

Ejercicio 1:

Se tiene interés en el cálculo de las de fugacidades y coeficientes de fugacidad en una mezcla equimolar de dos componentes, A(1)-B(2), donde B es un gas a la temperatura de 0°C y una presión de 15 bar. Se sabe que las moléculas de A tienen una tendencia importante a asociarse ($2A \rightarrow A_2$), aunque no hay efectos de solvatación importantes entre A y B. De medidas de viscosidad y coeficientes viriales, se determinó que los diámetros moleculares son $4,7 \cdot 10^{-10}$ y $3 \cdot 10^{-10}$ m, respectivamente. Además, se conoce que la constante de equilibrio para la asociación a 25°C es 0,1 y que la variación de entalpía es $-9,25 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$. El estado de referencia se define como el gas ideal a la presión de 1 bar. Interprete los resultados.

Ejercicio 2:

El xenón es uno de los gases nobles; su comportamiento puede describirse adecuadamente mediante el potencial de Lennard-Jones, cuyos parámetros han sido determinados mediante medidas de viscosidad, siendo $\sigma = 4,047 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ y $\epsilon \cdot k_B^{-1} = 231 \text{ K}$.

- Calcule la fugacidad del xenón a 300K y 20 bar de presión.
- Prediga en qué sentido varía la temperatura cuando el gas sufre una leve pérdida de carga al estrangularse en una válvula, a partir de la información del problema. La temperatura de ingreso a la válvula es 300K.

Sugerencia: Las interacciones pueden llegar a considerarse despreciables más allá de $2,3\sigma$.

Ejercicio 3:

A 25°C, se tiene un sistema compuesto por dos solventes (1 y 3) y un gas (2). Conociendo la composición de la fase líquida ($x_1 = 0,3$; $x_3 = 0,7$; $x_2 = 10^{-3}$), calcule la presión del sistema y la composición de la fase vapor. La temperatura consoluta superior de la mezcla de los componentes 1 y 3 es 200 K, y la misma se puede modelar según $g^E = Ax_1x_3$. Suponga gas ideal y además desestime el efecto de Poynting y la corrección de la constante de Henry por el efecto de la presión.

Datos a 25°C: $p_1^{sat} = 0,5 \text{ bar}$ $p_3^{sat} = 0,2 \text{ bar}$ $H_{2,1} = 1000 \text{ bar}$ $H_{2,3} = 3000 \text{ bar}$

Ejercicio 4:

Un alcohol se distribuye entre dos fluidos inmiscibles, hexano y dimetil sulfóxido. Calcular el coeficiente de distribución del alcohol entre las dos fases líquidas a 30°C y 100 bar (cuando la concentración del alcohol es muy pequeña). Enumerar las simplificaciones introducidas. Se dispone de los siguientes datos binarios, todos ellos a 0°C y 1 bar (la notación ' es para la fase hexano y la notación '' es para la fase dimetil sulfóxido):

Alcohol/hexano	Alcohol/dimetil sulfóxido
$g^E = 2400 \times A_{X_H} J \text{ mol}^{-1}$	$g^E = 320 \times A_{X_D} J \text{ mol}^{-1}$
$h^E = 4800 \times A_{X_H} J \text{ mol}^{-1}$	$h^E = 600 \times A_{X_D} J \text{ mol}^{-1}$
$v^E = 16 \times A_{X_H} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$	$v^E = -10 \times A_{X_D} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$

En una embotelladora de gaseosas, se llena una botella de "Sprote" con 1.5lts de gaseosa dejando 0.05lts de "head-space" (espacio entre el líquido y la tapa de la botella). El llenado se realiza a 10°C y el head-space (HS) se completa con dióxido de carbono a 1atm de presión. Si a 20°C una persona toma la botella cerrada, la abre, se sirve un vaso de 200cm³ de Sprote y tapa rápidamente* la botella,

a) ¿cuál es la presión final a la que queda el sistema cuando se alcanza nuevamente el equilibrio?

b) Por cuestiones constructivas, la botella no puede superar las 2atm de presión. Confirme si en algún momento, esa presión fue superada.

*Considere que el proceso de servir Sprote en el vaso es suficientemente rápido por lo que puede desestimarse la transferencia de alguno de los componentes de una fase a la otra.

Considere que la gaseosa es principalmente agua y que la composición de CO₂ en aire = 0,04% v/v y la HR ambiente = 0%.

$$K_{CO_2, H_2O}^{20^\circ C} = 1429 atm$$

$$K_{CO_2, H_2O}^{10^\circ C} = 1000 atm$$

$$P \cdot y_{CO_2} = K_{CO_2, H_2O} \cdot x_2$$

$$P_{H_2O, 10^\circ C}^{sat} = 0,012 atm$$

$$P_{H_2O, 20^\circ C}^{sat} = 0,048 atm$$