

# Clase 62 30 Noviembre 2021

Título de la nota

30/11/2021

Propiedades

Obtención de a y b

Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	ETILENO	
Masa Molar	28.054	g/mol
Temperatura Crítica	282.400	K
Presión Crítica	49.700	atm
Volumen Crítico	0.1290	L/mol
Punto ebullición	169.400	K
Punto de fusión	104.000	K
<b>Cp (cal/mol K)</b>	9.090e-1	<b>a</b>
<b>Cp=a+bT+cT<sup>2</sup>+dT<sup>3</sup></b>	3.740e-2	<b>b</b>
<b>(300-2500)K</b>	-1.994e-5	<b>c</b>
	4.192e-9	<b>d</b>
<b>Constantes de Antonio</b>	15.5368	<b>A</b>
<b>LN(p)=A-(B/(T+C))</b>	1347.0100	<b>B</b>
<b>T=K</b>	-18.1500	<b>C</b>
<b>p=mmHg</b>		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021 V2

Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME

PE-202021

Volumen real (tablas)

Mezclado

Vol real dependiente de  $V_c$ Vol real Independiente de  $V_c$ 

### Obtención de propiedades reales en un gas ó de mezclado binario y ternario

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Componente	M (g/mol)	m (g)	$p_c$ (atm)	$T_c$ (K)	$V_c$ (L/mol)	$n_i$
Etileno	28.05	20.00	49.70	282.40	0.1290	0.7130
	30.00	0.00	48.20	305.40	0.1480	0.0000
	44.00	0.00	41.90	369.80	0.2030	0.0000
					n total	0.7130

Componente	Dependiente de $V_c$		R (atmL/molK)	Independiente de $V_c$		y
	a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	b (L/mol)	$y_i$	a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	b (L/mol)	
Metano	2.4812	0.0430	0.0820	4.5518	0.0582	1.0000
	3.1673	0.0493		5.4891	0.0649	
	5.1800	0.0677		9.2583	0.0905	

Dependiente de $V_c$				
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	$b_M$ (L/mol)	$p_{cM}$ (atm)	$T_{cM}$ (K)	$V_{cM}$ (L/mol)
2.4812	0.0430	49.7000	282.4000	0.1290

Independiente de $V_c$				
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	$b_M$ (L/mol)	$p_{cM}$ (atm)	$T_{cM}$ (K)	$V_{cM}$ (L/mol)
4.5518	0.0582	49.7000	282.4000	0.1290



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2019

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

Volumen real (tablas)

Mezclado

Vol real dependiente de Vc

Vol real Independiente de Vc

## Obtención de ecuación cúbica del volumen tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	273.15
n (mol)	0.7130
p (atm)	40
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	2.4812
$b_M$ (L/mol)	0.0430
R (atmL/molK)	0.082



V <sup>3</sup>	V <sup>2</sup>	V	Cte
1	-0.4299131550	0.0315348909	-0.00096674845

V ideal (L)	0.3993
-------------	--------

Resolución de volumen cúbico tipo  $AV^3+BV^2+CV+D=0$ 

A=	1
B=	-0.42991
C=	0.03153
D=	-0.00097

Expresión	2	decimales
-----------	---	-----------

	Real	Imaginaria	
$V_1=$	0.34708		+0.35
$V_2=$	0.04142	0.0327	+0.04+0.03j
$V_3=$	0.04142	-0.0327	+0.04-0.03j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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

Volumen real (tablas)

Mezclado

Vol real dependiente de Vc

Vol real Independiente de Vc

## Obtención de ecuación cúbica del volumen tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	273.15
n (mol)	0.7130
p (atm)	40
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	4.5518
$b_M$ (L/mol)	0.0582
R (atmL/molK)	0.082



V <sup>3</sup>	V <sup>2</sup>	V	Cte
1	-0.440784	0.057852	-0.002402

V ideal (L)	0.3993
-------------	--------

Resolución de volumen cúbico tipo  $AV^3+BV^2+CV+D=0$ 

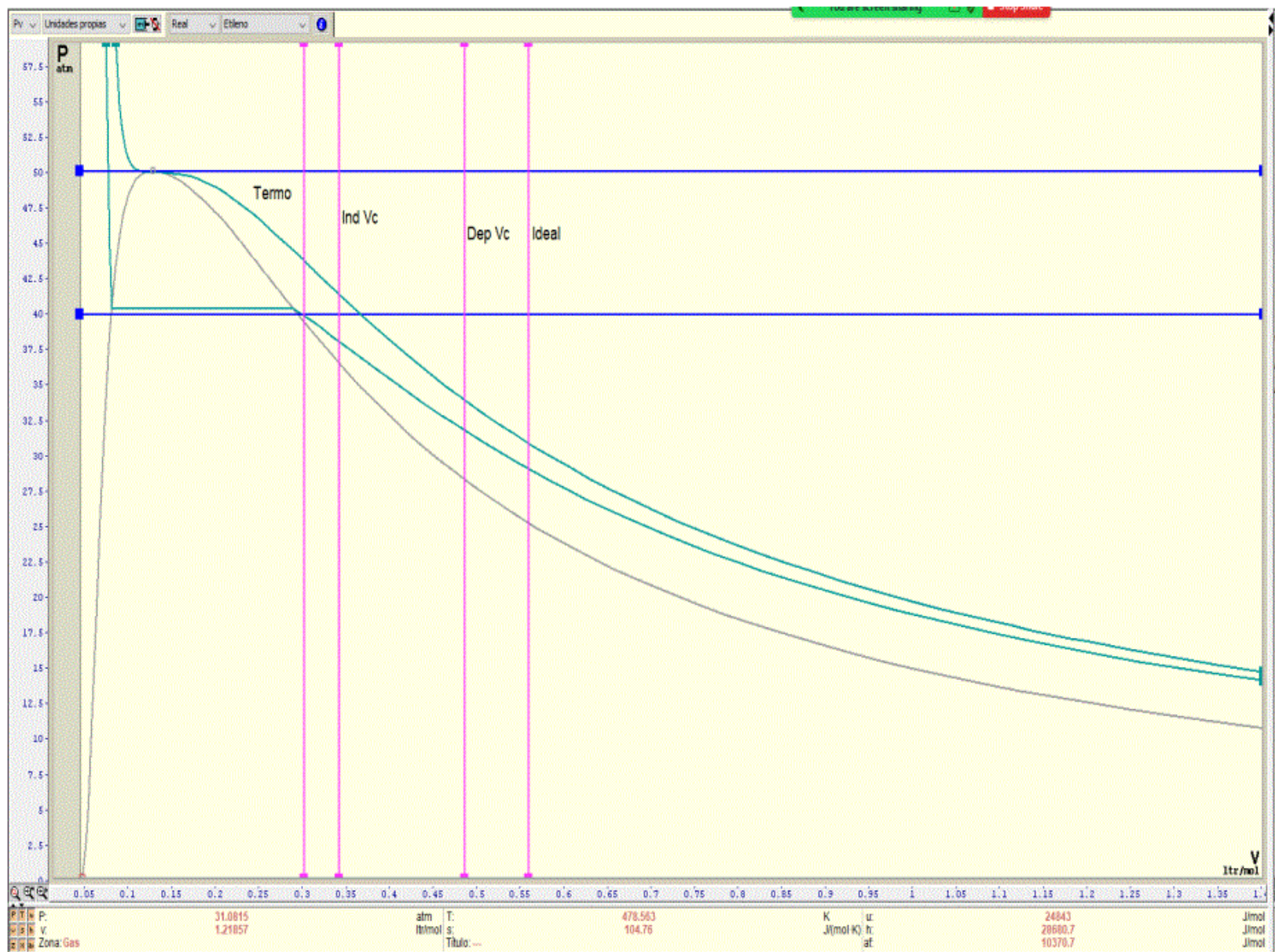
A=	1
B=	-0.44078
C=	0.05785
D=	-0.00240

Expresión	2	decimales
-----------	---	-----------

	Real	Imaginaria	
$V_1=$	0.24410		+0.24
$V_2=$	0.09834	0.0131	+0.10+0.01j
$V_3=$	0.09834	-0.0131	+0.10-0.01j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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



Propiedades

Obtención de a y b

Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	AMONIACO	
Masa Molar	17.031	<b>g/mol</b>
Temperatura Crítica	405.600	<b>K</b>
Presion Crítica	111.300	<b>atm</b>
Volumen Crítico	0.0725	<b>L/mol</b>
Punto ebullición	239.700	<b>K</b>
Punto de fusión	195.400	<b>K</b>
<b>Cp (cal/mol K)</b>	6.524e+0	<b>a</b>
<b>Cp=a+bT+cT<sup>2</sup>+dT<sup>3</sup></b>	5.692e-3	<b>b</b>
<b>(300-2500)K</b>	4.078e-6	<b>c</b>
	-2.830e-9	<b>d</b>
<b>Constantes de Antonio</b>	16.9481	<b>A</b>
<b>LN(p)=A-(B/(T+C))</b>	2132.5000	<b>B</b>
<b>T=K</b>	-32.9800	<b>C</b>
<b>p=mmHg</b>		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021 V2

Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME

PE-202021

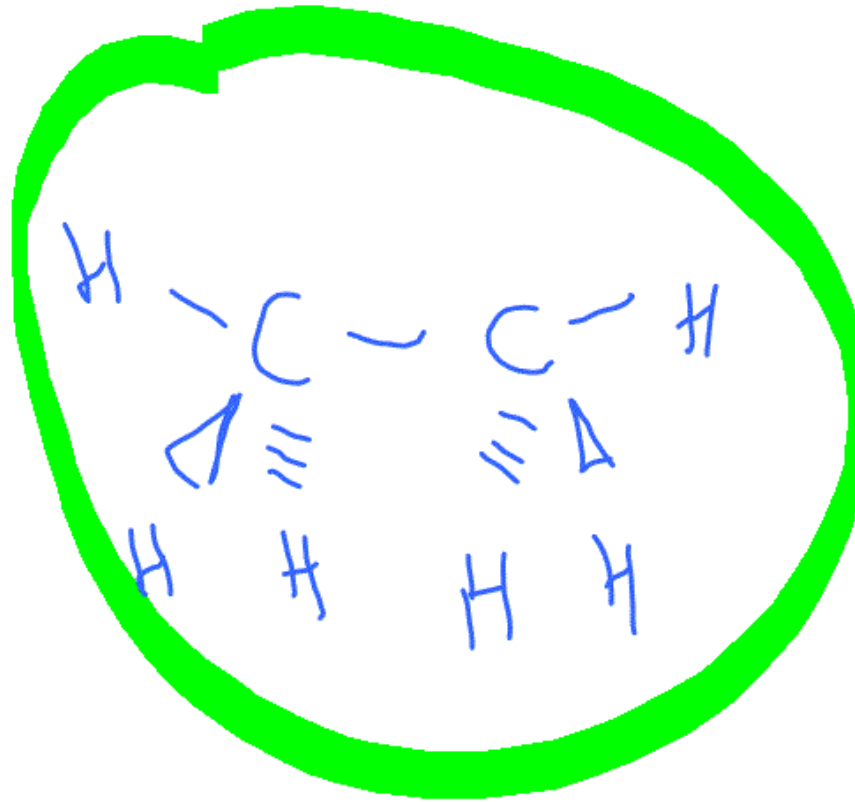
Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	ETANO	
Masa Molar	30.070	<b>g/mol</b>
Temperatura Crítica	305.400	<b>K</b>
Presion Crítica	48.200	<b>atm</b>
Volumen Crítico	0.1480	<b>L/mol</b>
Punto ebullición	184.500	<b>K</b>
Punto de fusión	89.900	<b>K</b>
<b>Cp (cal/mol K)</b>	1.292e+0	<b>a</b>
<b>Cp=a+bT+cT<sup>2</sup>+dT<sup>3</sup></b>	4.254e-2	<b>b</b>
<b>(300-2500)K</b>	-1.657e-5	<b>c</b>
	2.081e-9	<b>d</b>
<b>Constantes de Antonio</b>	15.6637	<b>A</b>
<b>LN(p)=A-(B/(T+C))</b>	1511.4200	<b>B</b>
<b>T=K</b>	-17.1600	<b>C</b>
<b>p=mmHg</b>		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021 V2

Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME

PE-202021



Volumen real (tablas)

Mezclado

Vol real dependiente de  $V_c$ Vol real Independiente de  $V_c$ 

### Obtención de propiedades reales en un gas ó de mezclado binario y ternario

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

Componente	M (g/mol)	m (g)	$p_c$ (atm)	$T_c$ (K)	$V_c$ (L/mol)	$n_i$
Amoniaco	17.03	400.00	111.30	405.60	0.0725	23.4880
Etano	30.07	500.00	48.20	305.40	0.1480	16.6279
	44.00	0.00	41.90	369.80	0.2030	0.0000
					n total	40.1158

Componente	Dependiente de $V_c$		Independiente de $V_c$		$y$	
	a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	b (L/mol)	$y_i$	a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )		b (L/mol)
Amoniaco	1.7551	0.0242	0.5855	4.1929	0.0374	1.0000
Etano	3.1673	0.0493	0.4145	5.4891	0.0649	
	5.1800	0.0677	0.0000	9.2583	0.0905	

Dependiente de $V_c$				
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	$b_M$ (L/mol)	$p_{cM}$ (atm)	$T_{cM}$ (K)	$V_{cM}$ (L/mol)
2.2902	0.0346	85.1453	364.0675	0.1038

Independiente de $V_c$				
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	$b_M$ (L/mol)	$p_{cM}$ (atm)	$T_{cM}$ (K)	$V_{cM}$ (L/mol)
4.7090	0.0488	85.1453	364.0675	0.1038



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2019

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

Volumen real (tablas) Mezclado Vol real dependiente de Vc Vol real Independiente de Vc

### Obtención de ecuación cúbica del volumen tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	300
n (mol)	40.1158
p (atm)	22
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	2.2902
$b_M$ (L/mol)	0.0346
R (atmL/molK)	0.082

V <sup>3</sup>	V <sup>2</sup>	V	Cte
1	-46.24458767167527103001	-232.493298508	

V ideal (L)	44.8568
-------------	---------



### Resolución de volumen cúbico tipo $AV^3+BV^2+CV+D=0$

A=	1
B=	-46.24459
C=	167.52710
D=	-232.49330

Expresión	2	decimales
-----------	---	-----------

	Real	Imaginaria	
V <sub>1</sub> =	42.42497		+42.42
V <sub>2</sub> =	1.90981	1.3538	+1.91+1.35j
V <sub>3</sub> =	1.90981	-1.3538	+1.91-1.35j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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

Volumen real (tablas) Mezclado Vol real dependiente de Vc Vol real Independiente de Vc

### Obtención de ecuación cúbica del volumen tipo Van der Waals

Introducir los valores en las celdas de color amarillo

T (K)	300
n (mol)	40.1158
p (atm)	22
$a_M$ (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	4.7090
$b_M$ (L/mol)	0.0488
R (atmL/molK)	0.082

V <sup>3</sup>	V <sup>2</sup>	V	Cte
1	-46.814038	344.459843	-674.192462

V ideal (L)	44.8568
-------------	---------



### Resolución de volumen cúbico tipo $AV^3+BV^2+CV+D=0$

A=	1
B=	-46.81404
C=	344.45984
D=	-674.19246

Expresión	2	decimales
-----------	---	-----------

	Real	Imaginaria	
V <sub>1</sub> =	38.27455		+38.27
V <sub>2</sub> =	3.48483	0.0000	+3.48
V <sub>3</sub> =	5.05466	0.0000	+5.05

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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



Propiedades

Obtención de a y b

Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	ETANOL	
Masa Molar	46.069	g/mol
Temperatura Crítica	516.200	K
Presión Crítica	63.000	atm
Volumen Crítico	0.1670	L/mol
Punto ebullición	351.500	K
Punto de fusión	159.100	K
<b>Cp (cal/mol K)</b>	2.153e+0	<b>a</b>
<b>Cp=a+bT+cT<sup>2</sup>+dT<sup>3</sup></b>	5.113e-2	<b>b</b>
<b>(300-2500)K</b>	-2.004e-5	<b>c</b>
	3.280e-10	<b>d</b>
<b>Constantes de Antonio</b>	18.9119	<b>A</b>
<b>LN(p)=A-(B/(T+C))</b>	3803.9800	<b>B</b>
<b>T=K</b>	-41.6800	<b>C</b>
<b>p=mmHg</b>		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021 V2  
 Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME  
 PE-202021

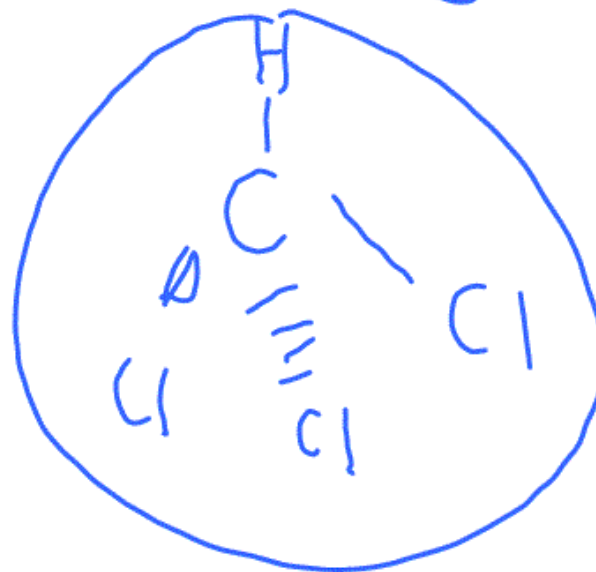
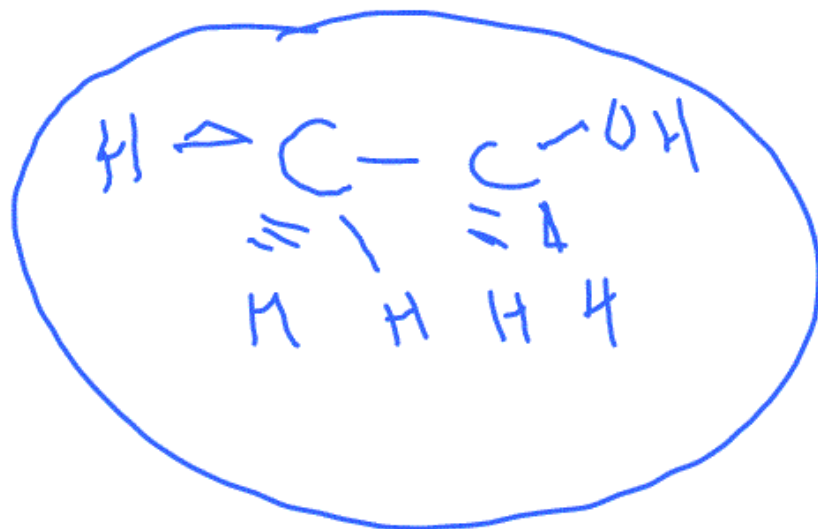
Propiedades

Obtención de a y b

Propiedades Físicoquímicas de sustancias		
Nombre	CLOROFORMO	
Masa Molar	119.378	g/mol
Temperatura Crítica	536.400	K
Presión Crítica	54.000	atm
Volumen Crítico	0.2390	L/mol
Punto ebullición	334.300	K
Punto de fusión	209.600	K
<b>Cp (cal/mol K)</b>	5.733e+0	<b>a</b>
<b>Cp=a+bT+cT<sup>2</sup>+dT<sup>3</sup></b>	4.522e-2	<b>b</b>
<b>(300-2500)K</b>	-4.397e-5	<b>c</b>
	1.590e-9	<b>d</b>
<b>Constantes de Antonio</b>	15.9732	<b>A</b>
<b>LN(p)=A-(B/(T+C))</b>	2696.7900	<b>B</b>
<b>T=K</b>	-46.1600	<b>C</b>
<b>p=mmHg</b>		



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021 V2  
 Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME  
 PE-202021



Masa molar real Mezclado Masa molar real Depen Vc Masa molar real Indep 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)	320
m (g)	0.2700
p (atm)	0.7697
a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	9.2536
b (L/mol)	0.07966
R (atmL/molK)	0.0820
V (L)	0.0750



M <sup>3</sup>	M <sup>2</sup>	M	Cte
0.05773	-7.10135	8.99450	-2.57936

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

M ideal (g/mol) 122.7283

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

A=	0.05773	
B=	-7.10135	
C=	8.99450	
D=	-2.57936	
Expresión	2	decimales

	Real	Imaginaria	
M <sub>1</sub> =	121.73825		+121.74
M <sub>2</sub> =	0.43703	0	+0.44
M <sub>3</sub> =	0.83983	0	+0.84

Masa molar real Mezclado Masa molar real Depen Vc Masa molar real Indep 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)	320
m (g)	0.2700
p (atm)	0.7697
a (atmL <sup>2</sup> /mol <sup>2</sup> )	15.1146
b (L/mol)	0.10182
R (atmL/molK)	0.0820
V (L)	0.0750



M <sup>3</sup>	M <sup>2</sup>	M	Cte
0.05773	-7.10596	14.69134	-5.38497

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

M ideal (g/mol) 122.7283

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

A=	0.05773	
B=	-7.10596	
C=	14.69134	
D=	-5.38497	
Expresión	2	decimales

	Real	Imaginaria	
M <sub>1</sub> =	120.99795		+121.00
M <sub>2</sub> =	0.47546	0	+0.48
M <sub>3</sub> =	1.62147	0	+1.62

# Factor compresibilidad ( $Z$ )

$$Z = \frac{\bar{V}_{\text{real}}}{\bar{V}_{\text{ideal}}}$$

$Z = 1$  ideal.

$Z > 1$  repulsión

$Z < 1$  atracción

$$\zeta = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} + \frac{D}{V^3}$$

$$\zeta = 1 + B'P + C'P^2 + D'P^3$$

$B, B', C, C'$  y  $D, D'$  son isot.

# Fugacidad (F)

$$F = \Phi_p$$

$$\Phi = 1 \text{ ideal.}$$

$$\Phi = \frac{F}{p}$$

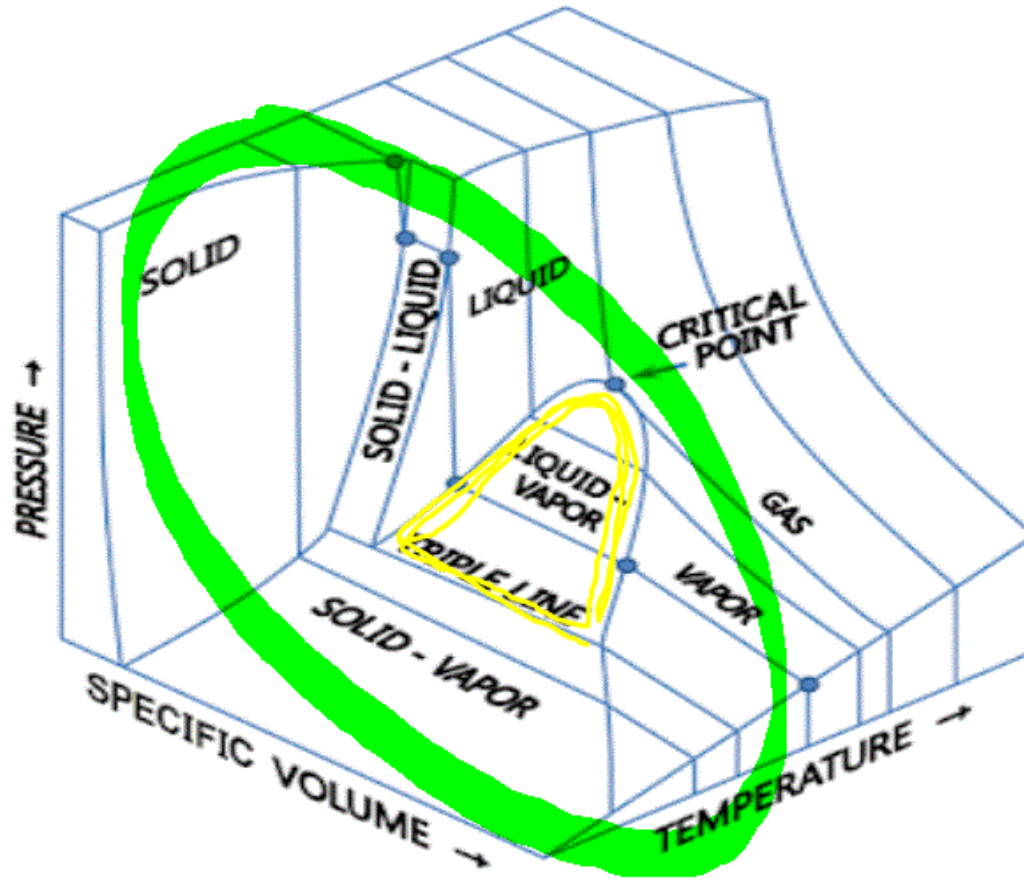
a dimensional

$$\Phi > 1 \text{ repulsión}$$

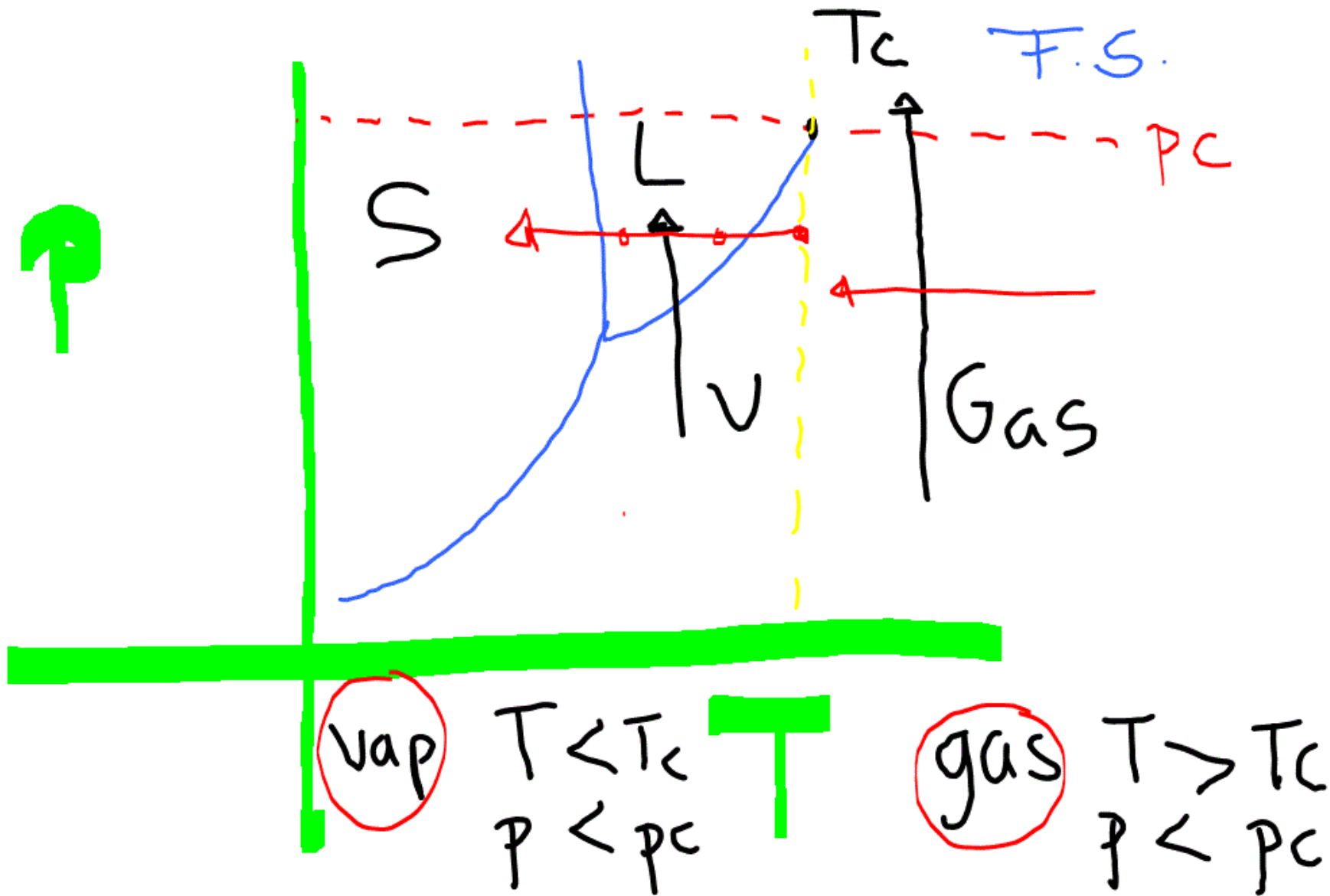
$$\Phi < 1 \text{ atracción}$$

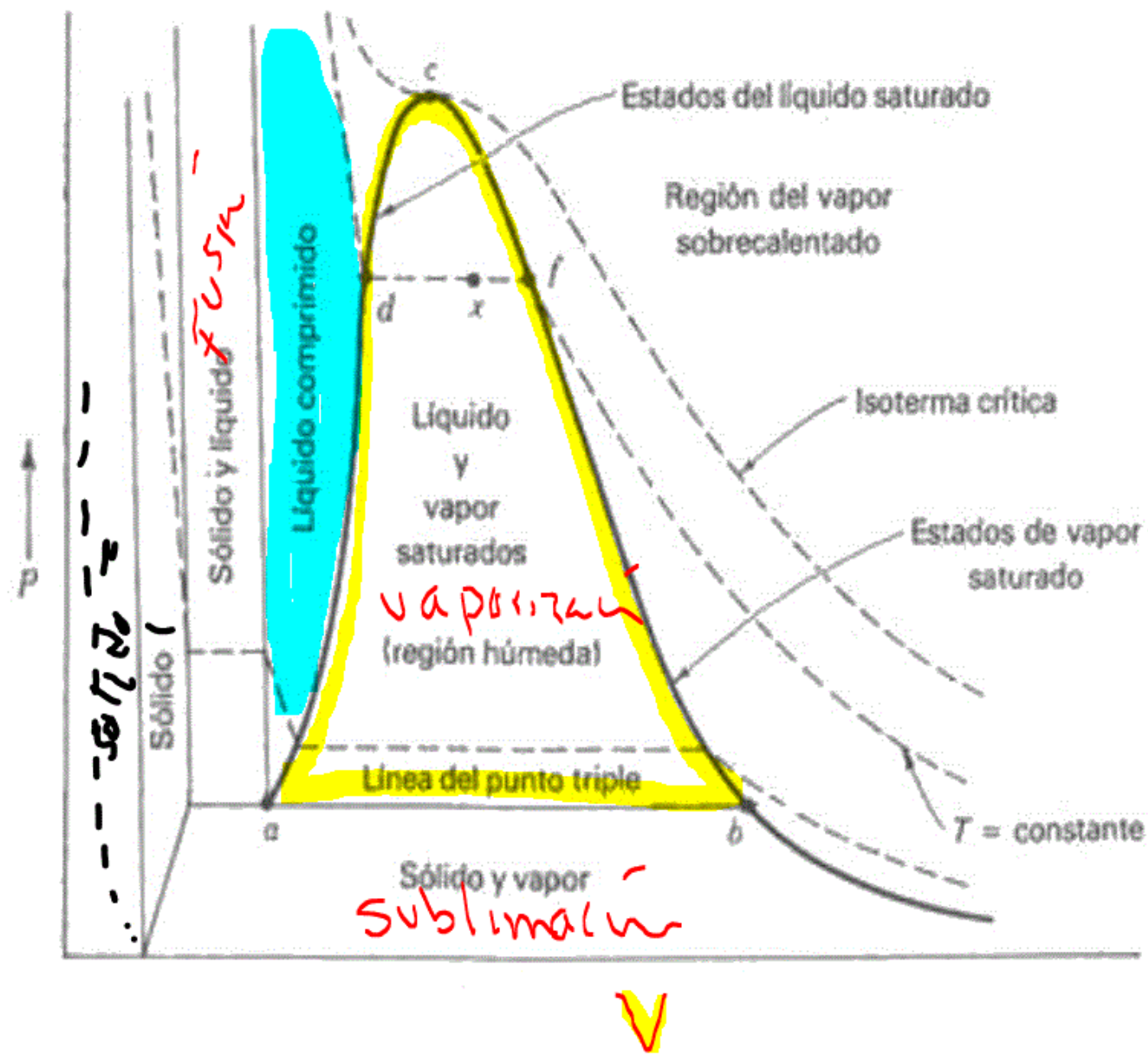
$$PV = ZnRT$$

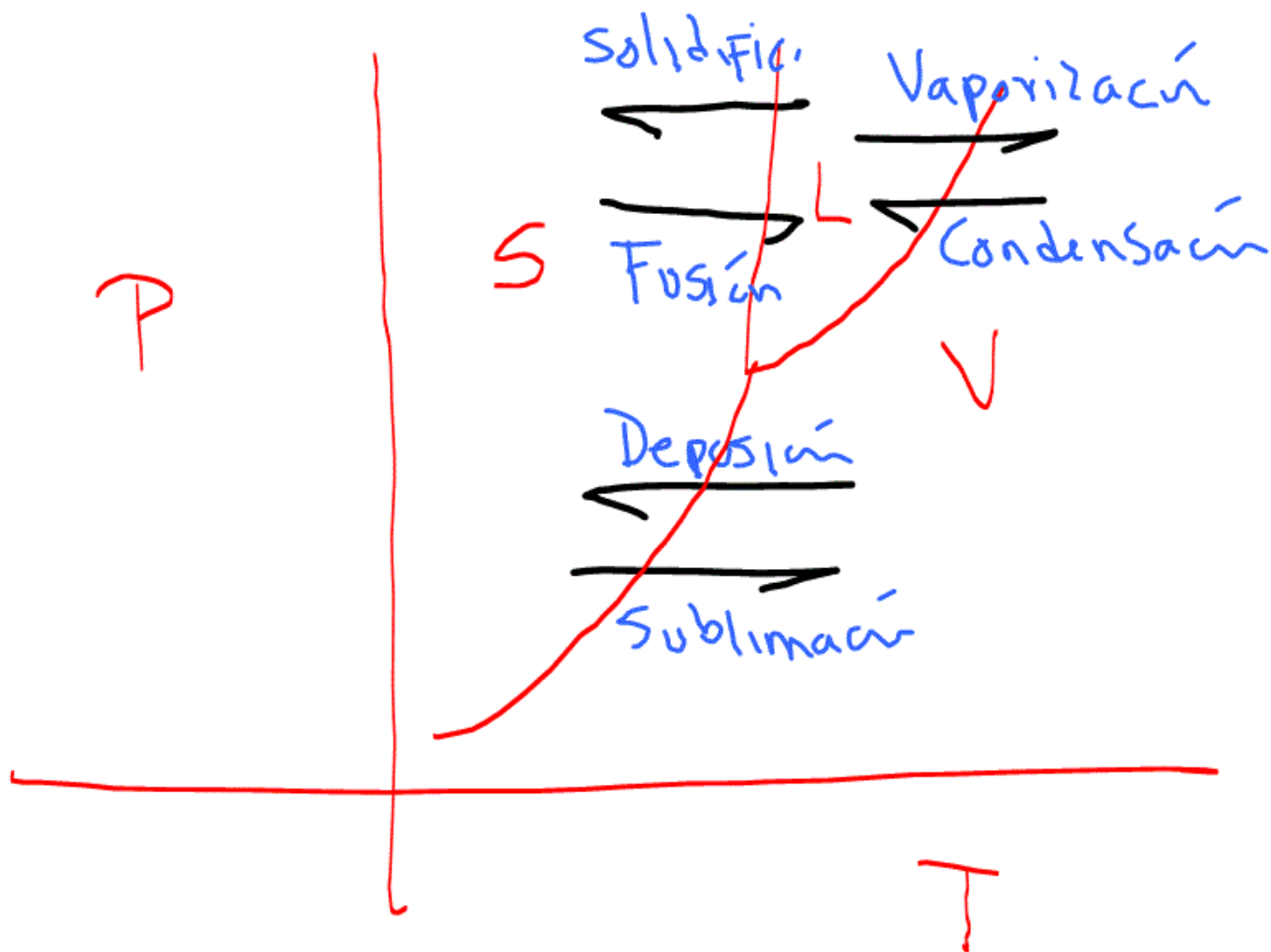
$$P\bar{V} = ZRT$$











Ecuação Clausius-Clapeyron

Ecuação Antoine

Curva Calentamiento

2016-1  
2015-2

potencial químico.

$$d\bar{G} = \bar{V}dp - \bar{S}dT$$

2021-1