

Μικρό πρόβλημα εξάσκησης Νο 1: ποια είναι η μέγιστη συγκέντρωση ρύπου στον αέρα των εδαφικών πόρων κατόπιν διαρροής τριχλωροαιθενίου;

Η τάση των ατμών του τριχλωροαιθυλενίου (trichloroethylene ή trichloroethene ή TCE) βρίσκεται ίση με 60 mmHg σε 20°C (LaGrega et al., 1994). Για να βρούμε τη συγκέντρωση στην αέρια φάση, θα χρησιμοποιήσουμε τον νόμο των ιδανικών αερίων:

$$P_{TCE}V = n_{TCE} R T \rightarrow n_{TCE} / V = P_{TCE} / R T = \\ = 8.12 \text{ kPa} / [(8.314 \times 10^{-3} \text{ kPa m}^3 / \text{K mol}) 293 \text{ K}] \\ = 3.33 \text{ mol} / \text{m}^3$$

Για τον υπολογισμό της μοριακής συγκέντρωσης (n_{TCE} / V) του τριχλωροαιθυλενίου χρειάστηκαν οι εξής μετατροπές:

$$P_{TCE} = 60 \text{ mm Hg} \times 1/7.3833 \text{ kPa/mm Hg} = 8.12 \text{ kPa}$$

$$R = 8.314 \text{ Pa m}^3 / \text{K mol} = 8.314 \times 10^{-3} \text{ kPa m}^3 / \text{K mol}$$

$$T = 273 + 20 = 293 \text{ }^\circ\text{K}$$

Βρίσκουμε το μοριακό βάρος του τριχλωροαιθενίου (C_2Cl_3H):

$$MB_{TCE} = 12 \times 2 + 35.45 \times 3 + 1 \times 1 = 131.4 \text{ g/mol}$$

και έτσι η συγκέντρωση του τριχλωροαιθενίου στην αέρια φάση είναι:

$$C_{TCE\alpha} = (n_{TCE} / V) \times MB_{TCE} = 3.33 \text{ mol/m}^3 \times 131.4 \text{ g/mol} \rightarrow \boxed{C_{TCE\alpha} = 438 \text{ g/m}^3}$$

Βλέπουμε ότι η μέγιστη δυνατή συγκέντρωση στον αέρα των εδαφικών πόρων κατόπιν διαρροής του τριχλωροαιθενίου (0.438 kg/m^3) αντιστοιχεί σε μια μάζα σχεδόν μισού κιλού τριχλωροαιθενίου στο κυβικό μέτρο, ποσότητα όχι αμελητέα!

Μικρό πρόβλημα εξάσκησης Νο 2: ποιές είναι οι μέγιστες συγκεντρώσεις ρύπων στον αέρα των εδαφικών πόρων κατόπιν διαρροής μείγματος τριχλωροαιθενίου και 1,1,1-τριχλωροαιθάνιου;

Για να εφαρμόσουμε τον νόμο του Raoult στο παράδειγμά μας, ας υποθέσουμε ότι το τριχλωροαιθυλένιο και το τριχλωροαιθάνιο έχουν την ίδια αναλογία κατά βάρος και ας θεωρήσουμε μια ενδεικτική ποσότητα μείγματος 1000 g από το καθένα. Το μόριο του τριχλωροαιθυλενίου, όπως είδαμε στο προηγούμενο πρόβλημα, έχει 2 άτομα C, 3 άτομα Cl και 1 άτομο H, ενώ του τριχλωροαιθάνιου έχει 2 επιπλέον άτομα H. Τα μοριακά βάρη είναι 131.4 g/mol και 133.4 g/mol. Για το παράδειγμά μας, υπολογίζονται ο αριθμός mol του τριχλωροαιθυλενίου (ουσία A), $n_A = 1000 \text{ g} / 131.4 \text{ g} = 7.6$, ο αριθμός mol του τριχλωροαιθάνιου (ουσία B), $n_B = 1000 \text{ g} / 133.4 \text{ g} = 7.5$, και ο συνολικός αριθμός mol στο μείγμα, $n_t = 15.1$. Τα αντίστοιχα μοριακά κλάσματα των δύο συστατικών του μείγματος είναι $x_A = 0.5$ και $x_B = 0.5$.

Από το προηγούμενο πρόβλημα:

$$P_{TCE}^0 = 60 \text{ mm Hg} \times 1/7.3833 \text{ kPa/mm Hg} = 8.12 \text{ kPa}$$

Η τάση των ατμών του 1,1,1-τριχλωροαιθάνιου (trichloroethane ή TCA) βρίσκεται ίση με 100 mmHg σε 20°C (LaGrega et al., 1994):

$$P_{TCA}^0 = 100 \text{ mm Hg} \times 1/7.3833 \text{ kPa/mm Hg} = 13.54 \text{ kPa}$$

Έτσι, ο νόμος του Raoult δίνει $P_A = P_A^0 x_A = 8.12 \text{ kPa} \times 0.5 = 4.06 \text{ kPa}$ και $P_B = P_B^0 x_B = 13.54 \text{ kPa} \times 0.5 = 6.77 \text{ kPa}$. Τέλος, εφαρμόζοντας τον νόμο των ιδανικών αερίων, προσδιορίζονται οι συγκεντρώσεις των δύο συστατικών.

$$n_{TCE} / V = P_{TCE} / R T = \text{mol/m}^3 = 4.06 \text{ kPa} / [(8.314 \times 10^{-3} \text{ kPa m}^3 / \text{K mol}) 293 \text{ K}] = 1.67 \text{ mol/m}^3$$

$$\rightarrow C_{TCE\alpha} = (n_{TCE} / V) \times MB_{TCE} = 1.67 \text{ mol/m}^3 \times 131.4 \text{ g/mol} \rightarrow \boxed{C_{TCE\alpha} = 219 \text{ g/m}^3}$$

$$n_{TCA} / V = P_{TCA} / R T = \text{mol/m}^3 = 6.77 / [(8.314 \times 10^{-3} \text{ kPa m}^3 / \text{K mol}) 293 \text{ K}] = 2.78 \text{ mol/m}^3$$

$$\rightarrow C_{TCA\alpha} = (n_{TCA} / V) \times MB_{TCA} = 2.78 \text{ mol/m}^3 \times 133.4 \text{ g/mol} \rightarrow \boxed{C_{TCA\alpha} = 370.5 \text{ g/m}^3}$$

Αξίζει να σημειωθεί, ότι σε περιπτώσεις μειγμάτων ρύπων, δεν είναι απαραίτητα ο πιο πτητικός ρύπος εκείνος ο οποίος έχει τη μεγαλύτερη συγκέντρωση στην αέρια φάση, όπως σε αυτό το παράδειγμα. Αυτό συμβαίνει γιατί η συγκέντρωση του κάθε ρύπου εξαρτάται όχι μόνο από την τάση των ατμών του, αλλά και από την αναλογία του στο μείγμα και από το μοριακό του βάρος.

Μικρό πρόβλημα εξάσκησης Νο 3: ποια είναι η μέγιστη συγκέντρωση στον αέρα των εδαφικών πόρων κατόπιν διαρροής υδατικού διαλύματος τριχλωροαιθενίου συγκέντρωσης $C_{Aw} = 10 \text{ mg/l}$;

Από τη δοσμένη συγκέντρωση, βρίσκεται ή η μοριακή συγκέντρωση, ή ο αριθμός mol και στη συνέχεια το μοριακό κλάσμα και, τέλος, από τον νόμο του Henry η μερική πίεση του τριχλωροαιθενίου, από την οποία βρίσκεται η συγκέντρωσή του στον αέρα.

Βρίσκουμε τη σταθερά του νόμου Henry ίση με $0.904 \text{ kPa m}^3/\text{mol}$ στους 20°C (Mackay and Shiu, 1981) και στη συνέχεια εκφράζουμε τη συγκέντρωση του τριχλωροαιθενίου στις κατάλληλες μονάδες:

$$C_{Aw} = 10 \times 10^{-3} \text{ g} / 10^{-3} \text{ m}^3 \rightarrow C_{Awm} = [10 \text{ g} / (131.4 \text{ g/mol})] / \text{m}^3 = 7.6 \times 10^{-2} \text{ mol/m}^3$$

Ο νόμος του Henry δίνει:

$$P_A = H_{CA} C_{Awm} = 0.904 \text{ kPa m}^3/\text{mol} \times 7.6 \times 10^{-2} \text{ mol/m}^3 = 6.9 \times 10^{-2} \text{ kPa}$$

Και εφαρμόζοντας τον νόμο των ιδανικών αερίων προσδιορίζουμε το ζητούμενο,

$$n_{TCE} / V = P_{TCE} / R T = 6.9 \times 10^{-2} \text{ kPa} / [(8.314 \times 10^{-3} \text{ kPa m}^3 / \text{K mol}) 293 \text{ K}] = 0.03 \text{ mol/m}^3$$

$$\rightarrow C_{TCE\alpha} = (n_{TCE} / V) \times MB_{TCE} = 0.03 \text{ mol/m}^3 \times 131.4 \text{ g/mol} \rightarrow \boxed{C_{TCE\alpha} = 3.7 \text{ g/m}^3}$$

Συγκρίνοντας αυτήν την τιμή με τη συγκέντρωση που υπολογίσαμε στο πρόβλημα Νο 1, δηλ. στην περίπτωση διαρροής καθαρού τριχλωροαιθυλενίου ($C_{TCE\alpha} = 438 \text{ g/m}^3$), τη βρίσκουμε πολύ μικρότερη. Θα μπορούσε να πει κανείς ότι το αποτέλεσμα της σύγκρισης ήταν αναμενόμενο, μιας και η διαρροή καθαρής ουσίας είναι λογικό να επιβαρύνει περισσότερο την αέρια φάση σε σχέση με τη διαρροή διαλύματος της ίδιας ουσίας. Όμως, θα δούμε ότι δεν είναι έτσι, όταν επανέλθουμε σ' αυτήν την παρατήρηση στο λυμένο παράδειγμα υπολογισμού μάζας ρύπου σε εδαφικό δοκίμιο.

Βιβλιογραφικές αναφορές

LaGrega, M., P.L. Buckingham and J.C. Evans (1994). Hazardous Waste Management, McGraw Hill.

Mackay, D. and W.Y. Shiu (1981). Critical review of Henry's Law constants for chemicals of environmental interest, J. Phys. Chem. Ref. Data, 10:4:1175-1199.