

- Други вежбовни колоквијум из хемијске термодинамике -

II-1. Одређивање фугасности гаса

Упутство за сређивање вежбе:

На почетку треба написати кратак теоријски увод о проблематици којом се бави ова вежба.

Користећи добијене табличне податке за V_m или Z на одређеној температури попунити следећу табелу:

Табела 1. Зависност моларне запремине (или фактора компресибилности) и израчунатих вредности α [или $(Z - 1) / P$] од притиска на датој температури.

$T \text{ [K]}$		
$P \text{ [atm]}$	$V_m \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right]$ или Z	$\alpha = \frac{RT}{P} - V_m \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right]$ или $\frac{Z - 1}{P} \text{ [atm}^{-1}\text{]}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

У табели не приказивати грешке јер ће у овој вежби бити потребно да се грешка израчуна само за вредност нумерички израчунатог интеграла, односа f / P и f .

Сада се са подацима из табеле 1. може конструисати зависност $\alpha = f(P)$ односно $(Z - 1) / P = f(P)$ ради екстраполације на $P = 0$ и добијања вредности $\alpha_{P=0}$ односно $[(Z - 1) / P]_{P=0}$. Ове вредности су неопходне како би се вредност интеграла нумеричком Симпсоновом методом добро проценила с обзиром да је доња граница интеграла у изразу који повезује фугасност и α , односно Z , нула а горња граница P . Примери екстраполације за различите случајеве су приказани на графику 1. Скале на графицима треба прилагодити добијеним вредностима, односно поставити их тако да се екстраполација може прецизно урадити. Без обзира на тачке које се касније користе за интеграцију Симпсоновом методом график зависности $\alpha = f(P)$ односно $(Z - 1) / P = f(P)$ конструисати са свим расположивим тачкама из табличних података до притиска до ког се врши интеграција (горње границе интеграла).

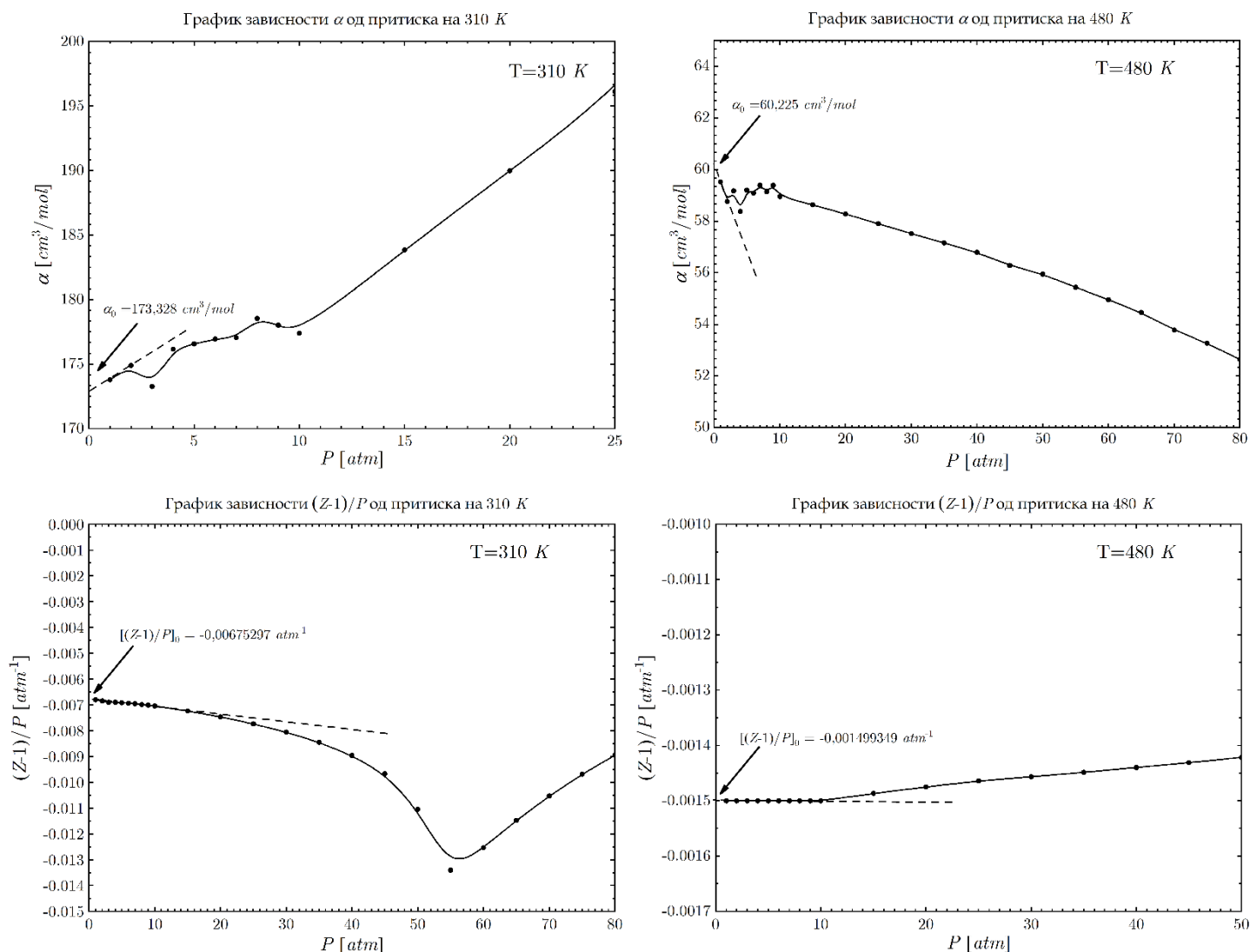


График 1. Примери екстраполације за различите случајеве.

Након екстраполације и добијања $\alpha_{P=0}$ односно $[(Z-1)/P]_{P=0}$ са унапред одређеним кораком интеграцију¹ вршити Симпсоновом методом. Након извршене интеграције са почетним кораком ради утврђивања грешке интеграције неопходно је извршити још једну интеграцију са дуго већим кораком интеграције.

Интеграле приказати са грешкама, границама интегралења, кораком интегралења и температурама за које су израчунати. Нпр. за неку температуру T :

¹ Нпр. за интеграцију од 1-100 atm треба користити корак за интеграцију од 5 atm што даје паран број интервала (20) за интеграцију, док ће се још једна интеграција радити са дуго већим кораком (10 atm) а што ће такође дати паран број интервала (10) за интеграцију.

$$I_1 = 8917,8666 \frac{\text{cm}^3 \text{atm}}{\text{mol}}, P_1 = 0, P_2 = 80 \text{ atm}, h = 5 \text{ atm}$$

$$I_2 = 8751,8133 \frac{\text{cm}^3 \text{atm}}{\text{mol}}, P_1 = 0, P_2 = 80 \text{ atm}, h = 10 \text{ atm}$$

$$\Delta I = 177,1317 \frac{\text{cm}^3 \text{atm}}{\text{mol}}$$

$$I = 8900 \pm 200 \frac{\text{cm}^3 \text{atm}}{\text{mol}}, T_1 = 380 \text{ K}$$

Са овако израчунатим вредностима интеграла одредити однос f/P и f и приказати их са грешкама². Упоредити добијене вредности односа f/P са табличним вредностима којима располаже асистент и прокоментарисати добијене резултате. Прокоментарисати како би се фугасност мењала за различите температуре.

² Фугасност се одређује само за притисак који одговара горњој граници интеграције.