

## Guía de Problemas de Equilibrio de Fases: Métodos de estimación de coeficientes de actividad Termodinámica de Ingeniería Química

**Prof. Julio Romero F.**

### Problema 1

Calcule los parámetros de la ecuación de Margules (A y B) para la estimación de los coeficientes de actividad del sistema binario 1,3-butadieno (1) /acetronitrilo (2) a 323,15 K, a partir de los siguientes datos.

**Tabla 1.** Valores de fracciones molares de 1,3-butadieno en la mezcla líquida y vapor con sus respectivas presiones de equilibrio a 323,15 K.

P (kPa)	$x_1$	$y_1$
34,797	0	0
109,058	0,05	0.6961
171,719	0,10	0.8160
269,711	0,20	0.8930
337,839	0,30	0.9215
389,301	0,40	0.9373
429,698	0,50	0.9481
460,495	0,60	0.9560
488,093	0,70	0.9633
514,224	0,80	0.9710
539,422	0,90	0.9800
571,686	1	1

Señale si el modelo de Margules describe adecuadamente este sistema, justificando su respuesta.

### Problema 2

Para el sistema binario Tetracloruro de carbono(1)/Nitrometano(2) a 70°C determine mediante el método de Wilson:

a) Los datos de ELV para el diagrama P-composición, llenando la siguiente tabla:

$x_1$	$x_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$P_1$ (atm)	$P_2$ (atm)	$P_{TOTAL}$ (atm)	$y_1$	$y_2$
0								
0,1								
0,2								
0,3								
0,4								
0,5								
0,6								
0,7								
0,8								
0,9								
1,0								

- b) Verifique si se observa presencia de azeótropo indicando, de ser así, si es de presión máxima o mínima, cuál es la composición y presión azeotrópica.
- c) Señale la presión y composición de burbuja a  $x_1=0,4$  así como la presión y composición de rocío para  $y_1=0,8$ .

### Problema 3

Para el sistema binario n-propanol (1) / benceno (2) a 318K determine mediante el método de Wilson:

a) Los datos de ELV para el diagrama P-composición, llenando la siguiente tabla:

$x_1$	$x_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$P_1$ (atm)	$P_2$ (atm)	$P_{TOTAL}$ (atm)	$y_1$	$y_2$
0								
0,2								
0,4								
0,6								
0,8								
1,0								

b) Verifique si se observa presencia de azeótropo, justificando su respuesta e indicando, de ser así, si es de presión máxima o mínima, cuál es la composición y presión azeotrópica.

### Problema 4

A partir de los siguientes datos experimentales de presión y composición para el sistema cloroformo (1) / 1,4-dioxano (2) a 50°C, estime los parámetros de la ecuación de Margules. Entregue una tabla que señale además los valores correspondientes de  $x_2$ ,  $y_2$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\ln(\gamma_1)$ ,  $\ln(\gamma_2)$ ,  $G^E/(RT)$  y  $G^E/(RTx_1x_2)$ .

$P$ (kPa)	$x_1$	$y_1$
15,79	0	0
17,51	0,0932	0,1794
18,15	0,1248	0,2383
19,30	0,1757	0,3302
19,89	0,2000	0,3691
21,37	0,2626	0,4628
24,95	0,3615	0,6184
29,82	0,4750	0,7552
34,80	0,5555	0,8378
42,10	0,6718	0,9137
60,38	0,8780	0,9860
65,39	0,9398	0,9945
69,36	1	1

### Problema 5

Determine mediante el método UNIFAC los coeficientes de actividad de una solución de n-hexano(1) / etanol(2) a 40°C con concentraciones  $x_1=0,35$  y  $x_2= 0,65$ .

### Problema 6

Construya mediante el método UNIFAC el diagrama presión-composición para el sistema agua(1)/etanol(2) a una temperatura de 25°C.