

Za teploty  $T = 300.68 \text{ K}$  tvoří kapaliny regulární roztok s dodatkovou Gibbsovou energií

$$G^E = RT\chi x_1(1 - x_1)$$

Tlaky nasycených par čistých kapalin jsou  $p_1^s(T) = 63 \text{ kPa}$  a  $p_2^s(T) = 104 \text{ kPa}$ , standardní tlak je  $100 \text{ kPa}$ , plynná fáze se chová ideálně.

Zjistěte, zda v systému existuje azeotrop pro následující hodnoty Floryho parametru  $\chi$ :

- $\chi = 0.2$
- $\chi = 1.3$
- $\chi = 3.1$

Pokud ano, stanovte složení kapalné i plynné fáze.

**Návod:** Vzoreček pro složení azeotropu v modelu regulárního roztoku je

$$x_1 = y_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\chi} \ln \frac{p_2^s}{p_1^s}$$

ale nestačí do něj jen dosadit!

- Vyjde-li  $x_1$  mimo interval  $(0,1)$ , jistě to není azeotrop.
- Vyjde-li  $x_1$  v intervalu  $(0,1)$ , není vyhráno. Musíte posoudit, zda azeotrop je stabilní. K tomu nakreslete graf Gibbsovy energie kapalné a plynné fáze podle rovnic (1) a (2) v [přednášce 12, slide 17](#); za  $\mu_1^\circ$  a  $\mu_2^\circ$  zvolte vhodné hodnoty tak, aby grafy pěkně vypadaly – můžete začít nulami. Ve vzorečku vystupuje také neznámý tlak  $p$ . Tento tlak:
  - Můžete spočítat z podmínky  $G_m^{(l)} = G_m^{(g)}$  pro  $x_1 = y_1$  (obě křivky se dotknou).
  - Nebo měňte hodnotu  $p$  zkusmo, dokud nedojde k dotknutí křivek.

Pak stanovte, zda tento bod leží uvnitř konvexního obalu funkcí  $G(x_1)$  pro kapalinu i plyn. Pokud ano, není to stabilní azeotrop.

Poznámky:

- S výrazem  $x \ln x$  má excel problémy pro  $x = 0$ . Abyste nemuseli pro  $x = 0$  a  $x = 1$  upravovat výraz, můžete:
  - Místo řady  $x \in \{0; 0,05; \dots; 1\}$  apod. použít např.  $x \in \{0,01; 0,08; \dots; 0,99\}$  (po 0,07) nebo něco podobného.
  - $x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)$  nahradit třeba  $x \ln(x + 1e-9) + (1 - x) \ln(1 + 1e-9 - x)$ .
- Je ovšem běžnější mít konstantní tlak a teplotu varu azeotropu počítat. To je však složitější, protože je nutno řešit transcendentní rovnici.