Šifalda Radek 4. ledna 2024/fcha-4a-47

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

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

Tlaky nasycených par čistých kapalin jsou $p_1^{\mathrm{s}}(T) = 64$ kPa a $p_2^{\mathrm{s}}(T) = 105$ kPa, standardní tlak je 100 kPa, plynná fáze se chová ideálně.

Zjistěte, zda v systému existuje azeotrop pro následující hodnoty Floryho parametru χ:

a) $\chi = 0.22$

b) $\chi = 1.3$

c) $\chi = 2.5$

Pokud ano, stanovte složení kapalné i plynné fáze.

Návod: Vzoreček pro složení azeotropu v modelu regulárního roztoku je

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

ale nestačí do něj jen dosadit!

1. Vyjde-li x_1 mimo interval (0,1), jistě to není azeotrop.
2. 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 μ_1° a μ_2° zvolte vhodné hodnoty tak, aby grafy pěkně vypadaly – můžete začít nulami. Ve vzorečku vystupuje také neznámý tlak p. Tento tlak:
   (a) Můžete spočítat z podmínky $G_{\mathrm{m}}^{(\mathrm{l})} = G_{\mathrm{m}}^{(\mathrm{g})}$ pro $x_1 = y_1$ (obě křivky se dotknou).
   (b) 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:
  1. Místo řady $x \in \{0; 0{,}05; \ldots; 1\}$ apod. použít např. $x \in \{0{,}01; 0{,}08; \ldots; 0.99\}$ (po 0,07) nebo něco podobného.
  2. $x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)$ nahradit třeba $x \ln(x + 1\text{e-}9) + (1 - x) \ln(1 + 1\text{e-}9 - x)$.
- Je ovšem běžnější mít konstantní tlak a teplotu varu azeotropu počítat. To je však složitější, protože je nutno řešit transcendentní rovnici.