PQI 3201 - Termodinâmica Química II

Questões para discussão

1) Os seguintes dados estão disponíveis para o equilíbrio de N₂ (1), O₂ (2) e CO₂ (3) em água (w), bem como a fração molar desses gases no ar atmosférico:

i	H _{i,w} [298,15 K] / bar	$\Delta_{sol}H_{i,w}$ / $kJ \cdot mol^{-1}$	$y_i(ar)$
1	88900	-10,8	0,7808
2	43700	-13,7	0,2095
3	1610	-20,2	0,0004

Calcule a solubilidade dos gases em água nas temperaturas de T=298,15~K~e~T=288,15 K, considerando uma pressão total $P = 1,0 \, bar$. Em seus cálculos, considere o valor de $\Delta_{sol}H_{i,w}$ constante.

2) Em soluções diluídas de sal, a atividade de água (a_w) pode ser calculada por:

$$ln(a_w) = -M_w^* \left(\sum_{j \neq w} m_j - 2A_{\varphi} \frac{I^{1,5}}{1 + b\sqrt{I}} \right) - \beta I^2$$

em que:

em que:
$$M_{w}^{*} = 0.018 \ kg \cdot mol^{-1} \qquad b = 1.2 \ kg^{1/2} \cdot mol^{-1/2}$$

$$m_{j} = \frac{n_{j}}{n_{w} M_{w}^{*}} \qquad A_{\varphi} = \begin{cases} 0.3914 \ kg^{1/2} \cdot mol^{-1/2} \ (298.15 \ K) \\ 0.4606 \ kg^{1/2} \cdot mol^{-1/2} \ (373.15 \ K) \end{cases}$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_{j \neq w} m_{j} z_{j}^{2}$$

Calcular a elevação da temperatura normal de ebulição da água pela adição de 0,5; 1,0 e 1,5 mol·kg-1 de Na₂SO₄. Compare o resultado rigoroso e o resultado obtido assumindo a lei de Raoult para o solvente $(a_w \cong x_w)$ Considere P =1,013 *bar*. Considere que, para o sulfato de sódio, $\beta = 4,86 \cdot 10^{-4} \ kg^2 \cdot mol^{-2}$, e para a água, próximo à temperatura normal de ebulição:

$$ln\left(\frac{P_w^{vap}}{bar}\right) = 11,7244 - \frac{3841,19}{(T/K) - 45,17}$$

$$\Delta_{vap}H_w = 40660\,J\cdot mol^{-1}$$