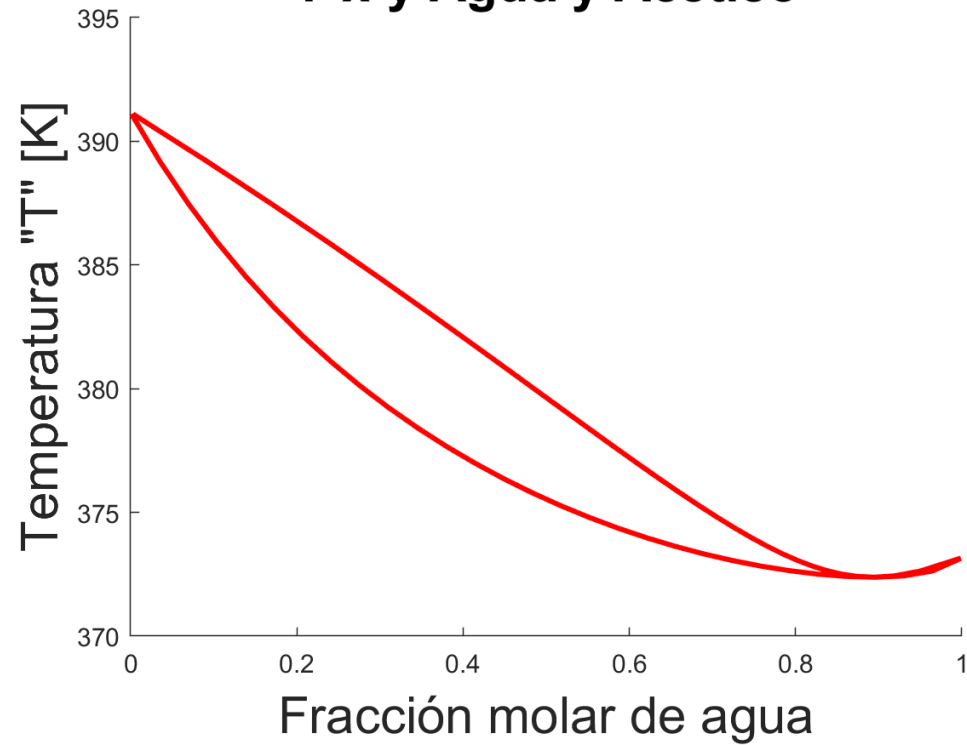


# Teoría química



T-x-y Agua y Acético



# Teoría química – Ejemplo de aplicación

Homero tenía razón



Binary azeotropes of water, b.p.=100 °C

2nd Component	b.p. of comp. (°C)	b.p. of mixture (°C)	% by weight	spéf. grav
with various <b>organic acids</b>				
formic acid	100.8	107.3	77.5	
acetic acid ‡ <sup>[5]</sup> <sup>[7]</sup>	118.1	No azeotrope		
propionic acid	141.1	99.98	17.7	1.016
butyric acid	163.5	99.94	18.4	1.007
iso-butyric acid	154.5	99.3	21	

Fuente: *la wikipedia*, niños no hagan esto en casa

# Teoría química - Repaso

Tu modelo no ajusta los datos experimentales AcOH -H2O	 Panik
Puedo usar teoría química	 Kalm
Tengo que usar teoría química	 Panik

$$y_i \widehat{\phi}_i P = z_i \hat{\zeta}_i P$$

$$\widehat{\phi}_i = \frac{z_i \hat{\zeta}_i}{y_i} \approx \frac{z_i}{y_i}$$

$$y_i \widehat{\phi}_i P = z_i P = x_i \gamma_i \phi_i^L P_i^{sat}$$

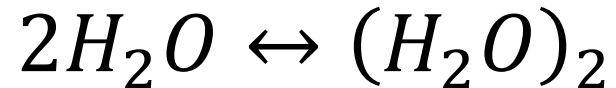
# Teoría química - Repaso

Para conocer el coeficiente de fugacidad de un puro en una mezcla que presenta desviaciones por interacción química vamos a considerar aquellas interacciones que experimenta en solitario

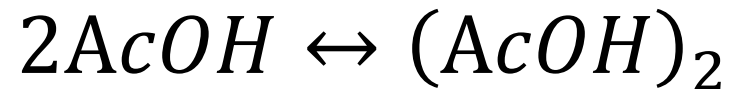
$$\phi_i^L = \phi_i^V = \phi_i^{sat}$$

$$\phi_i^{sat} = z_i \zeta_i \approx z_i$$

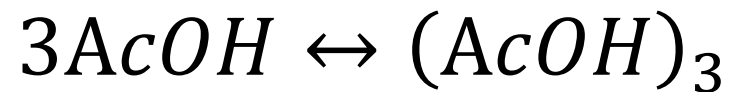
$$\text{Ya que } y_i = 1$$



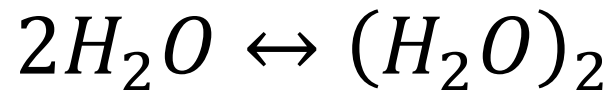
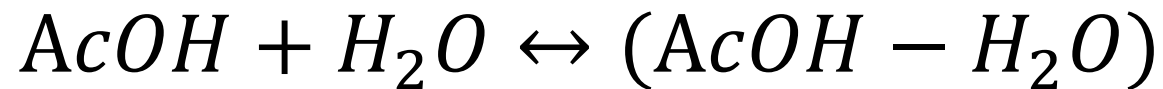
$$K_{pW2} = \frac{z_{W2}}{z_W^2} = \frac{(1 - z_W)}{z_W^2}$$



$$K_{A2}(T) = 10,108 - 3018/T$$



$$K_{A3}(T) = 18,63 - 4960/T$$



$$K_{AW}(T) = K_{W2}(T) = 6,881 - 808,2/T$$

Unidades de presión en mmHg

Mi sistema pasó de 2 componentes a 6

# Teoría química – ELV AcOH & H<sub>2</sub>O

1. AcOH
2. H<sub>2</sub>O
3. (AcOH)<sub>2</sub>
4. (AcOH)<sub>3</sub>
5. AcOH-H<sub>2</sub>O
6. (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

$$K_{pA2} = \frac{z_3}{z_1^2}$$

$$K_{pAW} = \frac{z_5}{z_1 z_2}$$

$$K_{pA3} = \frac{z_4}{z_1^3}$$

$$K_{pW2} = \frac{z_6}{z_2^2}$$



Al aplicar teoría química encontré 4 nuevas ecuaciones, pero ¿cuántas incógnitas tengo?

# Teoría química – ELV AcOH & H<sub>2</sub>O

*Incógnitas:  $T; y_1; y_2; z_1; z_2; z_3; z_4; z_5; z_6$*

$$y_i \widehat{\phi}_i P = z_i P = x_i \gamma_i \phi_i^L P_i^{sat}$$

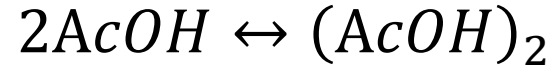
Estas son 2, de TQ tengo otras 4...

$$\sum y_i = 1 \text{ \& } \sum z_i = 1$$

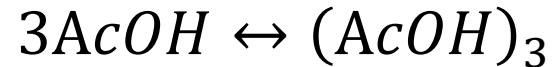
Tengo 9 incógnitas con solo 8 ecuaciones...



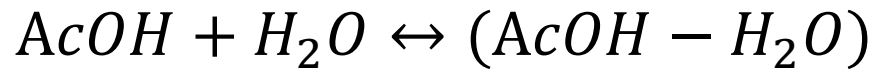
# Teoría química – Conservación de la masa



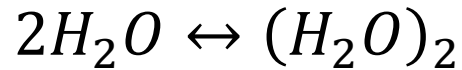
$$(AcOH)_2 = X_1$$



$$(AcOH)_3 = X_2$$



$$(AcOH - H_2O) = X_3$$



$$(H_2O)_2 = X_4$$

$$n_{AcOH} = n_{AcOH}^0 - 2X_1 - 3X_2 - X_3$$

$$n_{AcOH}^0 = n_{AcOH} + 2n_{(AcOH)_2} + 3n_{(AcOH)_3} + n_{AcOH-H_2O}$$

$$n_{H_2O} = n_{H_2O}^0 - X_3 - 2X_4$$

$$n_{H_2O}^0 = n_{H_2O} + 2n_{(H_2O)_2} + n_{AcOH-H_2O}$$



$$\frac{n_{AcOH}^0}{n_{H_2O}^0} = \frac{n_{AcOH} + 2n_{(AcOH)_2} + 3n_{(AcOH)_3} + n_{AcOH-H_2O}}{n_{H_2O} + 2n_{(H_2O)_2} + n_{AcOH-H_2O}}$$



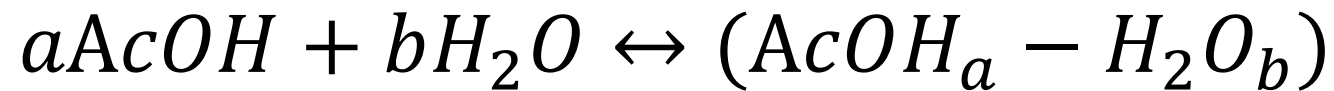
# Teoría química – Conservación de la masa

$$\frac{n_{AcOH}^0}{n_{H_2O}^0} = \frac{n_{AcOH} + 2n_{(AcOH)_2} + 3n_{(AcOH)_3} + n_{AcOH-H_2O}}{n_{H_2O} + 2n_{(H_2O)_2} + n_{AcOH-H_2O}}$$

$$\frac{y_{AcOH}}{y_{H_2O}} = \frac{z_{AcOH} + 2z_{(AcOH)_2} + 3z_{(AcOH)_3} + z_{AcOH-H_2O}}{z_{H_2O} + 2z_{(H_2O)_2} + z_{AcOH-H_2O}}$$

$$\frac{y_1}{y_2} = \frac{z_1 + 2z_3 + 3z_4 + z_5}{z_2 + 2z_6 + z_5}$$

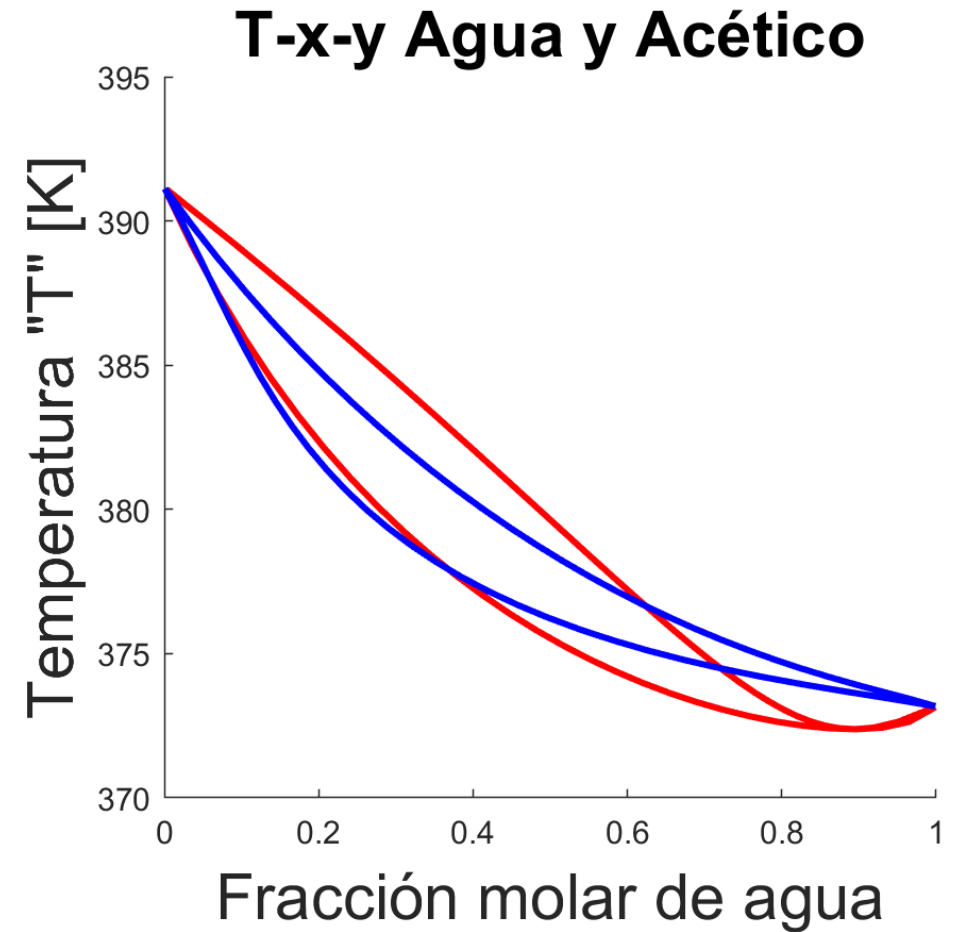
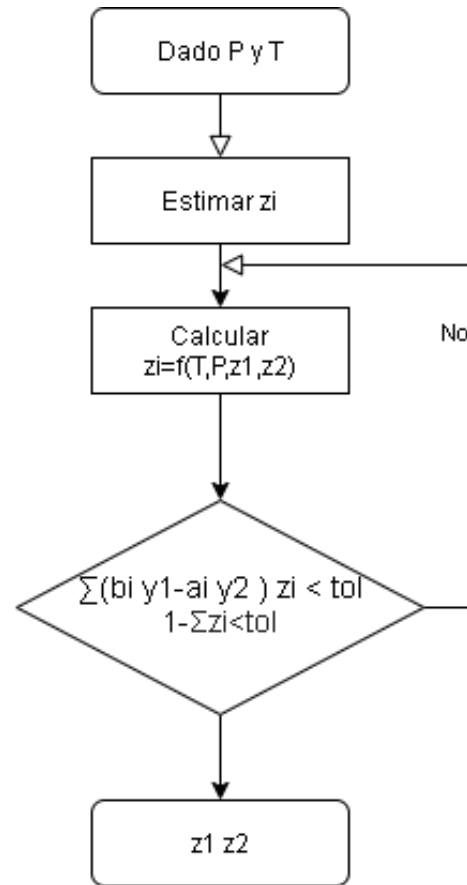
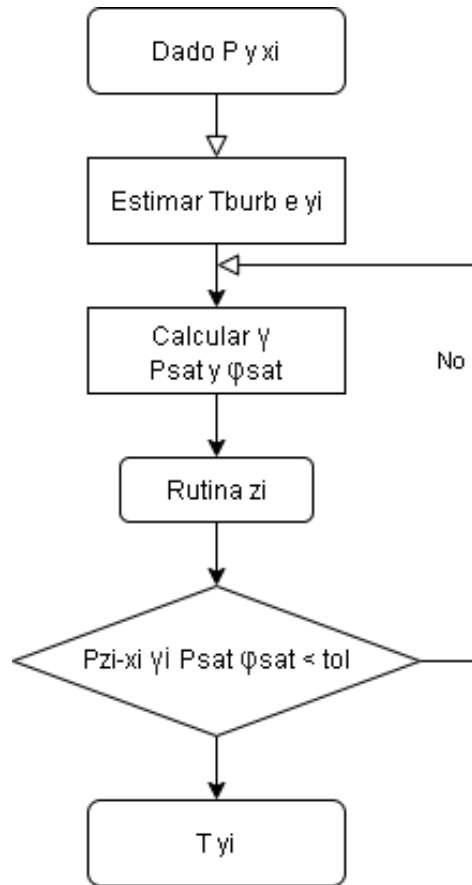
$$y_1(z_2 + 2z_6 + z_5) - y_2(z_1 + 2z_3 + 3z_4 + z_5) = 0$$



$$\sum (b_i y_1 - a_i y_2) z_i = 0$$

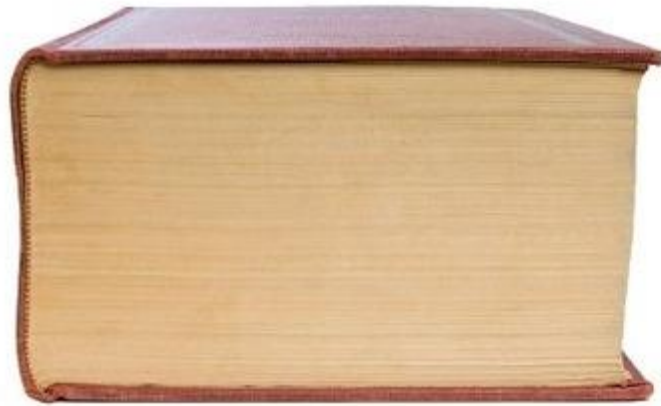


# Teoría química – Esquema de resolución



¿Preguntas?

**TEORÍA QUÍMICA**



**TQ SIN MEMES**