

Análisis de la difusividad de una mezcla binaria con fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

Gustavo Adolfo Rossoto Wong, Meydy Elisa Pérez Tolico, Eimy Lucía Cruz Rivera, Erick Gerardo Quiroa Toledo, Hader Andrés Ortiz Grajales & Rodrigo Fernando Esquivel Gómez¹.

RESUMEN

Se evaluó la difusividad de 3 diferentes mezclas de etanol, isopropanol y fragancia de canela, ampliamente utilizadas en la industria de desinfectantes; constituidas de la siguiente manera: un sistema de etanol-fragancia, un sistema de isopropanol-fragancia y el último sistema de etanol-isopropanol.

se agitaron brevemente a fin de homogeneizar la solución y se colocó el sistema en un lugar abierto durante un aproximado de una hora para cada corrida; siendo 3 corridas para cada sistema en total. Transcurrido el tiempo se observó si ocurrió algún cambio con respecto a la altura del líquido. A partir de estos datos, se determina la difusividad de las mezclas en el aire aplicando la ecuación de la celda de Arnold para datos experimentales.

Al estimar los valores de la difusividad en los 3 sistemas, se determinó que los sistemas que están comprendidos por una proporción igual para ambos constituyentes son los que presentan los valores más altos de difusión.

En base a estos resultados se concluye que, aunque el etanol sea un alcohol más volátil en comparación al isopropanol, se recomienda el uso de isopropanol en mezclas con fragancias debido a que presenta un valor mayor para el coeficiente de difusividad en comparación al etanol.

Palabras Clave: etanol; isopropanol; esencia de canela; difusividad; celda de Arnold.

ABSTRACT

Evaluation the diffusivity of 3 different mixtures of ethanol, isopropanol and cinnamon fragrance, widely

used in the disinfectant industry, was evaluated; constituted as follows: an ethanol-fragrance system, an isopropanol-fragrance system, and the last ethanol-isopropanol system.

They were shaken briefly to homogenize the solution and the system was placed in an open place for approximately one hour for each run; being 3 runs for each system in total. After time, it will be observed if any change occurred with respect to the height of the liquid. From these data, the diffusivity of the mixtures in air is determined by applying the Arnold cell equation to experimental data.

When estimating the diffusivity values in the 3 systems, it will be considered that the systems that are comprised by an equal proportion for both constituents are those that present the highest diffusion values.

Based on these results, it is concluded that, although ethanol is a more volatile alcohol compared to isopropanol, the use of isopropanol is recommended in mixtures with fragrances because it has a higher value for the diffusivity coefficient compared to ethanol.

Key Words: ethanol; isopropanol; cinnamon essence; diffusivity; Arnold's cell.

INTRODUCCIÓN

El etanol es un compuesto orgánico alifático con un grupo funcional hidroxilo, perteneciente a la familia de los alcoholes (McMurry, 2008). El isopropanol, es otro miembro de la familia de alcoholes; conocido también como propan-2-ol según la nomenclatura IUPAC (Wade, 2011).

El Cinamaldehído es la sustancia orgánica responsable del sabor y olor característico de la

¹ Universidad Mariano Gálvez de Guatemala, Facultad de Ingeniería, Matemática y Ciencias Físicas. Licenciatura en Ingeniería Química. Gustavo Rossoto: grossotow@miumg.edu.gt, Meydy Pérez: mperez4@miumg.edu.gt, Eimy Rivera: ecruzer1@miumg.edu.gt, Erick Quiroa: equiroat@miumg.edu.gt, Hader Ortiz: hortizg1@miumg.edu.gt, Rodrigo Esquivel: resquivelg@miumg.edu.gt.

Determinación de la difusividad de mezclas de etanol e isopropanol en fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

canela. Esta molécula está compuesta de un grupo fenilo enlazado a un aldehído insaturado. De forma natural se presenta en isomería trans en la corteza del árbol de canela (Quesada, 2016). Las estructuras de estas sustancias se presentan en la imagen a continuación.

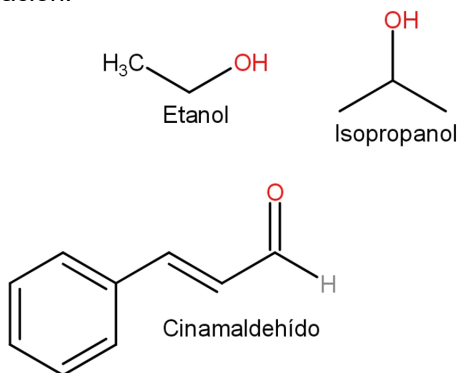


Figura 1: estructuras del etanol, isopropanol y esencia de canela.

Fuente: elaboración propia.

La razón del uso de estos alcoholes es que, al ser compuestos muy volátiles y estar en solución con la fragancia de canela, ésta se difunde fácilmente a través del ambiente en el que se encuentra; siendo este el principal objetivo de estudio en este documento.

Se realizaron varias mezclas entre el etanol, isopropanol y la fragancia de canela a diferentes proporciones con el fin de estimar el coeficiente de difusión haciendo uso de la ecuación basada en la celda de Arnold para los datos experimentales de estas mezclas en el aire.

La difusión de una especie química se puede imaginar como el movimiento de sus moléculas a través de una mezcla o sustancia. Esta difusión se puede determinar en base a uno de los componentes de dicha mezcla con respecto a los demás, o que dichos componentes se difunden a través del ambiente que los rodea, como ocurre, por ejemplo, con las mezclas de fragancias y alcohol utilizadas comúnmente en industria de perfumería o agentes de limpieza. Este proceso de difusión ocurre, según se describe en el libro de Operaciones Unitarias como: “un gradiente de concentración que tiende a mover el componente en una dirección tal que iguale las concentraciones y se anule el gradiente” (McGabe, Smith, & Harriot, 2007).

En el caso de las mezclas evaluadas de etanol-isopropanol, isopropanol-esencia de canela y etanol-esencia de canela, se evalúa el coeficiente de difusión D_{AB} de la mezcla en el aire. Este coeficiente de difusión se obtiene a partir de la ecuación de Fick para mezclas binarias en un sistema que es isotérmico e isobárico:

$$J_1 = -cD_{12}\nabla X_1 \quad (1)$$

Donde D_{AB} es la difusividad volumétrica en m^2/s y c es la concentración molar en mol/cm^3 . Este coeficiente depende de la presión, temperatura y la composición del sistema (Benítez, 2009). Es ideal para la determinación de la difusividad en este estudio ya que las condiciones del sistema son de presión y temperatura constante, ya que la mezcla se colocó en un espacio abierto y se asume que la presión atmosférica y la temperatura no variaron en el transcurso del experimento.

Para estimar el coeficiente D_{AB} a partir de datos experimentales se aplica el concepto de difusión en estado pseudo permanente a través de una columna de gas estancado tomando como base una celda de Arnold. Este concepto parte de un tubo estrecho el cual se llena de un líquido A; se vaporiza y se difunde en la fase gaseosa. Además, se toma como un estado pseudo permanente ya que la altura del líquido varía una cantidad muy pequeña en un periodo de tiempo que bastante largo, según se muestra en la imagen 2. (Welty, Wicks, Wilson, & Rorrer, 2010); el cual se estableció en una hora.

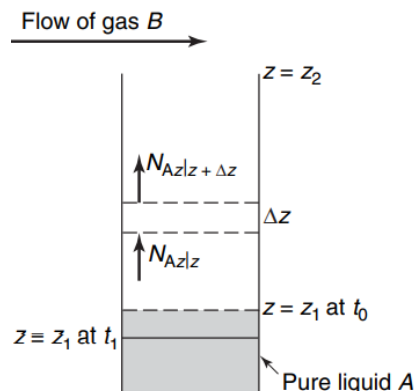


Figura 2: Celda de difusión de Arnold con una superficie líquida móvil

Fuente: (Welty, Wicks, Wilson, & Rorrer, 2010)

Canalización del Conocimiento Científico

Determinación de la difusividad de mezclas de etanol e isopropanol en fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

En base a estos dos conceptos y tomando como base la figura 2, se puede establecer lo siguiente: si el cambio en la altura del líquido Δz es una fracción muy pequeña del total de la altura y, además, ocurre en un periodo de tiempo muy largo; entonces, a cualquier instante durante dicho tiempo, el flujo molar en la fase gaseosa se puede evaluar mediante:

$$N_{A,z} = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{zy_{B,lm}} \quad (2)$$

Siendo z el cambio de altura a un tiempo t . El flujo molar $N_{A,z}$ además, está relacionado con la cantidad del líquido restante por:

$$N_{A,z} = \frac{\rho_{A,L}}{M_A} \frac{dz}{dt} \quad (3)$$

Donde $\rho_{A,L}$ es la densidad molar de A en la fase líquida y dz/dt es el diferencial de altura con respecto del tiempo. Aplicando las condiciones de estado pseudo permanente, las ecuaciones (2) y (3) se combinan para obtener:

$$\frac{\rho_{A,L}}{M_A} \frac{dz}{dt} = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{zy_{B,lm}} \quad (4)$$

Esta ecuación se puede integrar desde un tiempo $t = t_0$ hasta el tiempo en el que se está evaluando el sistema ($t = t$) y desde la altura del líquido en el tiempo inicial $z = z_{t_0}$ hasta la altura en el momento de la evaluación $z = z_t$ como:

$$\int_{t_0}^t dt = \frac{\rho_{A,L}y_{B,lm}/M_A}{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})} \int_{z_{t_0}}^{z_t} z \cdot dz \quad (5)$$

Lo que conduce a:

$$t = \frac{\rho_{A,L}y_{B,lm}/M_A}{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})} \left(\frac{z_t^2 - z_{t_0}^2}{2} \right) \quad (5)$$

Realizando un rearrreglo en la expresión, obtenemos la ecuación para estimar el coeficiente de difusión a partir de datos experimentales en base a la celda de Arnold (Welty, Wicks, Wilson, & Rorrer, 2010):

$$D_{AB} = \frac{\rho_{AB}y_{B,lm}/M_A}{ct \cdot (y_{A_1} - y_{A_2})} \left(\frac{z_t^2 - z_{t_0}^2}{2} \right) \quad (6)$$

Definiendo a $y_{B,lm}$ como la fracción molar media logarítmica:

$$y_{B,lm} = - \frac{y_{B_2} - y_{B_1}}{\ln \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}} \right)} \quad (6.1)$$

Las ecuaciones (6) y (6.1) se aplicaron para la determinación de D_{AB} de las mezclas.

MÉTODOS Y MATERIALES

El método para la determinación del coeficiente D_{AB} para las mezclas difundidas en el aire consiste en aplicar un análisis de un sistema en estado pseudo permanente a un sistema comprendido por una celda de Arnold, conformada por los siguientes materiales:

- 1 beaker de 150 mL.
- Varilla de vidrio.
- Pipeta serológica
- Llenador.
- Solución de etanol al 96%.
- Solución de isopropanol al 95%.
- Fragancia de canela.

Se prepararon de mezclas a diferentes proporciones de etanol-isopropanol, isopropanol-canela y etanol-canela según se muestra a continuación:

Tabla 1: mezclas de alcoholes y fragancia de canela

Sistema: etanol-isopropanol		
Corrida	Etanol (mL)	Isopropanol (mL)
1	25	25
2	10	40
3	40	10
Sistema: isopropanol-canela		
Corrida	Isopropanol (mL)	Canela (mL)
1	25	25
2	30	20
3	40	10
Sistema: etanol-canela		
Corrida	Etanol (mL)	Canela (mL)
1	25	25
2	30	20
3	40	10

Fuente: elaboración propia

Determinación de la difusividad de mezclas de etanol e isopropanol en fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

Cada solución, de 50 mL, se agitó con el fin de homogeneizarla y se procedió a colocar el beaker en un espacio abierto y cubierto de la luz del sol para que esta no vaporizara la solución e interfiriera con el cálculo del coeficiente. Transcurrido el tiempo que se estableció en una hora, se midió la altura del líquido con respecto al inicio y, en base a estos datos, se determinó los coeficientes D_{AB} para cada corrida.

RESULTADOS

Los datos con los que se estimó el coeficiente D_{AB} se tomaron de valores teóricos extraídos del libro: Perry's Chemical Engineers y se presentan a continuación:

Tabla 2: datos para la estimación del coeficiente de difusión

M etanol	46	g/mol
M isopropanol	60	g/mol
M canela	136	g/mol
T	299	K
P	1.011	Atm
R	82.05	cm ³ · atm/mol · K

Fuente: (Green & Perry, 2009)

A partir de estos datos se estimó la fracción molar de cada especie de la mezcla y_A , y_B , la fracción molar media logarítmica $y_{B,lm}$, y finalmente, la concentración molar de las especies

Tabla 3: fracciones y concentraciones molares

Sistema: etanol-isopropanol		
Corrida	$y_{B,lm}$	c (mol/cm ³)
1	0.7213	4.119x10 ⁻⁵
2	0.4971	4.119x10 ⁻⁵
3	0.8963	4.119x10 ⁻⁵
Sistema: isopropanol-canela		
Corrida	$y_{B,lm}$	c (mol/cm ³)
1	0.7213	4.175x10 ⁻⁵
2	0.6548	4.175x10 ⁻⁵
3	0.4971	4.175x10 ⁻⁵
Sistema: etanol-canela		
Corrida	$y_{B,lm}$	c (mol/cm ³)
1	0.7213	4.1009x10 ⁻⁵
2	0.6548	4.1009x10 ⁻⁵
3	0.4971	4.1009x10 ⁻⁵

Fuente: elaboración propia

A partir de estos datos se aplica la ecuación (6) para estimar el coeficiente de difusividad de las mezclas

Tabla 4: Coeficientes de difusión de las mezclas estimados a partir de datos experimentales.

Corrida	Sistema	D_{AB} (cm ² /s)
1	Etanol-isopropanol	0.1459
2	Etanol-isopropanol	0.0394
3	Etanol-isopropanol	0.0987
1	isopropanol-canela	0.1440
2	isopropanol-canela	0.0465
3	isopropanol-canela	0.0389
1	etanol-canela	0.02301
2	etanol-canela	0.00674
3	etanol-canela	0.01890

Fuente: elaboración propia

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los sistemas evaluados se basan en la difusión de un líquido vaporizado A (mezclas) en un gas B (aire). Esto se realiza armando un sistema de celda de Arnold o tubo de Stefan. Para este sistema se utilizó un beaker de 50ml en sustitución del tubo angosto; la solubilidad del gas B es despreciable en el líquido A, además, son químicamente inertes uno con el otro. El componente A se vaporiza y se difunde en la fase gaseosa B (kau.sa).

Debido a la poca variación de la altura de difusión en el intervalo de tiempo se denomina que es un modelo de difusión molecular pseudo estacionario (Torres, 2007). Dicha variación se observó y midió en cada una de las corridas realizadas. Para cada una de las mezclas y sus distintas corridas, las diferencias de alturas no superaron los 0.5cm en un tiempo de una hora; de ahí surge la idoneidad del experimento para encontrar sus coeficientes de difusividad, haciendo efectiva la utilización de la celda de Arnold y el uso de las ecuaciones (6) y (6.1).

Un error muy común en la experimentación con celdas de Arnold y tubos de Stefan es que el descenso del líquido produce vapor que ocupa un espacio dentro de este tubo y puede que no se difunda con el aire fuera del tubo, al ser estos vapores no visibles no se podría

Canalización del Conocimiento Científico

Determinación de la difusividad de mezclas de etanol e isopropanol en fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

evidenciar la presencia de vapor en el tubo. Pero este error tiene poca incidencia en estos resultados debido a que el beaker utilizado no tiene un diámetro considerablemente pequeño y su vaporización posee un mejor flujo debido a esta característica; además, de encontrarse vapores contenidos dentro del tubo el error al estimar la difusividad sería pequeño ya que la densidad parcial del gas será mucho menor comparándola con la de la mezcla líquida (Kmit, 1996).

La difusividad de las mezclas obtenidas a partir de la experimentación con la celda de Arnold nos da una comparativa de la medida de la movilidad de difusión; definiendo a esta como la relación de su flujo molar y su gradiente de concentración relativo a la velocidad molar promedio. Es decir, se compara la razón a la que transfiere masa de un punto de alta concentración a otro de baja concentración en un periodo de tiempo (Fernandez, 2010), por lo que se puede asumir que D_{AB} es independiente de la concentración. Cuando se puede suponer el estado pseudo estacionario, el flujo molar $N_{A,z}$ está relacionado con la cantidad de A que sale del líquido (Ecuación No. 3).

Según la Tabla 4 el etanol exhibe la mayor contribución cinética al ser un alcohol primario más volátil y con menor peso molecular, en comparación a las otras dos sustancias. Al contrario, el isopropanol presentó menores coeficientes de difusión al ser un alcohol secundario. Esta influencia del tipo de alcohol se hace evidente al comparar los datos de la tabla 1 y 4, para la segunda corrida del sistema etanol-isopropanol en el cual se observa que, cuando la proporción del isopropanol es mayor (40 mL) frente a la proporción del etanol (10 mL) el coeficiente de difusividad es menor comparado a las corridas 1 y 3. Nuevamente, a partir de los datos de la tabla 4 se observa también que, en la primera corrida para los 3 sistemas, se estima una mayor difusividad. Tomando las proporciones expuestas en la tabla 1 de nuevo, se determina que la difusividad de los 3 sistemas es mayor cuando ambos componentes están en la misma proporción.

Los alcoholes se encargarán de difundir las fragancias en el aire, por lo que se prefiere usar alcoholes de cadena larga; porque como muestra la corrida 1 de la tabla 4 al comparar los valores estimados para el

coeficiente de difusión de los sistemas de isopropanol-canela con etanol-canela, se obtiene un valor mayor para el primer sistema. Aunque su volatilización es mala, se opta por alcoholes desnaturalizados de gran concentración (FIDE, 2017). Una modificación por sugerir para experimentos posteriores es probar con relaciones menores de ambas sustancias como 10 ml de cada uno o 15 ml de alcohol y 10 ml de fragancia para conocer como varía el coeficiente de difusividad.

CONCLUSIONES

1. Los gradientes de potencial químico, así como los gradientes de concentración en estos sistemas son las fuerzas impulsoras para la transferencia de masa desde las mezclas de alcohol y fragancia de canela hacia el aire.

2. Se utilizó la ley de Fick para relacionar el flujo de difusión con el campo de concentración, postulando que el flujo va de regiones de alta concentración a regiones de baja concentración, con una magnitud proporcional al gradiente de concentración, según la relación:

$$J_1 = -cD_{12}\nabla_{x_1} \quad (1)$$

3. La temperatura es un factor muy importante para la difusividad, ya que, al asumir esta variable como constante se observó que la cantidad de cada especie también afecta de forma directa a la difusividad, obteniendo los mayores coeficientes cuando las proporciones en las mezclas son iguales.

Proporción (mL)	Sistema	D_{AB} (cm ² /s)
25 – 25	Etanol-isopropanol	0.1459
	isopropanol-canela	0.1440
	etanol-canela	0.02301

4. Vapores provenientes del líquido podrían quedar atrapados en el tubo alterando los resultados, pero es un valor que no tiene relevancia debido a que la densidad del vapor es menor a la del líquido gracias al sistema que se construyó.

5. El valor de la difusividad para cada mezcla es un indicativo durante la elección de los alcoholes, porque indica tan apropiado es para utilizarlo en fragancias que se difunden fácilmente a través del ambiente.

Canalización del Conocimiento Científico

Determinación de la difusividad de mezclas de etanol e isopropanol en fragancia de canela

Fecha de recepción: 19 marzo 2024

Fecha de corrección: 17 abril 2024

6. El isopropanol presenta la mayor difusividad cuando se encuentra en mezcla con la fragancia de canela, por lo que se asume como un mejor alcohol para uso industrial como solvente en fabricación de fragancias o perfumes, ya que, al ser el más volátil favorece la difusión de la fragancia en el ambiente.

REFERENCIAS

- Benítez, J. (2009). *Principles and Modern Applications of Mass Transfer Operations*. Hoboken, New Jersey: Wiley.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2006). *Fenómenos de Transporte*. México: Limusina Wiley.
- Fernandez, M. (2010). *Wordpress*. Retrieved from Difusion binaria en fase gaseosa: <https://lopei.files.wordpress.com/2010/05/practica-3.pdf>
- FIDE. (2017, Junio 2). *FIDE*. Retrieved from Sobre la utilización de alcohol desnaturalizado en la fabricación de perfumes: <https://www.fide.es/2017/06/02/sobre-la-utilizacion-de-alcohol-desnaturalizado-en-la-fabricacion-de-perfumes/>
- Green, D. W., & Perry, R. H. (2009). *Perry's Chemical Engineers Handbook*. Kansas, United States of America: McGraw Hill.
- kau.sa. (n.d.). *KAU*. Retrieved Agosto 15, 2021, from Steady-State Molecular Diffusion: <https://www.kau.edu.sa/Files/0060757/Subjects/3%20Steady%20state%20%20diffusion.pdf>
- Kmit, J. (1996). *Journals*. Retrieved from Application of Pseudo-Steady-Stationary approximation in solving Chemical Engineering Problems: <https://www.google.com/search?q=Pseudo-Steady-State+Diffusion&oq=Pseudo-Steady-State+Diffusion&aqs=chrome..69i57j69i59j0i22i30l2j69i60.450j0j4&sourceid=chrome&ie=UTF-8#>
- McGabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (2007). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. México: McGraw Hill.
- McMurry, J. (2008). *Química Orgánica*. Estados Unidos: CENGAGE Learning.
- Quesada, A. C. (2016, Septiembre). *Propiedades antimicrobianas y liberación de cinamaldehído en films de PLA*. Valencia, España.: Universitat Politècnica de Valencia, Instituto de ingeniería de alimentos para el desarrollo.
- Torres, H. (2007). *Diseño, construcción y puesta en marcha de equipos para la determinación de difusividades y coeficientes individuales de transferencia de masa*. Retrieved Agosto 7, 2021, from <http://saber.ucv.ve/bitstream/123456789/1317/1/Tesis%20MAYO2007%20I.pdf>
- Valero, A. (2018, Octubre 1). *TANDEM*. Retrieved from Fragancias y alcoholes en los productos cosmeticos: <https://tandemsl.com/seguridad-de-producto-blog/fragancias-y-alcoholes-en-los-productos-cosmeticos/>
- Wade, L. (2011). *Química Orgánica, Volumen I*. México: PEARSON EDUCACIÓN.
- Welty, J. R., Wicks, C. E., Wilson, R. E., & Rorrer, G. L. (2010). *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*. New York, United States of America: Wiley.