

UNIFAC49 v1.01

Plataforma: HP49G

ROM: probado únicamente en la 1.19-6

Tipo: librería (nº 1095)

Bytes: 15498.5

Checksum: 50CB h

Descripción: estimación de coeficientes de actividad para equilibrios vapor-líquido mediante el método de contribución de grupos UNIFAC.

Instalación

- Transfiere la librería a la calculadora.
- Colócala en el nivel 1 de la pila.
- Teclea 0, 1 ó 2 dependiendo del puerto donde quieras instalarla y a continuación presiona [STO].
- Reinicia la calculadora ([ON]+[C]).

Funcionamiento

Accediendo al menú de la librería se pueden ver cinco opciones, éstas son, de derecha a izquierda:

[Acerca.de.U49]

Información sobre el programa.

[Ayuda.U49]

Archivo donde se describen los argumentos de entrada y salida.

[Grupos.U49]

Listado de los grupos funcionales.

[DBU49]

Base de datos con estructuras UNIFAC para diversos compuestos.

[UNIFAC]

Es el programa principal, requiere tres argumentos de entrada:

3: { {Estructura UNIFAC compuesto 1}
 {Estructura UNIFAC compuesto 2}
 ...
 {Estructura UNIFAC compuesto n} }

2: { Fracción molar compuesto 1
 Fracción molar compuesto 2
 ...
 Fracción molar compuesto n }

1: Temperatura (K)

Salida:

1: { Coeficiente actividad compuesto 1
 Coeficiente actividad compuesto 2
 ...
 Coeficiente actividad compuesto n }

La estructura UNIFAC de un compuesto debe introducirse de la siguiente manera:

{ $g_1 f_1 g_2 f_2 \dots g_n f_n$ }

donde g_i es el número del subgrupo funcional y f_i su frecuencia (número de veces que se repite).

La lista de fracciones molares no puede contener ningún cero, de lo contrario se producirá un error (Bad Argument Value).

Si la suma de dicha lista es superior a 1.000001 ó inferior a 0.999999 es normalizada dividiendo cada elemento por la suma de todos ellos.

Los grupos funcionales son los siguientes:

[1] CH3		[12] ACCH3	
[2] CH2		[13] ACCH2	
[3] CH		[14] ACCH	ACCH2
[4] C	CH2		
		[15] OH	
[5] CH2=CH			
[6] CH=CH		[16] CH3OH	
[7] CH2=C			
[8] CH=C		[17] H2O	
[9] C=C	C=C		
		[18] ACOH	
[10] ACH			
[11] AC	ACH	[19] CH3CO	
		[20] CH2CO	CH2CO

[21] CHO		[55] CH ₃ NO ₂	
[22] CH ₃ COO		[56] CH ₂ NO ₂	
[23] CH ₂ COO	COOC	[57] CHNO ₂	CNO ₂
[24] HCOO		[58] ACNO ₂	
[25] CH ₃ O		[59] CS ₂	
[26] CH ₂ O		[60] CH ₃ SH	
[27] CH-O		[61] CH ₂ SH	CH ₃ SH
[28] FCH ₂ O	CH ₂ O	[62] Furfural	
[29] CH ₃ NH ₂		[63] (CH ₂ OH) ₂	DOH
[30] CH ₂ NH ₂		[64] I	
[31] CHNH ₂	CNH ₂	[65] Br	
[32] CH ₃ NH		[66] CH=-C	
[33] CH ₂ NH		[67] C=-C	C=-C
[34] CHNH	CNH	[68] DMSO	
[35] CH ₃ N		[69] ACRY	
[36] CH ₂ N	C ₃ N	[70] Cl(C=C)	ClCC
[37] ACNH ₂		[71] ACF	
[38] C ₅ H ₅ N		[72] DMF-1	
[39] C ₅ H ₄ N		[73] DMF-2	DMF
[40] C ₅ H ₃ N	Pyridine	[74] CF ₃	
[41] CH ₃ CN		[75] CF ₂	
[42] CH ₂ CN	CCN	[76] CF	CF ₂
[43] COOH		[77] COO	
[44] HCOOH	COOH	[78] SiH ₃	
[45] CH ₂ Cl		[79] SiH ₂	
[46] CHCl		[80] SiH	
[47] CCl	CCl	[81] Si	SiH ₂
[48] CH ₂ Cl ₂		[82] SiH ₂ O	
[49] CHCl ₂		[83] SiHO	
[50] CCl ₂	CCl ₂	[84] SiO	SiO
[51] CHCl ₃		[85] NMP	
[52] CCl ₃	CCl ₃		
[53] CCl ₄			
[54] ACCl			

Ejemplo

Supongamos una mezcla formada por etanol (fracción molar 0.3), acetona (fracción molar 0.2) y agua (fracción molar 0.5) a 298.15 K

El etanol está constituido por una unidad del grupo 1, una unidad del grupo 2, y una unidad del grupo 15.

Acetona: una unidad del grupo 1, una unidad del grupo 19.

Agua: una unidad del grupo 17.

Por lo tanto, los datos de entrada son:

3: { { 1 1 2 1 15 1 } { 1 1 19 1 } { 17 1 } }

2: { 0.3 0.2 0.5 }

1: 298.15

Y la solución que se obtiene es:

1: { 1.274 1.791 1.480 }

siendo éstos los coeficientes de actividad para el etanol, acetona y agua respectivamente.

Observación:

Si eliges los compuestos de la base de datos, utiliza el comando →LIST (puedes teclearlo o acceder a él mediante [Cambio izquierdo] [CAT] [F6] [F4]) para introducirlos en una lista una vez que los tengas en la pila.

En el nivel uno de la misma debe estar el número de elementos con el que quieres formar la lista.

UNIFAC49 v1.01 por Aquilino Nicolás Sánchez

Murcia (España), Nov-2003

Para cualquier comentario, sugerencia o informar de errores puedes dirigirte a:
ans.iq@wanadoo.es