

Diagramas T-x-y para mesturas ideais

En ese caso estúdiaranse os diagramas e comportamento do equilibrio vapor-líquido (VLE) dunha mestura **n-hexano/n-octano**. No diagrama, a liña azul representa o límite da fase líquida (punto de burbulla) e a liña verde representa o límite da fase vapor (punto de orballo).

Mesturas binarias

Paraa unha mestura ideal binaria de A e B , a presión da fase vapor P é a suma da presión parcial dos dous compoñentes p_A e p_B . A **Lei de Raoult**, polo contrario, serve só para mesturas ideais:

$$\begin{aligned}p_A &= x_A P_A^{sat}(T) \\ p_B &= x_B P_B^{sat}(T)\end{aligned}$$

Eliminando as presións parciais e obtendo unha expresión para a presión de vapor total:

$$P = \underbrace{x_A P_A^{sat}(T)}_{p_A = y_A P} + \underbrace{x_B P_B^{sat}(T)}_{p_B = y_B P} \quad (1)$$

Para mesturas binarias, a substitucións $x_B = 1 - x_A$ e $y_B = 1 - y_A$ da unha expresión para a presión total en función da composición x_A e a temperatura:

$$P = \underbrace{x_A P_A^{sat}(T)}_{p_A = y_A P} + \underbrace{(1 - x_A) P_B^{sat}(T)}_{p_B = (1 - y_B) P} \quad (2)$$

Esta relación pódese demostrar representando P , p_A , e p_B como funcións de x_A a temperatura constante.

O seguinte paso é seleccionar unha temperatura T e avaliar e mostrar P , p_A e p_B fas funcións da fracción molar da fase líquida x_A .

Ecuación de Antoine

Os cálculos deste caderno usan a **Ecuación de Antoine** para calcular a presión de vapor de saturación para unha temperatura dada e resolve a **Ecuación de Antoine** para a temperatura de saturación dunha presión dada.

A librería **thermo** implementa un conxunto completo de datos de propiedades físicas e químicas en Python.

A presión de saturación do compoñente i calcúlase mediante a ecuación de **Antoine**:

$$p_i^{sat} = 10^{\left(A_i - \frac{B_i}{T + C_i}\right)} \quad (3)$$

onde $i = 1$ para o **n-hexano** e $i = 2$ para o **n-octano**, p_i^{sat} é a presión de saturación (bar), A_i , B_i e C_i son as constantes de **Antoine**, e T a temperatura (°C).

A lei de **Raoult** úsase para calcular as presións do punto de burbulla e do punto de orballo por medio do emprego dos factores k :

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{p_i^{sat}}{p} \quad (4)$$

onde y_i é a fracción molar do compoñente i na fase vapor, e $y_1 + y_2 = 1$, x_i a fracción molar do compoñente i na fase líquida, e $x_1 + x_2 = 1$, e p é a presión total (bar).

A presión do punto de burbulla calcúlase usando a seguinte ecuación:

$$\sum k_i x_i = 1 \quad (5)$$

$$p = x_1 p_1^{sat} + x_2 p_2^{sat} \quad (6)$$

A presión do punto de orballo calcúlase usando a seguinte ecuación:

$$\sum \frac{y_i}{k_i} = 1 \quad (7)$$

$$p = \left(\frac{y_1}{p_1^{sat}} + \frac{y_2}{p_2^{sat}} \right) \quad (8)$$

Bibliografía

[1] J. R. Elliott and C. T. Lira, *Introductory Chemical Engineering Thermodynamics*, New York: Prentice Hall, 2012 pp. 372–377.

Caso práctico

1. Representa o diagrama P-x-y para unha temperatura de 115 °C
2. Representar o diagrama P-x-y para unha presión de 1.5 bar.