

Clase 65 8 diciembre 2020

Título de la nota

02/12/2020

➤ Propiedades críticas del Etanol

Nombre	etanol	
Masa Molar	46.069	g/mol
Temperatura Crítica	516.200	K
Presion Crítica	63.000	atm
Volumen Crítico	0.1670	L/mol
Punto ebullición	351.500	K
Punto de fusión	159.100	K
Cp (cal/mol K)	2.153e+0	a
Cp=a+bT+cT²+dT³	5.113e-2	b
(300-2500)K	-2.004e-5	c
	3.280e-10	d
Constantes de Antonio	18.9119	A
LN(p)=A-(B/(T+C))	3803.9800	B
T=K	-41.6800	C
p=mmHg		

➤ Obtención de a y b de Van der Waals (Dependientes e Independientes)

Dependiente de volumen crítico

Modelo

$$a = 3pc\overline{V_c}^2 \quad b = \frac{\overline{V_c}}{3}$$

a	atmL ² /mol ²	5.27102
b	L/mol	0.05567

Independiente de volumen crítico

Modelo

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

a	atmL ² /mol ²	11.99795
b	L/mol	0.08398

- Resultados del simulador con a y b de Van der Waals dependientes de V_c

M^3	M^2	M	Cte
0.30111	-14.02074	3.29478	-0.23198

- Comparación real Vs ideal

M ideal (g/mol)	46.4936	$M_1 =$	Real
			46.328213

➤ Resultados del simulador con a y b de Van der Waals independientes de V_c

M^3	M^2	M	Cte
0.30111	-14.03151	7.49962	-0.79632

M ideal (g/mol)	46.4936	$M_1 =$	Real
			46.060319

Propiedades Fisicoquímicas de sustancias		
Nombre	metano	
Masa Molar	16.043	g/mol
Temperatura Crítica	190.600	K
Presion Crítica	45.400	atm
Volumen Crítico	0.0990	L/mol
Punto ebullición	111.700	K
Punto de fusión	90.700	K
Cp (cal/mol K)	4.598e+0	a
Cp=a+bT+cT²+dT³	1.245e-2	b
(300-2500)K	2.860e-6	c
	-2.703e-9	d
Constantes de Antonio	15.2243	A
LN(p)=A-(B/(T+C))	897.8400	B
T=K	-7.1600	C
p=mmHg		



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

Expansión ó compresión de un gas real con comportamiento tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

V ₁ (L)	200.0000
V ₂ (L)	100.0000
Temperatura (K)	298.15
p ₁ (atm)	10.0000
R (atmL/molK)	0.0820
T _c (K)	190.60
p _c (atm)	45.4000
a (atmL ² /mol ²)	2.2699
b (L/mol)	0.0430

a y b Independiente de Vcritico

n (mol) 81.8053

Ideal			
W _R (J)	-140466.28	p ₂ (atm)	20.0000
W _{IR} (J)	-202650.00	ΔU _R (J)	0
Q _R (J)	-140466.28	ΔU _{IR} (J)	0
Q _{IR} (J)	202650.00	ΔH _R (J)	0
ΔS _R (J/K)	-471.13	ΔH _{IR} (J)	0
ΔS _{IR} (J/K)	-679.69	ΔG _R (J)	140466.28
		ΔG _{IR} (J)	202650.00

Real			
W _R (J)	-136434.24	p ₂ (atm)	19.2107
W _{IR} (J)	-194652.56	ΔU _R (J)	-7695.75
Q _R (J)	-144129.98	ΔU _{IR} (J)	-7695.75
Q _{IR} (J)	-202348.31	ΔH _R (J)	-15693.18
ΔS _R (J/K)	-483.41	ΔH _{IR} (J)	-15693.18
ΔS _{IR} (J/K)	-678.68	ΔG _R (J)	128436.80
		ΔG _{IR} (J)	186655.13



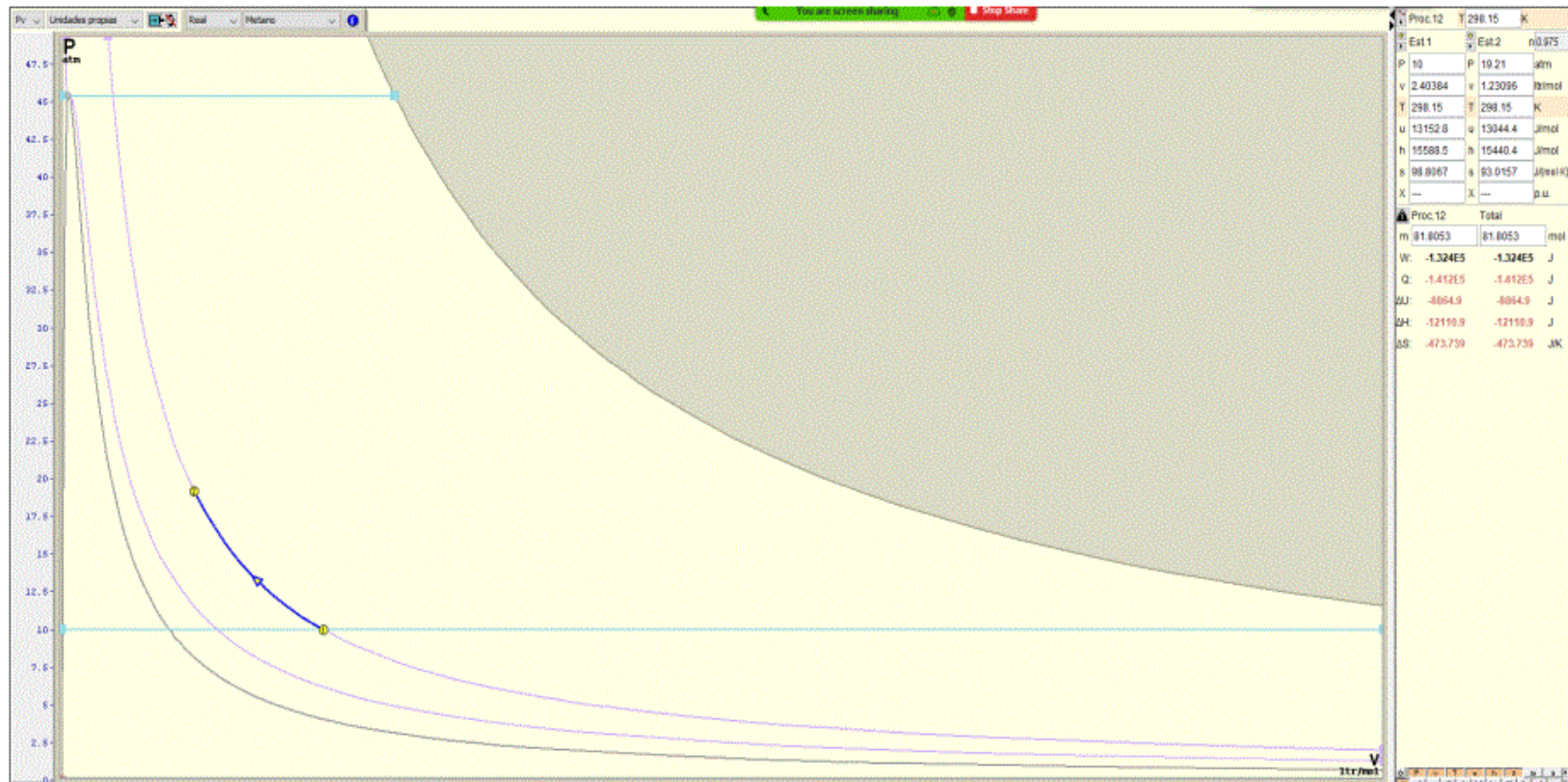
$$\Delta G = (\Delta H) - T(\Delta S) \rightarrow \ominus$$

$$\ominus$$

$$\Delta U = q - w$$

$$q_R = \Delta U_R + w_R$$

$$q_{IR} = \Delta U_{IR} + w_{IR}$$





$$\Delta H = \Delta U + \Delta pV$$

$$\overline{\Delta H} = \overline{\Delta U} + p_2 \overline{V_2} + p_1 \overline{V_1}$$



$$= J$$

pentatómico

$$2\Delta U = \Delta H$$

$$\overline{C_p} = 13/2 R$$

$$\overline{C_v} = 11/2 R$$

$$\left| \Delta U = \frac{11}{13} \Delta H \quad \Delta H = \frac{13}{11} \Delta U \right|$$

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

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

$$a = \frac{\text{atm L}^2 \text{K}}{\text{mol}^2}$$

(1878)



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Obtención de ecuación cúbica de la temperatura tipo Clausius

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Tc (K)	126.15
V sistema (L/mol)	12.00
pc (atm)	33.5000
p sistema (atm)	2.0000
a (atmL ² K/mol ²)	169.9920
b (L/mol)	0.0128
R (atmL/molK)	0.082
c (L/mol)	0.0258
Vc (L/mol)	0.0900

Modelo

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

T²	T	Cte
1.0000	-292.3706	-171.8322

T ideal (K)	292.6829
T real (K)	292.9572

Resolución de la ecuación tipo $AT^2+BT+C=0$

A=	1.0000
B=	-292.3706
C=	-171.8322

	real	imaginaria
T ₁	292.9572	
T ₂	-0.5865	



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

$$K^2 - K \left(\frac{(L/mol) atm}{atm L} \right) - \frac{atm L^2 K}{mol^2} \left(\frac{L}{mol} \right)$$

$$K^2 - K K - K^2 = 0 \quad \frac{atm L}{mol K} \left(\frac{L}{mol} \right)^2$$

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

Obtención de la ecuación cúbica del volumen modelo Clausius

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Tc (K)	126.12	Modelo $\bar{V}^3 + \bar{V}^2 \left[2c - b - \frac{RT}{p} \right] + \bar{V} \left[c^2 - \frac{2RcT}{p} - 2cb + \frac{a}{pT} \right] - \left[c^2 \left(b + \frac{RT}{p} \right) + \frac{ab}{pT} \right] = 0$
T sistema (K)	125.00	
pc (atm)	33.5000	
p sistema (atm)	69.0000	
a (atmL ² K/mol ²)	169.8707	
b (L/mol)	0.0128	
R (atmL/molK)	0.082	
c (L/mol)	0.0258	
Vc (L/mol)	0.0900	


V ³	V ²	V	Cte
1.0000	-0.1098	0.0120	-0.0004

V ideal (L/mol)	0.1486
V real (L/mol)	0.0387

Resolución de la ecuación tipo AV³+BV²+CV+D=0

A=	1.0000	
B=	-0.1098	
C=	0.0120	
D=	-0.0004	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria	
V ₁ =	0.03872	0	+0.0387
V ₂ =	0.03556	0.089580871	+0.0356+0.0896j
V ₃ =	0.03556	-0.089580871	+0.0356-0.0896j



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020 V2

Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE-20419