

Clase 64 7 diciembre 2020

Título de la nota

02/12/2020

Propiedades Fisicoquímicas de sustancias

Nombre	cloroformo	
Masa Molar	119.378	g/mol
Temperatura Crítica	536.400	K
Presion Crítica	54.000	atm
Volumen Crítico	0.2390	L/mol
Punto ebullición	334.300	K
Punto de fusión	209.600	K

a y b dependientes de V_c

Obtención de ecuación cúbica de la masa molar (M) tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	326.55
m (g)	0.8300
p (atm)	0.7697
a (atmL ² /mol ²)	9.2536
b (L/mol)	0.07966
R (atmL/molK)	0.0820
V (L)	0.2994



M ³	M ²	M	Cte
0.23045	-22.27588	21.29194	-4.70191

$$pVM^3 - mM^2(RT + pb_m) + M\left(\frac{a_m m^2}{V}\right) - \frac{a_m b_m m^3}{V^2} = 0$$

M ideal (g/mol)	96.4425
-----------------	---------

Resolución de M cúbico tipo $AM^3+BM^2+CM+D=0$

A=	0.23045	
B=	-22.27588	
C=	21.29194	
D=	-4.70191	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria
M ₁ =	95.70008	+95.7001

a y b independientes de Vc

Obtención de ecuación cúbica de la masa molar (M) tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	326.55
m (g)	0.8300
p (atm)	0.7697
a (atmL ² /mol ²)	15.1146
b (L/mol)	0.10182
R (atmL/molK)	0.0820
V (L)	0.2994



M ³	M ²	M	Cte
0.23045	-22.29004	34.77760	-9.81623

$$pVM^3 - mM^3(RT + pb_w) + M\left(\frac{a_w m^2}{V}\right) - \frac{a_w b_w m^3}{V^2} = 0$$

M ideal (g/mol)	96.4425
-----------------	---------

Resolución de M cúbico tipo $AM^3 + BM^2 + CM + D = 0$

A=	0.23045	
B=	-22.29004	
C=	34.77760	
D=	-9.81623	
Expresión	2	decimales

	Real	Imaginaria
M ₁ =	95.14327	+95.14

X propiedades Obtención de a y b

Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	n-butano	
Masa Molar	58.124	g/mol
Temperatura Crítica	425.200	K
Presion Crítica	37.500	atm
Volumen Crítico	0.2550	L/mol
Punto ebullición	272.700	K
Punto de fusión	134.800	K
Cp (cal/mol K)	2.266e+0	a
$Cp=a+bT+cT^2+dT^3$ (300-2500)K	7.913e-2	b
	-2.647e-5	c
	-6.740e-10	d
Constantes de Antonio	15.6782	A
$LN(p)=A-(B/(T+C))$	2154.9000	B
T=K	-34.4200	C
p=mmHg		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020
Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME
PE-200419



Obtención de a y b

Obtención de a y b de Van der Waals

Modelo

$$p = \frac{RT}{(\bar{V}-b)} - \left[\frac{a}{\bar{V}^2} \right]$$

R (atmL/molK)

0.082

Modelo

$$a = 3pc\bar{V}c^2 \quad b = \frac{\bar{V}c}{3}$$

a	atmL ² /mol ²	7.31531
b	L/mol	0.08500



Independiente de volumen critico

Modelo

$$a = \frac{27R^2Tc^2}{64pc} \quad b = \frac{RTc}{8pc}$$

a	atmL ² /mol ²	13.67624
b	L/mol	0.11622

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020
 Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME
 PE-200419

Expansion ó compresión de un gas real con comportamiento tipo Van der Waals			
Introducir los valores en las celdas de color amarillo			
V ₁ (L)	120.0000		
V ₂ (L)	240.0000		
Temperatura (K)	300.00		
p ₁ (atm)	12.0000		
R (atmL/molK)	0.0820		
T _c (K)	425.20		
p _c (atm)	37.5000		
a (atmL ² /mol ²)	13.6762		
b (L/mol)	0.1162		
a y b Independiente de V _{critico}			
n (mol)	58.5366		
Ideal			
W _R (J)	101135.72	p ₂ (atm)	6.0000
W _{IR} (J)	72954.00	ΔU _R (J)	0
q _R (J)	101135.72	ΔU _{IR} (J)	0
q _{IR} (J)	72954.00	ΔH _R (J)	0
ΔS _R (J/K)	337.12	ΔH _{IR} (J)	0
ΔS _{IR} (J/K)	243.18	ΔG _R (J)	-101135.72
		ΔG _{IR} (J)	-72954.00
Real			
W _R (J)	85671.13	p ₂ (atm)	5.3615
W _{IR} (J)	65190.04	ΔU _R (J)	19784.58
q _R (J)	105455.71	ΔU _{IR} (J)	19784.58
q _{IR} (J)	84974.62	ΔH _R (J)	4256.67
ΔS _R (J/K)	351.52	ΔH _{IR} (J)	4256.67
ΔS _{IR} (J/K)	283.25	ΔG _R (J)	-101199.04
		ΔG _{IR} (J)	-80717.96
Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020 V2			



ideal
 $q = w$

$$\Delta U = q - w$$

$$w = q - \Delta U$$

$$q = \Delta U + w$$

OBTENCIÓN DE LA PRESIÓN DE VAPOR Y TEMPERATURA DE EBULLICIÓN

 Coeficientes de Antonio: $\log_{10}(P_{\text{sat}}[\text{mmHg}])=A-B/(T[^\circ\text{C}]+C)$

Instrucciones:	Llenar las celdas de color amarillo. La TNE es cuando p vapor es cercana a 760 mmHg					
Sustancia	A	B	C	tMin[°C]	tMax[°C]	P ^{sat} [mmHg]
1-propanol	7.0253	1271.2540	222.9270	-31.00	99.00	913.88
1,4-dioxano	7.4316	1554.6790	240.3370	20.00	105.00	528.53
1-butanol	7.8103	1522.5600	191.9500	30.00	70.00	255.45
1-butanol	7.7533	1506.0700	191.5930	70.00	120.00	252.37
1-butanol	7.3637	1305.1980	173.4270	89.00	126.00	254.77
1-octanol	8.3660	2170.2403	205.9214	55.00	150.00	10.68
1-propanol	7.7442	1437.6860	198.4630	60.00	106.00	572.29
1-propanol	8.3790	1788.0200	227.4380	-15.00	98.00	554.15
2-butanol	7.2013	1157.0000	168.2790	72.00	107.00	523.67
2-butanona	7.2807	1434.2011	246.4990	-6.50	80.00	1039.05
2-propanol	8.8783	2010.3300	252.6360	-26.00	83.00	1019.70
3-pentanona	7.2306	1477.0210	237.5170	36.00	102.00	523.38
acetato de etilo	7.1018	1244.9500	217.8810	16.00	76.00	1138.18
acetona	7.1171	1210.5950	229.6640	-13.00	55.00	2129.49
acetonitrilo	7.3399	1482.2900	250.5230	-27.00	82.00	965.96

T[°C]

89.85

Sustancia

n-butano

A

6.8078

B

935.7700

C

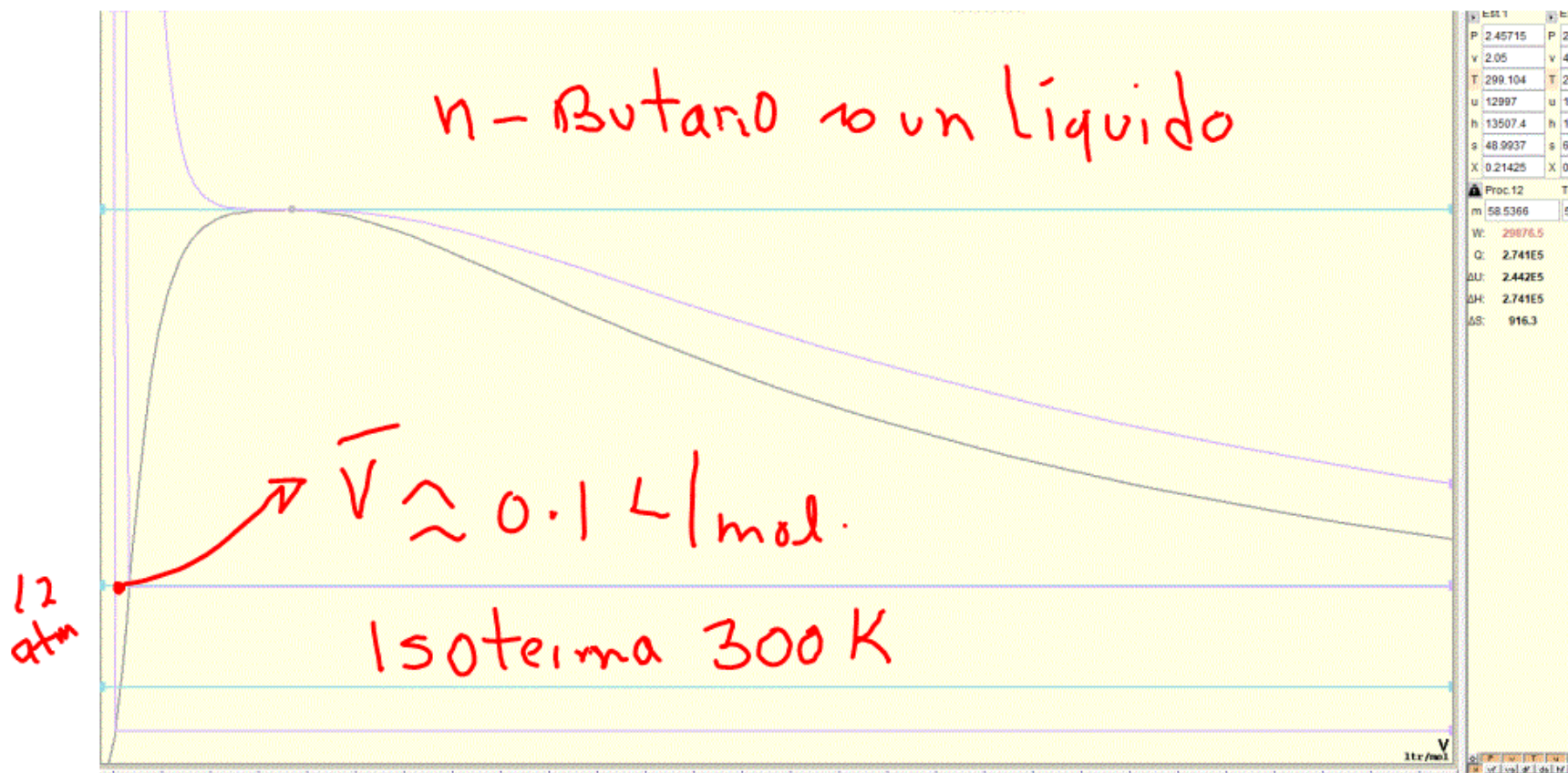
238.7890

p vapor [mmHg]

9127.4597

Dr Juan Carlos Vázquez Lira 2018

 Con apoyo del programa
 DGAPA-UNAM-PAPIME PE-202518



$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad \Delta G = -$$

$$\Delta H = - \quad \Delta S = +$$

Obtención de la presión de un gas con el modelo tipo Clausius

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Tc (K)	126.15
V sistema(L/mol)	2.0000
pc (atm)	33.5000
a (atmL ² K/mol ²)	169.9920
b (L/mol)	0.0128
R (atmL/molK)	0.082
T sistema(K)	100.00
c (L/mol)	0.0258
Vc (L/mol)	0.0900

p ideal (atm)	4.1000
p real (atm)	3.7122

Modelo

$$P = \frac{RT}{(\bar{V}-b)} - \left[\frac{a}{(\bar{V}+c)^2 T} \right]$$



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

Con apoyo del programa DGAPA-UNAM-PAPIME PE-200419

$$P = \frac{RT}{\bar{v}-b} - \frac{a}{(\bar{v}+c)^2 T}$$

$$P + \frac{a}{(\bar{v}+c)^2 T} = \frac{RT}{\bar{v}-b}$$

$$\frac{P(\bar{v}+c)^2 T + a}{(\bar{v}+c)^2 T} = \frac{RT}{\bar{v}-b}$$

$$\frac{p(\bar{v}+c)^2 T + a}{(\bar{v}+c)^2 T} = \frac{RT}{\bar{v}-b}$$

$$(p(\bar{v}+c)^2 T + a)(\bar{v}-b) = RT(\bar{v}+c)^2 T$$

$$\frac{(p(\bar{v}+c)^2 T + a)(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$\frac{\left(p(\bar{v}+c)^2 T + a \right) (\bar{v}-b)}{R (\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$\frac{\cancel{p(\bar{v}+c)^2} T \bar{v}}{R \cancel{(\bar{v}+c)^2}} - \frac{\cancel{p(\bar{v}+c)^2} T b}{\cancel{(\bar{v}+c)^2} R} + \frac{a \bar{v}}{R(\bar{v}+c)^2} - \frac{ab}{R(\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$\frac{PT\bar{v}}{R} - \frac{PTb}{R} + \frac{a(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$\frac{PT\bar{v}}{R} - \frac{pTb}{R} + \frac{a(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$T^2 - T \left(\frac{\bar{v}p - pb}{R} + \frac{a(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} \right)$$

$$\frac{T(\bar{v}p - pb)}{R} + \frac{a(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} = T^2$$

$$T^2 - T \left(\frac{\bar{v}p - pb}{R} + \frac{a(\bar{v}-b)}{R(\bar{v}+c)^2} \right) = 0$$

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^3}{p_c}$$

$$b = \bar{v}_c - \frac{RT_c}{4p_c}$$

$$c = \frac{3RT_c}{8p_c} - \bar{v}_c$$

$$\bar{V}^3 + \bar{V}^2 \left[2c - b - \frac{RT}{p} \right] + \bar{V} \left[c^2 - \frac{2RcT}{p} - 2cb + \frac{a}{pT} \right] - \left[c^2 \left(b + \frac{RT}{p} \right) + \frac{ab}{pT} \right] = 0$$

$$(\bar{v} + c)^2 = \bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2$$

$$p = \frac{RT}{\bar{v} - b} - \frac{a}{(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)T}$$

$$\frac{[p(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)T + a](\bar{v} - b)}{\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2T} = RT$$

$$\frac{[P(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)T + a](\bar{v} - b)}{\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2T} = RT$$

$$[P(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)T + a](\bar{v} - b) = RT^2(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)$$

$$P(\bar{v}^3 + 2\bar{v}^2c + \bar{v}c^2)T + P(\bar{v}^2b - 2\bar{v}cb - c^2b)T + a\bar{v} - ab = RT^2(\bar{v}^2 + 2\bar{v}c + c^2)$$

$$P\bar{v}^3T + 2P\bar{v}^2cT + P\bar{v}c^2T - P\bar{v}^2bT - 2P\bar{v}cbT - Pc^2bT + a\bar{v} - ab = RT^2\bar{v}^2 + 2RT^2\bar{v}c + RT^2c^2$$

$$P\bar{v}^3T + 2P\bar{v}^2cT + P\bar{v}c^2T - 2RT^2\bar{v}c - P\bar{v}^2bT - 2P\bar{v}cbT - Pc^2bT - RT^2\bar{v}^2 - RT^2c^2 + a\bar{v} - ab = 0$$

$$\frac{\bar{v}^3(pT) + \bar{v}^2(2pcT - pbT - RT^2) + \bar{v}(pc^2T - 2RT^2c - 2pcbT + a) - [c^2(pbT + RT^2) + ab]}{pT} = 0$$

$$\frac{\bar{v}^3(pT) + \bar{v}^2(2pcT - pbT - RT^2) + \bar{v}(pc^2T - 2RTc^2 - 2pcbT + a) - \left[\frac{c^2(pbT + RT^2) + ab}{pT} \right]}{pT} = 0$$

$$\bar{v}^3 + \bar{v}^2 \left(2c - b - \frac{RT}{P} \right) + \bar{v} \left(c^2 - \frac{2RcT}{P} - 2cb + \frac{a}{pT} \right) - \left[c^2 \left(b + \frac{RT}{P} \right) + \frac{ab}{pT} \right] = 0$$