

## Clase 46 21 octubre 2015

Título de la nota

21/10/2015

Una mezcla de etano; n-propano y n-butano (10, 5, 8 Kg) respectivamente) se mezclan isotérmicamente a  $25^{\circ}\text{C}$  en un volumen de  $50\text{L}$ . Posteriormente del mezclado se desea comprimir a la mitad del volumen con un comportamiento tipo Van der Waals. ¿Es posible el segundo proceso? Si se realiza isotérmicamente y de forma irreversible. Utilizar  $Z$  para localizar punto del sistema.

Respuesta

Calcular  $\Delta S_H$  y  $\Delta G_H$

a) calcular las moles de Clu

$$\text{moles de CH}_3\text{CH}_3 = \frac{10000\text{g}}{30\text{g/mol}} = 333.333\text{ mol}$$

$$\text{moles de CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 = \frac{5000\text{g}}{44\text{g/mol}} = 113.6363\text{ mol}$$

$$\text{moles de CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 = \frac{8000\text{g}}{58\text{g/mol}} = 137.9318\text{ mol}$$

---

584.9003 moles totales

b) Fracción molar

$$y_{\text{Etano}} = \frac{333.33 \text{ mol}}{584.9003 \text{ mol}} = 0.5698$$

$$y_{\text{n-propano}} = \frac{113.6363 \text{ mol}}{584.9003 \text{ mol}} = 0.1942$$

$$y_{\text{n-butano}} = \frac{137.9310 \text{ mol}}{584.9003 \text{ mol}} = 0.2358$$

$$\Delta G_M = n_T RT \sum_{i=1}^n y_i \ln y_i = (584.9003 \text{ mol})(8.314 \text{ J/molK})(298.15 \text{ K}) \sum_{i=1}^n y_i \ln y_i$$
$$= -1420.13 \text{ KJ}$$

$$\Delta S_M = - \frac{\Delta G_M}{T} = \frac{1420130 \text{ J}}{298.15 \text{ K}} = 4763.15 \text{ J/K}$$

$$q_{\text{necesario}} = T \Delta S_M = 1420.13 \text{ kJ}$$

aplicando primera Ley  $\Delta U_M = q_M - w_M = 0$

$$q_M = w_M = 1420.13 \text{ kJ}$$

$$\bar{V}_{\text{inicial}} \text{ despues del mezclado es } = \frac{50L}{584.9003 \text{ mol}} = 0.085484 \text{ l/mol}$$

si se comprime a la mitad

$$\bar{V}_2 = \frac{0.085484 \text{ mol}}{2} = 0.04274 \text{ l/mol}$$

si tiene compartimento Von der Waals

$$P = \frac{RT}{\bar{V}_2 - b_m} - \frac{a_m}{\bar{V}_2^2}$$

Calcular  $b_m$

$$b_{\text{Etano}} = 0.0638 \text{ l/mol}$$

$$b_{\text{n-propano}} = 0.0845 \text{ l/mol}$$

$$b_{\text{n-butano}} = 0.1226 \text{ l/mol}$$

$$b_{\text{mezcla}} = \sum_{i=1}^n b_i y_i = 0.5698 (0.0638 \text{ l/mol}) + 0.1942 (0.0845 \text{ l/mol}) \\ + 0.2358 (0.1226 \text{ l/mol}) = 0.0822 \text{ l/mol}$$

Si se calcula  $a_{mezcla}$

$$a_{\text{etano}} = 5.489 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2$$


$$a_{\text{propano}} = 8.654 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2$$

$$a_{\text{butano}} = 14.47 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2$$

$$a_{\text{mezcla}} = \left[ \sum_{i=1}^n y_i (a_i)^{1/2} \right]^2 = \left[ 0.5698 (5.489 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2)^{1/2} + 0.1992 (8.654)^{1/2} + 0.2358 (14.47)^{1/2} \right]^2$$
$$= 8.222 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2$$

$$P = \frac{RT}{\bar{v} - b_m} - \frac{a_m}{\bar{v}^2}$$

es necesario calcular  $P_2$  porque es compresión irreversible

$$P_2 = \frac{(0.082 \text{ atm L/mol K})(298.15 \text{ K})}{0.04274 \text{ L/mol} - 0.0822 \text{ L/mol}} - \frac{8.222 \text{ atm L}^2/\text{mol}^2}{(0.04274 \text{ L/mol})^2}$$


Este valor es menor de bmezcla por lo tanto no es posible aplicar esta ecuación y por lo tanto no es posible la compresión irreversible tipo Vander Waals



## Variables críticas

|                | Etano  | n-propano | n-butano |
|----------------|--------|-----------|----------|
| $P_c$<br>(atm) | 48.16  | 41.94     | 37.7     |
| $T_c$<br>(K)   | 305.53 | 369.82    | 425.16   |

para utilizar la gráfica de  $z$  calcular  $T_r$  y  $p_r$

$$T_r = \frac{T_{sist}}{T_{CM}}$$

$$T_{sist} = 298.15K$$

$$p_r = \frac{p_{sist}}{p_{CM}}$$

$$\bar{V}_{mezclado} = 0.08548 \text{ l/mol}$$

$$\begin{aligned} p_{sist} &= \frac{RT}{\bar{V}} = \left( \frac{0.082 \text{ atm L}}{\text{mol K}} \right) \frac{(298.15K)}{(0.08548 \text{ l/mol})} \\ &= 286.011 \text{ atm} \end{aligned}$$

## Cálculo $T_{CM}$ y $p_{CM}$

$$\begin{aligned} p_{CM} &= \sum_{i=1}^n y_i p_{ci} = \left[ y_{e-t} p_{c e-t} + y_{n-p} p_{c n-p} + y_{n-b} p_{c n-b} \right] \\ &= \left[ (0.5698) 48.16 \text{ atm} + (0.1942) 41.94 \text{ atm} + (0.2358) 37.7 \text{ atm} \right] \\ &= 44.47 \text{ atm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{CM} &= \sum_{i=1}^n y_i T_{ci} = \left[ y_{e-t} T_{c e-t} + y_{n-p} T_{c n-p} + y_{n-b} T_{c n-b} \right] \\ &= \left[ (0.5698) (305.53 \text{ K}) + (0.1942) (369.82 \text{ K}) + (0.2358) (425.16) \right] \\ &= 346.16 \text{ K} \end{aligned}$$

$$T_r = \frac{298.15 \text{ K}}{346.16 \text{ K}} = 0.85$$

$$p_r = \frac{286.011 \text{ atm}}{44.47 \text{ atm}} = 6.4$$

Localizando en el gráfico a  $p_r$  intermedias

$Z = 0.85$  quiere decir que existe atracción por la  
alta presión

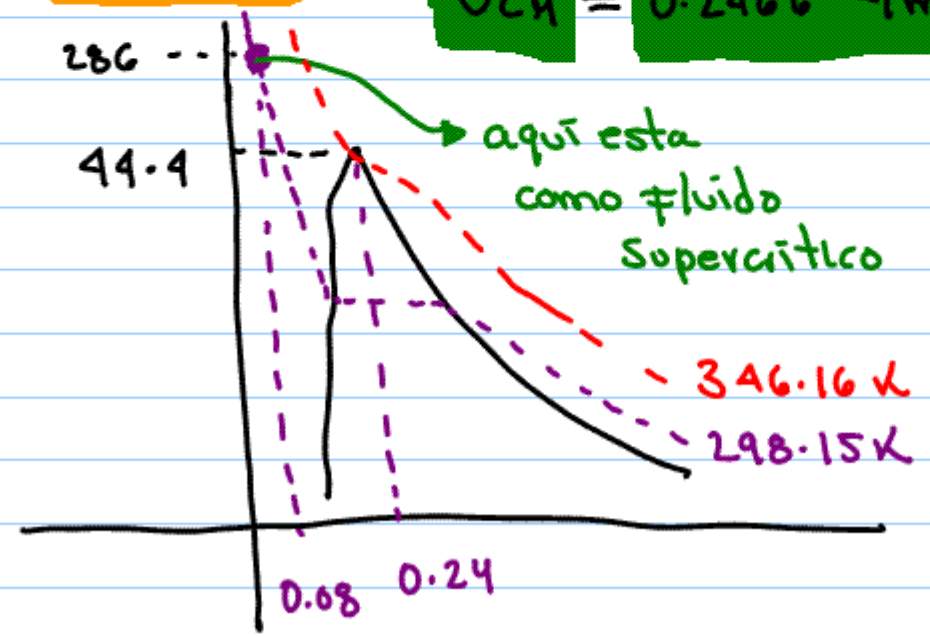
localizando punto del sistema

$$p_{CM} = 44.4 \text{ atm}$$

$$\bar{T}_{CM} = 346.16 \text{ K}$$

$$\bar{V}_{CM} = 3b_H \quad b_H = \frac{1}{3} \bar{V}_{CM} = 3(0.0822 \text{ L/mol})$$

$$\bar{V}_{CM} = 0.2466 \text{ L/mol}$$



$$T_{SLIS} = 298.15 \text{ K}$$
$$p_{SLIS} = 286 \text{ atm}$$

## Conclusiones

El punto del sistema está en la zona de Fluido Super Crítico ✓

Sería imposible comprimirlo

La ecuación de Von der Waals no es válida en esta zona ✓

$z < 1$   $z = 0.85$  indica que  $\frac{\bar{U}_{real}}{\bar{U}_{ideal}} < 1$  existe atracción por la alta presión ✓