

Respuestas y puntualidades. Tarea 5 Equilibrio L-V. Ley de Raoult y Dalton. Diagramas p vs xy y T vs xy.

Utilizar los siguientes simuladores:

<https://tareaf3b.fisicoquim.com/>

<https://tareaf3c.fisicoquim.com/>

<https://tareaf3d.fisicoquim.com/>

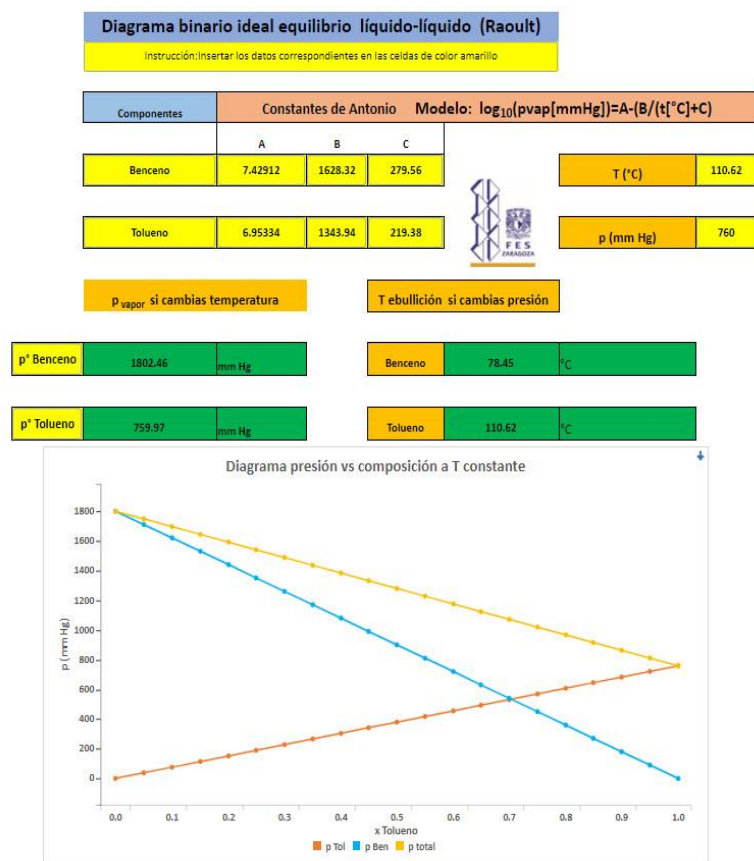
<https://tareaf3e.fisicoquim.com/>

Parte A

Obtener el diagrama p vs composición (x) de comportamiento ideal para la mezcla tolueno-benceno a las temperaturas de ebullición normales de cada componente. Discutir los 2 diagramas, solo generar 5 cálculos manuales para cada una de las 2 gráficas obtenidas.

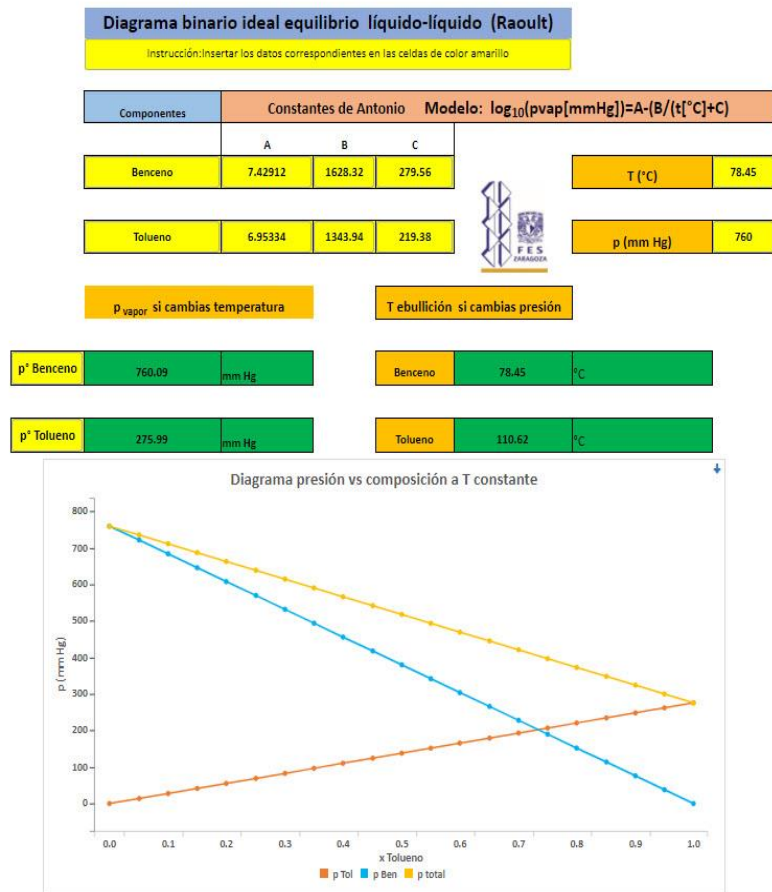
Primer diagrama a TNE para el tolueno

		(mm Hg)		
x Tol	x Ben	p Tol	p Ben	p total
0.0000	1.00	0.00	1802.46	1802.46
0.0500	0.95	38.00	1712.34	1750.34
0.1000	0.90	76.00	1622.22	1698.21
0.1500	0.85	114.00	1532.09	1646.09
0.2000	0.80	151.99	1441.97	1593.96
0.2500	0.75	189.99	1351.85	1541.84
0.3000	0.70	227.99	1261.72	1489.71
0.3500	0.65	265.99	1171.60	1437.59
0.4000	0.60	303.99	1081.48	1385.47
0.4500	0.55	341.99	991.36	1333.34
0.5000	0.50	379.98	901.23	1281.22
0.5500	0.45	417.98	811.11	1229.09
0.6000	0.40	455.98	720.99	1176.97
0.6500	0.35	493.98	630.86	1124.84
0.7000	0.30	531.98	540.74	1072.72
0.7500	0.25	569.98	450.62	1020.59
0.8000	0.20	607.97	360.49	968.47
0.8500	0.15	645.97	270.37	916.34
0.9000	0.10	683.97	180.25	864.22
0.9500	0.05	721.97	90.12	812.09
1.0000	0.00	759.97	0.00	759.97



Segundo diagrama a TNE para el benceno

		(mm Hg)		
x Tol	x Ben	p Tol	p Ben	p total
0.0000	1.00	0.00	760.09	760.09
0.0500	0.95	13.80	722.09	735.89
0.1000	0.90	27.60	684.08	711.68
0.1500	0.85	41.40	646.08	687.48
0.2000	0.80	55.20	608.07	663.27
0.2500	0.75	69.00	570.07	639.07
0.3000	0.70	82.80	532.07	614.86
0.3500	0.65	96.60	494.06	590.66
0.4000	0.60	110.40	456.06	566.45
0.4500	0.55	124.20	418.05	542.25
0.5000	0.50	138.00	380.05	518.04
0.5500	0.45	151.80	342.04	493.84
0.6000	0.40	165.60	304.04	469.63
0.6500	0.35	179.40	266.03	445.43
0.7000	0.30	193.20	228.03	421.22
0.7500	0.25	207.00	190.02	397.02
0.8000	0.20	220.80	152.02	372.81
0.8500	0.15	234.60	114.01	348.61
0.9000	0.10	248.39	76.01	324.40
0.9500	0.05	262.19	38.00	300.20
1.0000	0.00	275.99	0.00	275.99

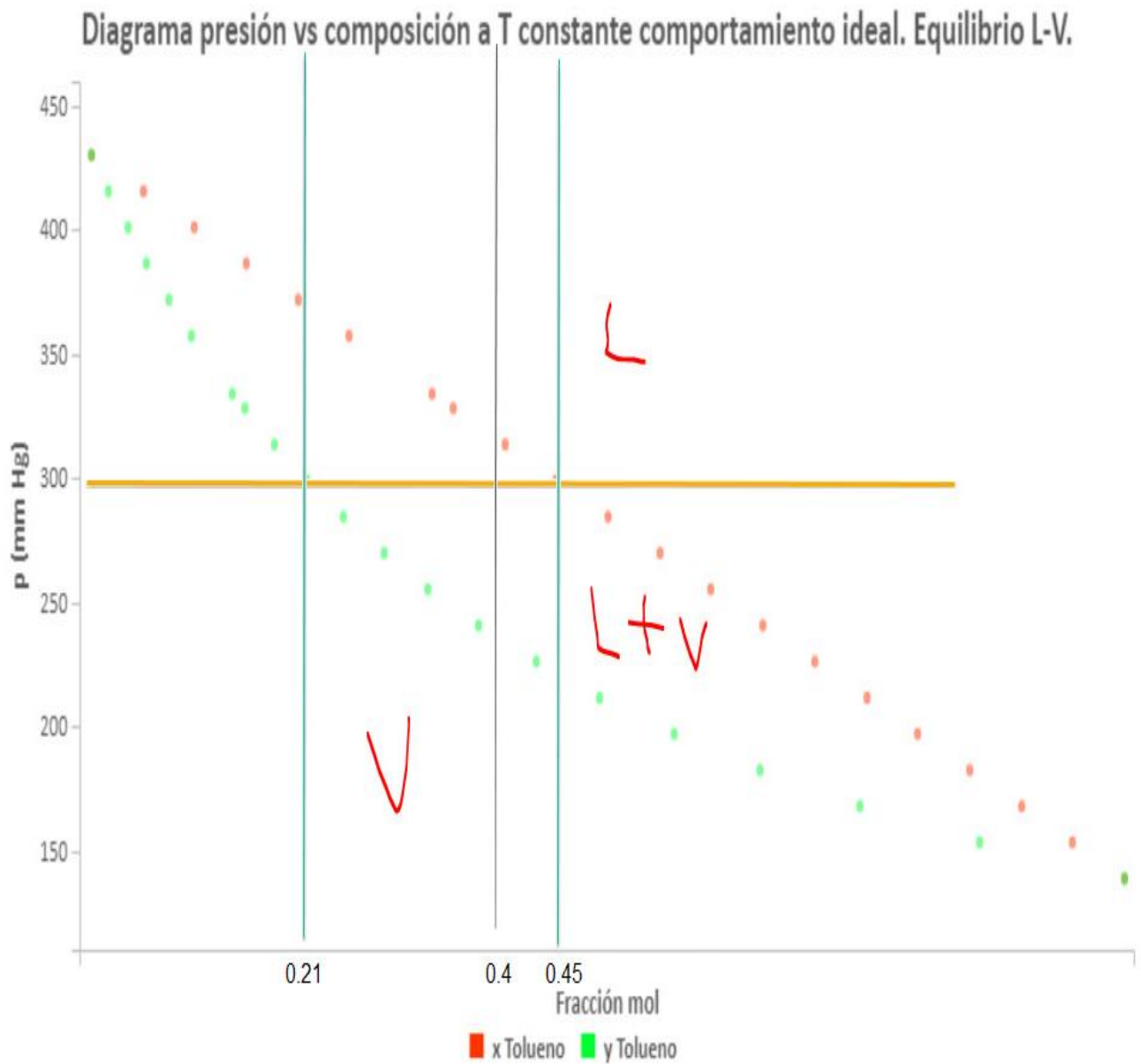


En los diagramas anteriores los límites de presión son más grandes para el diagrama 1 debido a que la presión de vapor del componente más volátil es más alta (benceno), en tanto el diagrama 2 estos límites son más reducidos por que la presión de vapor del componente más estable no disminuye mucho (tolueno). Para obtener el comportamiento grafico se aplica la ley de Raoult (comportamiento ideal), lo que indica que en esta mezcla binaria las fuerzas de interacción son equivalentes.

Parte B

Aplicar la regla de la palanca en una mezcla de 4 moles de tolueno y 6 moles de benceno mezclados isotérmicamente a 60 °C, cuando la presión es de 300 mm de Hg. Realizar el balance de materia y obtener la composición en ese punto. Justificar con cálculos manuales. Discutir los resultados.

Diagrama isotérmico a 60 °C isopleta en 0.4 x tolueno



Aplicando la regla de la palanca

líquido-líquido

líquido-vapor

vapor-vapor

Regla de la palanca equilibrio líquido-vapor (miscibilidad total)

Instrucción. Llenar las celdas de color amarillo, los resultados aparecen en las celdas de color verde

		Coordenadas del diagrama de fases			Zona Líquido-vapor	
n_{total} (mol)		L	C	V		
10.0000		0.450	0.400	0.210		
T (K)		n_V/n_L	0.2632			
333.15		$n_V=$	0.2632	n_L		
		$n_L+n_V=$	10.0000	mol		
		0.2632	n_L	+	$n_L =$	10.0000 n_{total}
		$n_L=$	7.9167	mol		
		$n_V=$	2.0833	mol		

Composición			
V	A	1.6458	mol
	B	0.4375	mol
L	A	4.3542	mol
	B	3.5625	mol
n_{total}		10.0000	mol

Comprobación			
mol _A	6.0000	X_A	0.6000
mol _B	4.0000	X_B	0.4000
total	10.0000	total	1.0000



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

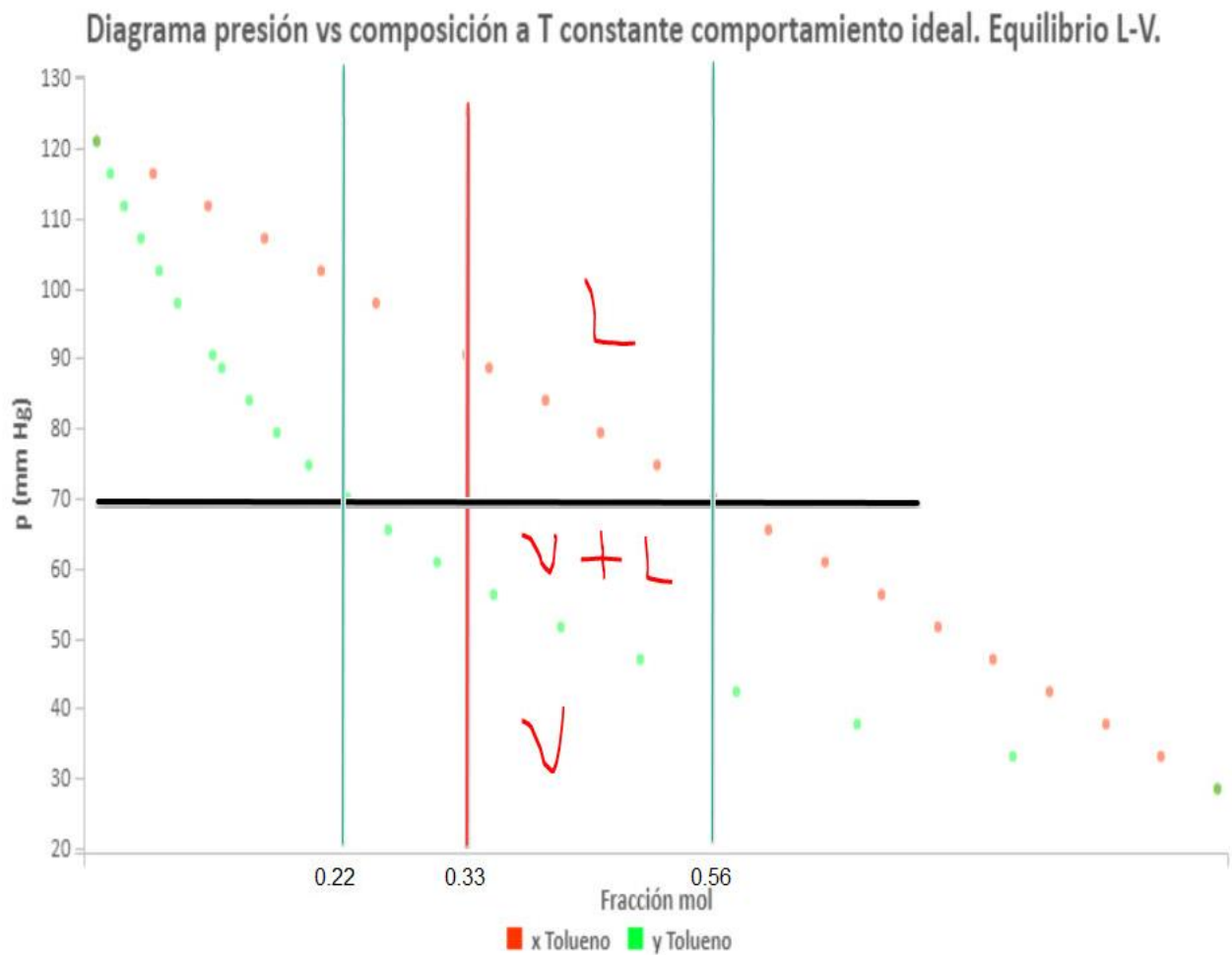
Reseteo

Imprimir

Lo anterior indica que se encuentra más cerca de la línea de burbuja, es decir existe mayor cantidad de líquido, de acuerdo al balance A=Tolueno y B=Benceno, lo que indica que la composición del punto C es más rica en el componente más volátil, también la composición del líquido es más alta para benceno, lo que se traduce que existe más vapor de este componente inestable.

Aplicar la regla de la palanca en una mezcla de 2 moles de tolueno y 4 moles de benceno mezclados isotérmicamente a 25 °C, cuando la presión es de 70 mm de Hg. Realizar el balance de materia y obtener la composición en ese punto. Justificar con cálculos manuales. Discutir los resultados.

Diagrama isotérmico a 25 °C isopleta en 0.33 x tolueno




Aplicando la regla de la palanca

líquido-líquido líquido-vapor vapor-vapor

Regla de la palanca equilibrio líquido-vapor (miscibilidad total)

Instrucción. Llenar las celdas de color amarillo, los resultados aparecen en las celdas de color verde

n _{total} (mol)	Coordenadas del diagrama de fases			Zona Líquido-vapor	
	L	C	V		
6.0000	0.560	0.334	0.220		
T (K)	n _v /n _L	1.9825			
298.15	n _v =	1.9825	n _L		
	n _L +n _v =	6.0000	mol		
	1.9825	n _L	+	n _L = 6.0000	n _{total}
	n _L =	2.0118	mol		
	n _v =	3.9882	mol		



Composición		
V	A	3.1108 mol
	B	0.8774 mol
L	A	0.8852 mol
	B	1.1266 mol
n _{total}		6.0000 mol

Comprobación			
mol _A	3.9960	X _A	0.6660
mol _B	2.0040	X _B	0.3340
total	6.0000	total	1.0000

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

Resetear Imprimir

Lo anterior indica que se encuentra más cerca de la línea de rocío, es decir existe mayor cantidad de vapor, de acuerdo al balance A=Tolueno y B=Benceno, lo que indica que la composición del punto C es más rica en el componente más volátil y la proporción de vapor es más alta para benceno, la composición del líquido es más alta para el tolueno debido a la coordenada de la línea de burbuja.

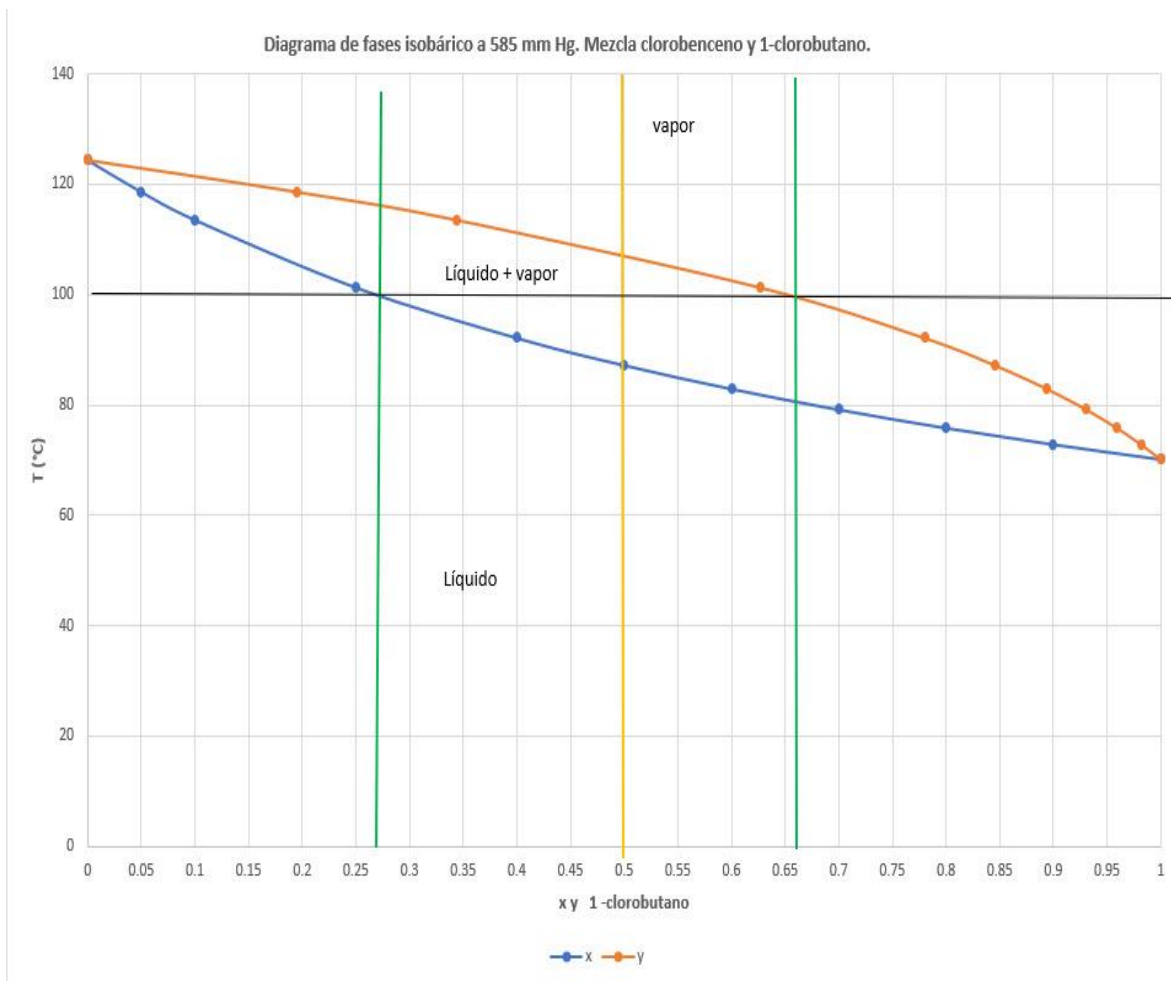
Parte C

Obtener el diagrama T vs composición de comportamiento ideal para la mezcla de 1-clorobutano y clorobenceno a 585 mm Hg. Discutir el diagrama, justificar con al menos 5 cálculos manuales.

Diagrama T vs composición mezcla binaria ideal						
Insertar en las celdas de color amarillo los valores adecuados						
Componentes	A	B	C	p (kPa)		
1-clorobutano	13.9600	2826.26	224.10	77.99		
clorobenceno	13.9926	3295.12	217.55	77.99		
Ley de Raoult y Dalton						
	$y_1 p^T = x_1 p^0_1$	$p^0 = e^{-(A-B)/(t+C)}$				
	$y_2 p^T = x_2 p^0_2$	T ⁰	1-clorobutano	70.20 °C		
despejando	$x_2 = y_2 p^T / p^0_2$	T ⁰	clorobenceno	124.41 °C		
	$x_1 = y_1 p^T / p^0_1$					
De esta forma	$p^T = x_1 p^0_1 + x_2 p^0_2$		$(y_1 + y_2) p^T = x_1 p^0_1 + x_2 p^0_2$			
$f(T) = x_1 p^0_1 + (1-x_1) p^0_2 - p^T = 0$						
		p ⁰	p ⁰			
x 1-clorobutano	T (°C)	1-clorobutano (kPa)	clorobenceno (kPa)	f(T)	p ^T (kPa)	y 1-clorobutano
0.05	118.6572	303.18	66.14	0.0000	77.9900	0.1944
0.10	113.5747	267.80	56.90	0.0001	77.9901	0.3434
0.25	101.3324	195.46	38.83	0.0002	77.9902	0.6266
0.40	92.1846	152.05	28.62	0.0001	77.9901	0.7798
0.50	87.2331	131.90	24.08	0.0000	77.9900	0.8456
0.60	82.9525	116.22	20.64	0.0001	77.9901	0.8941
0.70	79.2000	103.71	17.97	0.0000	77.9900	0.9309
0.80	75.8720	93.53	15.84	0.0002	77.9902	0.9594
0.90	72.8907	85.09	14.12	0.0000	77.9900	0.9819



Aplicar la regla de la palanca cuando se mezclan 5 moles de cada componente a una presión de 585 mm de Hg a una temperatura de 100°C. Realizar el balance de materia y obtener la composición en ese punto. Justificar con cálculos manuales. Discutir los resultados.




Aplicando la regla de la palanca

líquido-líquido líquido-vapor vapor-vapor

Regla de la palanca equilibrio líquido-vapor (miscibilidad total)

Instrucción. Llenar las celdas de color amarillo, los resultados aparecen en las celdas de color verde

n _{total} (mol)	Coordenadas del diagrama de fases			Zona Líquido-vapor	
	L	C	V		
10.0000	0.270	0.500	0.660		
T (K)	n _V /n _L	1.4375			
373.15	n _V =	1.4375	n _L		
	n _L +n _V =	10.0000	mol		
	1.4375	n _L	+	n _L =	10.0000 n _{total}
	n _L =	4.1026	mol		
	n _V =	5.8974	mol		



Composición			Comprobación			
V	A	2.0051 mol	mol _A	5.0000	X _A	0.5000
	B	3.8923 mol	mol _B	5.0000	X _B	0.5000
L	A	2.9949 mol	total	10.0000	total	1.0000
	B	1.1077 mol				
n _{total}	10.0000	mol				

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

Reseteo Imprimir

Lo anterior indica que se encuentra más cerca de la línea de rocío, es decir existe mayor cantidad de vapor, de acuerdo al balance A=Clorobenceno y B=1-clorobutano, lo que se traduce para la composición del punto C en una mezcla equimolar, las diferencias se observan en la distribución de fases, es decir existe mayor cantidad de vapor del componente más volátil 1-clorobutano con respecto al clorobenceno, en tanto el líquido es más rico en clorobenceno debido a la coordenada de la línea de burbuja.