

- 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  $\alpha$  [или  $(Z - 1) / P$ ] од притиска на датој температури.

$T$ [K]		
$P$ [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 $\frac{Z - 1}{P} [\text{atm}^{-1}]$
⋮	⋮	⋮

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  $\alpha$ , 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). Уколико је неопходно, зарад тачније екстраполације, приказати и увеличани део графика у области од 0 до 10 atm.

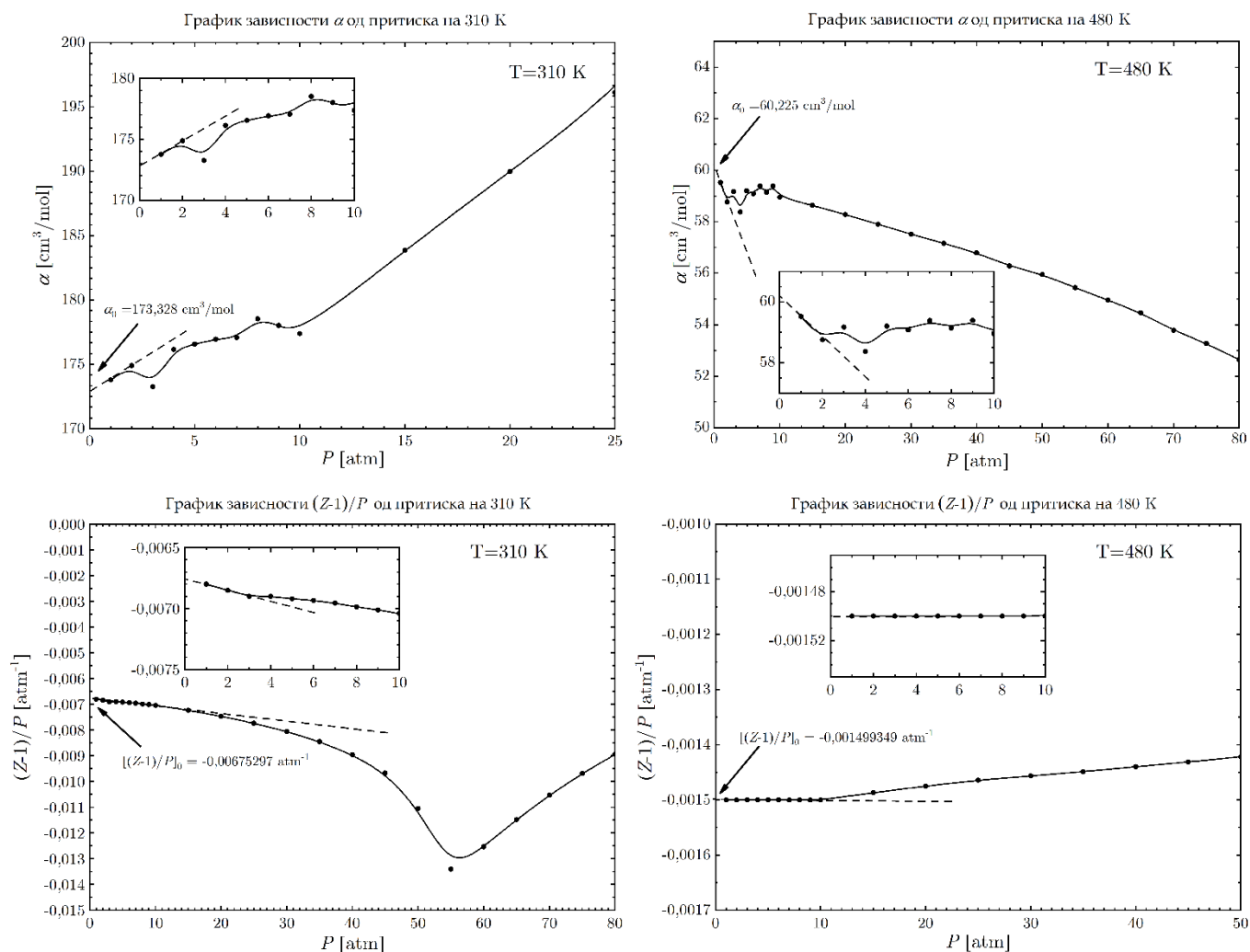


График 1. Примери екстраполације подинтегралне функције на нулти притисак за различите случајеве код етана.

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

<sup>1</sup> Нпр. за интеграцију од 1-100 atm треба користити корак за интеграцију од 5 atm што даје паран број интервала (20) и непаран број тачака (21) за интеграцију, док ће се још једна интеграција радити са душло већим кораком (10 atm) а што ће такође дати паран број интервала (10) и непаран број тачака (11) за интеграцију.

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

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

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

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

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

Са овако израчунатим вредностима интеграла одредити однос  $f/P$  и  $f$  и приказати их са грешкама<sup>2</sup>. 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.

---

<sup>2</sup> Фугасност се одређује само за притисак који одговара горњој граници интеграције.