Clase 56 16 Noviembre 2021

Título de la nota 16/11/2021

Cuadro 2: Predicciones de las funciones de estado (*ΔH, ΔU, ΔS*) y trayectoria (*q, w*).

Funciones de estado	
ΔH_M	0
ΔU_M	0
ΔS_M	+ (Expansión)
ΔG_M	- (Espontáneo)
Funciones de trayectoria	

$$p_{c\,M} = y_{CH4}\,(p_{c\,CH4}) + y_{C2H6}\,(p_{c\,C2H6}) + y_{C3H8}\,(p_{c\,C3H8})$$
$$p_{c\,M} = 0.3118\,(45.400\ atm) + 0.6655\,(48.200\ atm) + 0.0227\,(41.900\ atm)$$
$$p_{c\,M} = 14.15572\ atm + 32.0771\ atm + 0.95113\ atm$$
$$p_{c\,M} = 47.18395\ atm$$

$$T_{c\,M} = y_{CH4}\,(T_{c\,CH4}) + y_{C2H6}\,(T_{c\,C2H6}) + y_{C3H8}\,(T_{c\,C3H8})$$
$$T_{c\,M} = 0.3118\,(190.600\ K) + 0.6655\,(305.400\ K) + 0.0227\,(369.800\ K)$$
$$T_{c\,M} = 59.42908\ K + 203.2437\ K + 8.39446\ K$$
$$T_{c\,M} = 271.0672\ K$$

$$V_{c\,M} = y_{CH4}\,(V_{c\,CH4}) + y_{C2H6}\,(V_{c\,C2H6}) + y_{C3H8}\,(V_{c\,C3H8})$$
$$V_{c\,M} = 0.3118\,(0.0990\ L/mol) + 0.6655\,(0.1480\ L/mol) + 0.0227\,(0.2030\ L/mol)$$
$$V_{c\,M} = 0.03086\ L/mol + 0.09849\ L/mol + 0.00460\ L/mol$$
$$V_{c\,M} = 0.13395\ L/mol$$

Cálculo de n_i

- Para metano (CH_4).

Datos

- $M_i = 16.043 \frac{g}{mol}$
- $m_i = 50\ g$

Usando la fórmula

$$n_i = \frac{m_i}{M_i}$$

$$n_i = \frac{50\ g}{16.043\ \frac{g}{mol}}$$

$$n_i = 3.1166\ mol$$

- Para etano (C_2H_6).

Datos:

- $M_i = 30.07\ \frac{g}{mol}$
- $m_i = 200\ g$

Usando la fórmula

$$n_i = \frac{m_i}{M_i}$$

$$n_i = \frac{200\ g}{30.07\ \frac{g}{mol}}$$

$$n_i = 6.6511\ mol$$

- Para propano (C_3H_8).

Datos

- $M_i = 44.097\ \frac{g}{mol}$
- $m_i = 10\ g$

Usando la fórmula

$$n_i = \frac{m_i}{M_i}$$

$$n_i = \frac{10\ g}{44.097\ \frac{g}{mol}}$$

$$n_i = 0.2267\ mol$$

MEZCLADO DE GASES

Modelo perfecto e ideal

Insertar en las celdas de color amarillo los valores correspondientes | Los resultados en las celdas de color verde

Constantes de Cp como función de T (cal/molK)

Gases	a	b	c	d	e	mi (g)	ni (mol)	yi	Mi (g/mol)	pi (atm)	Vi (L)
metano	4.5980e+0	1.2450e-2	2.8600e-6	-2.7030e-9	0.0000e+000	50.0000	3.1172	0.3114	16.0400	0.5112	46.7060
etano	1.2920e+0	4.2540e-2	-1.6570e-5	2.0810e-9	0.0000e+000	200.0000	6.6667	0.6659	30.0000	1.0933	99.8887
propano	-1.0090e+0	7.3150e-2	-3.7890e-5	7.6780e-9	0.0000e+000	10.0000	0.2273	0.0227	44.0000	0.0373	3.4053
	0.0000e+0			0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000	0.0000	0.0000	39.9400	0.0000	0.0000
	0.0000e+0	0.0000e+0	0.0000e+0	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000	0.0000	0.0000	44.0000	0.0000	0.0000
						ntotal	10.0111	1.0000			

p_{total} (atm)	1.6418
V_{total} (L)	150.00

Cp_M como función de T (cal/molK)

a	b	c	d	e	R (cal/molK)	T (K)	p_{total} (atm)	V_{total} (L)
2.2692e+0	3.3866e-2	-1.1004e-5	7.1845e-10	0.0000e+0	1.9886	300	1.6418	150.00

Cv_M como función de T (cal/molK)

a	b	c	d	e
2.8056e-1	3.3866e-2	-1.1004e-5	7.1845e-10	0.0000e+0

M_M (g/mol)	25.9711	ΔH_M (cal)	0	ΔU_M (cal)	0	ΔS_M (cal/K)	14.3336	ΔG_M (cal)	-4300.0660

q_M (cal)	4300.0660	w_M (cal)	4300.0660

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020

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

Modelo perfecto e ideal Reversibles

Insertar en las celdas de color amarillo los valores correspondientes

Resultados en las celdas de color verde

Constantes de Cp como función de T (cal/molK)

Gases	a	b	c	d	e	gi (g)	ni (mol)	yi	M (g/mol)
N2	4.60e+0	1.24e-2	2.86e-6	-2.70e-9	0.00e+000	50.0000	3.1172	0.3114	16.0400
O2	1.29e+0	4.25e-2	-1.66e-5	2.08e-9	0.00e+000	200.0000	6.6667	0.6659	30.0000
Ne	-1.01e+0	7.32e-2	7.68e-9	7.68e-9	0.00e+000	10.0000	0.2273	0.0227	44.0000
Ar	0.00e+0			0.00e+000	0.00e+000	0.0000	0.0000	0.0000	39.9400
CO2	0.00e+0	0.00e+0	0.00e+0	0.00e+000	0.00e+000	0.0000	0.0000	0.0000	44.0000
						ntotal	10.0111	1.0000	

Cp de mezclado como función de T (cal /molK)

a	b	c	d	e	T_1 (K)	T_2 (K)	R (cal/mol K)	p_1 (atm)	p_2 (atm)
2.2684	3.38e-2	-1.02e-5	7.187650733143361e-10	0	300	600	1.9886	1.628	1.628
					V_1 (L)	V_2 (L)		n (mol)	10.01
					150	300			

ΔH (cal)	46330.0263	Cp (cal/molK)	11.5205	γ	1.2086
ΔU (cal)	40358.2605	Cv (cal/molK)	9.5319	w adiabático (cal)	-40358.2605
ΔS p cte (cal/K)	104.0332	ΔS V cte (cal/K)	90.2355	M_m (g/mol)	25.9711
q p cte (cal)	46330.0263	q V cte (cal)	40358.2605	ΔS isotérmico (cal/K)	0.0000
w p cte (cal)	5971.7658	w V cte (cal)	0	ΔS adiabático (cal/K)	0
q isotérmico (cal)	0.0000	w isotérmico (cal)	0.0000	q adibático (cal)	0
				Se cumple la segunda ley de la Termodinámica	

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020

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

Propiedades | Vol real Independiente de Vc | Vol real dependiente de Vc | T y p dependiente de Vc | T y p Independiente de V

Obtención de parámetros de mezclado binario y ternario

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Componente	M (g/mol)	m (g)	pc (atm)	Tc (K)	Vc (L(mol)	ni
Metano	16.00	0.00	45.40	190.60	0.0990	0.0000
Etano	30.00	0.00	48.20	305.40	0.1480	0.0000
Propano	44.00	250.00	41.90	369.80	0.2030	5.6818
					n total	5.6818

R (atmL/molK)
0.0820

	Dependiente de Vc			Independiente de Vc		
Componente	a (atmL^2/mol^2)	b (L/mol)	yi	a (atmL^2/mol^2)	b (L/mol)	y
Metano	1.3349	0.0330	0.0000	2.2699	0.0430	1.0000
Etano	3.1673	0.0493	0.0000	5.4891	0.0649	
Propano	5.1800	0.0677	1.0000	9.2583	0.0905	

Dependiente de Vc

a_M (atmL^2/mol^2)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
5.1800	0.0677	41.9000	369.8000	0.2030

Independiente de Vc

a_M (atmL^2/mol^2)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
9.2583	0.0905	41.9000	369.8000	0.2030

FES ZARAGOZA

- **Cálculo del modelo de Van der Waals independiente de Vc**

Fórmula:

$$T = \frac{(p+\frac{an^2}{V^2})(V-nb)}{nR}$$

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

$$a=3pc\overline{Vc}^2 \qquad b=\frac{\overline{Vc}}{3}$$

a	atmL²/mol²	5.17997
b	L/mol	0.06767

Independiente de volumen crítico

Modelo

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

a	atmL²/mol²	9.25830
b	L/mol	0.09046

Propiedades | Vol real Independiente de Vc | Vol real dependiente de Vc | T y p dependiente de Vc | T y p Independiente de Vc

Obtención de Temperatura y presión comportamiento tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Volumen (L)	4.8000
moles (n)	5.6818
presión (atm)	35.0000
a_M ($atmL^2/mol^2$)	9.2583
b_M (L/mol)	0.0905
R (atmL/molK)	0.082

T ideal (K)	360.59
T real (K)	441.31

Propiedades | Vol real Independiente de Vc | Vol real dependiente de Vc | T y p dependiente de Vc | T y p Independiente de Vc

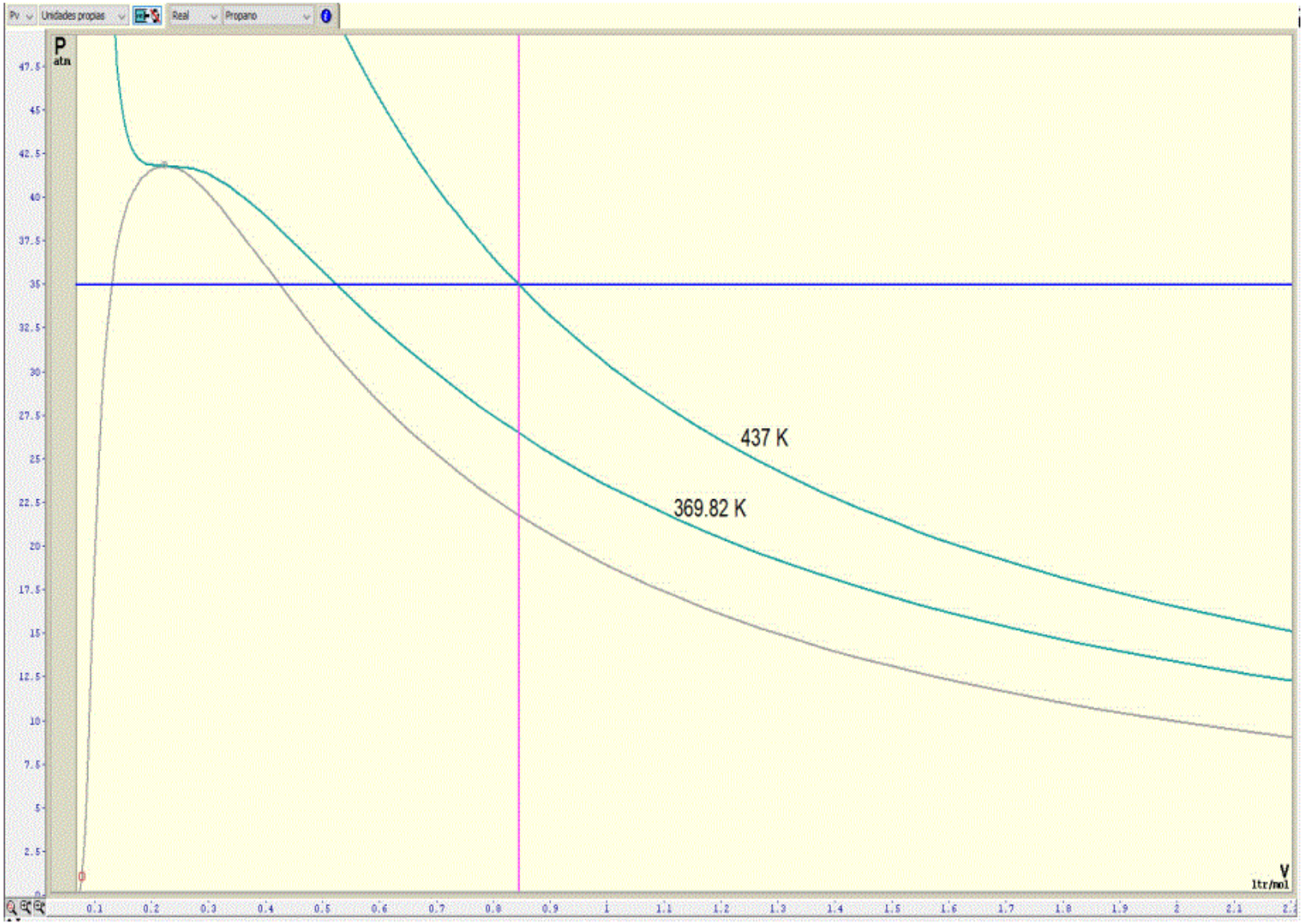
Obtención de Temperatura y presión comportamiento tipo Van der Waals

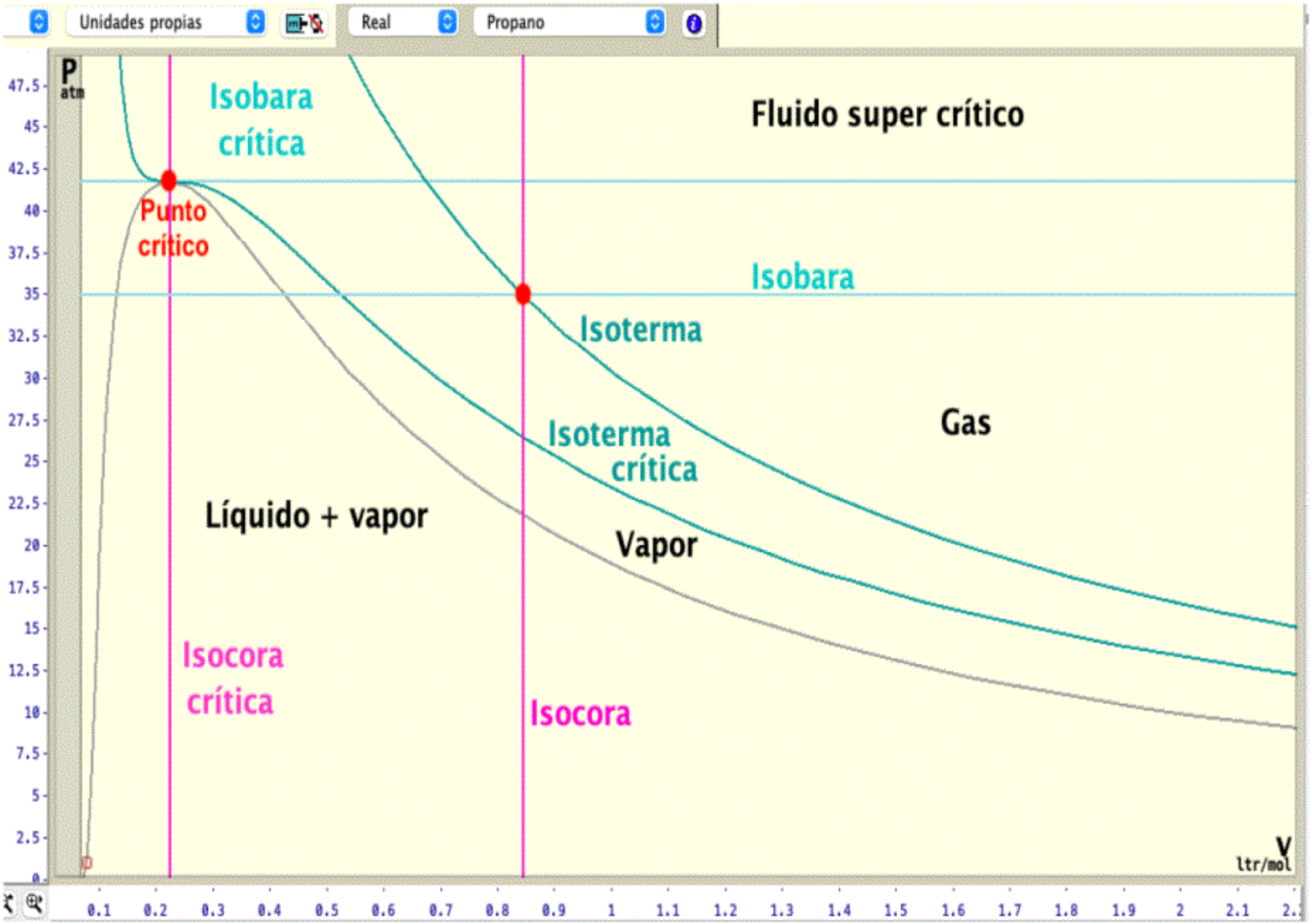
Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Volumen (L)	4.8000
moles (n)	5.6818
presión (atm)	35.0000
a_M (atmL^2/mol^2)	5.1800
b_M (L/mol)	0.0677
R (atmL/molK)	0.082

T ideal (K)	360.59
T real (K)	400.49

FES ZARAGOZA


Pv
Unidades propias
Real
Propano
P
atm
437 K
369.82 K
V
ltr/mol


Unidades propias
Real
Propano
P
atm
Isobara
crítica
Fluido super crítico
Punto
crítico
Isobara
Isoterma
Isoterma
crítica
Gas
Líquido + vapor
Vapor
Isocora
crítica
Isocora
V
ltr/mol

Obtención de parámetros de mezclado binario y ternario

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Componente	M (g/mol)	m (g)	pc (atm)	Tc (K)	Vc (L(mol)	ni
Metano	16.00	30.00	45.40	190.60	0.0990	1.8750
Etano	30.00	300.00	48.20	305.40	0.1480	10.0000
Propano	44.00	0.00	41.90	369.80	0.2030	0.0000
					n total	11.8750

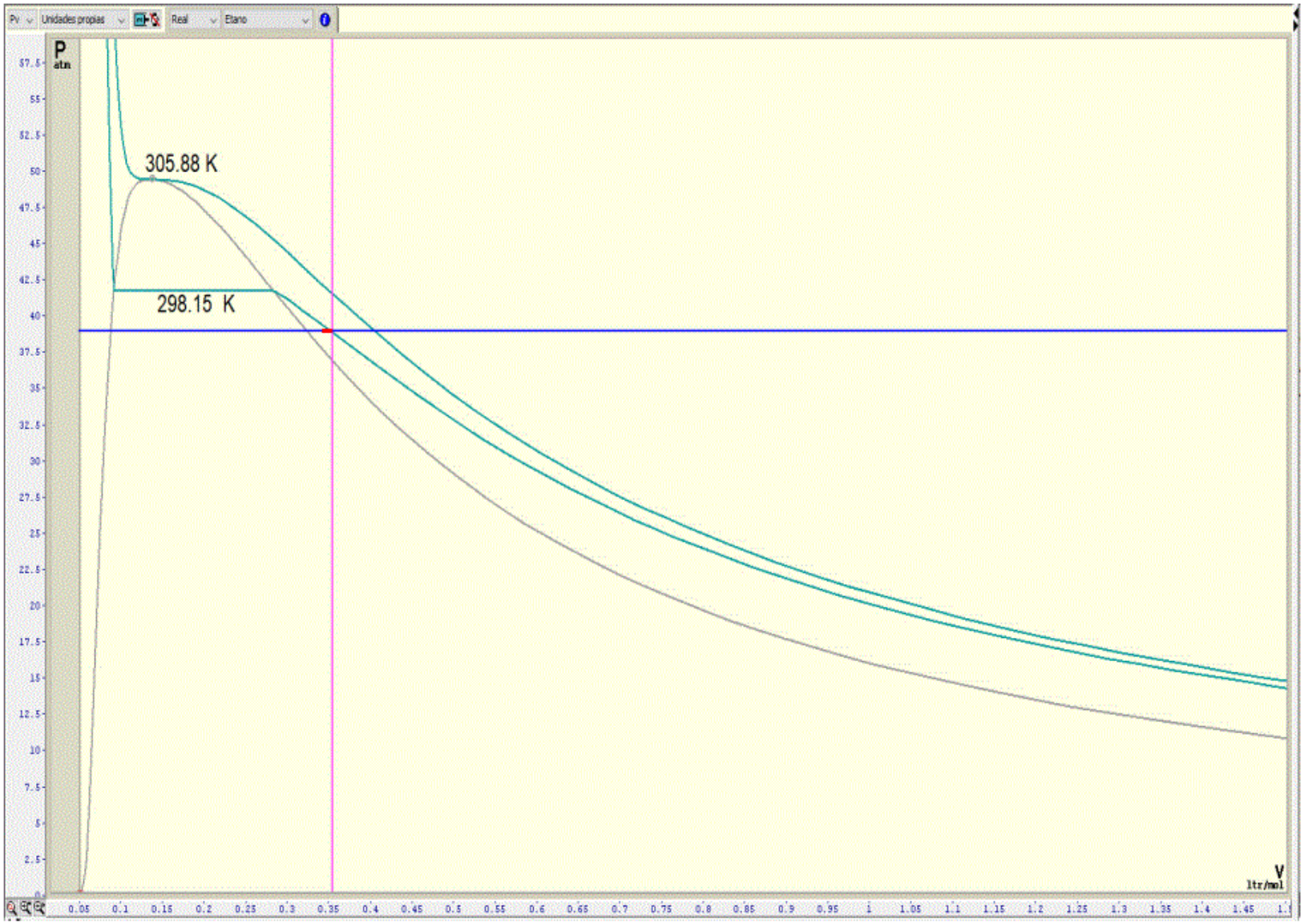
			R (atmL/molK)			
	Dependiente de Vc		0.0820	Independiente de Vc		
Componente	a (atmL^2/mol^2)	b (L/mol)	yi	a (atmL^2/mol^2)	b (L/mol)	y
Metano	1.3349	0.0330	0.1579	2.2699	0.0430	1.0000
Etano	3.1673	0.0493	0.8421	5.4891	0.0649	
Propano	5.1800	0.0677	0.0000	9.2583	0.0905	

Dependiente de Vc				
a_M (atmL^2/mol^2)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
2.8262	0.0467	47.7579	287.2737	0.1403

Independiente de Vc				
a_M (atmL^2/mol^2)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
4.8878	0.0615	47.7579	287.2737	0.1403

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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


Pv
Unidades propias
Real
Etano
P
atm
305.88 K
298.15 K
V
ltr/mol

Volumen (L)	5.0000
Temperatura (K)	298.15
moles (n)	11.8750
a_M (atmL^2/mol^2)	2.8262
b_M (L/mol)	0.0467
R (atmL/molK)	0.0820

p ideal (atm)	58.0647
p real (atm)	49.3756

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

Volumen (L)	5.0000
Temperatura (K)	298.15
moles (n)	11.8750
a_M ($atmL^2/mol^2$)	4.8878
b_M (L/mol)	0.0615
R (atmL/molK)	0.082

p ideal (atm)	58.0647
p real (atm)	40.4232

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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