

## PQI 3201 - Termodinâmica Química II

### Questão para discussão

Considere os dados de ELV para o sistema acetona (1) e hexano (2) a 318,15 K (dados experimentais Schaefer K., Rall W., *Z. Elektrochem.* 62 (1958) 1090-1092), apresentados na planilha anexa. Sugere-se que esse sistema seja modelado usando a equação de van Laar:

$$\frac{G^{EX}}{RT} = \frac{Ax_1x_2}{x_1 + Bx_2}$$

que resulta em:

$$\ln\gamma_1 = \frac{ABx_2^2}{(x_1 + Bx_2)^2}$$

$$\ln\gamma_2 = \frac{Ax_1^2}{(x_1 + Bx_2)^2}$$

com os parâmetros  $A = 1,61$  e  $B = 1,05$ .

A pressão de vapor dos compostos puros é dada pela equação de Antoine:

$$\ln \frac{P_i^{vap}}{\text{bar}} = A_i - \frac{B_i}{(T/K) + C_i}$$

válida para  $T_i^{min} \leq T \leq T_i^{max}$ , conforme a Tabela:

| Composto       | $A_i$   | $B_i$    | $C_i$   | $T_i^{min}/K$ | $T_i^{max}/K$ |
|----------------|---------|----------|---------|---------------|---------------|
| 1 <sup>a</sup> | 9,80349 | 2809,085 | -42,497 | 209,15        | 343,15        |
| 2 <sup>b</sup> | 9,52214 | 2869,781 | -40,162 | 178,2         | 510,2         |

a - [ddbonline.ddbst.de/AntoineCalculation/AntoineCalculationCGI.exe?component=Acetone](http://ddbonline.ddbst.de/AntoineCalculation/AntoineCalculationCGI.exe?component=Acetone)

b - [dbonline.ddbst.de/AntoineCalculation/AntoineCalculationCGI.exe?component=Hexane](http://dbonline.ddbst.de/AntoineCalculation/AntoineCalculationCGI.exe?component=Hexane)

Trace o diagrama de equilíbrio em temperatura constante (ou seja, pressão em função da composição de líquido e vapor) com os dados experimentais e com os valores calculados com as equações de van Laar e Antoine.