

PROBLEMA CONJUNTO DE QUÍMICA GENERAL (TEMA 7) Y DE APLICACIONES INFORMÁTICAS PARA LA QUÍMICA (MANIPULADOR ALGEBRAICO)

En el caso de una disolución binaria ideal, las expresiones que relacionan las presiones parciales de los dos componentes (P_1 y P_2) y la presión de vapor total (P_{TOT}) con la fracción molar de uno de los componentes en la disolución líquida (x_1^L) y las presiones de vapor de los compuestos puros son las siguientes:

$$P_1 = x_1^L P_1^* = P_1^* x_1^L$$

$$P_2 = x_2^L P_2^* = (1 - x_1^L) P_2^* = -P_2^* x_1^L + P_2^*$$

$$P_{TOT} = P_1 + P_2 = P_1^* x_1^L - P_2^* x_1^L + P_2^* = (P_1^* - P_2^*) x_1^L + P_2^*$$

a) Representar, haciendo uso del manipulador algebraico, la variación de P_{TOT} con x_1^L para el caso de una disolución de butanona y metilbenceno, sabiendo que la presión de vapor de la butanona pura es 36066 Pa y la del metilbenceno puro es 12295 Pa. Situar la presión total en el eje de ordenadas y la fracción molar en el eje de abscisas. Nombrar dicha gráfica como graf1.

b) Representar las tres ecuaciones indicadas arriba juntas (cada una con un color diferente) en una misma gráfica. ¿Son las tres rectas? El comportamiento observado, ¿coincide con el explicado en clase para una disolución ideal (diagrama de la segunda diapositiva de la página 6)?

c) ¿Cuánto valen la pendiente y la ordenada en el origen de cada recta?

d) Representar cómo varía la presión de vapor total con la fracción molar del componente 1 en el vapor (x_1^V):

$$P_{TOT} = \frac{P_1^* P_2^*}{P_1^* - (P_1^* - P_2^*) x_1^V}$$

Exigir que el eje de abscisas vaya de 0 a 1 y que el eje de ordenadas vaya de 0 a 37000 Pa. Llamar a la gráfica graf2. ¿Se obtiene una recta? El comportamiento observado, ¿coincide con el explicado en clase (primera diapositiva de la página 7)?

e) Representar juntas en una misma gráfica, haciendo uso del comando "show", graf1 y graf2 a fin de obtener un diagrama de fases P-x. Los ejes deben extenderse en el mismo intervalo indicado en el apartado anterior. ¿Cuál es la zona de predominio de la disolución líquida? ¿Cuál es la zona de predominio de la mezcla de gases? ¿Dónde se encuentran en equilibrio la fase líquida y la fase vapor?

f) La tabla siguiente recoge valores medidos de la presión de vapor total de disoluciones de metilbenceno y butanona en función de la fracción molar de butanona en la disolución líquida. Representar los valores con el manipulador algebraico, denominando dicha gráfica graf3.

x_1^L	P_{TOT}/Pa
0	12295
0.0895	15496
0.1981	18592
0.2812	20698
0.3964	23402
0.4806	25239
0.6423	28626
0.7524	30900
0.9102	34121
1	36066

g) Mostrar, en una misma gráfica, dichos valores reales junto con la gráfica realizada en el apartado a) (graf1), que mostraba cómo variaría la presión total en el caso de una disolución binaria ideal de los mismos componentes. A la vista de la gráfica obtenida, ¿podemos concluir que una disolución de metilbenceno y butanona es ideal? En el caso de que no, ¿la disolución muestra desviaciones positivas o negativas respecto a la ley de Raoult? La entalpía de mezcla, ¿será positiva o negativa? ¿Y el volumen de mezcla?

h) Conectarse al servidor de correo de la universidad y enviar el archivo generado con los resultados obtenidos como adjunto al profesor de Química general. El nombre del archivo debe acabar con el sufijo .nb.