Clase 54 25 Noviembre 2020

Título de la nota 25/11/2020

$$p_c = \frac{RT_c}{\bar{V}_c - b} - \frac{a}{\bar{V}_c^2} \qquad a = 3p_c\bar{V}_c^2$$

$$b = \frac{1}{3}\bar{V}_c$$

$$p_c = \frac{RT_c}{\bar{V}_c - b} - \frac{3p_c\bar{V}_c^2}{\bar{V}_c^2} \qquad \bar{V}_c = 3b$$

$$p_c = \frac{RT_c}{3b - b} - 3p_c$$

$$p_c = \frac{RT_c}{2b} - 3p_c \quad \therefore 4p_c = \frac{RT_c}{2b}$$

$$b = \frac{RT_c}{8p_c} = \frac{(atm\,L/mol\,K)(K)}{atm}$$

$$b = 4 l/mol$$

$$b = \frac{RT_c}{8 p_c}$$

$$p_c = \frac{RT_c}{\bar{V}_c - b} - \frac{a}{\bar{V}_c^2} \qquad b = \frac{1}{3}\bar{V}_c$$

$$3b = \bar{V}_c$$

$$p_c = \frac{RT_c}{3b - b} - \frac{a}{(3b)^2}$$

$$p_c = \frac{RT_c}{2b} - \frac{a}{9b^2}$$

$$p_c = \frac{9b^2 RT_c - 2ba}{18b^3}$$

$$pc = \frac{9b^2RTc - 2ba}{18b^3}$$

$$18b^3pc = 9b^2RTc - 2ba$$

$$a = -\frac{18b^3pc + 9b^2RTc}{2b}$$

$$a = -9b^2pc + \frac{9}{2}bRTc$$

$$a = -9\left(\frac{RTc}{8pc}\right)^2pc + \frac{9}{2}\left(\frac{RTc}{8pc}\right)RTc$$

$$a = -9\left(\frac{R^2Tc^2}{64pc^2}\right)pc + \frac{9}{16}\frac{R^2Tc^2}{pc}$$

$$a = -9\left(\frac{R^2 T_c^2}{64 p_c^2}\right) p_c + \frac{9}{16}\frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$

$$a = -\frac{9}{64}\frac{R^2 T_c^2}{p_c} + \frac{9}{16}\frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$

$$a = -\frac{9}{64}\frac{R^2 T_c^2}{p_c} + \frac{36}{64}\frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$

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

$$\frac{(atmL/molK)^2 (K)^2}{atm}$$

$$= \frac{atmL^2}{mol^2}$$

Propiedades Fisicoquímicas de sustancias

Nombre	nitrógeno	
Masa Molar	28.013	g/mol
Temperatura Crítica	126.260	K
Presion Crítica	33.540	atm
Volumen Crítico	0.0901	L/mol
Punto ebullición	77.400	K
Punto de fusión	63.300	K
Cp (cal/mol K)	7.440e+0	a
$Cp=a+bT+cT^2+dT^3$	-3.240e-3	b
(300-2500)K	6.400e-6	c
	-2.790e-9	d
Constantes de Antonio	14.9342	A
$LN(p)=A-(B/(T+C))$	588.7200	B
T=K	-6.6000	C
p=mmHg		

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

Temperatura Crítica	126.260	K
Presion Crítica	33.540	atm
Volumen Crítico	0.0901	L/mol

Nitrogeno (Tablas)

$$a = \left(1.408 \frac{bar\ L^2}{mol^2}\right)\left(\frac{1\ atm}{1.013\ bar}\right) = 1.3899 \frac{atm\ L^2}{mol^2}$$

$$b = 0.03913\ L/mol$$

Dependiente de $\bar{V}c$

$$a = 3 p_c \bar{V}_c^2 = 3(3.54\ atm)\left(\frac{0.0901\ L}{mol}\right)^2 = \frac{0.8161\ atm\ L^2}{mol^2}$$

$$b = \frac{1}{3}\bar{V}c = \frac{0.0901\ L}{3\ mol} = \frac{0.030\ L}{mol}$$

Independiente de $\overline{V_c}$

$$a = \frac{27}{64}\frac{R^2 T_c^2}{P_c} = \frac{27}{64}\frac{\left(0.082\ \frac{atm\,L}{mol\,K}\right)^2 (126.26\ K)^2}{33.54\ atm}$$

$$= 1.3482\ \frac{atm\,L^2}{mol^2}$$

$$b = \frac{RT_c}{8P_c} = \frac{(0.082\ atm\,L/mol\,K)(126.26\ K)}{8\,(33.54\ atm)}$$

$$= 0.0385\ \frac{L}{mol}$$

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	0.81629
b	L/mol	0.03002

Independiente de volumen crítico

Modelo

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

a	atmL²/mol²	1.34828
b	L/mol	0.03859

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

Calcular V_{N_2} en un sistema cerrado a 300 K $p = 5$ atm 2 moles

Contrastar vs el modelo ideal.

$$V^3 - V^2\left(nb + \frac{nRT}{p}\right) + \frac{Van^2}{p} - \frac{an^3b}{p} = 0$$

V^3	V^2	V	Cte
1	-9.918200	1.111920	-0.086952

V ideal (L)	9.8400

$$V = \frac{nRT}{p}$$

A=	1	
B=	-9.91820	
C=	1.11192	
D=	-0.08695	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	9.80571		+9.8057
V_2=	0.05625	0.07552452813	+0.0562+0.0755j
V_3=	0.05625	-0.07552452813	+0.0562-0.0755j

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)	300.000
n (mol)	2.0000
p (atm)	5.0000
a (atmL²/mol²)	1.3899
b (L/mol)	0.0391
R (atmL/molK)	0.0820

V³	V²	V	Cte
1	-9.918200	1.111920	-0.086952

V ideal (L)	9.8400

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

A=	1	
B=	-9.91820	
C=	1.11192	
D=	-0.08695	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	9.80571		+9.8057
V_2=	0.05625	0.07552452813	+0.0562+0.0755j
V_3=	0.05625	-0.07552452813	+0.0562-0.0755j

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)	300.000
n (mol)	2.0000
p (atm)	5.0000
a (atmL^2/mol^2)	0.8161
b (L/mol)	0.0300
R (atmL/molK)	0.0820

V^3	V^2	V	Cte
1	-9.900000	0.652880	-0.039173

V ideal (L)	9.8400

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

A=	1	
B=	-9.90000	
C=	0.65288	
D=	-0.03917	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	9.83402		+9.8340
V_2=	0.03299	0.05380424065	+0.0330+0.0538j
V_3=	0.03299	-0.05380424065	+0.0330-0.0538j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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

Dependientes

a $\overline{Vc}$

b

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)	300.000
n (mol)	2.0000
p (atm)	5.0000
a (atmL²/mol²)	1.3482
b (L/mol)	0.0385
R (atmL/molK)	0.0820

V^3	V^2	V	Cte
1	-9.917000	1.078560	-0.083049

V ideal (L)	9.8400

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

A=	1	
B=	-9.91700	
C=	1.07856	
D=	-0.08305	
Expresión	4	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	9.80789		+9.8079
V_2=	0.05455	0.07410527565	+0.0546+0.0741j
V_3=	0.05455	-0.07410527565	+0.0546-0.0741j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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

a y b Independiente de $\bar{V}c$

N_2

$T > T_c$ $\quad 300\,K > 126.25\,K$

$p < p_c$ $\quad 5\,atm < 33.54\,atm$

gas ideal

Mezclado (y_i)

$$a_M = \sum_{i=1}^{n} \left[a_i^{1/2} y_i\right]^2$$

$$b_M = \sum_{i=1}^{n} b_i y_i$$

$$V^3 - V^2\left(nb_M + \frac{nRT}{P}\right) + \frac{Va_Mn^2}{P} - \frac{a_M n^3 b_M}{P} = 0$$

Propiedades Fisicoquímicas de sustancias

Nombre	oxígeno	
Masa Molar	31.999	g/mol
Temperatura Crítica	154.600	K
Presion Crítica	49.800	atm
Volumen Crítico	0.0734	L/mol
Punto ebullición	90.200	K
Punto de fusión	54.400	K
Cp (cal/mol K)	6.713e+0	a
$Cp=a+bT+cT^2+dT^3$	-8.790e-7	b
(300-2500)K	4.170e-6	c
	-2.544e-9	d
Constantes de Antonio	15.4075	A
LN(p)=A-(B/(T+C))	734.5500	B
T=K	-6.4500	C
p=mmHg		

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

Aire

$y_{N_2} = 0.81$

$y_{O_2} = 0.19$

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

O_2

Modelo

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

a	atmL²/mol²	0.80490
b	L/mol	0.02447

Independiente de volumen crítico

Modelo

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

a	atmL²/mol²	1.36145
b	L/mol	0.03182

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

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)	pc (atm)	Tc (K)	Vc (L(mol)	ni
Metano	28.00	78.08	33.54	126.26	0.0901	2.7886
Etano	32.00	20.95	49.80	154.60	0.0734	0.6547
Propano	44.00	0.00	41.90	369.80	0.2030	0.0000
					n total	3.4433

R (atmL/molK) = 0.0820

Componente	Dependiente de Vc: a (atmL²/mol²)	Dependiente de Vc: b (L/mol)	yi	Independiente de Vc: a (atmL²/mol²)	Independiente de Vc: b (L/mol)	y
Metano	0.8168	0.0300	0.8099	1.3483	0.0386	1.0000
Etano	0.8049	0.0245	0.1901	1.3614	0.0318	
Propano	5.1800	0.0677	0.0000	9.2583	0.0905	

Dependiente de Vc

a_M (atmL²/mol²)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
0.8146	0.0290	36.6316	131.6485	0.0869

Independiente de Vc

a_M (atmL²/mol²)	b_M (L/mol)	pc_M (atm)	Tc_M (K)	Vc_M (L/mol)
1.3508	0.0373	36.6316	131.6485	0.0869

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2019

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

$$T_{cM} = \sum_{i=1}^{n} y_i T_{ci}$$

$$p_{cM} = \sum_{i=1}^{n} y_i p_{ci}$$

$$\bar{V}_{cM} = \sum_{i=1}^{n} y_i \bar{V}_{ci}$$

$$a_m = \left[y_{O_2} (a_{O_2})^{1/2} + y_{N_2} (a_{N_2})^{1/2} \right]^2$$

$$b_m = y_{O_2} b_{O_2} + y_{N_2} b_{N_2}$$

Independiente de $\bar{V}_c$

Aire a 300 K $p = 5$ atm

$y_{N_2} = 0.81$

$y_{O_2} = 0.19$

$n = 3.4433$

obtener volumen.

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)	3.4433
p (atm)	5
a_M ($atmL^2/mol^2$)	1.3508
b_M (L/mol)	0.0373
R (atmL/molK)	0.082

V^3	V^2	V	Cte
1	-17.069265	3.202975	-0.411362

V ideal (L)	16.9408

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

A=	1	
B=	-17.06927	
C=	3.20297	
D=	-0.41136	
Expresión	2	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	16.88097		+16.88
V_2=	0.09415	0.1245	+0.09+0.12j
V_3=	0.09415	-0.1245	+0.09-0.12j

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)	5.6011
p (atm)	5
a_M ($atmL^2/mol^2$)	1.3549
b_M (L/mol)	0.0352
R (atmL/molK)	0.082

V^3	V^2	V	Cte
1	-27.754365	8.501085	-1.675509

V ideal (L)	27.5573

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

A=	1	
B=	-27.75437	
C=	8.50109	
D=	-1.67551	
Expresión	2	decimales

	Real	Imaginaria	
V_1=	27.44686		+27.45
V_2=	0.15375	0.1934	+0.15+0.19j
V_3=	0.15375	-0.1934	+0.15-0.19j

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira UNAM FES Zaragoza 2020

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