

Equilibrio Líquido-Vapor: estudio de las desviaciones de la idealidad del sistema 1-Propanol/Agua a través de los modelos de van Laar y Wilson:

Asignación

Período A-2017: 21/03/2017

Importante:

Reglas:

- Debe entregar su artículo (**trabajo individual**) en formato .docx en un archivo adjunto a silviamargaritacalderon@gmail.com antes del 28/03/2017 a 8:00 am

Recuerde expresar sus resultados con el número correcto de cifras significativas

El diagrama de equilibrio líquido-vapor para el sistema 1-Propanol/Agua se estudiará siguiendo la variación del punto de ebullición de los compuestos puros por adición de la segunda sustancia. Por tanto la composición del líquido se variará en dos direcciones, una partiendo de 1-Propanol puro (Rama 1) y otra partiendo de agua pura (Rama 2), según lo establecido en la tabla 1.

Tabla 1: Soluciones propuestas para construir el diagrama T-xy del sistema 1-Propanol/Agua. Rama 1 desde 1-Propanol y Rama 2 desde Agua

Variación de la composición	Rama 1	Rama 2
Volumen inicial (mL)	25	15
Primer incremento	0.5	1.0
Segundo incremento	0.5	2.0
Tercer incremento	2.0	9.0
Cuarto incremento	2.5	9.0
Quinto incremento	2.5	12
Sexto incremento	5.0	15.0

- Asumiendo que a $20^{\circ}C$ la densidad del 1-propanol(1) es igual a $0.804 \frac{g}{cm^3}$ y que la densidad del agua(2) es igual a $0.9979955 \frac{g}{cm^3}$, y que los pesos moleculares de ambas sustancias son respectivamente iguales a $(60.09502 \text{ } 18.01528) \frac{g}{mol}$, determine la fracción molar en 1-propanol para cada uno de los sistemas a estudiar según lo indica la tabla 1
- Con la composición en fracción molar, estime la temperatura de burbuja de cada una de las soluciones estudiadas a la presión total de $610mmHg$ (presión atmosférica en La Hechicera, Mérida, Venezuela) usando los modelos de van Laar y Wilson para estimar los coeficientes de actividad de las especies en solución. Para la aplicación de los modelos use las constantes para los modelos reportadas en la tabla 2. Use además el modelo de Antoine para la determinación de la presión de vapor de los compuestos puros a partir de las constantes mostradas en la tabla 3

- Usando los resultados de γ_i obtenidos en el apartado anterior, determine la composición del vapor (y_i) según cada uno de los modelos y de acuerdo a la ecuación (1)
- Compare la temperatura de burbuja y la composición del vapor y_i calculadas por cada modelo. Represente gráficamente las relaciones $(Txy)_{van\ Laar}$ y $(Txy)_{Wilson}$. Discuta sobre la validez de cada modelo con base en las causas de las desviaciones de la idealidad del sistema 1-propanol/agua
- Para cada modelo calcule el residual $\frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ a cada una de las composiciones estudiadas. Aplique el método de Barker para determinar si el modelo aporta resultados consistentes termodinámicamente. Realice un análisis t de contraste de significación para la media de la serie $\frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ contra valor verdadero ($\mu = 0$) a un nivel de confianza del 95%. Si el modelo aporta resultados consistentes, es decir los resultados satisfacen la ecuación de Gibbs-Duhem, los residuales deben mostrar una distribución normal alrededor de cero con una varianza constante, y por tanto su valor promedio no debe ser significativamente distinto de cero según el análisis de contraste t. Si desea saber más sobre el método de Barker consulte el libro "Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química (7^{ma} edición) por J.M. Smith, H.C. van Ness y M.M. Abbott, p.p.441 y s.s.

$$y_i = \frac{x_i P_i^o \gamma_i}{P} \quad (1)$$

Tabla 2: Parámetros de los modelos de van Laar y Wilson para el estudio del sistema 1-propanol(1)/agua(2)[1]

van Laar	Wilson	Wilson
$A_{12} = 2.9095$	$(\lambda_{12} - \lambda_{11}) = 906.5256 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$	$v_1^o = 75.14 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$
$A_{21} = 1.1572$	$(\lambda_{21} - \lambda_{22}) = 1396.6398 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$	$v_2^o = 18.07 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$

Tabla 3: Constantes de Antoine para la presión de vapor (P en mmHg en y T en °C) [1]

Compuesto	A	B	C
1-Propanol (1)	8.37895	1788.020	227.438
Agua(2)	8.07131	1730.630	233.426

Referencias

"Destilación: Manual del Ingeniero Químico" (1998). En: editado por Robert Perry. México: McGraw-Hill Interamericana de México S.A. de C.V. Capítulo 13.