

15. ZADATAK

Procijeniti koeficijente kompresibilnosti i fugacitivnosti **ekvimolarne** smjese metanola(1), etanola(2) i acetona(3) pri temperaturi od 300 K i tlaku od 8 bar. Pretpostaviti da se plinska smjesa pri tim uvjetima vlada prema Soave-Redlich-Kwongovom modelu.

Pseudokritične parametre smjese izračunati prema Kayevom i Prausnitz-Gunnovom pravilu. Polinomni oblik funkcije, $z=f(z)$, riješiti Newton-Gossetovim postupkom.

Provjeriti fazno područje, odnosno potvrditi stabilnost faza.

Podaci:

	T_K/K	$v_K/cm^3 mol^{-1}$	z_K	ω
metanol(1)	512,6	118,0	0,224	0,556
etanol(2)	513,9	167,1	0,240	0,644
aceton(3)	508,1	209,0	0,232	0,304

SOAVE REDLICH KWONG (1972)

Jednadžba

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha}{v(v+b)}$$

$$v^3 - \frac{RT}{p}v^2 - \left(b^2 + \frac{RTb}{p} - \frac{a\alpha}{p} \right)v - \frac{a\alpha b}{p} = 0$$

$$z^3 - z^2 - \left(\frac{b^2 p^2}{R^2 T^2} + \frac{bp}{RT} - \frac{a\alpha p}{R^2 T^2} \right)z - \frac{a\alpha b p^2}{R^3 T^3} = 0$$

$$z^3 - z^2 + (A - B^2 - B)z - AB = 0$$

Parametri

$$a = \frac{\Omega_a R^2 T_k^2}{p_k} \quad b = \frac{\Omega_b RT_k}{p_k}$$

$$\Omega_a = \frac{1}{9(2^{1/3} - 1)} = 0,427480 \quad \Omega_b = \frac{(2^{1/3} - 1)}{3} = 0,086640$$

$$\alpha = \left(1 + \kappa(1 - \sqrt{T_r}) \right)^2$$

$$\kappa = 0,48508 + 1,55171\omega - 0,15613\omega^2$$

$$\text{vodik: } \alpha = 1,202 \exp(-0,30288T_r)$$

$$A = \frac{a\alpha p}{R^2 T^2} = \frac{\Omega_a \alpha p_r}{T_r^2} \quad B = \frac{bp}{RT} = \frac{\Omega_b p_r}{T_r}$$

SMJESE REALNIH PLINOVA

Pseudokritični parametri

Kay

$$v_{\text{KM}} = \sum y_i v_{\text{ki}}$$

$$T_{\text{KM}} = \sum y_i T_{\text{ki}}$$

$$p_{\text{KM}} = \sum y_i p_{\text{ki}}$$

Prausnitz i Gunn

$$v_{\text{KM}} = \sum y_i v_{\text{ki}}$$

$$T_{\text{KM}} = \sum y_i T_{\text{ki}}$$

$$z_{\text{KM}} = \sum y_i z_{\text{ki}}$$

$$p_{\text{KM}} = \frac{z_{\text{KM}} RT_{\text{KM}}}{v_{\text{KM}}}$$

Newton-Gosset (SRK)

$$f(z) = z^3 - z^2 + (A - B^2 - B)z - AB$$

$$f'(z) = 3z^2 - 2z + (A - B^2 - B)$$

Početne pretpostavke:

$$z^V = 1 \quad z^L = B$$

Konačna rješenja za koeficijent fugacitivnosti smjese:

$$v^V = \frac{z^V RT}{p} = \frac{0,569952 \cdot 8,314 \cdot 300}{8 \cdot 10000} = 1,77697 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$\ln \varphi^V = \ln \frac{v^V}{v^V - b} + \frac{a\alpha(T)}{bRT} \ln \frac{v^V}{v^V + b} + (z^V - 1) - \ln z^V$$

$$v^L = \frac{z^L RT}{p} = \frac{0.0233841 \cdot 8,314 \cdot 300}{8 \cdot 100000} = 7,29057 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$\ln \varphi^L = \ln \frac{v^L}{v^L - b} + \frac{a\alpha(T)}{bRT} \ln \frac{v^L}{v^L + b} + (z^L - 1) - \ln z^L$$

Parcijalne fugacivnosti komponenata:

$$\ln \hat{\phi}_i = \frac{b_i}{b_M} (z-1) - \ln \left[z \left(1 - \frac{b_M}{v} \right) \right] + \frac{1}{b_M RT} \left(\frac{(a\alpha)_M b_i}{b_M} - 2 \sum_j y_j (a\alpha)_{ij} \right) \ln \left(1 + \frac{b_M}{v} \right)$$

**TREBA TESTIRATI PARCIJALNE
FUGACITIVNOSTI KOMPONENATA.**

Može se dogoditi da je parcijalna fugacivnost za jednu komponentu viša u parnoj, a za drugu u kapljevitoj fazi. Uspostavlja se fazna ravnoteža para-kapljevina s različitim sastavima parne i kapljevite faze! **Problem stabilnosti rješava se na drugačiji način nego za čistu komponentu!**