ROVNOVÁHA KAPALINA-PÁRA V REÁLNÝCH SYSTÉMECH

Pokud není uvedeno jinak, použijte pro výpočet tlaků nasycené páry čistých složek Antoineovu rovnici, jejíž konstanty jsou uvedeny v tabulce na konci této kapitoly. Tuto tabulku budete používat také při testech (dostanete se zadáním testu).

1 Výpočet aktivitního koeficientu z tlaku páry nad roztokem netěkavé látky

Nad roztokem, který obsahoval 7 g glukózy (M = 180,2 g mol^{-1}) a 258 cm^3 vody (M = 18,016 g mol^{-1}), byl při teplotě 27°C naměřen tlak páry vody 3,454 kPa. Hustota vody při této teplotě je 0,9965 g cm^{-3}. Vypočtěte aktivitu a aktivitní koeficient vody v daném roztoku.

[γ_1 = 0,9769]

2 Výpočet aktivitního koeficientu z tlaku páry nad roztokem netěkavé látky

Jedním z kritérií pro hodnocení mikrobiální stability potravinářských výrobků je aktivita vody, která nemá mít větší hodnotu než 0,9. Při teplotě 25°C byl měřen tlak páry vody nad pěti vzorky salámu s těmito výsledky:

vzorek č.	1	2	3	4	5
p_{H2O} /kPa	3,34	2,52	3,41	2,75	3,52

Vypočítejte aktivitu vody pro jednotlivé vzorky a posuďte, které ze vzorků mají vyhovující kvalitu.

Vyhovují vzorky 2 a 4:

vzorek č.	1	2	3	4	5
a_{H2O}	1,058	0,798	1,080	0,871	1,115

3 Výpočet aktivitního koeficientu z tlaku páry nad roztokem netěkavé látky

Nad roztokem netěkavé látky v toluenu o molalitě $\underline{m}_2$ = 6 mol kg^{-1} byl při teplotě 30°C naměřen tlak páry toluenu 2,565 kPa. Jaký je aktivitní koeficient toluenu v tomto roztoku? Pro molární hmotnost toluenu použijte hodnotu 92 g mol^{-1}, molární hmotnost rozpuštěné látky je 56 g mol^{-1}.

[γ_1 = 0,8132]

4 Výpočet aktivitních koeficientů z dat pro rovnováhu kapalina-pára

Za konstantního tlaku 101,325 kPa vřela kapalná směs benzenu (1) a butanolu (2), obsahující 21,9 mol.% benzenu, při teplotě 96,9°C. V rovnovážné páře bylo zjištěno 37,1 mol. % butanolu. Vypočítejte aktivity, aktivitní koeficienty a rozdíl chemických potenciálů $\mu_i - \mu_i^\bullet$ pro obě složky ($\mu_i^\bullet$ je chemický potenciál složky ve standardním stavu čistá složka při teplotě a tlaku soustavy). Předpokládejte ideální chování parní fáze.

[γ_1 = 1,759 ; γ_2 = 1,052; a_1 = 0,3853 ; a_2 = 0,822
$\mu_1 - \mu_1^\bullet$ = –2934,1 J mol^{-1}; $\mu_2 - \mu_2^\bullet$ = –604,37 J mol^{-1}]

5 Aktivitní koeficient, složení rovnovážné páry nad roztokem dvou těkavých látek

Kapalná směs hexanu (složka 1; M = 86 g mol^{-1}) s heptanem (složka 2; M = 100 g mol^{-1}), obsahující 52,4 hm.% hexanu vře za konstantní teploty 30°C při tlaku 130,6 torr. Aktivitní koeficient hexanu má za těchto podmínek hodnotu γ_1 = 0,975. Vypočítejte složení rovnovážné páry a aktivitní koeficient heptanu. Předpokládejte ideální chování parní fáze.

[y_1 = 0,7928 ; γ_2 = 1,068]

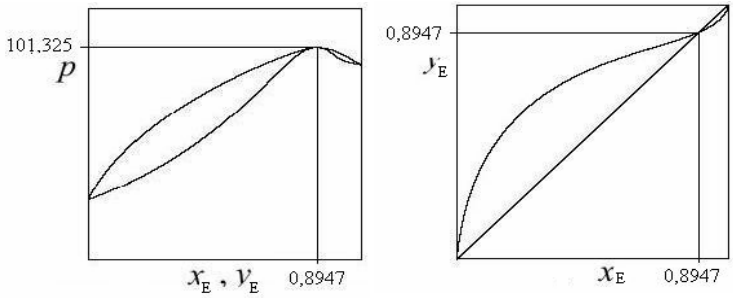
6 Azeotropický systém, výpočet aktivitních koeficientů (10-40)

Azeotropická směs ethanolu (1) a vody (2), která obsahuje za normálního tlaku 95,6 hm. % ethanolu, vře při teplotě 78,15°C.

a) načrtněte p - x - y a y - x diagram při teplotě 78,15°C,

b) vypočtěte složení azeotropu v molárních procentech a hodnoty aktivitních koeficientů, c) určete tlak a složení parní fáze, která by odpovídala kapalné směsi o obsahu 95,6 hm.% ethanolu za předpokladu platnosti Raoultova zákona.

a) závislost $p = p(x)$ bude mít při složení azeotropu maximum.
b) $x_E = 0{,}8947$,
$\gamma_E = 1{,}0058$, $\gamma_2 = 2{,}312$,
c) $p = 94{,}508$ kPa, $y_E = 0{,}9537$



7 Azeotropický systém, výpočet aktivitních koeficientů

Normální teplota varu azeotropické směsi methanolu (1) a benzenu (2), která obsahuje 61,7 mol.% methanolu, je 57,97°C. Vypočítejte hodnoty aktivitních koeficientů azeotropu.

[$\gamma_{1az} = 1{,}302$; $\gamma_{2az} = 2{,}086$]

8 Azeotropický systém, výpočet aktivitních koeficientů (10-41)

Závislost aktivitních koeficientů na složení v systému cyklopentan(1) + chloroform(2) při 25°C vystihuje vztah $\ln \gamma_i = b\,(1 - x_i)^2$, kde $b = 0{,}42$. Určete hodnoty: y_1 a p pro $x_1 = 0{,}2$. Kromě toho zjistěte, zda tento systém při dané teplotě tvoří azeotrop.

[$p = 31{,}797$ kPa, $y_1 = 0{,}34845$; Azeotrop se netvoří, z podmínky $\gamma_{1az} / \gamma_{2az} = p_1^s/p_2^s$ plyne $x_{1az} > 1$]

9 Aktivitní koeficienty azeotropu, koncentrační závislost aktivitních koeficientů

Látky A a B tvoří azeotropickou směs, která obsahuje 35 mol.% složky A a za normálního tlaku vře při teplotě 76°C. Závislost tlaků nasycené páry pro jednotlivé složky je vyjádřena Antoineovou rovnicí

$$\ln\left(p_i^s/\mathrm{kPa}\right) = A - \frac{B}{C+t}$$

látka	A	B	C
(A)	6,443	1070	220
(B)	7,023	1120	207

Pomocí těchto údajů vypočítejte konstantu b koncentrační závislosti aktivitních koeficientů:

$$\ln \gamma_i = b \cdot (1 - x_i)^2$$

[$b = 0{,}79089$]

Konstanty Antoineovy rovnice

$$\log\left(p^{\mathrm{s}}/\mathrm{kPa}\right) = A - \frac{B}{C + (t/^{\mathrm{o}}\mathrm{C})}$$

Látka	Vzorec	*A*	*B*	*C*	Látka	Vzorec	*A*	*B*	*C*
Acetanhydrid	$C_4H_6O_3$	6,24655	1427,77	198,037	Kyselina sírová	H_2SO_4	7,641563	3073,77	214,699
Aceton	C_3H_6O	6,2047	1166,99	230	2-Methyl-1-propen	C_4H_8	5,96624	923,2	240
Acetonitril	C_2H_3N	6,34522	1388,446	238,294	2-Methylbutan	C_5H_{12}	5,95805	1040,73	235,445
Acetylen	C_2H_2	8,11522	1162,05	274,005	2-Methylpropan	C_4H_{10}	6,03538	946,35	246,68
Amoniak	NH_3	11,094593	3596,83	426,382	Methan	CH_4	5,82051	405,42	267,777
Anilin	C_6H_7N	6,40627	1702,817	202,995	Methanol	CH_4O	7,25164	1608,39	242,08
Benzen	C_6H_6	6,01907	1204,682	220,078	Methylamin	CH_5N	6,6218	1079,15	240,23
Brom	Br_2	6,886373	1559,32	261,27	Mravenčí kyselina	CH_2O_2	6,5028	1563,28	247,06
Butan	C_4H_{10}	5,93386	935,86	238,73	Naftalen	$C_{10}H_8$	6,19487	1782,509	207,52
1,3-Butadien	C_4H_6	5,97489	930,54	238,844	Nitromethan	CH_3NO_2	6,40194	1444,38	227,364
1-Butanol	$C_4H_{10}O$	6,54172	1336,026	176,802	Nonan	C_9H_{20}	6,0593	1429,46	201,82
1-Buten	C_4H_8	5,9678	926,1	240	Octan ethylnatý	$C_4H_8O_2$	6,22723	1245,239	217,911
Cis-2-buten	C_4H_8	5,99416	960,1	237	Octová kyselina	$C_2H_4O_2$	6,68206	1642,54	233,386
Cyklohexan	C_6H_{12}	5,9662	1201,531	222,647	Oktan	C_8H_{18}	6,05632	1358,8	209,855
Cyklohexanol	$C_6H_{12}O$	6,1634	1381,5	156,6	Oxid dusičitý	NO_2	8,040653	1798,22	276,8
Cyklohexanon	$C^6H_{10}O$	6,1033	1495,511	209,552	Oxid dusnatý	NO	5,487703	266,74	227,619
Cyklohexen	C_6H_{10}	5,99732	1221,899	223,172	Oxid siřičitý	SO_2	7,593493	1512,4	280,699
Cyklopentan	C_5H_{10}	6,008	1122,21	231,139	Oxid uhličitý	CO_2	8,758183	1286,47	268,654
Dekan	$C_{10}H_{22}$	6,09206	1510,415	195,504	Oxiran	C_2H_4O	6,3859	1115,1	244,135
Diethylether	$C_4H_{10}O$	6,05115	1062,409	228,183	1-Pentanol	$C_5H_{12}O$	6,3099	1290,23	161,731
2,2-Dimethylpropan	C_5H_{12}	5,76532	900,54	230,039	1-Penten	C_5H_{10}	5,96999	1043,962	233,383
Dimethylether	C_2H_6O	6,44136	1025,56	256,05	Pentan	C_5H_{12}	5,98799	1070,14	232,665
1,2-Ethandiol	$C_2H_6O_2$	6,98465	1928,08	189,7	Peroxid vodíku	H_2O_2	5,817	1264,74	171,561
Ethan	C_2H_6	5,95942	663,7	256,47	1-Propanol	C_3H_8O	6,86874	1437,906	198,529
Ethanal	C_2H_4O	6,141	1034,5	230	2-Propanol	C_3H_8O	6,86087	1357,514	197,364
Ethanol	C_2H_6O	7,23347	1591,28	226,095	Propadien	C_3H_4	4,8386	458,06	196,07
Ethylbenzen	C_8H_{10}	6,06991	1416,922	212,434	Propan	C_3H_8	5,92888	803,81	246,99
Ethylen	C_2H_4	5,87246	585	255	Propen	C_3H_6	5,9445	785	247
Fenol	C_6H_6O	6,25947	1516,072	174,569	Propin	C_3H_4	5,90975	803,73	229,08
Formaldehyd	CH_2O	6,5475	1062,4	253,23	Propylbenzen	C_9H_{12}	6,07438	1490,61	207,121
Fosgen	$COCl_2$	5,962703	950,48	231,924	Síra	S	4,902133	1466,99	62,06
Heptan	C_7H_{16}	6,02633	1268,583	217,096	Sirouhlík	CS_2	5,992293	1135,84	238,372
Hexan	C_6H_{14}	6,00431	1172,04	224,403	Styren	C_8H_8	6,08201	1445,58	209,43
Chlor	Cl_2	6,132153	886,33	248,56	Sulfurylchlorid	SO_2Cl_2	7,221793	1856,21	286,602
Chlorbenzen	C_6H_5Cl	6,308323	1574,53	234,229	Tetrachlormethan	CCl_4	5,99114	1202,9	225,14
Chlormethan	CH_3Cl	6,11935	902,45	243,6	Toluen	C_7H_8	6,08627	1349,122	220
Chloroform	$CHCl_3$	6,23638	1232,79	230,213	Trans-2-buten	C_4H_8	5,99442	960,8	240
Isopropylbenzen	C_9H_{12}	6,05949	1459,975	207,738	Voda	H_2O	7,19621	1730,63	233,426
Jod	I_2	7,954273	2995,21	220,099	m-Xylen	C_8H_{10}	6,14083	1467,244	215,708
Keten	C_2H_2O	5,80297	711,14	236,76	o-Xylen	C_8H_{10}	6,13132	1480,155	214,346
Kyanovodík	HCN	7,268653	1318,33	232,334	p-Xylen	C_8H_{10}	6,14779	1475,767	217,909