

Tokomponent - faselikevekt

Eva Tula Larsen Aunet, Emma Birkeland,
Alexander Barkatsa Sæbø og Erlend Sørli

Gruppe 4a-4

Mars 2021

Sammendrag

I dette eksperimentet brukes et tokomponentsystemet bestående av ulike konsentrasjoner med isopropanol og 2-metyl-1-butanol. Videre ble sammenhengen mellom kokepunkt og sammensetning av komponentene i systemet brukt til å bestemme aktivitetskoeffisient og aktiviteten for isopropanol i væskefasen.

Molfraksjonen av kondensatet ble plottet mot molfraksjonen av væsken. Plottet viste at blandingen ikke dannet en azeotrop, og at komponentene kunne skilles ved destillering. Aktivitetskoeffisientene til isopropanol ble bestemt til å være over 1 for alle blandinger med en tilstrekkelig mengde av begge komponentene. Dette tyder på frastøtende krefter mellom isopropanol og 2-metyl-1-butanol i blandingen. Hovedfeilkilden i forsøket er antatt å være målte temperaturer.

Innhold

1	Introduksjon	4
2	Teori	4
3	Eksperimentelt	6
3.1	Apparatur	6
3.2	Utførelse	7
4	Resultater	8
5	Diskusjon	10
6	Konklusjon	10
A	Eksperimentelle data	12
B	Beregninger	13
B.1	Kalibreringskurve	13
B.2	Aktivitetskoeffisient	13
C	Usikkerhetsberegninger	15
C.1	Kalibreringskurve	15
C.2	Aktivitetskoeffisient	15

1 Introduksjon

Molekyler i en reell blanding vil alltid vekselvirke. Dette påvirker egenskaper som smelte- og kokepunkt, og er derfor viktig i industrielle prosesser der væskeblandinger skal separeres. Disse vekselvirkningene kan beskrives med aktivitetskoeffisienter som gjør rede for avvik fra ideell oppførsel. Aktivitetskoeffisienter for komponenter i en væskeblanding kan bestemmes ved å studere sammenhengen mellom kokepunkt og sammensetning i et tokomponentsystem.

2 Teori

I dette eksperimentet brukes et tokomponentsystem bestående av to flyktige komponenter som antas å være rene. Komponentene er i likevekt mellom gass- og væskefase. Ved likevekt vil det kjemiske potensialet for væske $\mu_i^{(l)}$ være likt det kjemiske potensialet for gass $\mu_i^{(g)}$ for hvert av komponentene $i = 1, 2$ ved temperatur T .

$$\mu_i^{(l)}(T) = \mu_i^{(g)}(T) \quad (2.1)$$

Trykket p over væsken er definert som $p = p_1 + p_2$. Videre kan dampfasen betraktes som ideell ved et trykk rundt 1 atmosfære, og ved bruk av ideell gass lov kan det kjemiske potensialet uttrykkes,

$$\mu_i^{(l)}(T) = \mu_i^{(g),0}(T) + RT \ln \frac{p_i}{p^0} \quad (2.2)$$

hvor $\mu_i^{(g),0}(T)$ er det kjemiske potensialet for gassfasen ved standardtrykket $p^0 = 1$ bar og p_i er partialtrykket til komponent i . Dersom komponentene er rene, vil ligning (2.2) kunne uttrykkes som,

$$\mu_i^{(l),*}(T) = \mu_i^{(g),0}(T) + RT \ln \frac{p_i^*}{p^0} \quad (2.3)$$

$\mu_i^{(l),*}(T)$ beskriver kjemisk potensial for ren væske og p_i^* er damptrykket. Kombineres ligning (2.2) og (2.3) kan det kjemiske potensialet i blandingen sammenlignes med verdiene for det kjemiske potensialet i ren væske.

$$\mu_i^{(l)}(T) - \mu_i^{(l),*}(T) = RT \ln \frac{p_i}{p_i^*} \quad (2.4)$$

Dampen over en ideell væskeblanding vil følge Raoult's lov. Det er fordi at i en ideell væskeblanding er det ingen endring i temperatur ved blanding av komponentene. Dermed vil partialtrykket til komponent i , p_i , være gitt,

$$p_i = x_i p_i^* \quad (2.5)$$

x_i beskriver molbrøkene til hvert av komponentene i . Ved å sette dette inn i ligning (2.4), kan kjemisk potensial for væsken beskrives slik

$$\mu_i^{(l)}(T) = \mu_i^{(l),*}(T) + RT \ln x_i \quad (2.6)$$

Videre bestemmes det kjemiske potensialet til standardtilstanden for å være lik det kjemiske potensialet til ren væske, $\mu_i^{(l),*}(T) = \mu_i^{(l),0}(T)$. Dette medfører,

$$\mu_i^{(l)}(T) = \mu_i^{(l),0}(T) + RT \ln x_i \quad (2.7)$$

Settes ligning (2.7) inn i ligning (2.2), får en et uttrykk for endring av Gibbs energi ved fordampning $\Delta_{vap}G_i(T)$.

$$RT \ln x_i - RT \ln \frac{p_i}{p^0} = \mu_i^{(g),0}(T) - \mu_i^{(l),0}(T) := \Delta_{vap}G_i \quad (2.8)$$

Endring av Gibbs energi ved fordampning kan også uttrykkes som,

$$\Delta_{vap}G_i = \Delta_{vap}H_i - T\Delta_{vap}S_i \quad (2.9)$$

hvor $\Delta_{vap}H_i$ og $\Delta_{vap}S_i$ beskriver henholdsvis fordampningsentalpien og fordampningsentropien av komponent i. Ved komponentenes kokepunkt for ren væske vil temperaturen T være lik T_i^* og $\Delta_{vap}G_i$ være lik 0.

$$\Delta_{vap}S_i = \frac{\Delta_{vap}H_i}{T_i^*} \quad (2.10)$$

Det antas at fordampningsentalpien og fordampningsentropien endres lite i temperaturintervallet som undersøkes. Settes ligning (2.9) og (2.10) inn i ligning (2.8), får en Clausius-Clapeyrons formel dersom $x_i = 1$.

$$\ln \frac{x_i p^0}{p_i} = \frac{\Delta_{vap}H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*} \right) \quad (2.11)$$

Ved å bruke relasjonene

$$\sum_{i=1}^2 x_i = 1, \quad (2.12)$$

og

$$\sum_{i=1}^2 p_i = p, \quad (2.13)$$

hvor p er totaltrykket. Ved å koble disse to relasjonene sammen med ligning (2.11), kan sammensetningen mellom gass- og væskefase i tokomponentsystemet beregnes. Dette gjelder dersom temperaturene ligger mellom kokepunktene T_1^* og T_2^* og at væskefasen er ideell.

Dersom væskefasen ikke er ideell vil ikke Raoults lov gjelde. Normalt er en væske reell, slik at det skjer en varmetoning i blandinger. Det kjemiske potensialet for en reell væskefase vil være gitt ved,

$$\mu_i^{(l)}(T) = \mu_i^{(l),0}(T) + RT \ln a_i \quad (2.14)$$

Aktiviteten a_i definerer forholdet mellom trykket over blandingen og ren væske.

$$a_i = \frac{p_i}{p_i^*} \quad (2.15)$$

Aktiviteten kan i tillegg beregnes ved å bruke aktivitetskoeffisienten til komponent i, γ_i . Aktivitetskoeffisienten er et mål på avviket fra idealitet.

$$a_i = \gamma_i x_i \quad (2.16)$$

På lik måte som for en ideell væskeblanding, kan følgende uttrykk for en reell væskeblanding bestemmes.

$$RT \ln a_i - RT \ln \frac{p_i}{p^0} = \mu_i^{(g),0}(T) - \mu_i^{(l),0}(T) := \Delta_{vap} G_i \quad (2.17)$$

Videre kan dette uttrykket omformes ved hjelp av ligning (2.9) og ligning (2.10), slik at dersom $\gamma_i x_i = 1$ blir Clausius-ligning for reell væskeblanding,

$$\ln \frac{\gamma_i x_i p^0}{p_i} = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right) \quad (2.18)$$

Molfraksjon til dampen y_i kan uttrykkes,

$$y_i = \frac{p_i}{p}, \quad (2.19)$$

slik at ligning (2.18) kan omskrives ved bruk av molfraksjonen til dampen.

$$\ln \gamma_i = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*} \right) + \ln \frac{p y_i}{x_i p^0} \quad (2.20)$$

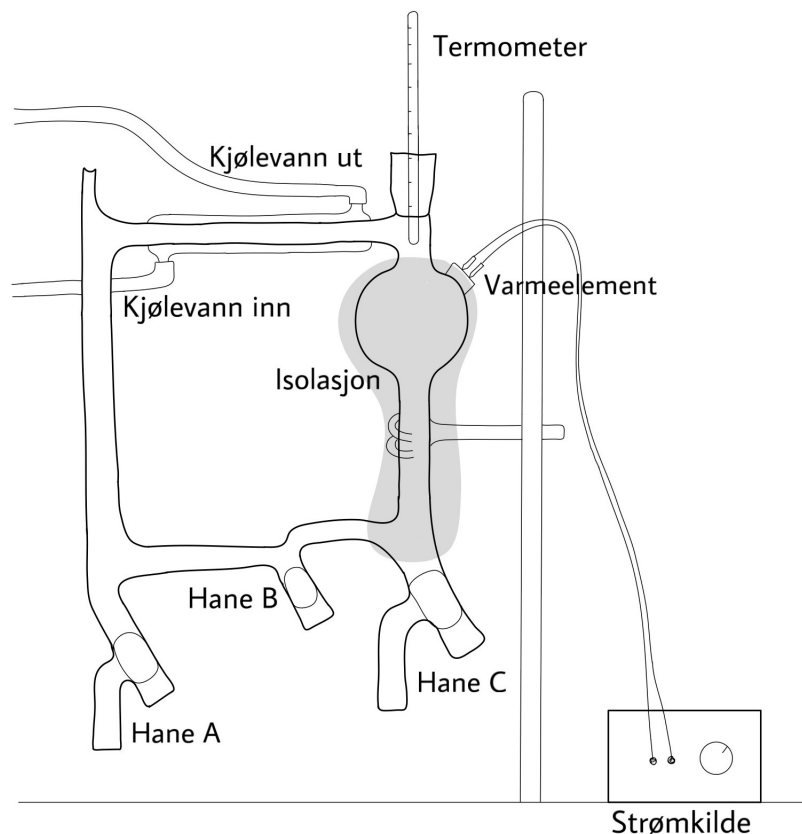
Verdien for aktivitetskoeffisienten (γ_i) kan beregnes når fordampningsentalpi for ren væske i ($\Delta_{vap} H_i$), kokepunkt for ren væske i (T_i^*), koketemperatur (T), totalt trykk (p) og sammensetning i damp- (y_i) og væskefaser (x_i) er bestemt. En aktivitetskoeffisient er egentlig en funksjon av temperatur, men i dette eksperimentet antas det at den ikke er avhengig av temperatur.

Dersom aktivitetskoeffisienten, $\gamma_i = 1$, for begge komponentene i blandingen, vil væskene være ideelle og følge Raoult's lov. Da er vekselvirkningene mellom komponentene like, slik at komponentene blir tilfeldig fordelt i løsningen. Er derimot $\gamma_i > 1$ tyder det på frastøtende krefter mellom komponentene, mens for $\gamma_i < 1$ tyder det på tiltrekkende krefter mellom komponentene i blandingen.

3 Eksperimentelt

3.1 Apparat

Det eksperimentelle oppsettet av forsøket vises i Figur 3.1. Apparaturen brukt i forsøket var en isolert kokebeholder og en kondensatbeholder som ble koblet sammen med et glassrør som sørget for resirkulasjon. Kokebeholder var koblet til en kjøler på den øverste seksjonen som kondenserte dampen fra væsken i kokebeholderen. Væsken ble varmet i kokebeholderen av en glødetråd som var koblet til en spenningskilde med 3,0-3,5 A. Et termometer var montert på toppen av lokket mellom kjøleren og kokebeholderen. Termometeret målte temperaturen av dampen og var ikke i kontakt med væskeblanding.



Figur 3.1: Apparaturl som ble benyttet for gjennomføring av forsøk, for måling av temperatur og damptrykk. ^[1]

3.2 Utførelse

Forsøket ble gjort i avtrekkskap. Det ble laget seks standardløsninger med ulike blandingsforhold av 2-metyl-1-butanol og isopropanol, der brytningsindeksen ble målt med et refraktometer. Volumene vises i Tabell A.1. Brytningsindeksene fra disse blandingene ble brukt til å lage en kalibreringskurve i python med funksjonen `numpy.polyfit()`.

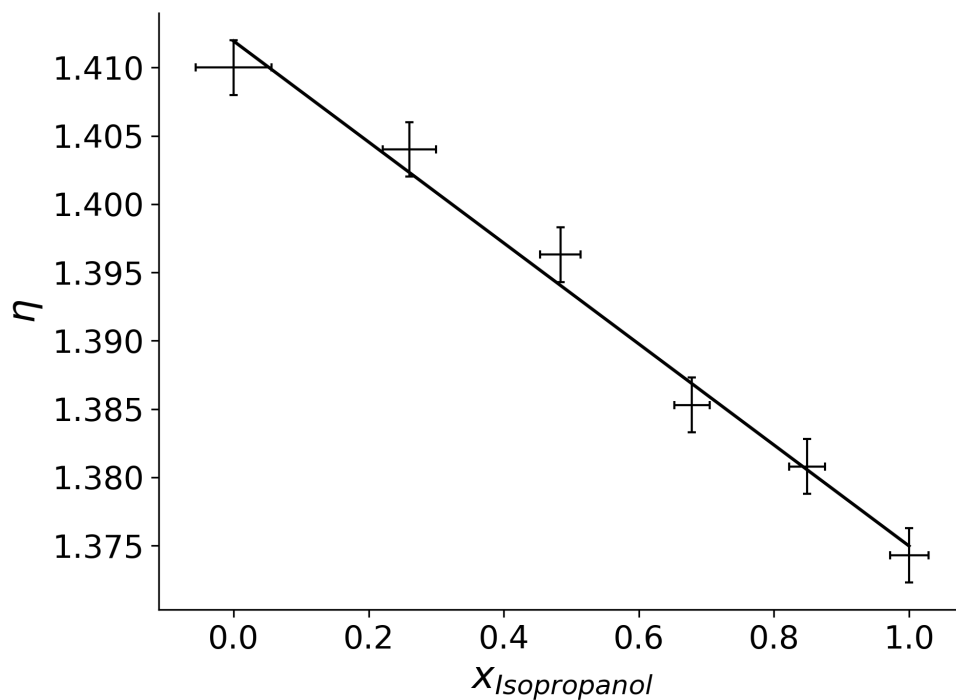
Analysen av tokomponentsystemet startet med å måle trykket. Under forsøket ble alt stoff tilsatt gjennom åpningen der termometeret var festet. 50 mL isopropanol ble tilsatt systemet, og oppvarmet til temperaturen var stabil. Hane B ble holdt åpen for å ha stabil koking og væskesirkulasjon i systemet. Hane A og hane C ble holdt lukket under oppvarming.

Da væskeblandingen hadde stabilisert seg, ble hane B stengt. Kondensatet samlet på venstre side av apparaturen ble tappet av ved å åpne hane A, som deretter ble stengt. Etter at apparaturen hadde fylt seg med mer kondensat, ble det tatt en prøve av kondensatet. Deretter ble det tatt en prøve av væskeblandingen ved å bruke hane C.

10 mL 2-metyl-1-butanol ble tilsatt systemet og hane B ble åpnet. Nye prøver av kondensat og væske ble tatt med samme fremgangsmåte som tidligere. Dette ble gjort ytterligere to ganger. Deretter ble systemet tappet for all væske. Prosessen ble gjentatt, men ved å starte med å tilsette 50 mL 2-metyl-1-butanol, og tilsette 10 mL isopropanol mellom prøvene. Totalt ble det tatt åtte prøver av kondensatet og åtte prøver av væskeblandingen. Til slutt ble brytningsindeksen til prøvene målt med et refraktometer.

4 Resultater

Ved å bruke pythonfunksjonen `numpy.polyfit()` på dataen i Tabell A.1, ble uttrykket for kalibreringskurven bestemt til å være $\eta = (-0,037 \pm 0,003)x_{\text{Isop}} + (1,412 \pm 0,002)$. Kalibreringskurven og datapunktene med usikkerheter vises i Figur 4.1.



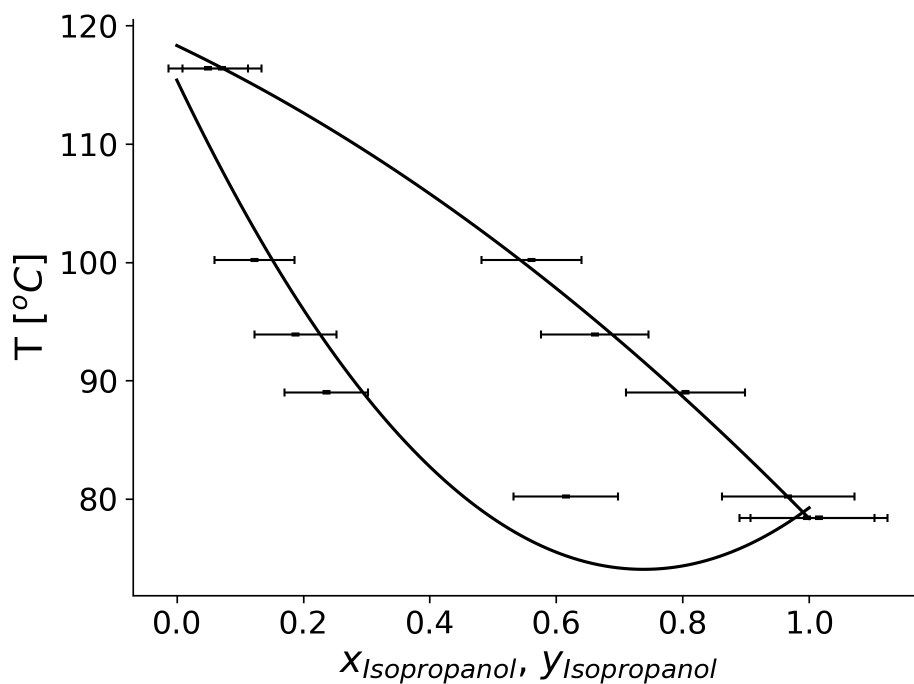
Figur 4.1: Kalibreringskurven for forsøket, og datapunktene fra Tabell A.1 med to usikkerheter.

I Tabell 4.1 vises aktivitetskoeffisientene γ_{Isop} og aktivitetene a_{Isop} .

Tabell 4.1: Aktivitetskoeffisienter og aktiviteter oppgitt med én usikkerhet for prøvene tatt i forsøket.

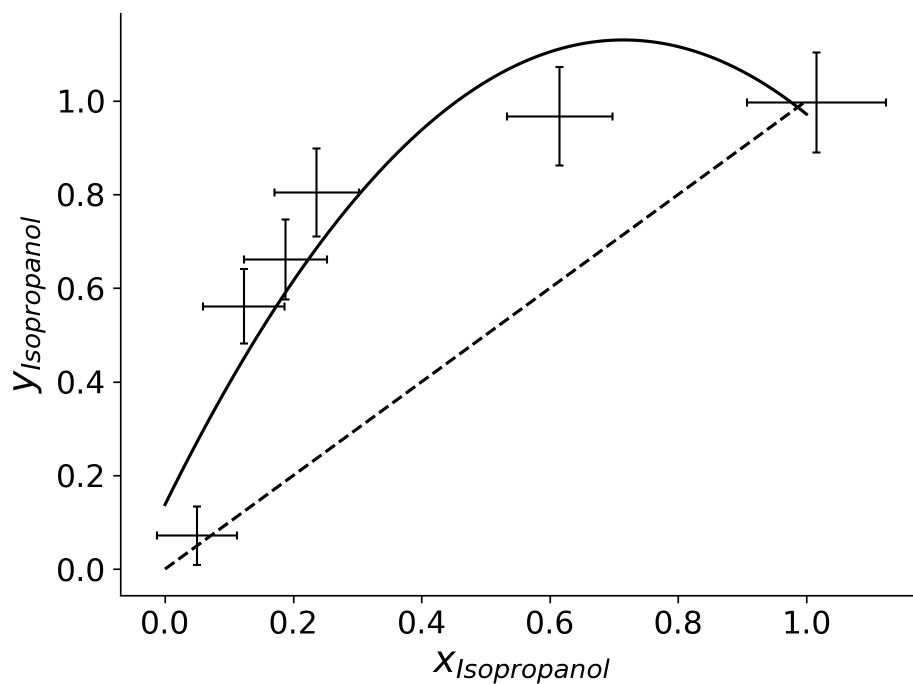
Prøvenr.	γ_{isop}	a_{isop}
1	$0,96 \pm 0,14$	$0,98 \pm 0,18$
2	$1,43 \pm 0,18$	$0,88 \pm 0,29$
5	$0,31 \pm 0,30$	$0,01 \pm 0,21$
6	$1,83 \pm 0,36$	$0,22 \pm 0,21$
7	$1,80 \pm 0,32$	$0,33 \pm 0,14$
8	$2,13 \pm 0,36$	$0,50 \pm 0,14$

Molfraksjonene av isopropanol i kondensatet og i væsken ble plottet mot de målte kokepunktene i et kokepunktsdiagram. Diagrammet vises i Figur 4.2.



Figur 4.2: Kokepunktsdiagram for isopropanol i blanding med 2-metyl-1-butanol. Den øverste linja viser y_{Isop} , mens den nederste viser x_{Isop} . Datapunkter fra Tabell A.2 og B.2 er plottet med én usikkerhet.

Figur 4.3 viser molfraksjonene av isopropanol i væsken plottet mot molfraksjonen i kondensatet.



Figur 4.3: Molfraksjonen y_{Isop} av isopropanol i kondensatet, plottet mot molfraksjonen x_{Isop} av isopropanol i væsken. Den stiplede linjen $y = x$ gjelder for en ideell væske etter Raoults lov, og er inkludert for sammenligning. Datapunktene fra Tabell B.1 er plottet med én usikkerhet.

5 Diskusjon

Kalibreringskurven i Figur 4.1 viser at alle punktene faller innenfor regresjonsområdet når de plottes med en usikkerhet på to standardavvik. Regresjonskurven gir altså en god beskrivelse av sammenhengen mellom målepunktene. Det er likevel relativt stor usikkerhet, og denne kommer hovedsakelig fra unøyaktigheter i standardprøvene.

Fasediagrammet i Figur 4.2 avviker fra idealitet, og dette er spesielt sant for væskefasen. Avviket er ikke like stort for kondensatfasen. Usikkerheten er også så stor at det er vanskelig å fastslå om fasen oppfører seg ideelt. Årsaken til at væskefasen ikke er ideell kan være varmetoning ved blanding av stoffene, som alltid vil forekomme i reelle blandinger.

Figur 4.3 viser at blandingen av isopropanol og 2-metyl-1-butanol ikke er en azeotrop. Dette er fordi kurven for molfraksjonene i væske- og kondensatfasen ikke krysser linjen $y_{\text{Isop}} = x_{\text{Isop}}$, utenom for ren isopropanol, hvor dette er forventet. Kondensatet hadde høyere konsentrasjon av isopropanol enn 2-metyl-1-butanol i alle prøver bestående av de to komponentene. Isopropanol kan derfor sies å være den mest flyktige komponenten, og er den som vil dampe av først ved destillasjon.^[2]

Aktivitetskoeffisientene til isopropanol ble bestemt til å være over 1 for alle blandinger med en tilstrekkelig mengde av begge komponentene. For prøve 1 var aktivitetskoeffisienten ca. 1, som var forventet ettersom prøven bestod av ren isopropanol. For prøve 5 var x_{Isop} tilnærmet 0 slik at aktivitetskoeffisienten til isopropanol får liten betydning. At aktivitetskoeffisientene hovedsakelig var over 1 tyder på at det virker frastøtende krefter mellom komponentene i blandingen, og at blandingen ikke følger Raoult's lov. Dette vil si at blandingen samlet sett ikke er ideelle.

Ettersom gasser oppfører seg ideelt ved høy temperatur og lavt trykk, ble det i beregningene antatt ideell gasslov. Det ble også antatt likevekt mellom væske- og kondensatfase. Dette er en rimelig antakelse når temperatur og trykk holdes konstant, som var tilfellet her. Ettersom temperaturintervallet under forsøket er lite, er det rimelig å anta at fordampningsentalpien og fordampningsentropien er tilnærmet konstante under forsøket.

Usikkerhetene i resultatene stammer fra måleutstyret og fra regresjonen. Målingene for både kalibreringskurven og for tokomponentsystemet var varierende. Dette resulterte i relativt store usikkerheter som følge av regresjonen av kalibreringskurven. I tillegg var de målte kokepunktene til isopropanol og 2-metyl-1-butanol flere grader under tabellverdiene. Derfor er det rimelig å anta at usikkerhetene stammer fra unøyaktige målinger av temperatur og brytningsindeks. Ettersom temperaturene avviker fra tabellverdiene antas det at unøyaktige temperaturmålinger er hovedfeilkilden i forsøket.

6 Konklusjon

I dette eksperimentet ble aktiviteten og aktivitetskoeffisienten til isopropanol bestemt ved å se på sammenhengen mellom kokepunkt og sammensetningen i et tokomponentsystem bestående av isopropanol og 2-metyl-1-butanol. Aktivitetskoeffisientene ble bestemt til å være større enn 1 for blandingen, hvilket indikerer frastøtende krefter mellom isopropanol og 2-metyl-1-butanol. Ved å plote molfraksjonene av isopropanol i gass og væskefase mot hverandre ble det vist at komponentene kan separeres ved destillasjon. Hovedfeilkilden i forsøket var unøyaktige målinger av temperaturen.

Referanser

- [1] K. R. Kristiansen, A. Broggi, and S. Kjelstrup, “Prosjekter i TKJ4162-Fysikalsk kjemi: Kjemisk termodynamikk.” https://ntnu.blackboard.com/bbcswebdav/pid-1245242-dt-content-rid-33516461_1/xid-33516461_1.pdf. (Hentet 16.02.2021).
- [2] P. Atkins, J. Paula, and J. Keeler, *Atkins' Physical Chemistry 11th edt.* Oxford, 2018. s. 164-172 and 179-181.
- [3] Wiley, *Aylward, G.H and Finlay, SI Chemical Data 7th edt.* Australia, 2014.

A Eksperimentelle data

Tabell A.1 presenterer data brukt til å lage kalibreringskurven.

Tabell A.1: Sammensetning og brytningsindeks brukt for å lage kalibreringskurve. Her beskriver V_{Isop} og V_{2M1B} oppmålt volum av henholdsvis isopropanol og 2-metyl-1-butanol, og η viser brytningsindeksen. Usikkerheten stammer fra måleinstrumentene.

Parallell	V_{Isop} [mL]	V_{2M1B} [mL]	η
1	$5,0 \pm 0,1$	0	$1,3744 \pm 0,0010$
2	$4,0 \pm 0,1$	$1,0 \pm 0,1$	$1,3808 \pm 0,0010$
3	$3,0 \pm 0,1$	$2,0 \pm 0,1$	$1,3853 \pm 0,0010$
4	$2,0 \pm 0,1$	$3,0 \pm 0,1$	$1,3963 \pm 0,0010$
5	$1,0 \pm 0,1$	$4,0 \pm 0,1$	$1,4040 \pm 0,0010$
6	0	$5,0 \pm 0,1$	$1,4100 \pm 0,0010$

Tabell A.2 viser diverse målte data for prøvene i dette eksperimentet.

Tabell A.2: Målte data for prøvene tatt i forsøket: Kokepunkt, trykk og brytningsindeks for kondensat og væskefase. Usikkerheten stammer fra måleinstrumentene.

Prøvenr	T [°C]	p [mmHg]	η_K	η_V
1	$78,4 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3751 \pm 0,0010$	$1,3738 \pm 0,0010$
2	$80,2 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3762 \pm 0,0010$	$1,3892 \pm 0,0010$
3	$85,1 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3702 \pm 0,0010$	$1,4012 \pm 0,0010$
4	$95,6 - 107,2 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3812 \pm 0,0010$	$1,4082 \pm 0,0010$
5	$116,4 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,4093 \pm 0,0010$	$1,4181 \pm 0,0010$
6	$100,2 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3912 \pm 0,0010$	$1,4074 \pm 0,0010$
7	$93,9 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3875 \pm 0,0010$	$1,4050 \pm 0,0010$
8	$89,0 \pm 0,1$	$736 \pm 0,5$	$1,3822 \pm 0,0010$	$1,4032 \pm 0,0010$

Grunnet feil på lab, hvilket resulterte i for lite væske i systemet, ble prøve 3 og 4 utelatt fra analysen av resultatene. Ettersom målingene avviker fra generelle trender, i tillegg til at målingene ble gjort på feil grunnlag som følge av at systemet hadde for lite væske.

Tabell A.3 vises fysikalske data for isopropanol og 2-metyl-1-butanol.

Tabell A.3: Fysikalske data^[3] for forbindelsene brukt i forsøket. M er molar masse, ρ er tetthet, T_b er kokepunkt og $\Delta_{\text{vap}}H$ er fordampningsentalpi.

Forbindelse	M [g mol ⁻¹]	ρ [g mL ⁻¹]	T_b [°C]	$\Delta_{\text{vap}}H$ [kJ mol ⁻¹]
Isopropanol	60,1	0,781	82,3	45
2-metyl-1-butanol	88,2	0,815	128	54

B Beregninger

B.1 Kalibreringskurve

Antall mol av en forbindelse i væskefase er gitt ved

$$n_i = \frac{\rho_i V_i}{M_i} \quad (\text{B.1})$$

Molfraksjonen av en komponent i en løsning er gitt ved,

$$x_i = \frac{n_i}{n_{\text{tot}}} \quad (\text{B.2})$$

Hvor n_{tot} er summen av antall mol av alle komponentene i en løsning.

Ved å kombinere ligning (B.1) og ligning (B.2), og ved å skrive om uttrykket, kan molfraksjonen av isopropanol i parallellene fra Tabell A.1 bestemmes ved,

$$x_{\text{Isop}} = \frac{\rho_{\text{Isop}} V_{\text{Isop}} M_{2\text{M1B}}}{\rho_{\text{Isop}} V_{\text{Isop}} M_{2\text{M1B}} + \rho_{2\text{M1B}} V_{2\text{M1B}} M_{\text{Isop}}} \quad (\text{B.3})$$

Molfraksjonen av isopropanol til parallell 2 beregnes ved ligning (B.3). Verdier brukt i utregningen er hentet fra Tabell A.1 og Tabell A.3.

$$x_{\text{Isop}} = \frac{0,781 \text{ g mL}^{-1} \cdot 4,0 \text{ mL} \cdot 88,2 \text{ g mol}^{-1}}{0,781 \text{ g mL}^{-1} \cdot 4,0 \text{ mL} \cdot 88,2 \text{ g mol}^{-1} + 0,815 \text{ g mL}^{-1} \cdot 1,0 \text{ mL} \cdot 60,1 \text{ g mol}^{-1}} = 0,85$$

Molfraksjonen av isopropanol er 0,85. Dette virker rimelig ettersom volumet av isopropanol i parallell 2 er mye høyere enn volumet av 2-metyl-1-butanol. Resultatet presenteres i Tabell B.1, og de resterende molfraksjonene beregnes på tilsvarende måte som for parallell 2.

Tabell B.1: Molfraksjoner av isopropanol i parallellene brukt til kalibreringskurve. Volum av de ulike komponentene er gitt i Tabell A.1. Molfraksjonene er oppgitt med én usikkerhet.

Parallell	x_{Isop}
1	1
2	$0,85 \pm 0,013$
3	$0,68 \pm 0,013$
4	$0,48 \pm 0,015$
5	$0,26 \pm 0,02$
6	0

B.2 Aktivitetskoeffisient

Molfraksjonene x_{Isop} og y_{Isop} ble funnet ved å omforme uttrykket for kalibreringskurven presentert i Resultater.

$$x_{\text{Isop}} = \frac{\eta - b}{a} \quad (\text{B.4})$$

For å finne molfraksjonen av isopropanol i væske- og gassfase brukes ligning (B.4), og verdier hentes ut fra Tabell A.2. Molfraksjonene blir funnet for prøve 2.

$$x_{\text{Isop}} = \frac{1,3892 - 1,412}{-0,037} = 0,62$$

$$y_{\text{Isop}} = \frac{1,3762 - 1,412}{-0,037} = 0,97$$

Molfraksjonen av isopropanol i væske- og gassfase utregnes til å være henholdsvis 0,62 og 0,97. Resultatet presenteres i Tabell B.2 og molfraksjonene for de andre prøvenummerene beregnes på tilsvarende måte som for prøve 2.

Tabell B.2: Molfraksjoner av isopropanol for prøvene i væske- og gassfase, henholdsvis x_{Isop} og y_{Isop} . Molfraksjonene er oppgitt med en usikkerhet.

Prøvenr.	x_{Isop}	y_{Isop}
1	$1,02 \pm 0,11$	$0,99 \pm 0,11$
2	$0,62 \pm 0,08$	$0,97 \pm 0,10$
5	$0,05 \pm 0,06$	$0,07 \pm 0,06$
6	$0,12 \pm 0,06$	$0,56 \pm 0,08$
7	$0,19 \pm 0,06$	$0,66 \pm 0,08$
8	$0,24 \pm 0,07$	$0,80 \pm 0,09$

Aktivitetskoeffisientene ble beregnet ved å bruke ligning (2.20). Aktivitetene ble deretter beregnet ved ligning (2.16). Verdier brukt for å finne aktivitetskoeffisienten og aktivitetene er hentet fra Tabell A.2, Tabell A.3 og Tabell B.2. For T_i^* brukes målingen av kokepunktet til prøve 1. Som p^0 brukes 1 bar ≈ 750 mmHg.

$$\gamma_{\text{Isop}} = \exp \left(\frac{45 \text{ kJ mol}^{-1}}{8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}} \cdot \left(\frac{1}{353,35 \text{ K}} - \frac{1}{351,55 \text{ K}} \right) \right) \cdot \frac{736 \text{ mmHg} \cdot 0,97}{750 \text{ mmHg} \cdot 0,67} = 1,43$$

$$a_{\text{Isop}} = 1,43 \cdot 0,62 = 0,88$$

Aktivitetskoeffisienten og aktiviteten til isopropanol er henholdsvis 1,43 og 0,88 for prøve 2. Resultatet er presentert i Tabell 4.1 sammen med resultatene for de andre prøvenummerene. Disse er beregnet på tilsvarende måte.

C Usikkerhetsberegninger

Feilforplantningen i beregningene ble beregnet ved Gauss' feilforplantingslov.

$$s_w = \sqrt{\sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial w}{\partial x_i} s_{x_i} \right)^2} \quad (\text{C.1})$$

Hvor w er en funksjon av variablene x_i , s_w er standardavviket til funksjonen w og s_{x_i} er usikkerheten i målingene av variablene x_i .

C.1 Kalibreringskurve

Ved å bruke ligning (C.1) på ligning (B.3), vil uttrykket for usikkerheten til x_{Isop} være gitt ved,

$$s_{x_{\text{Isop}}} = \sqrt{\left(\frac{\partial x_{\text{Isop}}}{\partial V_{\text{Isop}}} s_{V_{\text{Isop}}} \right)^2 + \left(\frac{\partial x_{\text{Isop}}}{\partial V_{2\text{M1B}}} s_{V_{2\text{M1B}}} \right)^2} \quad (\text{C.2})$$

hvor

$$\frac{\partial x_{\text{Isop}}}{\partial V_{\text{Isop}}} = \frac{\rho_{\text{Isop}} M_{\text{Isop}} \rho_{2\text{M1B}} M_{2\text{M1B}} V_{2\text{M1B}}}{(\rho_{\text{Isop}} V_{\text{Isop}} M_{2\text{M1B}} + \rho_{2\text{M1B}} V_{2\text{M1B}} M_{\text{Isop}})^2}$$

og

$$\frac{\partial x_{\text{Isop}}}{\partial V_{2\text{M1B}}} = \frac{-\rho_{\text{Isop}} M_{\text{Isop}} \rho_{2\text{M1B}} M_{2\text{M1B}} V_{\text{Isop}}}{(\rho_{\text{Isop}} V_{\text{Isop}} M_{2\text{M1B}} + \rho_{2\text{M1B}} V_{2\text{M1B}} M_{\text{Isop}})^2}$$

C.2 Aktivitetskoeffisient

Usikkerheten i molfraksjonene for de ulike prøvene beregnes ved å bruke Gauss' forplantingslov på ligning (B.4),

$$s_{x_{\text{Isop}}} = \sqrt{\left(\frac{s_\eta}{a} \right)^2 + \left(\frac{-s_b}{a} \right)^2 + \left(\frac{(\eta - b)s_a}{a^2} \right)^2} \quad (\text{C.3})$$

Tilsvarende ble Gauss forplantningslov brukt på (2.20). Det er fem variable i uttrykket: x_i , y_i , p , T og T^* ,

$$s_{\gamma_i}^2 = \left[\exp \left(\frac{\Delta_{\text{vap}} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right) \right) \right]^2 \left[\left(\frac{-p y_i}{p^0 x_i^2} s_{x_i} \right)^2 + \left(\frac{p}{p^0 x_i} s_{y_i} \right)^2 + \left(\frac{y_i}{p^0 x_i} s_p \right)^2 + \left(\frac{-p y_i \Delta_{\text{vap}} H_i}{p^0 x_i R T^2} s_T \right)^2 + \left(\frac{p y_i \Delta_{\text{vap}} H_i}{p^0 x_i R T^{*2}} \right)^2 \right] \quad (\text{C.4})$$

Gauss' forplantingslov brukt på ligning 2.16 gir uttrykket for usikkerheten i aktiviteten,

$$s_{a_i} = \sqrt{(x_i s_{\gamma_i})^2 + (\gamma_i s_{x_i})^2} \quad (\text{C.5})$$