



Universidad de Alicante

# Determinació de l'entalpia de vaporització de l'aigua

Estudiant:

Víctor Mira Ramírez

Professor:

Ángel Ávila Freire

Universitat d'Alacant  
Facultat de Ciències: Departament de Física Aplicada  
Tècniques experimentals I

## Resum

L'objectiu d'aquest informe es verificar l'equació de Clausius-Clapeyron, determinar experimentalment l'entalpia de vaporització molar de l'aigua i finalment comparar l'obtenció experimental de la temperatura d'ebullició de l'aigua (a pressió atmosfèrica) amb l'equació semi-empírica de Antoine.

## Índex

<b>1</b>	<b>Introducció i motivació</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Marc teòric</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Procediment experimental</b>	<b>4</b>
3.1	Material	4
3.2	Metodologia	4
<b>4</b>	<b>Resultats i discussió</b>	<b>5</b>
4.1	Càlcul de la pressió de vapor de l'aigua	5
4.2	Verificació de l'equació de Clausius-Clapeyron	7
4.3	Comparació amb l'equació de Antoine	8
<b>5</b>	<b>Possibilitats de millora</b>	<b>9</b>
<b>6</b>	<b>Conclusions</b>	<b>9</b>
<b>7</b>	<b>Apèndixs</b>	<b>10</b>
7.1	Mesures amb baròmetre de mercuri	10
7.2	Dades experimentals	11
7.3	Càlcul d'errors	11
7.4	Comparació d'entalpies de vaporització	12
7.5	Càlcul de les gràfiques	12
<b>8</b>	<b>Referències</b>	<b>14</b>

# 1 Introducció i motivació



Els objectius d'aquest informe estan definits a el *abstract*, estudiarem la relació de la pressió de vapor amb la temperatura per a verificar l'equació de Clausius-Clapeyron. Esta equació facilitarà el càlcul de tant l'entalpia de vaporització com de la temperatura d'ebullició de l'aigua. A més, finalment compararem les dades experimentals amb l'aproximació de Antoine.

La motivació principal és l'obtenció de dades experimentals més importants (des d'un punt de vista termodinàmic) del líquid més abundant al nostre planeta, l'aigua. I es que dades com el punt d'ebullició de l'aigua, que a primera vista puguen semblar obvi- es o d'escassa utilitat, han sigut molt importants per al desenvolupament industrial de la humanitat. Per eixemple, la certesa de la mesura en relació a la pressió es clau per a estalviar energia esterilitzant productes mitjançant l'ebullició d'aigua.

A fi de profunditzar en aquests resultats i aportar conclusions, realitzem aquest breu estudi sobre el tema.

## 2 Marc teòric

A aquest apartat discutirem les bases teòriques de l'inform en profunditat, començant amb l'energia lliure de Gibbs, denotada  $G$ .

$$G \equiv H - TS \quad (1)$$

L'energia lliure de Gibbs,  $G$ , es un potencial termodinàmic que pot ser utilitzat per a calcular el màxim del treball reversible que pot realitzar-se mitjançant un sistema termodinàmic, a una temperatura y pressió constants.

Cal destacar que la variació d'aquest potencial soles dependrà dels estats inicial i final, no del camí entre els estats. A més, el treball realitzat es sempre menor a  $G$  i soles serà igual si ens trobem a un procés reversible al qual no n'hi ha treball d'expansió.

Ara, continuarem definint el potencial químic,  $\mu$ .

$$\mu_i \equiv \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_{i \neq j}} = \left( \frac{\partial F}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_{i \neq j}} = \left( \frac{\partial H}{\partial n_i} \right)_{S,P,n_{i \neq j}} = \left( \frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{S,V,n_{i \neq j}} \quad (2)$$

El subíndex de l'equació ens indica que el potencial químic està associat a cada espècie. Per tant, el que  $\mu$  representa es com va a canviar l'energia del sistema si augmentem el nombre de partícules d'una especie específica del sistema, pero sense modificar la resta de variables d'estat. Podem relacionar  $G$  i  $\mu$  mitjançant la definició d'entalpia.

$$G = H - TS = TS + \sum_{i=1}^e \mu_i dn_i - TS = \sum_{i=1}^e \mu_i dn_i \quad (3)$$

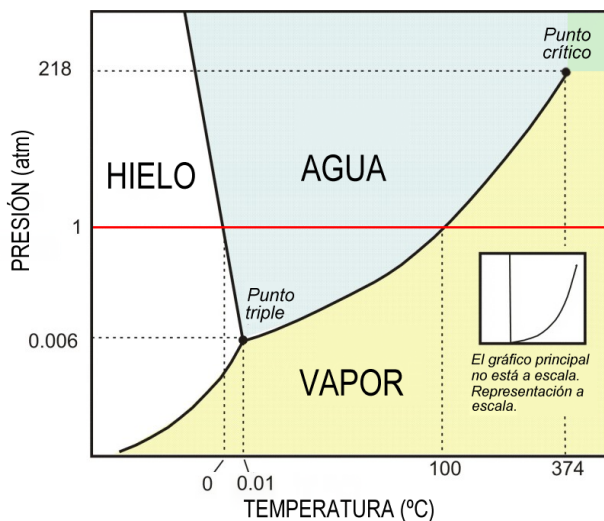


Figura 1: Diagrama de fase de l'aigua

Anem a profunditzar en el canvi de fase. Podem observar que la pendent de la recta del canvi de fase sòlid-líquid es negativa, es a dir que l'aigua sòlida es menys densa que la líquida. Anem a tractar de mesurar la variació d'entalpia molar  $\Delta \overline{H}$ , a la transició de líquid-vapor.

Com el potencial químic es manté constant a la transició, podem dir que soles depenen de pressió i temperatura.  $\mu_v(P, T) = \mu_l(P, T)$  Primerament, realitzem un canvi infinitesimal a la pressió i temperatura, que produirà un canvi infinitesimal a l'energia lliure de Gibbs. A més, com el nostre sistema soles pot produir treball degut a un canvi de volum arribem a que

$$d\bar{G} = \bar{V}dP + \bar{S}dT$$

comprovem que el canvi infinitesimal també manté que  $d\mu_v(P,T) = d\mu_l(P,T)$  Com el potencial lliure de Gibbs molar coincideix amb el potencial químic quan estem al canvi de fase, deduïm que:

$$\bar{V}_v dP + \bar{S}_v dT = \bar{V}_l dP + \bar{S}_l dT \iff \frac{dP}{dT} = \frac{\bar{S}_v - \bar{S}_l}{\bar{V}_v - \bar{V}_l} = \frac{\Delta \bar{S}_v}{\Delta \bar{V}_v}$$

Si apliquem la següent relació  $\Delta \bar{S} = \frac{\Delta \bar{H}}{T}$  arribem a l'equació de Clausius-Clapeyron on  $v$  denota vaporització.

$$\frac{dP_v}{dT} = \frac{\Delta \bar{H}_v}{T \Delta \bar{V}_v}$$

## 3 Procediment experimental

### 3.1 Material

Ara, descriurem breument el material necessari per a realitzar l'experiment:

- Vas de precipitats 1L
- Tub d'assaig (amb divisions de 1mL)
- Calefactor elèctric
- Agitador magnètic
- Termòmetre tipus termoparell
- Aigua destil·lada bullida
- Gel
- Xeringa

### 3.2 Metodologia

L'experiment realitzat en el laboratori va consistir d'un recinte tancat (tub d'assaig donat la volta) on n'hi ha un gas (aire) en contacte amb un líquid (aigua destil·lada bullida) com podem observar a la figura.

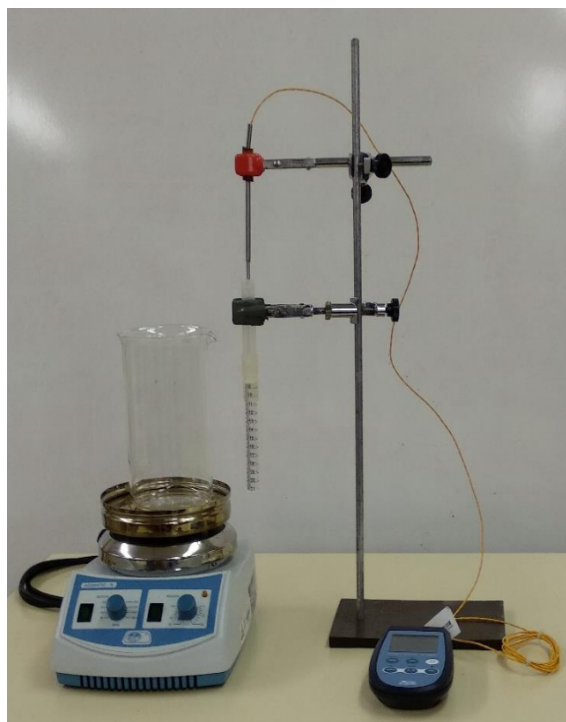


Figura 2: Disposició experimental

A la figura 2 es mostra la disposició del material experimental que es va utilitzar. La fase gasosa, que es troba a l'interior del tub d'assaig, consisteix en una quantitat fixa d'aire i una variable de vapor d'aigua que variarà amb la temperatura de tot el sistema. Seguidament, es descriu com mesurar el volum de la fase gasosa en funció de la temperatura, que ens permetrà obtenir la pressió de vapor de l'aigua. Després d'aplicar l'equació de Clausius-Clapeyron obtindrem l'entalpia de vaporització.

En primer lloc s'ompli el vas de precipitat amb aigua destil·lada i es col·loca sobre el calefactor. A continuació, s'introdueix aigua destil·lada bullida en el tub d'assaig fins aproximadament  $\frac{2}{3}$  del volum total, es tapa amb un dit l'extrem, i s'inverteix el tub d'assaig. Coloquem el tub en aquesta posició dins del vas de precipitat, amb cura de que quede completament submergit dins de l'aigua. S'ha d'utilitzar aigua destil·lada bullida prèviament per a omplir el tub d'assaig amb la finalitat d'evitar les bombolles d'aire que normalment són dissoltes a l'aigua. D'aquesta manera a l'interior del tub d'assaig es forma una càmera amb una mescla gasosa d'aire i vapor d'aigua.

Aïllem el vas de precipitat de l'exterior, per a garantir l'equilibri tèrmic, i el tapem amb una planxa de poliuretà, a través de la qual es fa passar un termoparell que permet mesurar la temperatura de l'aigua i de la mescla gasosa de l'interior del tub d'assaig. El termoparell s'ha de situar de manera que l'extrem lliure es trobe pròxim al tub d'assaig i cap a la meitat d'aquest. S'encén el calefactor, al 40 – 50% de la seua potència màxima, fins que l'aigua arribe a una temperatura aproximada de 65°C. L'agitador ha d'estar activat a  $200 \frac{\text{rev}}{\text{minut}}$  per a mantenir una distribució de temperatures homogènia a tot el sistema.

En aconseguir la temperatura de  $65^{\circ}\text{C}$ , es deté el calefactor, encara que l'agitador ha de romandre actuant en tot moment. Llavors l'aigua es refredarà per convecció tèrmica. És important desconnectar el calefactor una vegada arribem a  $65^{\circ}\text{C}$  ja que el vidre del tub es trencarà a temperatures superiors. Seguidament es faran mesures del volum  $V$  de la cambra gasosa de l'interior del tub d'assaig en funció de la temperatura  $T$  per a totes les divisions possibles de l'escala del tub, en un rang entre  $65^{\circ}\text{C}$  i  $50^{\circ}\text{C}$ .

La mesura del volum del gas del tub d'assaig es fa per visualització directa del menisc de l'aigua a l'interior del tub d'assaig. La pressió total  $P_{\text{mescla}}$  del sistema gasós de l'interior del tub d'assaig es considera aproximadament constant i igual a la pressió atmosfèrica,  $P_0$ , en l'interval de temperatures utilitzat en aquest experiment, menyspreant el pes de la columna d'aigua del tub. La pressió atmosfèrica al laboratori es mesura amb un baròmetre de mercuri. (veure apèndix 7.1)

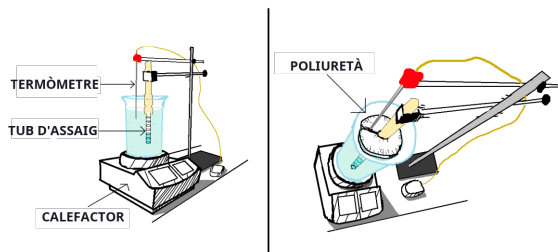


Figura 3: Esquema del material

## 4 Resultats i discussió

Procedim ara a exposar els resultats experimentals. Seguint els objectis parlarem de la medició de la pressió de vapor de l'aigua, de l'equació de Clausius-Clapeyron i de Antoine.

### 4.1 Càlcul de la pressió de vapor de l'aigua

El primer pas lògic es calcular els valors de la pressió de vapor associats a les mesures experimentals. La pressió del laboratori  $P_0$  va ser mesurada amb un baròmetre de Torricelli (veure apèndix 7.1) i vam obtenir un valor de  $P_0 = (101820 \pm 7)\text{Pa}$ . Les taules amb les dades experimentals de la temperatura i el volum es troben a l'apèndix 7.2.

Calculem ara la pressió de vapor juntament amb el seu error corresponent mitjançant l'equació següent:

$$P_v = P_0 \left( 1 - \frac{V_0 T}{T_0 V} \right)$$

Els errors estan descrits a l'apèndix 7.3. Ara, grafiquem les dades obtingudes.

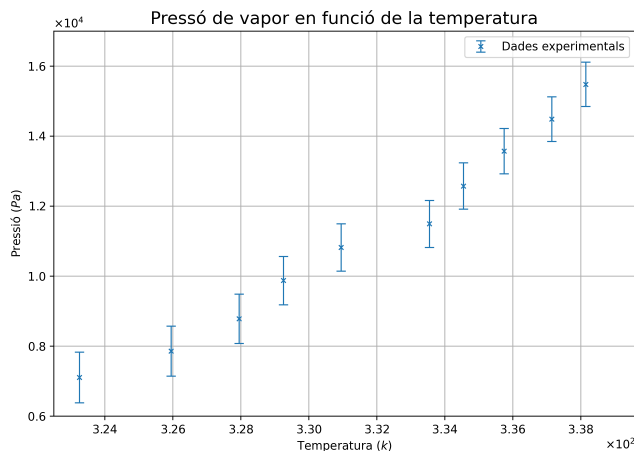


Figura 4: Pressió de vapor de l'aigua en funció de la temperatura

Cap destacar que no podem veure l'error en la temperatura per ser molt petit en comparació amb l'error en la pressió. Per a la realització d'aquesta gràfica, hem suposat que la pressió de vapor de l'aigua a 0°C era de 0Pa. Però en la realitat sabem que el valor es de 610Pa. Hem de modificar 4.1 per a tindre en compte aquest apunt.

$$P_v = P_0 - \frac{(P_0 - 610) V_0 T}{T_0 V}$$

Graficant altra vegada, però amb les dades modificades,

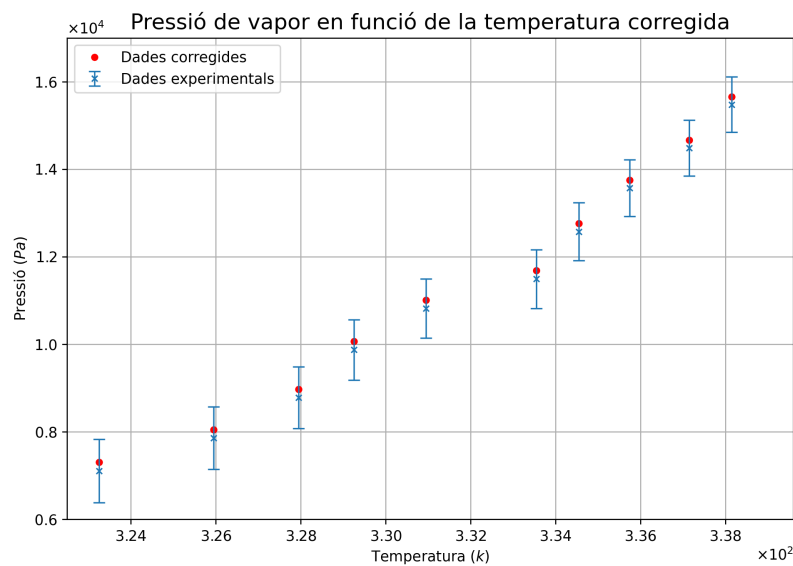


Figura 5: Error al suposar que  $P_v = 0$  en  $T = 0^\circ\text{C}$

Podem observar la diferència amb les nostres dades és quasi igual a tots els punts, i sempre dins de les barres d'error representades.

## 4.2 Verificació de l'equació de Clausius-Clapeyron

Per a realitzar aquesta secció, necessitem primerament conèixer l'equació de Clausius-Clapeyron

$$\log\left(\frac{P_v}{P_0}\right) = \frac{\Delta\overline{H}_v}{R} \left( \frac{1}{T_{0\text{ eb}}} - \frac{1}{T} \right)$$

Com es trata d'una relació logarítmica, utilitzarem paper logarítmic per a la realització de la gràfica corresponent. Tindrem  $\left(\frac{P_v}{P_0}\right)$  a l'eix  $y$  amb el seu error corresponent, i en el eix  $x$   $\frac{1}{T}$  també amb el seu error corresponent però no l'apreciarem ja que es massa petit. Linealitzant les dades i obtenint la pendent, tindrem un valor per a la relació  $\log\left(\frac{P_v}{P_0}\right)$ . Podem obtenir també l'increment d'entalpia molar de vaporització de l'aigua, així com la temperatura d'ebullició de l'aigua a la pressió atmosfèrica del laboratori.

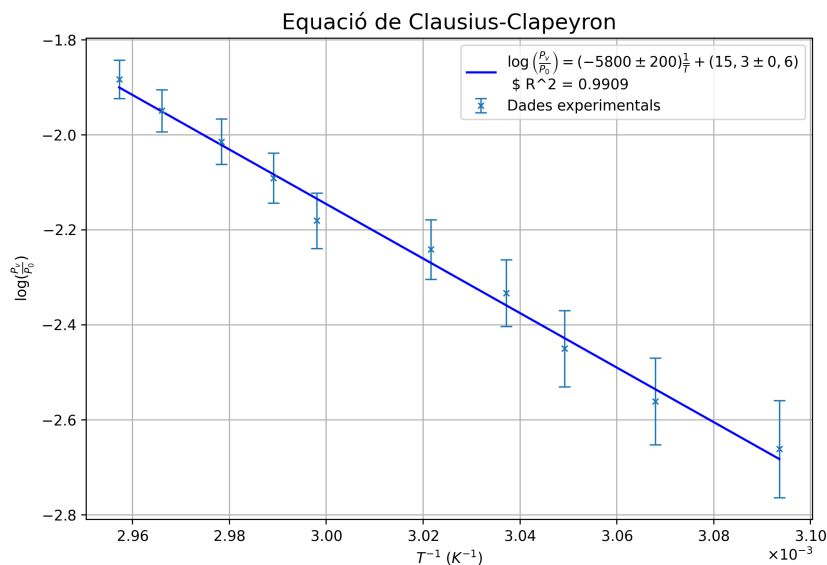


Figura 6: Equació de Clausius-Clapeyron

Obtenim un  $R^2$  molt proper a 1, que ens certifica que les dades poden aproximar-se amb una recta. Fixant-nos a l'equació 4.2 podem realitzar els següents càlculs.

$$\log\left(\frac{P_v}{P_0}\right) = (-5600 \pm 200) \frac{1}{T} + (15.3 \pm 0.6) = \frac{\Delta\overline{H}_v}{R} \left( \frac{1}{T_{0\text{ eb}}} - \frac{1}{T} \right)$$

D'aquest resultat podem obtenir el següent.

$$-5800 \pm 200 = \frac{\Delta\overline{H}_v}{R} \qquad 15.3 \pm 0.6 = \frac{\Delta\overline{H}_v}{RT_{0\text{ eb}}}$$

Per a finalment obtenir que:

$$\Delta\overline{H}_v = -48200 \pm 1700 \text{ J/mol} \qquad T_{0\text{ eb}} = 380 \pm 20 \text{ K}$$

Els errors d'aquests càlculs son a l'apèndix 7.3, però cal destacar els errors relatius de ambdós, 3.5% per a l'entalpia molar de vaporització de l'aigua, i 5.2% per a la temperatura. Observem com l'error de la temperatura es més prominent que el de l'entalpia, encara que ambdós son relativament grans.



### 4.3 Comparació amb l'equació de Antoine

A aquesta secció anem a comparar les dades experimentals amb l'equació semi-empírica de Antoine. Aquesta equació té una forma diferent per a cada rang de temperatures, i específicament al nostre rang de temperatures (amb  $P$  en kPa i la resta en unitats del SI):

$$\log(P_v) = 16.573 - \frac{3988.842}{T - 39.47}$$

Ara, graficarem aquesta aproximació amb les nostres dades experimentals per a obtindre la següent gràfica: Els nostres valors disten molt de l'equació de Antoine com podem observar. Això ens indica que n'hi ha un

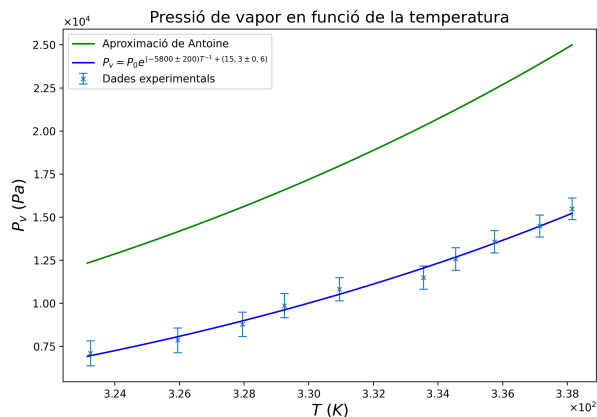


Figura 7: Comparació experimental amb Antoine

error a una suposició, tot i que la forma de l'aproximació es similar.

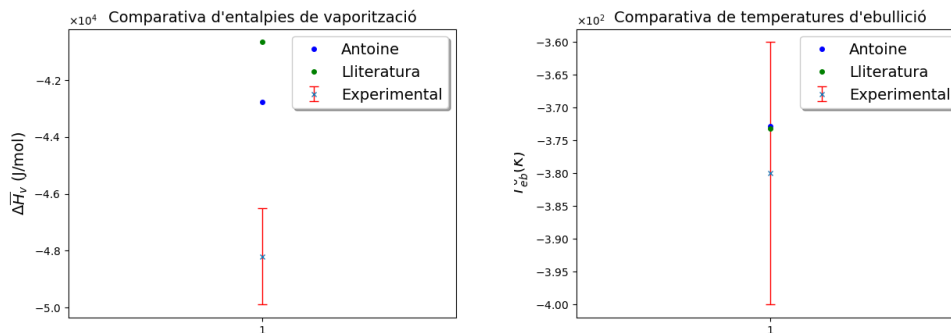
Ara, anem a calcular l'entalpia de vaporització i la temperatura d'ebullició desde l'equació semi-empírica de Antoine i arribem a la conclusió de que és una aproximació molt bona.

Aplicant el mateix desenvolupament matemàtic que a l'apartat de l'equació de Clausius-Clapeyron, obtenim els valors de:

$$\Delta \bar{H}_v = -42767 \pm 8 \text{ J/mol}$$

$$T_{0 \text{ eb}} = 372 \pm 0.014 \text{ K}$$

Comprovem que els errors son molt menuts en comparació amb els obtinguts experimentalment. La temperatura d'ebullició entra dins de l'error que hem marcat, però l'entalpia de vaporització s'allunya massa de les nostres barres d'error. Això torna a indicar-nos que n'hi ha una suposició que no es correcta.



## 5 Possibilitats de millora

En aquesta secció profunditzarem en les causes dels errors experimentals, i com suprimir-los o minimitzar-los el màxim possible. Els errors més rellevants són l'error instrumental, l'error per la suposició de que la pressió de vapor es nula a  $0^{\circ}\text{C}$  i l'error per la suposició de que el vapor d'aigua és un gas ideal. L'error humà també és present però no hauria de ser molt significatiu sempre i quan no n'hi haja un error greu.

Si calculem els errors relatius, com està detallat a l'apèndix 7.3 observem que l'error en el volum és el major de tots que, juntament amb la suposició de que la pressió de vapor es nula a  $0^{\circ}\text{C}$  són els més significatius. Probablement una forma més sofisticada i precisa de mesurar el volum ajudaria a que els valors experimentals s'apoparen més a l'equació semi-empírica de Antoine.

## 6 Conclusions

Al nostre informe hem calculat primerament la pressió de vapor d'aigua, i amb aquesta dada, hem calculat la temperatura d'ebullició de l'aigua a pressió atmosfèrica, juntament amb l'entalpia de vaporització molar de l'aigua. La suposició de que l'aigua en estat gasós és un gas ideal i de que la pressió de vapor de l'aigua a  $0^{\circ}\text{C}$  és 0, han introduït unes imprecisions considerables.

## 7 Apèndixs

### 7.1 Mesures amb baròmetre de mercuri



Evangelista Torricelli (1608-1647) va ser un físic italià que va inventar el baròmetre de mercuri, a més de demostrar que era possible tindre un recipient sense contingut al extraure l'aire del recipient. A la figura 8 podem veure aquest tipus de baròmetre, que es el utilitzat al laboratori.

Per a fer les mesures, en primer lloc s'ha de comprovar que la punta de la part inferior del baròmetre toca lleugerament el mercuri. A continuació, s'ha d'enrasar el menisc superior del mercuri amb el caragol superior, la pressió (en dm de Hg) es llegirà en l'escala de la dreta corresponent al valor del zero de la part superior del caragol metàl·lic. A aquesta pressió, hem de restar-li la correcció corresponent a la temperatura que el fabricant ens facilita amb la taula de la figura 9.

Figura 8: Baròmetre de Torricelli

CORRECCION DE LECTURAS BAROMETRICAS CON LA TEMPERATURA											
t (°C)	670	680	690	700	710	720	730	740	750	760	770
	(Columna barométrica en mm Hg)										
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	0.11	0.11	0.11	0.11	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.13
3	0.22	0.22	0.23	0.23	0.23	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25	0.26
4	0.33	0.33	0.34	0.34	0.34	0.35	0.36	0.36	0.37	0.37	0.38
5	0.44	0.44	0.45	0.46	0.46	0.47	0.48	0.48	0.49	0.50	0.50
6	0.55	0.56	0.56	0.57	0.58	0.59	0.60	0.60	0.61	0.62	0.63
7	0.66	0.67	0.68	0.69	0.70	0.71	0.71	0.72	0.73	0.74	0.75
8	0.77	0.78	0.79	0.80	0.81	0.82	0.83	0.85	0.86	0.87	0.88
9	0.87	0.89	0.90	0.91	0.93	0.94	0.95	0.97	0.98	0.99	1.01
10	0.98	1.00	1.01	1.03	1.04	1.06	1.07	1.09	1.10	1.12	1.13
11	1.09	1.11	1.13	1.14	1.16	1.17	1.19	1.21	1.22	1.24	1.26
12	1.20	1.22	1.24	1.26	1.27	1.29	1.31	1.33	1.35	1.36	1.38
13	1.31	1.33	1.35	1.37	1.39	1.41	1.43	1.45	1.47	1.49	1.51
14	1.42	1.44	1.46	1.48	1.50	1.53	1.55	1.57	1.59	1.61	1.63
15	1.53	1.55	1.57	1.60	1.62	1.64	1.67	1.69	1.71	1.73	1.76
16	1.64	1.66	1.69	1.71	1.74	1.76	1.78	1.81	1.83	1.86	1.88
17	1.75	1.77	1.80	1.82	1.85	1.88	1.90	1.93	1.96	1.98	2.01
18	1.86	1.88	1.91	1.94	1.97	1.99	2.02	2.06	2.08	2.10	2.13
19	1.96	1.99	2.02	2.05	2.08	2.11	2.14	2.17	2.20	2.23	2.26
20	2.07	2.10	2.13	2.17	2.20	2.23	2.26	2.29	2.32	2.35	2.38
21	2.18	2.21	2.25	2.28	2.31	2.34	2.38	2.41	2.44	2.47	2.51
22	2.29	2.32	2.36	2.39	2.43	2.46	2.50	2.53	2.56	2.60	2.63
23	2.40	2.43	2.47	2.51	2.54	2.58	2.61	2.66	2.69	2.72	2.76
24	2.51	2.54	2.58	2.62	2.66	2.69	2.73	2.77	2.81	2.84	2.88
25	2.62	2.66	2.69	2.73	2.77	2.81	2.86	2.89	2.93	2.97	3.01
26	2.72	2.77	2.81	2.85	2.89	2.93	2.97	3.01	3.05	3.09	3.13
27	2.83	2.88	2.92	2.96	3.00	3.04	3.09	3.13	3.17	3.21	3.26
28	2.94	2.99	3.03	3.07	3.12	3.16	3.20	3.25	3.29	3.34	3.38
29	3.05	3.10	3.14	3.19	3.23	3.28	3.32	3.37	3.41	3.46	3.51
30	3.16	3.21	3.25	3.30	3.35	3.39	3.44	3.49	3.54	3.58	3.63
31	3.27	3.32	3.36	3.41	3.46	3.51	3.56	3.61	3.66	3.71	3.76
32	3.37	3.43	3.48	3.53	3.58	3.63	3.68	3.73	3.78	3.83	3.88
33	3.48	3.54	3.59	3.64	3.69	3.74	3.79	3.85	3.90	3.95	4.00
34	3.59	3.64	3.70	3.75	3.81	3.86	3.91	3.97	4.02	4.07	4.13
35	3.70	3.75	3.81	3.87	3.92	3.98	4.03	4.09	4.14	4.20	4.25
36	3.81	3.86	3.92	3.98	4.03	4.09	4.15	4.21	4.26	4.32	4.38

Figura 9: Taula de correcció del baròmetre de Torricelli

## 7.2 Dades experimentals

A la taula ?? podem veure les mesures experimentals tant de la temperatura com del volum del sistema termodinàmic.

Taula 1: Dades experimentals

$(T \pm 0.05) \text{ K}$	$(V \pm 0.05) \cdot 10^{-6} \text{ m}^3$
65	7
64	6.9
62.6	6.8
61.4	6.7
60.4	6.6
57.8	6.5
56.1	6.4
54.8	6.3
52.8	6.2
50.1	6.1

## 7.3 Càlcul d'errors

A aquest apèndix anem a calcular els errors, començant primerament amb els errors instrumentals, que seran:

$$\mu(T) = \mu(T_0) = \frac{0.05}{\sqrt{3}} K \quad \mu(V) = \mu(V_0) = \frac{0.05}{\sqrt{3}} \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \quad \mu(P) = \frac{7}{\sqrt{3}} \text{ Pa}$$

i amb propagació d'errors arribar a:

$$\mu(P_v) = \sqrt{\left(\left(1 - \frac{V_0 T}{T_0 V}\right) \mu(P_0)\right)^2 + \left(\frac{P_0 V_0 T}{T_0 V^2} \mu(V)\right)^2 + \left(\frac{P_0 V_0}{T_0 V} \mu(T)\right)^2 + \left(\frac{P_0 T}{T_0 V} \mu(V_0)\right)^2 + \left(\frac{P_0 V_0 T}{T_0^2 V} \mu(T_0)\right)^2}$$

Aplicant la fórmula al les dades experimentals, obtenim la següent taula:

Taula 2: Dades experimentals amb errors

$(T \pm 0.05) \text{ K}$	$P_v \text{ Pa}$
65.00	$(154 \pm 6) \cdot 10^2$
64.00	$(144 \pm 6) \cdot 10^2$
62.60	$(135 \pm 6) \cdot 10^2$
61.40	$(125 \pm 7) \cdot 10^2$
60.40	$(114 \pm 7) \cdot 10^2$
57.80	$(107 \pm 7) \cdot 10^2$
56.10	$(98 \pm 7) \cdot 10^2$
54.80	$(87 \pm 7) \cdot 10^2$
52.80	$(78 \pm 7) \cdot 10^2$
50.10	$(70 \pm 7) \cdot 10^2$

## 7.4 Comparació d'entalpies de vaporització

A aquest apèndix anem a comparar les entalpies de vaporització de diverses substàncies, i observem que l'aigua es la substància amb menor entalpia de vaporització i anàlogament l'heli té una entalpia molt alta. Aquests valors ens indiquen la quantitat d'energia que hem d'aplicar a les substàncies per a que canvien de fase.

Taula 3: Entalpies de vaporització

	$\Delta \bar{H}_v \text{ J/mol}$
Aigua	-40656
Metanol	-35300
Acetona	-32000
Butano	-21000
Hidrogen	-460
Heli	-84.5

## 7.5 Càlcul de les gràfiques

A aquest apèndix trobem el codi que he utilitzat per a fer les gràfiques

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import numpy as np
3 import scipy.stats as scis
4 from numpy import sqrt,exp
5
6 vol = np.array([7,6.9,6.8,6.7,6.6,6.5,6.4,6.3,6.2,6.1]) * 10**(-6)
7 errVol = (0.1*10**(-6))/(12**(1/2))
8 temp = 273.15 + np.array([65,64,62.6,61.4,60.4,57.8,56.1,54.8,52.8,50.1])
9 errTemp = (0.1)/(12**(1/2))
10
11 t0=0.3+273.15
12 v0=4.8*10**(-6)
13 tlab = 22.2+273.15
14 plab = 101820
15 errPlab = 13/(12**(1/2))
16 R = 8.314
17
18 err1 = ((1 - (v0/t0)*(temp/vol))*errPlab)
19 err2 = ((plab*v0*temp*errVol)/(t0*vol*vol))
20 err3 = ((plab*v0*errTemp)/(t0*vol))
21 err4 = ((plab*temp*errVol)/(t0*vol))
22 err5 = ((plab*v0*temp*errTemp)/(t0*t0*vol))
23
24 """Presion de Vapor"""
25 P_v = plab*(1 - (v0/t0)*temp/vol)
26 errpv = sqrt(err1**2 + err2**2 + err3**2 + err4**2 + err5**2)
27 print(plab,v0,t0,temp,vol)
28
29 P = np.polyfit(temp,P_v,1)
30 plt.figure(figsize=(9,6),dpi=250)
31 plt.title("Pressio de vapor en funcio de la temperatura", fontsize = 15)
32 x = np.linspace(temp[0],temp[-1])
33 plt.errorbar(temp,P_v,yerr=errpv, fmt='o',label='Dades experimentals',
34 ms=4,marker='x',elinewidth = 1, capsize = 4, capthick = 1,)
35 #plt.plot(x,np.polyval(P,x),label='Linealizacion',color = 'r')
36 plt.legend(loc='best')
37 plt.grid()
38 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
39 plt.ylim(0.6*10**(4),1.7*10**(4))
40 plt.xlim(3.225*10**(2),3.396*10**(2))
41 plt.xlabel('Temperatura $(K)$')
42 plt.ylabel('Pressio $(Pa)$')
```

```

43
44 ajuste = scis.linregress(P_v,vol)
45 print('$R^2 =$',round(ajuste.rvalue,4))
46 plt.savefig('Presion de vapor.png')
47
48 plt.figure(figsize=(9,6),dpi=250)
49 plt.title("Pressio de vapor en funcio de la temperatura corregida", fontsize = 15)
50 x = np.linspace(temp[0],temp[-1])
51 plt.plot(temp, plab-((plab-211)*v0*temp)/(t0*vol),"ro", ms = 4,label = "Dades corregides")
52 plt.errorbar(temp,P_v,yerr=errpv, fmt='o',label='Dades experimentals',
53 ms=4,marker='x',elinewidth = 1, capsize = 4, capthick = 1,)
54 #plt.plot(x,np.polyval(P,x),label='Linealizacion',color = 'r')
55 plt.legend(loc='best')
56 plt.grid()
57 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
58 plt.ylim(0.6*10**(4),1.7*10**(4))
59 plt.xlim(3.225*10**(2),3.396*10**(2))
60 plt.xlabel('Temperatura $(K)$')
61 plt.ylabel('Pressio $(Pa)$')
62 plt.savefig('Presion de vapor corregida.png')
63
64 """Ecuacion de Clausius-Clapeyron"""
65
66 T = temp
67 R = scis.linregress(1/temp,np.log(P_v/plab)).rvalue
68 print('$R^2 =$',round(R**2,4))
69 R = R**2
70 errCl = np.sqrt((errpv/P_v)**2+(errPlab/plab)**2)
71
72
73 plt.figure(figsize=(9,6),dpi=250)
74 plt.errorbar(1/temp,np.log(P_v/plab), marker='x',yerr=errCl, fmt = 'o', ms=4,
75 elinewidth = 1, capsize = 4, capthick = 1, label = "Dades experimentals")
76 plt.title("Equacio de Clausius-Clapeyron", fontsize = 15)
77 plt.xlabel('$T^{-1}$ $(K^{-1})$')
78 plt.ylabel('$\log(\frac{P_v}{P_0})$')
79 label = "$\log(\frac{P_v}{P_0}) = \left(-5800 \pm 200\right) + \frac{1}{T} + \left(15,3 \pm 0,6\right)$"
80 plt.plot(1/T,np.polyval(np.polyfit(1/temp,np.log(P_v/plab),1),1/temperature),"b",
81 label = label)
82 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
83 plt.legend(loc='best')
84 plt.grid()
85 plt.savefig('Clausius-Clapeyron.png')
86
87
88 """Antoine"""
89 def Antoine(t):
90     return 1000*exp(16.573 - (3988.842)/(t-39.47))
91
92 def lineal(t):
93     return plab * exp(np.polyval(np.polyfit(1/temp,np.log(P_v/plab),1),1/t))
94 t =273.15 + np.linspace(50,65,100)
95
96 plt.figure(figsize=(9,6),dpi=250)
97 plt.errorbar(temp,P_v,yerr=errpv, fmt='o',label='Dades experimentals',
98 ms=4,marker='x',elinewidth = 1, capsize = 4, capthick = 1,)
99 plt.plot(t,Antoine(t),"g",label = "Aproximacio de Antoine")
100 plt.plot(t,lineal(t),"b", label = "$P_v = P_0 e^{\left(-5800 \pm 200\right) T^{-1} + (15,3 \pm 0,6)}$")
101 plt.title("Pressio de vapor en funcio de la temperatura", fontsize = 15)
102 plt.xlabel('$T$ $(K)$', fontsize = 15)
103 plt.ylabel('$P_v$ $(Pa)$', fontsize = 15)
104 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
105 plt.legend(loc='best')
106 plt.savefig('antoine.png')
107 plt.grid()
108
109
110 "Datos"

```

```

111
112 plt.figure()
113 plt.title("Comparativa d'entalpies de vaporitzacio", fontsize = 14)
114 plt.ylabel("$\\Delta \\overline{H}_v$ (J/mol)", fontsize = 14)
115 plt.errorbar(1, -48200, 1700, fmt = 'x', ms=4, ecolor='r', elinewidth = 1,
116 capsize = 4, capthick = 1, label = "Experimental")
117 plt.plot(1, -42767, 'bo', ms=4, label = "Antoine")
118 plt.plot(1, -40656, 'go', ms=4, label = "Lliteratura")
119 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
120 plt.legend(fontsize = 14, shadow = True)
121 plt.xticks([1])
122 plt.savefig('entalpies.png')
123
124 plt.figure()
125 plt.title("Comparativa de temperatures d'ebullicio", fontsize = 14)
126 plt.ylabel("$T_{eb}^0$ (K)", fontsize = 14)
127 plt.errorbar(1, -380, 20, fmt = 'x', ms=4, ecolor='r', elinewidth = 1,
128 capsize = 4, capthick = 1, label = "Experimental")
129 plt.plot(1, -372.76, 'bo', ms=4, label = "Antoine")
130 plt.plot(1, -373.15, 'go', ms=4, label = "Lliteratura")
131 plt.ticklabel_format(style = "sci", scilimits=(0,0), useMathText=True)
132 plt.legend(fontsize = 14, shadow = True)
133 plt.xticks([1])
134 plt.savefig('temperatures.png')
135
136 plt.show()

```

## 8 Referències

NIST Chemistry Book

Apuntes de termodinàmica, J.M. Villaplana Soria

liceoagb.es - Líquidos y sólidos, diagramas de fase