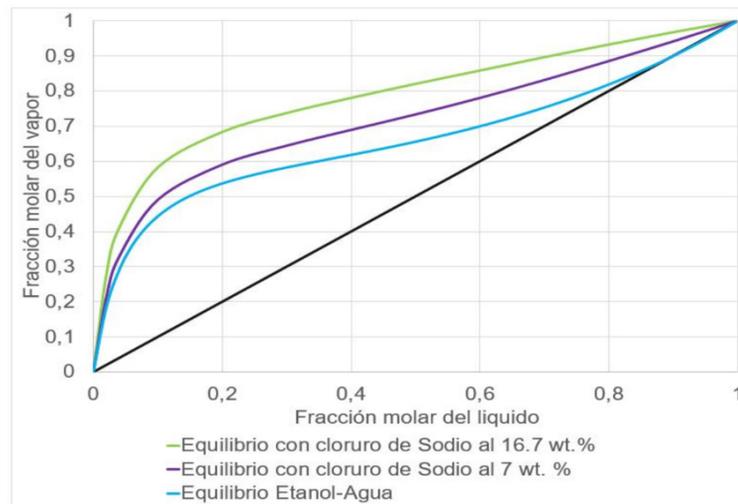
**Tabla 3.** Datos reportados por el simulador para el equilibrio de las sales seleccionadas al 16.7 % wt

$x1^*$	$y1$ (NaCl)	$y1$ (Ca <sub>2</sub> Cl)	$y1$ (KI)
0	0	0	0
0.02	0.274	0.245	0.167
0.04	0.41	0.377	0.272
0.1	0.582	0.55	0.435
0.2	0.683	0.648	0.55
0.3	0.737	0.699	0.614
0.4	0.78	0.742	0.665
0.5	0.82	0.784	0.714
0.6	0.858	0.827	0.765
0.7	0.896	0.871	0.819
0.8	0.932	0.915	0.876
0.9	0.967	0.959	0.936

\*La fracción de etanol es considerada como en base libre de sal.



**Figura 3.** Equilibrio pseudobinario para el sistema etanol-agua con adición de yoduro de potasio y cloruro de sodio 16.7 wt.% base libre de sal.



**Figura 4.** Equilibrio pseudobinario para el sistema agua-etanol con adición de cloruro de sodio al 7 y 16.7 wt. % base libre de sal.

Por medio de las gráficas de pseudoequilibrio se puede establecer que la adición de sales inorgánicas (yoduro de potasio, cloruro de calcio y cloruro de sodio) afecta el equilibrio de fases del sistema binario etanol-agua, lo que modifica la volatilidad relativa del sistema y rompe el azeótropo formado originalmente. Esto sugiere la aplicabilidad de estas sales para el diseño y montaje de equipos de separación, como columnas de destilación y extracción enfocadas a la purificación de sustancias de tipo alcohólico. Adicionalmente, en la figura 3, el cloruro de sodio es la sal que reporta una mayor separación del azeótropo. En la figura 4 se realizó la comparación de dos concentraciones de esta sal, con la que se concluye que el grado de modificación del equilibrio depende de la concentración de la sal.

Por otro lado, se evidencia en la tabla 2 la fiabilidad de los datos obtenidos por medio del simulador Aspen Plus 8.6<sup>®</sup> con respecto a los datos reportados experimentalmente para el sistema agua-etanol-cloruro de calcio con los porcentajes de error calculados. En fracciones de etanol en base libre de sal por debajo de 0.04 se presentan los mayores porcentajes de error, que llegan a un máximo del 9.6 %. Sin embargo, si se quiere emplear este modelo para el desarrollo de un proceso de separación de etanol con agentes salinos, se encontrará que la fracción de etanol es superior al 20 % molar, lo que indica que el margen de error decrecerá a la hora de simular un eventual equipo de separación, lo cual corrobora la eficacia del modelo matemático

Finalmente, es importante mencionar que para el equilibrio del cloruro de sodio y el yoduro de potasio no hay referencias actualizadas que permitan la comparación de los datos reportados en el simulador, los que se obtendrían de forma experimental, como se hizo con el caso del cloruro de calcio.

## CONCLUSIONES

La adición de sales como el cloruro de calcio, el cloruro de sodio y el yoduro de potasio modifica el equilibrio de la mezcla etanol-agua y rompe el azeótropo formado por esta, lo que sugiere su aplicabilidad en procesos de purificación de etanol.

Entre mayor concentración de sal sea adicionada a la mezcla formada por el etanol y el agua, mayor será el grado de modificación del equilibrio.

El NRTL-E en un modelo de actividad con una amplia aplicabilidad y con bajos porcentajes de error en sistemas con presencia de electrolitos. Para el caso del sistema etanol-agua se cuenta con los parámetros de interacción de cada una de las sales adicionadas al sistema, lo que permite el cálculo del equilibrio pseudobinario.

Para una mayor fiabilidad, se recomienda comparar los datos acá reportados con los datos experimentales del equilibrio, específicamente, para el caso del cloruro de sodio y el yoduro de potasio.

## AGRADECIMIENTOS

El autor expresa su gratitud al grupo de investigación en Procesos Separaciones no Convencionales (GPS) por el apoyo a la investigación.

## REFERENCIAS

- Chen, C., Britt, H., Boston, J., y Evans, L. (1982). Local composition model for excess Gibbs energy of electrolyte systems. Part I: single solvent, single completely dissociated electrolyte systems. *AIChE Journal*, 28(4), 588-596. doi:10.1002/aic.690280410
- Chen, C., y Evans, L. (1986). A local composition model for the excess Gibbs energy of aqueous electrolyte systems. *AIChE Journal*, 32(3), 444-454. doi:10.1002/aic.690320311
- Chen, C., y Song, Y. (2004). Generalized electrolyte-NRTL model for mixed-solvent electrolyte systems. *AIChE Journal*. 50(8),1928-1941. doi:10.1002/aic.10151
- Furter, W. (1979). *Thermodynamic behavior of electrolytes models in mixed solvent salts*. EE. UU.: American Chemical Society. doi: 10.1021/ba-1979-0177
- Gómez, M., y Ibarra, H. (2015). *Equilibrio de fases para sistemas electrolíticos*. Bogotá D. C.: Editorial Universidad Nacional de Colombia.
- Kontogeorgis, G., y Folas, G. (2009). *Thermodynamic models for industrial applications: from classical and advanced mixing rules to association theories*. RU: John Wiley & Sons. doi: 10.1021/ba-1979-0177

- Levine, I. (2004). *Fisicoquímica* (5.<sup>a</sup> ed.). EE. UU.: McGraw Hill.
- Llano-Restrepo, M., y Aguilar-Arias, J. (2003). Modeling and simulation of saline distillation columns for the production of absolute ethanol. *Computers & Chemical Engineering*, 27(4), 527-549. doi: 10.1016/S0098-1354(02)00215-6
- Mock, B., Evans, L., y Chen, C. (1986). Thermodynamic representation of phase equilibria of mixed-solvent electrolyte systems. *AIChE Journal*, 32(10), 1655-1664. doi: 10.1002/aic.690321009
- Nishi, Y. (1974). Vapor-liquid equilibrium relations for the system accompanied by hypothetical chemical reaction containing salt. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 8(3), 187-191. doi: 10.1252/jcej.8.187
- Orozco, M., y Sáenz, J. (2010). *Desarrollo de un algoritmo para la simulación del modelo por etapas de equilibrio en la obtención de etanol anhidro por destilación extractiva salina* (trabajo de grado). Programa de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Fundación Universidad de América, Bogotá D. C., Colombia.
- Thomsen, K. (2009). *Electrolyte solutions: thermodynamics, crystallization, separation methods*. Copenhagen: Technical University of Denmark.
- Turton, R., Bailie, R., Whiting, W., Shaeiwitz, J., y Bhattacharyya, D. (2003). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. EE. UU.: Prentice Hall.
- Wright, M. (2007). *An introduction to aqueous electrolyte solutions*. Chichester, RU: Wiley.