

Problema 2

La expresión del logaritmo del coeficiente de fugacidad de compuestos puros en función del volumen molar según la ecuación de estado de Van der Waals es la siguiente:

$$\ln \phi = \frac{b}{V-b} - \frac{2a}{RTV} - \ln \left[1 - \frac{a(V-b)}{RTV^2} \right]$$

Donde a y b son los parámetros correspondientes a cada compuesto puro.

A su vez, la ecuación de Van der Waals explícita en presión tiene la siguiente forma:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

Complete la tabla adjunta en el archivo Excel, a partir de las expresiones anteriormente mostradas (**también puede usar el complemento XSEOS para la ecuación de Van der Waals, si lo desea**), para los siguientes compuestos: hidrógeno, dióxido de carbono, oxígeno y helio. Use el siguiente valor de la constante universal de los gases:

$$R = 83,14 \frac{\text{bar} \cdot \text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

- ¿Cuál es el valor de los parámetros a y b de la ecuación de Van der Waals para cada uno de los compuestos (celdas en amarillo en la hoja de cálculo)?
- ¿Cuál es la presión que predice la ecuación para cada uno de los componentes dada la temperatura y el volumen molar (celdas en verde en la hoja de cálculo)?
- ¿Cuál es el logaritmo del coeficiente de fugacidad y el coeficiente de fugacidad que predice la ecuación para cada uno de los componentes dada la temperatura y el volumen molar (celdas en naranja en la hoja de cálculo)?
- ¿Cuál es la fugacidad para cada uno de los componentes dada la temperatura y el volumen molar (celdas en rosa en la hoja de cálculo)?
- ¿En qué estado de agregación se encuentra cada compuesto en cada caso? ¿Cómo lo sabe?
- ¿Cómo es la desviación respecto al modelo de gases ideales?
- Grafique el logaritmo del coeficiente de fugacidad y el coeficiente de fugacidad respecto de la presión del sistema para cada compuesto.