Tokomponent - faselikevekt

Vegard Gjeldvik Jervell, Mats Kulås og Aamund Westermoen 19. juni 2019

Sammendrag

I dette forsøket ble aktivitetskoeffisienten til 2-metyl-1-butanol i en blanding med isopropanol bestemt for ulike konsentrasjoner, og det ble laget et fasediagram som relaterte sammensetning i kondensat og væskefase med kokepunktet til væskefasen. Dette ble bestemt fra målinger av kokepunkt for væskeblandinger med ulik konsentrasjon av komponentene og bruk av ligninger utledet fra antagelser om likevekt mellom damp og væske. Feil i temperaturer målt under forsøket antas å være den største feilkilden, da det var store forskjeller mellom litteraturverdier og målte verdier for kokepunktene til de rene komponentene.

Innhold

1	Introduksjon	3
2	Teori	3
3	Eksperimentelt	5
4	Resultater	6
5	Diskusjon	9
6	Konklusjon	9
Α	Målinger	12
в	Beregninger	13
С	Usikkerhetsanalyse	16
D	Symbolliste	18

1 Introduksjon

I en væskeblanding vil intermolekylære krefter variere ut i fra hvilke molekyler som interagerer. Styrken av kreftene bestemmer kokepunktet til væskeblandingen, og om stoffene i blandingen kan skilles ved destillasjon. Forståelse av dette er viktig blant annet i industrielle prosesser hvor blandinger av væsker skal separeres. De intermolekylære kreftene beskrives med aktivitetskoeffisienten γ , som kan bestemmes fra målinger av kokepunkt og sammensetning av væsken og dens damp, og ligninger utledet fra antagelser om ideell gass og likevekt mellom gass og væske. I dette forsøket skal aktivitetskoeffisienten til 2-metyl-1-butanol i en blanding med isopropanol bestemmes, og et fasediagram som relaterer kokepunkt med sammensetning i gass- og væskefase for blandingen lages.

2 Teori

I et tokomponentsystem av ideell væskeblanding og væskens damp vil

$$\mu_i(g,T) = \mu_i(l,T),\tag{2.1}$$

være gjeldende ved likevekt mellom væske og gass for begge komponentene. μ_i er her kjemisk potensial for komponent *i*. Ved bruk av ideell gasslov kan denne ligningen omskrives til

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

hvor $\mu_i^0(g,T)$ er kjemisk potensial for gassfasen ved standardtrykk p^0 lik 1 bar, og p_i er partielltrykket til komponent *i*. For rene komponenter vil ligning (2.2) bli

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

hvor p_i^* og $\mu_i^*(l,T)$ er henholdsvis damptrykket og det kjemiske potensialet til en ren komponent *i*. Disse kan kombineres for å finne forskjellen mellom det kjemiske potensialet i ren og utblandet form:

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

For en ideell væskeblanding vil dampen over væsken følge Raoults lov^[1], og partielltrykket til komponent i vil være gitt ved

$$p_i = x_i \cdot p_i^*. \tag{2.5}$$

Her er p_i , x_i og p_i^* henholdsvis partielltrykket, molfraksjonen i væskefasen og damptrykket til komponent *i*. Ved å definere potensialet til en ren væske som standardpotensial $\mu_i^0(l,T)$ og sette inn i ligning (2.4) får man

$$\mu_i(l,T) = \mu_i^0(l,T) + RT \ln x_i.$$
(2.6)

Dette satt inn i ligning (2.2) gir

$$RT\ln x_i - RT\ln \frac{p_i}{p^0} = \mu_i^0(g, T) - \mu_i^0(l, T) = \Delta_{vap}G_i.$$
 (2.7)

Ved temperaturen T vil

$$\Delta_{vap}G_i = \Delta_{vap}H_i - T\Delta_{vap}S_i, \qquad (2.8)$$

og ved kokepunktet T_i^* er $\Delta_{vap}G_i = 0$. Da er

$$\Delta_{vap}S_i = \frac{\Delta_{vap}H_i}{T_i^*}.$$
(2.9)

Dette kan brukes til å skrive om ligning (2.7) til

$$\ln \frac{x_i p^0}{p_i} = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*}\right). \tag{2.10}$$

Sammen med relasjonene

$$\sum_{i=1}^{2} x_i = 1,$$

$$\sum_{i=1}^{2} p_i = p,$$
(2.11)

hvor p er totaltrykket, kan ligning (2.10) benyttes til å beregne sammensetning i gassfase og væskefase for tokomponentblandingen, gitt at temperaturen ligger mellom kokepunktene til komponent 1 og 2 og at væskefasen er ideell. For reelle væskeblandinger vil ikke Raoults lov gjelde, og potensialet til væskefase må skives som

$$\mu_i(l,T) = \mu_i^0(l,T) + RT \ln a_i, \qquad (2.12)$$

hvor a_i er aktiviteten til komponent i definert ved

$$a_i = \frac{p_i}{p_i^*}.\tag{2.13}$$

Den kan beregnes ved å innføre størrelsen γ_i , som er aktivitetskoeffisienten til komponent *i*. Den beskriver avviket væskeblandingen har fra idealitet:

$$a_i = \gamma_i x_i. \tag{2.14}$$

Ved å sette inn a_i for x_i i ligning (2.10) får man

$$\ln \frac{x_i \gamma_i p^0}{p_i} = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*}\right). \tag{2.15}$$

Molfraksjonen y_i i dampfasen er gitt ved

$$y_i = \frac{p_i}{p},\tag{2.16}$$

og dette kan benyttes til å omskrive ligning (2.15) til

$$\ln \gamma_i = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*} \right) + \ln \frac{p y_i}{p^0 x_i}.$$
(2.17)

Hvis man kjenner fordampningsentalpi og kokepunkt for en ren væske, det totale trykket og koketemperaturen til blandingen kan denne ligningen brukes til å beregne γ_i fra sammensetningen av væske- og gassfasen. Hvis γ_1 er 1 følger blandingen Raoults lov, og kreftene som virker mellom komponent 1 og komponent 2 er like store som kreftene mellom komponent 1 og 1. Hvis den er mindre enn 1 er kreftene mellom komponent 1 og 2 sterkere enn mellom komponent 1 og 1, og motsatt hvis γ_1 er større enn 1^[2].

3 Eksperimentelt

ved å åpne henholdsvis hane C og A.

3.1 Utstyr

Apparaturen brukt i forsøket er vist i figur 3.1, og består av en isolert kokebeholder og en kondensatbeholder som er tilknyttet med glassrør som sikrer sirkulasjon. Den øvre sammenkoblingen er innebygget en kjøler som sørger for kondensasjon av gass som kommer fra kokebeholderen. Kokebeholderen inneholder en glødetråd tilkoblet en spenningskilde som virker som et varmeelement. Blandingen tilsettes og kokes i kokebeholderen, og temperatur av gass måles med et termometer plassert i overgangen mellom kokebeholderen og kjølerøret. Sirkulasjon oppnås ved å åpne hane B, mens væskefase og kondensat tappes av

3.2 Utførelse

Barometertrykk ble målt. Løsninger med sammensetning i henhold til tabell A.3 ble laget, og en kalibreringskurve ble laget fra brytningindeksene målt for løsningene med refraktometer. Så ble 60 mL 2-metyl-1-butanol fylt i kokebeholderen, varmen ble slått på og hane B ble åpnet slik at løsningen sirkulerte. Da temperaturen hadde stabilisert seg og blandingen hadde sirkulert i minst 30 sekunder ble hane B lukket, og det ble tatt prøver fra væskefasen og kondensatet. 11 mL isopropanol ble så tilsatt og hane B ble åpnet. Da temperaturen hadde stabilisert seg og blandingen hadde sirkulert ble hane B lukket og prøver ble tatt. Dette ble repetert for alle løsningene i tabell A.1. Brytningsinndeksen til prøvene fra kondensat og væskefase ble så bestemt med refraktometer. Tabell 3.1 viser fysikalsk data for isopropanol og 2-metyl-1-butanol brukt i beregninger.



Figur 3.1: Apparatur benyttet i forsøket

4 Resultater

Målinger gjort i forsøket er vist i tabell A.1 og A.2. Figur 4.4 viser sammensetning i dampfase som funksjon av sammensetning i væskefase. Kalibreringskurven laget fra data i tabell A.3 er vist i figur 4.1, og koeffisientene fra lineærregresjonen er vist i tabell B.2. Aktivitetskoeffisienten til 2-metyl-1-butanol som funksjon av konsentrasjon 2-metyl-1-butanol i væskefasen er vist i figur 4.2. Molfraksjon av isopropanol i kondensat og væskefase plottet mot kokepunkt er vist i figur 4.3. Aktiviteten til 2-metyl-1-butanol ble beregnet til 0.136 ± 0.005 for konsentrasjon av 2-metyl-1-butanol lik 0.91 ± 0.02. Utregninger er vist i vedlegg B. Usikkerheter er oppgitt med ett standardavvik.

Tabell 3.1: Fysikalske data for isopropanol og 2-metyl-1-butanol^[3]

Forbindelse	$\frac{\Delta_{vap}H}{\mathrm{kJmol}^{-1}}$	$\frac{\rho}{\mathrm{gcm}^{-3}}$	$\frac{M}{\mathrm{gmol}^{-1}}$
Isopropanol 2-metyl-1-butanol	$\begin{array}{c} 45\\54\end{array}$	$0.781 \\ 0.815$	$ \begin{array}{r} 60.1 \\ 88.2 \end{array} $



Figur 4.1: Kalibreringskurven benyttet til å beregne molfraksjon av isopropanol i prøvene



Figur 4.2: Aktivitetskoeffisient til 2-metyl-1-butanol som funksjon av konsentrasjon 2-metyl-1-butanol i væskefasen



Figur 4.3: Kokepunkt som funksjon av sammensetning i kondensat og væskefase



Figur 4.4: Molfraksjon av isopropanol i kondensat som funksjon av molfraksjon i væskefase

5 Diskusjon

Aktivitetskoeffisienten til 2-metyl-1-butanol var mindre enn 1 for alle konsentrasjonene i figur 4.2, noe som betyr at væskeblandingen ikke var ideell, da kreftene mellom 2-metyl-1-butanol og isopropanol var sterkere enn kreftene mellom 2metyl-1-butanolmolekylene. Den beregnede aktiviteten til 2-metyl-1-butanol var lavere enn korresponderende konsentrasjon, noe som også antyder avvik fra idealitet. Likevel viser figur 4.3 at blandingen av 2-metyl-1-butanol og isopropanol ikke var en azeotrop, da sammensetningene i væskefase og kondensat kun var like for rene komponenter. Aktivitetskoeffisientene med lav usikkerhet i figur 4.2 viser også at dette er tilfelle, da de varierer lite med sammensetningen av væsken, noe som kjennetegner væskeblandinger som ikke er azeotroper. Dette betyr at ingen blanding av isopropanol og 2-metyl-1-butanol vil ha høyere kokepunkt enn kokepunktet til den rene komponenten med høvest kokepunkt, eller lavere enn den med lavest kokepunkt, og komponentene kan derfor skilles ved destillasjon. Figur 4.4 viser at kondensatet hadde høvest konsentrasjon av isopropanol i alle prøvene som ikke var ren 2-metyl-1-butanol. Isopropanol var derfor den mest flyktige komponenten, og ved destillasjon er det denne komponenten som hovedsaklig vil dampe av. I figur 4.2 er ikke den beregnede aktivitetskoeffisienten for den laveste konsentrasjon av 2-metyl-1-butanol vist. Denne var tilnærmet lik 0, og ble sett bort ifra da denne avvek veldig fra andre målte verdier, hadde stor usikkerhet, og det ikke er relevant å beskrive aktiviteten til komponenter som ikke befinner seg i løsningen. Den beregnede verdien er likevel oppgitt i tabell B.3. Antagelsene gjort i forsøket var ideell gass og likevekt mellom gassfase og væskefase. Gasser oppfører seg tilnærmet ideelt ved høye temperaturer og lave trykk^[4], så antagelsen om ideell gass stemmer sannsynligvis godt. Litteraturverdien for kokepunktene til 2-metyl-1-butanol og isopropanol er henholdsvis 129 °C og 83 °C $^{[3]},$ mens målte verdier var 118 °C og 78 °C. At kokepunktene til de rene komponenten ikke stemmer overens med litteraturverdiene antyder enten at systemet ikke var i likevekt, eller at termometeret var feilkalibrert. Uansett vil dette være en feilkilde. Kalibreringskurven vist i figur 4.1 viser de fleste punktene ligger veldig nære kurven, noe som antyder at bruk av refraktometer for å bestemmme konsentrasjonen i prøvene er en nøyaktig målemetode. Den største feilkilden fra målingene er derfor sannsynligvis temperaturen.

6 Konklusjon

Kokepunkt for blandinger av 2-metyl-1-butanol og isopropanol med ulik sammensetning ble målt, og nøyaktig sammensetning ble bestemt ved bruk av refraktometer. Disse dataene ble brukt til å beregne aktivitetskoeffisienten til 2-metyl-1-butanol for ulike væskesammensetninger, regne ut aktiviteten til 2-metyl-1-butanol for én konsentrasjon, samt å lage et fasediagram med kokepunkt som funksjon av sammensetning i væskefase og kondensat. Aktiviteten ble beregnet til 0.136 \pm 0.005 for en konsentrasjon av 2-metyl-1-butanol lik 0.91 \pm 0.02, og fasediagrammet viste at komponentene kan skilles ved destillasjon. Stor for-

skjell på litteraturverdier og målte verdier for kokepunkter til rene komponenter antyder at målte temperaturer ikke nødvendigvis stemmer overens med faktiske verdier. Dette var sannsynligvis den største feilkilden i forsøket.

Referanser

- B. Pedersen. Raoults lov. https://snl.no/Raoults_lov, 2017. Hentet 26.03.2019.
- [2] S. Kjelstrup. Prosjekter i KJ1042 Grunnleggende termodynamikk med laboratorium. Tapir Akademiske forlag, 10th edition, 2016. s. 33-39.
- [3] Allan G. Blackman. Aylward and Findlay's SI chemical data. Wiley, 7th edition, 2014.
- [4] B. Pedersen. ideal gass. https://snl.no/ideal_gass, 2019. Hentet 26.03.2019.

A Målinger

Tabell A.1 viser sammensetning og kokepunkt for prøvene i forsøket, samt trykket i rommet da prøvene ble tatt. Figur A.2 viser to målinger av brytningsindeks for både kondensat og væskefase for prøvene beskrevet i tabell A.1. Tabell A.3 viser sammensetning og brytningindeks for prøvene benyttet til å lage kalibreringskurven.

Prøvenummer	$V_{MB}[\mathrm{mL}]$	$V_{ISOP}[\mathrm{mL}]$	$T_K[^{\circ}C]$	P[cmHg]
1	60 ± 1	0	118.0 ± 0.1	75.7 ± 0.05
2	60 ± 1	11 ± 1	98.8 ± 0.1	75.7 ± 0.05
3	60 ± 1	18 ± 1	95.1 ± 0.1	75.7 ± 0.05
4	60 ± 1	27 ± 1	91.8 ± 0.1	75.6 ± 0.05
5	0	60 ± 1	78.0 ± 0.1	75.6 ± 0.05
6	10 ± 1	60 ± 1	80.0 ± 0.1	75.6 ± 0.05
7	21 ± 1	60 ± 1	82.4 ± 0.1	75.6 ± 0.05
8	52 ± 1	60 ± 1	90.2 ± 0.1	75.6 ± 0.05

Tabell A.1: Kokepunkt målt for ulike løsninger

Tabell A.2: Brytningsindekser målt i forsøket

Prøvenummer	η_{V1}	η_{V2}	η_{K1}	η_{K2}
1	1.4098 ± 0.0003	1.4098 ± 0.0003	1.4096 ± 0.0003	1.4096 ± 0.0003
2	1.4061 ± 0.0003	1.4061 ± 0.0003	1.3900 ± 0.0003	1.3899 ± 0.0003
3	1.4041 ± 0.0003	1.4041 ± 0.0003	1.3885 ± 0.0003	1.3891 ± 0.0003
4	1.4037 ± 0.0003	1.4037 ± 0.0003	1.3844 ± 0.0003	1.3844 ± 0.0003
5	1.3765 ± 0.0003	1.3766 ± 0.0003	1.3767 ± 0.0003	1.3768 ± 0.0003
6	1.3823 ± 0.0003	1.3823 ± 0.0003	1.3776 ± 0.0003	1.3778 ± 0.0003
7	1.3889 ± 0.0003	1.3888 ± 0.0003	1.3783 ± 0.0003	1.3784 ± 0.0003
8	1.3972 ± 0.0003	1.3974 ± 0.0003	1.3831 ± 0.0003	1.3830 ± 0.0003

Tabell A.3: Målinger til kalibreringskurve

$V_{MB}[\mathrm{mL}]$	$V_{ISO}[\mathrm{mL}]$	η_1	η_2
5 ± 0.2	0	1.3768 ± 0.0003	1.3768 ± 0.0003
5 ± 0.2	1.6 ± 0.2	1.3842 ± 0.0003	1.3840 ± 0.0003
5 ± 0.2	2 ± 0.2	1.3884 ± 0.0003	1.3921 ± 0.0003
5 ± 0.2	3 ± 0.2	1.3885 ± 0.0003	1.3885 ± 0.0003
0	5.3 ± 0.2	1.4100 ± 0.0003	1.4100 ± 0.0003
1 ± 0.2	5 ± 0.2	1.4082 ± 0.0003	1.4082 ± 0.0003
2 ± 0.2	5 ± 0.2	1.4006 ± 0.0003	1.4005 ± 0.0003
3 ± 0.2	5 ± 0.2	1.3971 ± 0.0003	1.3971 ± 0.0003

B Beregninger

B.1 Kalibreringskurve

Stoffmengde av isopropanol og 2-metyl-1-butanol i prøvene som ble brukt til å lage kalibreringskurven ble beregnet fra volum av de respektive komponentene ved

$$n_i = \frac{\rho_i V_i}{M_i}.\tag{B.1}$$

Hvor ρ_i er tettheten, M_i er molar masse og V_i er volum til komponent *i*. Molfraksjon av isopropanol i en prøve er gitt ved,

$$x_{iso} = \frac{n_{iso}}{n_{iso} + n_{mb}}.$$
(B.2)

Molfraksjon av isopropanol uttrykt ved volum av de to komponentene blir dermed $\hfill K$

$$x_{iso} = \frac{\rho_{iso} V_{iso} M_{mb}}{\rho_{iso} V_{iso} M_{mb} + \rho_{mb} V_{mb} M_{iso}}$$
(B.3)

Volumene vist i tabell A.3 og konstantene vist i tabell 3.1 innsatt i likning (B.3) gav fraksjonene vist i tabell B.1, beregning av usikkerhet i fraksjoner er vist i vedlegg C. Med verdier fra rad nummer 2 i tabell B.1 blir utregningen:

$$x_{iso} = \frac{0.781 \text{ g/cm} \cdot 5.0 \text{ mL} \cdot 88.2 \text{ g/mol}}{0.781 \text{ g/cm} \cdot 5.0 \text{ mL} \cdot 88.2 \text{ g/mol} + 0.815 \text{ g/cm} \cdot 1.6 \text{ mL} \cdot 60.1 \text{ g/mol}} = 0.81$$
(B.4)

Det ble laget en kalibreringskurve fra punktene vist i tabell A.3. Lineærregresjon av datapunktene med molfraksjon langs førsteaksen og brytningsindeks langs andreaksen med numpy.polyfit() returnerte koeffisientene vist i tabell B.2. Kalibreringskurven er vist i figur 4.1.

Tabell B.1: Molfraksjoner av isopropanol i prøver til kalibreringskurve

$V_{ISO}[\mathrm{mL}]$	$V_{MB}[\mathrm{mL}]$	x_{iso}
5.0 ± 0.2	0	1
5.0 ± 0.2	1.6 ± 0.2	0.81 ± 0.02
5.0 ± 0.2	2.0 ± 0.2	0.78 ± 0.02
5.0 ± 0.2	3.0 ± 0.2	0.70 ± 0.016
0	5.3 ± 0.2	0
1.0 ± 0.2	5.0 ± 0.2	0.22 ± 0.03
2.0 ± 0.2	5.0 ± 0.2	0.36 ± 0.02
3.0 ± 0.2	5.0 ± 0.2	0.46 ± 0.02

Koeffisient	Verdi	Varians
Vinkelkoeffisient (a)	-0.035	1.95e-06
Konstantledd (b)	1.41	7.68e-07

B.2 Aktivitetskoeffisient

Molfraksjon av isopropanol i prøvene ble beregnet fra brytningsindeks og koeffisientene til kalibreringskurven ved

$$x_{iso} = \frac{\eta - b}{a} \tag{B.5}$$

hvora og ber henholdsvis vinkelkoeffisient og konstantledd til kalibreringskurven og η er brytningsindeksen. Molfraksjon av 2-metyl-1-butanol ble beregnet fra fraksjon av isopropanol ved

$$x_{mb} = 1 - x_{iso}.\tag{B.6}$$

Videre ble aktivitetskoeffisienten beregnet fra

$$\gamma_i = \exp\left(\frac{\Delta_{vap}H_{MB}}{R}\left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_i^*}\right) + \ln\left(\frac{p}{p^0}\frac{y_i}{x_i}\right)\right). \tag{B.7}$$

Brytningsindeksene vist i tabell A.2 ga molfraksjonene og aktivitetskoeffisientene vist i tabell B.3.

Tabell B.3: Aktivitetskoeffisienter og molfraksjoner av 2-metyl-1-butanol i væskefase og kondensat beregnet fra brytningsindeksen til prøvene beskrevet i tabell $\underline{A.1}$

Måling	x_{mb} i væskefase	$\boldsymbol{x_{mb}}$ i kondensat	γ_{mb}
1	0.91 ± 0.02	0.90 ± 0.02	0.149 ± 0.005
2	0.80 ± 0.018	0.35 ± 0.013	0.155 ± 0.007
3	0.75 ± 0.017	0.32 ± 0.014	0.18 ± 0.09
4	0.73 ± 0.017	0.20 ± 0.016	0.13 ± 0.11
5	-0.02 ± 0.02	-0.02 ± 0.02	0.8 ± 1
6	0.13 ± 0.017	0.01 ± 0.02	0.06 ± 0.14
7	0.32 ± 0.014	0.03 ± 0.02	0.07 ± 0.05
8	0.55 ± 0.013	0.16 ± 0.017	0.15 ± 0.017

B.3 Forskjell på a_{mb} og x_{mb}

Aktiviteten til 2-metyl-1-butanol kan beregnes fra

$$a_{mb} = \gamma_{mb} x_{mb}, \tag{B.8}$$

hvor *a* er aktivitet, γ er aktivitetskoeffisient og *x* er molfraksjon i væskefase. Ved $x_{mb} = 0.91 \pm 0.02$ ble γ_{mb} beregnet til 0.136 \pm 0.005. Aktiviteten til 2metyl-1-butanol, beregnet fra likning (B.8) med $x_{mb} = 0.91 \pm 0.02$, blir dermed $a_{mb} = 0.136 \pm 0.005$. Beregning av usikkerheten er vist i vedlegg C.

C Usikkerhetsanalyse

Usikkerheten i størrelser beregnet fra verdier målt under forsøket ble beregnet med Gauss feilforplantningslov, gitt ved

$$s_F^2 = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial x_i} s_{x_i}\right)^2,\tag{C.1}$$

hvor Fer en funksjon av variablen
e $x_i,\,s_F$ er usikkerhet iF og
 s_{x_i} er usikkerhet i $x_i.$

C.1 Aktivitetskoeffisient

Ligningen brukt for å beregne aktivitetskoeffisienten er

$$\ln \gamma_i = \frac{\Delta_{vap} H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_i^*} \right) + \ln \frac{p y_i}{p^\circ x_i}.$$
 (C.2)

Usikkerheten kommer her fra usikkerheten
i y_i og $x_i,\,T,\,T_i^*$ og $p.\ s_{\gamma_i}$ er der
for gitt ved

$$s_{\gamma_{i}}^{2} = \left(\frac{\partial\gamma_{i}}{\partial y_{i}}s_{y_{i}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\gamma_{i}}{\partial x_{i}}s_{x_{i}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\gamma_{i}}{\partial T}s_{T}\right)^{2} \\ + \left(\frac{\partial\gamma_{i}}{\partial T_{i}^{*}}s_{T_{i}^{*}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\gamma_{i}}{\partial p}s_{p}\right)^{2} \\ = \exp\left(\frac{\Delta_{vap}H_{i}}{R}\left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{i}^{*}}\right]\right)^{2}\left[\left(\frac{p}{p^{\circ}x}s_{y_{i}}\right)^{2} + \left(\frac{-py_{i}}{p^{\circ}x^{2}}s_{x_{i}}\right)^{2} \\ + \left(\frac{-py_{i}\Delta_{vap}H_{i}}{RT^{2}}s_{T}\right)^{2} + \left(\frac{py_{i}\Delta_{vap}H_{i}}{R(T_{i}^{*})^{2}}s_{T_{i}^{*}}\right)^{2} + \left(\frac{y}{p^{\circ}x}s_{p}\right)^{2}\right].$$
(C.3)

C.2 Kalibreringskurve

Molfraksjon av isopropanol i prøvene brukt i kalibreringskurven ble beregnet med likning (B.3). Gauss feilforplantningslov gir dermed

$$s_{x_{iso}}^2 = \left(\frac{\partial x_{iso}}{\partial V_{iso}} s_{V_{iso}}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_{iso}}{\partial V_{mb}} s_{V_{mb}}\right)^2,\tag{C.4}$$

hvor

$$\frac{\partial x_{iso}}{\partial V_{iso}} = \frac{\rho_{iso} M_{mb} \rho_{mb} M_{iso} V_{mb}}{(\rho_{iso} M_{mb} V_{iso} + \rho_{mb} M_{iso} V_{mb})^2} \tag{C.5}$$

og

$$\frac{\partial x_{iso}}{\partial V_{mb}} = \frac{-\rho_{mb}M_{iso}\rho_{iso}M_{mb}V_{iso}}{(\rho_{mb}M_{iso}V_{mb} + \rho_{iso}M_{mb}V_{iso})^2}.$$
(C.6)

Usikkerhetene i fraksjoner vist i tabell B.1 er beregnet fra tilhørende verdier for V_{mb} og V_{iso} , og fysikalske data vist i tabell 3.1 med disse likningene.

C.3 Molfraksjoner

Usikkerheten i molfraksjon av isopropanol ble beregnet fra standardavvik i koeffisientene til kalibreringskurven og usikkerhet i brytningsindeks. Molfraksjon ble beregnet fra brytningsindeks ved likning (B.5). Dermed blir usikkerhet i molfraksjon gitt ved

$$s_{x_{iso}}^{2} = \left(\frac{\partial x_{iso}}{\partial \eta}s_{\eta}\right)^{2} + \left(\frac{\partial x_{iso}}{\partial b}s_{b}\right)^{2} + \left(\frac{\partial x_{iso}}{\partial a}s_{a}\right)^{2}$$

$$s_{x_{iso}} = \sqrt{\left(\frac{s_{\eta}}{a}\right)^{2} + \left(\frac{-s_{b}}{a}\right)^{2} + (\eta s_{a})^{2}}$$
(C.7)

Standardavviket i koeffisientene til kalibreringskurven er kvadratet av variansene gitt i tabell B.2. Usikkerhet i molfraksjon av 2-metyl-1-butanol ble beregnet ved Gauss feilforplantningslov fra usikkerhet i molfraksjon av isopropanol. Molfraksjon av 2-metyl-1-butanol ble beregnet fra likning (B.6). Usikkerhet i x_{mb} er da gitt ved

$$s_{x_{mb}}^{2} = \left(\frac{\partial x_{mb}}{\partial x_{iso}} s_{x_{iso}}\right)^{2}$$

$$s_{x_{mb}} = s_{x_{iso}}.$$
(C.8)

Usikkerhetene i prøvene vist i tabell B.3 er beregnet fra variansene gitt i tabell B.2 og brytningsindeksene gitt i tabell A.2.

C.4 Aktivitet

Aktiviteter er beregnet fra molfraksjoner og aktivitetskoeffisienter ved likning B.8. Usikkerhet i aktivitet fra gauss feilforplantningslov er dermed gitt ved

$$s_{a_i} = \sqrt{(x_i s_{\gamma_i})^2 + (\gamma_i s_{x_i})^2}.$$
 (C.9)

Innsatt for $x_{mb} = 0.91 \pm 0.02$ og $\gamma_{mb} = 0.149 \pm 0.005$ gir dette $s_{a_{mb}} = 0.005$.

D Symbolliste

Symbol Forklaring		Forklaring
_	$\Delta_{vap}H$	Fordampningsentalpi[J/mol]
	$\Delta_{vap}S$	Fordampningsentropi[J/mol]
	$\Delta_{vap}G$	Endring i Gibbs fri energi ved fordampning [J/mol]
	T_i^*	Kokenpunktet til ren komponent i[K]
	μ	Kjemisk potensial[J/mol]
	μ^0	Standard kjemisk potensial[J/mol]
	μ^*	Kjemisk potensial for ren komponent[J/mol]
	x_i	Molfraksjon i væskefasen til komponent i
	y_i	Molfraksjon i gassfasen til komponent i
	R	Den universelle gasskonstanten lik $8.314472\mathrm{J/Kmol}$
	T	Temperatur [K]
	p_{i}	Partialtrykk til en komponent i [Pa]
	p_{i}^{*}	Damptrykk til ren komponent i [Pa]
	p^0	Standard trykk lik 1 bar
	p	Totalt trykk[Pa]
	a_{i}	Aktiviteten til en komponent i
	γ_i	Aktivitetskoeffisienten til komponent i
	V_{MB}	Volum 2-metyl-1-butanol[m ³]
	V_{ISO}	Volum isopropanol[m ³]
	T_K	Kokepunkt[K]
	η_{Vi}	Brytningsindeks væskefase i måling i
_	η_{Ki}	Brytningsindeks kondensat i måling i