

Primena računara u fizičkoj hemiji

Izračunavanje transportnog broja

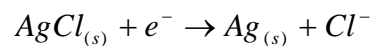
Vedran Milanković 2016/0005

1) Teorijski uvod

Struju kroz elektrolit prenose katjoni i anjoni. Zbog različitih poluprečnika i naelektrisanja, kao i zbog različitih energija međudejstava sa okolinom, katjoni i anjoni različito učestvuju u provođenju struje kroz elektrolit. Učešće pojedine jonske vrste u prenošenju struje opisuje se prenosnim (transportnim) brojem. Prenosni broj definiše se kao odnos količine naelektrisanja prenete datom jonskom vrstom (q_+ ili q_-) i ukupne količine naelektrisanja prenete kroz elektrolit:

$$t_+ = \frac{q_+}{\sum q_+} \quad \text{i} \quad t_- = \frac{q_-}{\sum q_-}$$

Jedna od metoda za određivanje prenosnih brojeva je metoda pokretne granice. Pored prenosnih brojeva ovom metodom se mogu odrediti i jonske pokretljivosti. Glavni deo aparature sastoji se od dugačke vertikalne staklene cevi uniformnog preseka. Donji kraj cevi je zatvoren metalom koji može da se anodno rastvara pri prolasku struje. Najčešće se kao anoda koristi Cu ili Cd. Na gornjem kraju cevi se nalazi katoda. Ako se želi odredit prenosni broj jona H^+ kao elektrolit se koristi HCl, a kao katodu je pogodno koristiti Ag/AgCl elektrodu pošto se na njoj tokom merenja odigrava sledeća reakcija:



čime se ne menja sastav elektrolita.

Pri prolasku električne struje Cl^- joni se kreću ka anodi, a Cd^{2+} ili Cu^{2+} i H^+ joni putuju ka katodi. Količina katodno oslobođenih Cl^- jona, po Faradejevim zakonima, odgovara količini koja je utrošena za formiranje $CdCl_2$ ili $CuCl_2$ tako da je koncentracija HCl sve vreme nepromenjena. Kada se kroz ćeliju propusti konstantna struja jačine I ampera tokom t sekundi dolazi do pomeranja granice sa prvobitnog položaja x_0 do novog položaja x_1 . Broj katjona H^+ koji se nalazio u zapremini V ($V=A(x_0-x_1)$, gde je A površina unutrašnjeg poprečnog preseka cevi) je prošao put od (x_0-x_1) za vreme t . Naelektrisanje koje nose H^+ joni jednako je proizvodu koncentracije C_{H^+} , zapremine V , Faradejeve konstante F i valentnosti jona vodonika z_{H^+} pa se prenosni broj jona može napisati na sledeći način:

$$t_{H^+} = \frac{z_{H^+} C_{H^+} VF}{It}$$

Da bi vizuelno moglo da se prati pomeranje granice, elektrolitu se doda nekoliko kapi metil-oranža koji će kiseli rastvor da oboji crveno. Zbog anodnog rastvaranja kadmijuma ili bakra, iznad anode nastaje sloj bleđožutog rastvora soli koji potiskuje crveno obojeni rastvor kiseline. Granica između bleđožutog i crvenog rastvora mora da bude vrlo oštra, a to se postiže ako elektrolit koji se koristi ima pokretnije katjone od onih koji nastaju rastvaranjem anode, a donji rastvor ima veću gustinu od gornjeg rastvora.

Znajući da su:

$$z_{H^+} = 1 \qquad F = 96485 \frac{J}{molC} \qquad V = (0,166 \pm 0,001) \cdot 10^{-3} dm^3$$

i unošenjem eksperimentalnih podataka (C_{H^+}, I, t) u formulu za t_{H^+} dolazi se do vrednosti transportnog broja za vodonični jon.

Na osnovu dobijenih podataka crta se grafik $t_{H^+} = f(\sqrt{C_{H^+}})$ iz čijeg se odsečka dobija transportni broj pri beskonačnom razblaženju $t_{H^+}^0$.

2) Uputstvo za korišćenje programa:

Program *transportni_brojevi* omogućava tabelarno prikazivanje eksperimentalnih podataka, izračunavanje parametara za crtanje grafika, grafički prikazuje $t_{H+} = f(\sqrt{C_{H+}})$ i očitava vrednost odsečka za linearno fitovani grafik tj. daje vrednost transportnog broja vodoničnog jona pri beskonačnom razblaženju t_{H+}^0 . Takđe je moguće i štampanje GUI prozora.

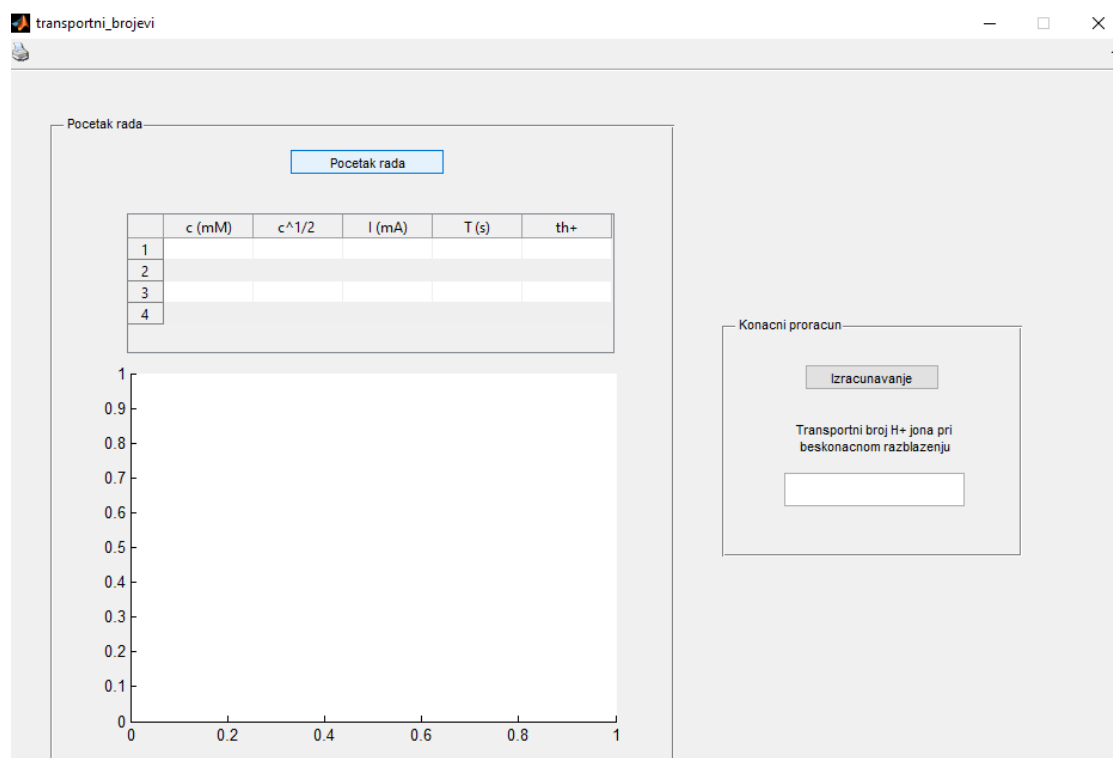
Program ne radi sa klasičnim unošenjem podataka iz Excel-a, nego se podaci unose direktno u kod programa.

```
125 %Unos vrednosti, prikazuju se u vidu matrica dimenzija 5x1, kako bi mogli
126 %kasnije da se prikazu u tabeli
127 - C = [1.25; 2.5; 5; 10; 20];%Koncentracija (mM)
128 - Ct = C;
129 - C = C/1000;%Prelazak iz mM u M
130 - Ck = sqrt(C);%Racunanje kvadratnog korena vrednosti koncentracija
131 - I = [0.03; 0.08; 0.15; 0.3; 0.50];%Jacina struje (mA)
132 - It = I;
133 - I = I/1000;%Prelazak iz mA u A
134 - T = [470; 407; 475; 445; 485];%Vreme (sekund)
```

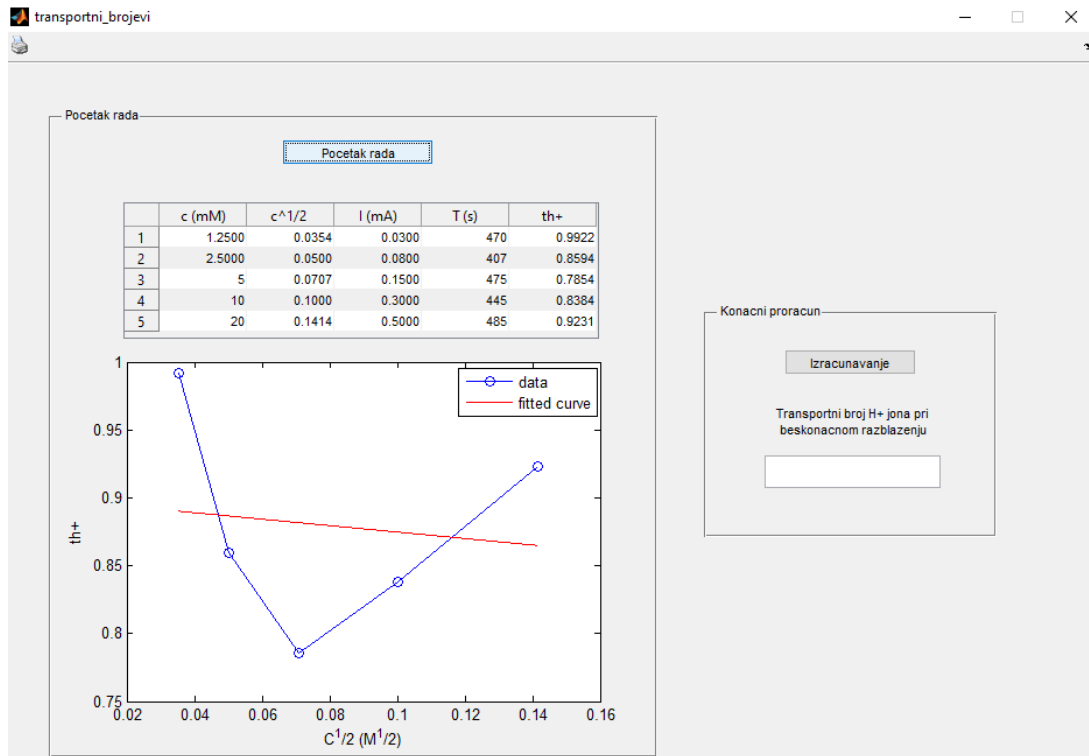
U

linije koda 127, 131 i 134 se unose podaci za promenjive: koncentraciju (mM), jačinu struje (mA) i vreme (s) respektivno.

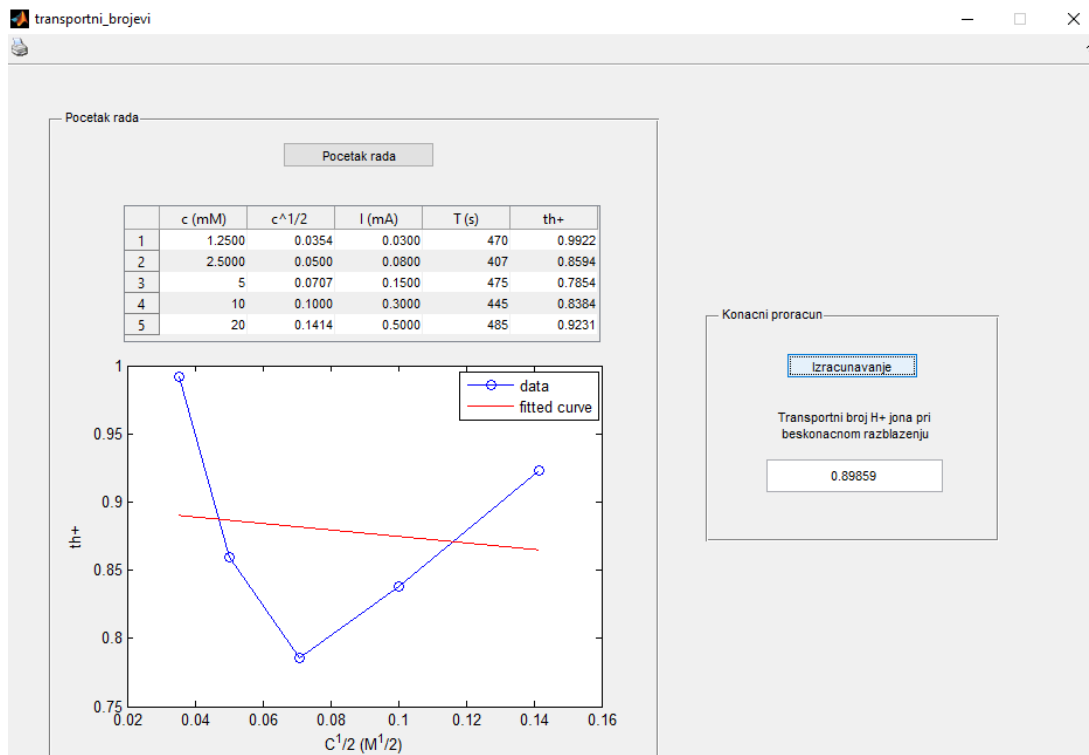
Pritiskom na dugme *Run* program se pokreće. U novootvorenom prozoru vidimo nepopunjenu tabelu, prostor za grafik i prozor u kojem ćemo dobiti konačan proračun.



Pritiskom na dugme *Pocetak rada* popunjava se tabela sa podacima koje smo uneli u kod kao i sa izračunatim podacima i crta se grafik.



Da bi smo dobili vrednost transportnog broja vodoničnog jona pri beskonačnom razblaženju pritišćemo dugme *Izracunavanje*.



Ukoliko želimo da odštampamo GUI prozor pritiskuemo opciju *Print Figure* u gornjem desnom uglu.

