

ชื่อ.....รหัส.....

มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์
คณะวิศวกรรมศาสตร์

การสอบปลายภาค ประจำปีการศึกษาที่ 1

ประจำปีการศึกษา 2547

วันที่ : 2 ตุลาคม 2547

เวลา : 9.00 – 12.00 น.

วิชา : 230-613 Fluid Phase Equilibria

ห้อง : ทุนยนต์

ทฤษฎีในการสอบ โทษขั้นต่ำคือ ปรับตกในรายวิชาที่ทฤษฎี และพักการเรียน 1 ภาคการศึกษา

- คำสั่ง: 1) อนุญาตให้นำเอกสาร หนังสือ เครื่องคำนวณ ทุกชนิดเข้าห้องสอบได้
- 2) ทำข้อสอบทุกข้อด้วยดินสอหรือปากกา
- 3) มีตารางข้อมูลทั้งหมด 4 หน้า เป็นข้อมูลเกี่ยวกับ physical properties, chemical properties และ Conversion factors

หน้าที่	ข้อที่	คะแนนเต็ม	คะแนนที่ได้
2	1-2	6	
3	3-4	10	
4	5	6	
5	6	6	
6	7	5	
7	8	6	
8	9	7	
9	Properties of solvents	-	
10	Data from Yaws (1999)	-	
11	Data from R. Sander(1999)	-	
12	Conversion factors	-	
	คะแนนรวม	40	

อ. ลือพงศ์ แก้วศรีจันทร์

ชื่อ.....รหัส.....

1. (4 คะแนน) จงนิยามสัญลักษณ์ต่อไปนี้

K_{AW}

K'_{AW}

H

H'

2. (2 คะแนน) จงแสดงที่มาของความสัมพันธ์ $H = K_{AW}RT$ โดยการกำหนดข้อสมมุติ (assumption) ประกอบ

ชื่อ.....รหัส.....

3. (4 คะแนน) จงนำตัวเลขใส่ในวงเล็บให้ถูกต้อง (ห้ามตอบซ้ำ)

1. high Henry's constant () Hydrophilic
2. high volatility () Hydrophobic
3. low Kow
4. low volatility

4. (6 คะแนน) สมการ (8.3) ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอกติวิตี ค่าสัมประสิทธิ์ฟิวกาซีตี ค่าเศษส่วนเชิง โมลในวัฏภาคของเหลว และค่าความดันไอของสารบริสุทธิ์ ดังนี้

$$H' = \frac{P_i}{X_i} = \frac{\gamma_i P_i^s}{\phi_i} \quad (8.3)$$

มีข้อสมมุติ (assumption) บางประการในการเปลี่ยนรูปสมการ (8.3) มาเป็นสมการ (*) ดังนี้

$$H' = \frac{P_i^s}{X_i^s} \quad (*)$$

จงแสดงการอนุพัทธ์ (derivation) สมการดังกล่าวพร้อมทั้งกำหนดข้อสมมุติ ที่ใช้

ชื่อ.....รหัส.....

5. (6 คะแนน) ให้ใช้แบบจำลอง Klopmann หาค่า Log Kow ของสารเคมีต่อไปนี้

5.1 1, 4 – Dichlorobenzene

5.2 phenol

ให้เปรียบเทียบค่าที่คำนวณได้กับข้อมูลของ Yaws (1999)

ชื่อ.....รหัส.....

6. (6 คะแนน) จากเอกสารของ Rolf Sander (1999) ท่านคิดว่าข้อมูลของ reference ฉบับใด ที่ให้ค่าคงที่ของเฮนรี ณ อุณหภูมิ 25°C ของสารเคมีต่อไปนี้ :

(6.1) 1,2,3 trimethylbenzene

(6.2) m-xylene

ใกล้เคียงกับค่า จากข้อมูลของ C.C. Yaws (1999) มากที่สุด ให้แสดงการคำนวณประกอบ

ชื่อ.....รหัส.....

7. (5 คะแนน) จงใช้สมการของ Mackay and shiu คำนวณค่า K_{AW} ณ อุณหภูมิ 25°C ของ 1,2 dimethylbenzene โดยใช้ข้อมูล C_w^s จาก C.C. Yaws (1999)

ชื่อ.....รหัส.....

8. (6 คะแนน) An equimolar binary mixture of two non-polar similar components is at 50°C . At this temperature $P_1^s = 0.436$ Bar, and $P_2^s = 0.517$ Bar. The activity coefficient of component 1 in the mixture at this temperature is given by : $\ln \gamma_1 = 1.204 x_2^2$ and for component 2 is : $\ln \gamma_2 = 1.204 x_1^2$

(a) Determine the vapor pressure of the equimolar mixture.

(b) Determine the mole fraction of components in the vapor phase.

Note : Equimolar means both mole fractions in a binary system are equal.

ชื่อ.....รหัส.....

9. (7 คะแนน) The binary mixture: chloroform (1) – ethanol (2) at 55°C is well represented with the Margules equation in the form :

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 [A_{12} + 2(A_{21} - A_{12})x_1]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 [A_{21} + 2(A_{12} - A_{21})x_2]$$

Find the coefficients in these equations from the azeotrope composition and pressure:

$$x_1 = 0.84 \quad P = 0.08667 \text{ Mpa}$$

The pure-component vapor pressures of these components are

$$P_1^s = 0.0824 \text{ MPa} \quad P_2^s = 0.03731 \text{ Mpa}$$

PROPERTIES OF COMMON SOLVENTS

This table gives properties of 133 frequently used organic solvents. Compounds are listed in alphabetical order by the most common name; a systematic name or synonym is given below the primary name. The properties given are:

MF:	Molecular formula
CAS RN:	Chemical Abstracts Service Registry Number
M_r :	Molecular weight
T_m :	Melting point in °C
T_b :	Boiling point in °C
ρ :	Density at 25°C in g/mL
c_p :	Specific heat capacity at constant pressure at 25°C in J/g K
p_v :	Vapor pressure at 25°C in kPa (1 kPa = 7.50 torr)
μ :	Electric dipole moment in debye units
T_{FP} :	Flash point temperature in °C
Fl. Lim.:	Flammable (explosive) range in air in percent by volume
T_{AI} :	Autoignition temperature in °C
TLV:	Threshold limit for airborne concentration, given in parts per million by volume at 25°C and 100.325 kPa (see table "Threshold Limit Values for Airborne Contaminants")

REFERENCES

1. P. H. Howard, Ed., *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data*, Vol. II, Solvents, Lewis Publishers, Chelsea, MI 48118, 1990.
2. D. Walsh, Ed., *Chemical Safety Data Sheets*, Vol. 1, Solvents, Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., 1989.
3. *Fire Hazard Properties of Flammable Liquids, Gases, and Volatile Solids*, NFPA 325M, National Fire Protection Association, Quincy, MA, 1984.
4. J. A. Riddick and W. B. Bunger, *Techniques of Chemistry*, Vol. II, Organic Solvents, Wiley-Interscience, New York, 1970.

Name/ Synonym	MF	CAS RN	M_r	T_m /°C	T_b /°C	ρ /g mL ⁻¹	c_p /J g ⁻¹ K ⁻¹	p_v /kPa	μ /D	T_{FP} /°C	Fl. Lim.	T_{AI} /°C	TLV
Acetic acid Ethanoic acid	C ₂ H ₄ O ₂	64-19-7	60.05	17	118	1.0429	2.05	2.1	1.74	43	5-16%	427	10
Acetone 2-Propanone	C ₃ H ₆ O	67-64-1	58.08	-95	56	0.7856	2.17	31	2.88	-19	3-13%	538	750
Acetonitrile Ethanenitrile	C ₂ H ₃ N	75-05-8	41.05	-44	82	0.7793	2.23	11.8	3.924	6	4-16%	524	40
Adiponitrile	C ₆ H ₈ N ₂	111-69-3	108.14	1	295	0.9599	1.19	<0.01	—	93	2-5%	550	—
Benzene	C ₆ H ₆	71-43-2	78.11	6	80	0.8729	1.74	12.7	0	-11	1-8%	560	10
Bromoform	CHBr ₃	75-25-2	252.73	8	149	2.8761	0.52	0.73	0.99	83	—	—	0.5
<i>o</i> -Xylene 1,2-Dimethylbenzene	C ₈ H ₁₀	95-47-6	106.17	-25	144	0.8764	1.75	0.88	—	17	1-6%	464	100
<i>m</i> -Xylene 1,3-Dimethylbenzene	C ₈ H ₁₀	108-38-3	106.17	-48	139	0.8608	1.72	1.13	—	25	1-7%	528	100
<i>p</i> -Xylene 1,4-Dimethylbenzene	C ₈ H ₁₀	106-42-3	106.17	13	138	0.8577	1.71	1.19	0	25	1-7%	529	100

Table 5.15 | Values of K_{ow} , water solubilities and Henry's law constants for selected organic compounds

Compound	$\log K_{ow}$	Water solubility mg/L	K_H atm/M
Data from Yaws for 25°C			
Halogenated aliphatic compounds			
Methanes			
Chloromethane	0.91	5,900	8.2
Dichloromethane	1.25	19,400	2.5
Chloroform	1.97	7,500	4.1
Bromoform	2.4	3,100	0.59
Carbon tetrachloride	2.83	790	29
Dichlorodifluoromethane	2.16	18,800	390
Ethanes			
Chloroethane	1.43	9,000	6.9
1,1-Dichloroethane	1.79	5,000	5.8
1,2-Dichloroethane	1.48	8,700	1.18
1,1,1-Trichloroethane	2.49	1,000	22
1,1,2-Trichloroethane	1.89	4,400	0.92
Hexachloroethane	3.91	8	25
Ethenes			
Vinyl chloride	1.62	2,700	22
1,1-Dichloroethene	2.13	3,400	23
1,2- <i>cis</i> -Dichloroethene	1.86	3,500	7.4
1,2- <i>trans</i> -Dichloroethene	2.09	6,300	6.7
Trichloroethene	2.42	1,100	11.6
Tetrachloroethene	3.4	150	26.9
Aromatic compounds			
Hydrocarbons			
Benzene	2.13	1,760	5.6
Toluene	2.73	540	6.4
Ethylbenzene	3.15	165	8.1
Styrene	2.95	322	2.6
<i>o</i> -Xylene	3.12	221	4.2
<i>m</i> -Xylene	3.2	174	6.8
<i>p</i> -Xylene	3.15	200	6.2
1,2,3-Trimethylbenzene	3.66	36	7.4
1,2,4-Trimethylbenzene	4.02	35	
Napthalene	3.3	32	0.46 (20°C)
Phenanthrene	4.46	1.18	
Anthracene	4.45	0.053	
Fluorene	4.18	1.89	
Other aromatic compounds			
Chlorobenzene	2.84	390	4.5
1,2-Dichlorobenzene	3.43	92	2.8
1,3-Dichlorobenzene	3.53	123	3.4
1,4-Dichlorobenzene	3.44	80	
1,2,4-Trichlorobenzene			3.0
Hexachlorobenzene	5.73	0.0047	

Table 5.15 | (continued)

Compound	$\log K_{ow}$	Water solubility mg/L	K_H atm/M
Data from Yaws for 25°C			
Other aromatic compounds			
Nitrobenzene	1.85	1,940	0.021
3-Nitrotoluene	2.45	500	0.075
Phenol	1.46	80,000	0.00076
Diethyl phthalate	2.47	1,000	0.00014
2-Chlorophenol	2.15	25,000	0.037
3-Chlorophenol	2.5	25,000	0.00204
Dibenzofuran	4.12		
Other aliphatic compounds			
Methyl <i>t</i> -butyl ether	0.94	51,000	0.54
Methyl ethyl ketone	0.29	250,000	0.030
Data from Schnoor et al. for 20°C			
2-Nitrophenol	1.75	2,100	
Benzo(a)pyrene	6.06	0.0038	0.00049
Acrolein	0.01	210,000	0.0038
Alachlor	2.92	240	
Atrazine	2.69	33	
Pentachlorophenol	5.04	14	
DDT	6.91	0.0055	0.038
Lindane	3.72	7.52	0.0048
Dieldrin	3.54	0.2	0.0002
2,4-D	1.78	900	0.00000172

Sources: C. L. Yaws, "Chemical Properties Handbook." McGraw-Hill, New York, 1999. Schnoor et al., "Processes, Coefficients, and Models for Simulating Toxic Organics and Heavy Metals in Surface Waters." U.S. Environmental Protection Agency, EPA/600/3-87/015, June 1987.

substance	k_H^\ominus [M/atm]	$\frac{-d \ln k_H}{d(1/T)}$ [K]	reference	type	note
1,2-dimethylbenzene $C_6H_4(CH_3)_2$ (o-xylene) [95-47-6]	1.9×10^{-1}		<i>Hine and Mookerjee</i> [1975]	V	
	2.0×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	1.9×10^{-1}	3400	<i>Robbins et al.</i> [1993]	M	
	2.5×10^{-1}	4200	<i>Dewulf et al.</i> [1995]	M	
	2.9×10^{-1}	5400	<i>Wasik and Tsang</i> [1970]	M	
	2.4×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
	1.9×10^{-1}	3200	<i>Ashworth et al.</i> [1988]	X	3
	1.9×10^{-1}	4000	<i>Staudinger and Roberts</i> [1996]	L	
	2.1×10^{-1}	5600	<i>Bissonette et al.</i> [1990]	X	3
1,3-dimethylbenzene $C_6H_4(CH_3)_2$ (m-xylene) [108-38-3]	1.6×10^{-1}		<i>Hine and Mookerjee</i> [1975]	V	
	1.4×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	1.6×10^{-1}	4000	<i>Dewulf et al.</i> [1995]	M	
	1.7×10^{-1}		<i>Bohon and Claussen</i> [1951]	V	
	1.5×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
	1.3×10^{-1}	3300	<i>Ashworth et al.</i> [1988]	X	3
	1.3×10^{-1}	4200	<i>Staudinger and Roberts</i> [1996]	L	
	1.4×10^{-1}	6000	<i>Bissonette et al.</i> [1990]	X	3
1,4-dimethylbenzene $C_6H_4(CH_3)_2$ (p-xylene) [106-42-3]	1.6×10^{-1}		<i>Hine and Mookerjee</i> [1975]	V	
	1.4×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	1.7×10^{-1}	4500	<i>Dewulf et al.</i> [1995]	M	
	1.6×10^{-1}		<i>Bohon and Claussen</i> [1951]	V	
	2.3×10^{-1}	5400	<i>Wasik and Tsang</i> [1970]	M	
	1.6×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
	1.2×10^{-1}	3000	<i>Hansen et al.</i> [1993]	X	3
	1.2×10^{-1}	5300	<i>Bissonette et al.</i> [1990]	X	3
	1.3×10^{-1}	3500	<i>Ashworth et al.</i> [1988]	X	3
	1.3×10^{-1}	3800	<i>Staudinger and Roberts</i> [1996]	L	
1,2,3-trimethylbenzene $C_6H_3(CH_3)_3$ [526-73-8]	3.1×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	2.7×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
1,2,4-trimethylbenzene $C_6H_3(CH_3)_3$ [95-63-6]	1.7×10^{-1}		<i>Hine and Mookerjee</i> [1975]	V	
	1.7×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	1.5×10^{-1}	4300	<i>Hansen et al.</i> [1995]	M	
	1.8×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
	1.5×10^{-1}	4200	<i>Hansen et al.</i> [1993]	X	3
1,3,5-trimethylbenzene $C_6H_3(CH_3)_3$ (mesitylene) [108-67-8]	1.7×10^{-1}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	1.2×10^{-1}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39
	1.4×10^{-1}	3600	<i>Ashworth et al.</i> [1988]	X	3
1,2,4,5-tetramethylbenzene $C_6H_2(CH_3)_4$	4.0×10^{-2}		<i>Mackay and Shiu</i> [1981]	L	
	3.9×10^{-2}		<i>Yaws and Yang</i> [1992]	?	39

TABLE XI-3 (CONTINUED)

To convert from:	To:	Multiply by:
British thermal unit (Btu, International Table)	joule	1.0550404E+03
Btu/(pound-mass·°F)	joule/(kilogram·kelvin)	4.1840000*E+03
Btu/second	watt	1.0550404E+03
calorie (thermochemical)	joule	4.1840000*E+00
cal/(gram·°C)	joule/(kilogram·kelvin)	4.1868000*E+03
centimeter	meter	1.0000000*E-02
centimeter of mercury (0°C)	pascal	1.3332237E+03
centimeter of water (4°C)	pascal	9.80638E+01
degree Fahrenheit (°F)	kelvin	$T_K = (T_F + 459.67)/1.8$
degree Rankine (°R)	kelvin	1/1.8
dyne	newton	1.0000000*E-05
erg	joule	1.0000000*E-07
electron volt (eV)	joule	1.60218E-19
fluid ounce (U.S.)	meter ³	2.9573530E-05
foot	meter	3.0480000*E-01
foot/second ²	meter/second ²	3.0480000*E-01
foot-pound-force	joule	1.3558179E+00
foot ² /second	meter ² /second	9.2903040*E-02
gallon (U.S. liquid)	meter ³	3.7854118E-03
gram	kilogram	1.0000000*E-03
horsepower†	watt	7.4569987E+02
inch	meter	2.5400000*E-02
kilogram-force	newton	9.8066500*E+00
mile (U.S. statute)	meter	1.6093440*E+03
mile/hour	meter/second	4.4704000*E-01
millimeter of mercury (0°C)	pascal	1.3332237E+02
pint (U.S. liquid)	meter ³	4.7317647E-04
pound-force·second/foot ²	pascal·second	4.7880258E+01
pound-mass (lbm avoirdupois)	kilogram	4.5359237*E-01
pound-mass/foot ³	kilogram/meter ³	1.6018463E+01
pound-mass/(foot·second)	pascal·second	1.4881639E+00
psia	pascal	6.8947573E+03
quart (U.S. liquid)	meter ³	9.4635295E-04
ton (long, 2240 lbm)	kilogram	1.0160469E+03
ton (short, 2000 lbm)	kilogram	9.0718474*E+02
torr (mmHg, 0°C)	pascal	1.3332237E+02
volt (International of 1948)	volt (absolute)	1.000330E+00
watt (International of 1948)	watt	1.000165E+00
watt-hour	joule	3.6000000*E+03
yard	meter	9.1440000*E-01

†1 horsepower = 550 foot·pound-force/second.

2 Some Fundamental Constants in Various Units

Avogadro's constant, N_A mol ⁻¹	6.022 × 10 ²³
Boltzmann's constant, k J K ⁻¹	1.38066 × 10 ⁻²³
erg K ⁻¹	1.38066 × 10 ⁻¹⁶
eV K ⁻¹	8.61738 × 10 ⁻⁵
Gas constant, R J mol ⁻¹ K ⁻¹	8.31451
Pa m ³ mol ⁻¹ K ⁻¹	8.31451
atm cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹	82.0578
atm liter mol ⁻¹ K ⁻¹	0.0820578
atm ft ³ lb-mol ⁻¹ °R ⁻¹	0.7302
bar cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹	83.1451
Btu lb-mol ⁻¹ °R ⁻¹	1.98592
cal mol ⁻¹ K ⁻¹	1.98721
erg mol ⁻¹ K ⁻¹	8.31451 × 10 ⁷
hp·h lb-mol ⁻¹ °R ⁻¹	7.805 × 10 ⁻⁴
kW·h lb-mol ⁻¹ °R ⁻¹	5.828 × 10 ⁻⁴
mmHg liter mol ⁻¹ K ⁻¹	62.3640
psia ft ³ lb-mol ⁻¹ °R ⁻¹	10.73
Planck's constant, h J s	6.6261 × 10 ⁻³⁴