

$$R=8.314 = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\text{Kompresibilitní faktor: } z = \frac{pV_m}{RT}$$

Van der Waalsova rovnice:

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$$

$$V_{mc} = 3b \quad T_c = \frac{8}{27R} \frac{a}{b} \quad p_c = \frac{a}{27b^2}$$

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$

$$b = \frac{1}{8} \frac{RT_c}{p_c}$$

1. Opakování

Kolik jedlé sody je potřeba na kilogram těsta, aby při pečení bábovka vykynula na dvojnásobek objemu? Hustota těsta je přibližně stejná jako vody, teplotu a tlak odhadněte.

5.4 g, přidáme-li do těsta citronovou šťávu, pak polovina

$$T=373 = 373 \text{ K}$$

$$p=1e5 = 1e+05 \text{ bar}$$

$$V=1e-3 = 0.001 \text{ m}^3$$

$$n=pV/R/T = 0.03225 \text{ mol}$$

$$n \cdot 2 \cdot M(\text{NaHCO}_3) = 5.418 \text{ g}$$

2. Opakování

Koncentrace oxidu uhličitého stoupla z 280 ppm v předindustriální éře na dnešních 425 ppm. Předpokládejme, že všechny tento oxid uhličitý pochází ze spalování uhlí. Jak vysoký kopec ve tvaru kužele se sklonem 45° by to byl? Uhlí obsahuje 70 hm. % uhlíku, hustota sypaného uhlí je 900 kg m⁻³. Povrch Země je 510 milionů km², průměrná teplota 15 °C, tlak na hladině moře 1 bar. Střední molární hmotnost vzduchu je 29 g mol⁻¹.

7.8 km

$$A=510e6 \cdot 1e6 = 5.1e+14 \text{ m}^2$$

$$p=1e5 = 1e+05 \text{ Pa}$$

$$g=9.81 = 9.81 \text{ m s}^{-2}$$

$$M_{\text{vzduch}}=0.029 = 0.029 \text{ kg mol}^{-1}$$

$$MC=0.012 = 0.012 \text{ kg mol}^{-1}$$

$$m_{\text{atm}}=A \cdot p/g = 5.199e+18 \text{ kg} \quad \text{tlak } p = F/A = m_{\text{atm}}g/A$$

$$n=m_{\text{atm}}/M_{\text{vzduch}} = 1.793e+20 \text{ mol}$$

$$n_{\text{CO}_2}=n \cdot (425-280) \cdot 1e-6 = 2.599e+16 \text{ mol}$$

$$m_{\text{uhli}}=n_{\text{CO}_2} \cdot MC/0.7 = 4.456e+14 \text{ kg}$$

$$V=m_{\text{uhli}}/900 = 4.951e+11 \text{ m}^3 \quad V = \frac{\pi}{3} v^3$$

$$v=\text{cbrrt}(3 \cdot V/\pi) = 7790 \text{ m}$$

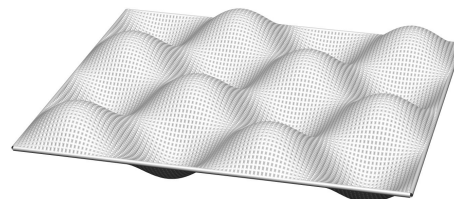
3. Derivace implicitní funkce

Funkce $y(x)$ je daná implicitně vztahem

$$z(x, y) = \sin x \sin y.$$

Vypočtěte derivaci $(\partial y / \partial x)_z$ v bodě $x = y = \pi/4$.

$$\left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_z = - \frac{z_x}{z_y} = - \frac{\cos x \sin y}{\sin x \cos y}$$



4. *Derivace implicitní funkce

Dietericiho stavová rovnice je

$$p = \frac{RTe^{-a/RTV_m}}{V_m - b},$$

kde a, b jsou konstanty podobného významu jako u ostatních dvoukonstantových rovnic. Vypočtěte koeficient izobarické roztažnosti (jako funkci V_m, T).

$$\left. \frac{\partial V_m}{\partial T} \right|_p = \frac{((q - \Lambda)^p - \Lambda J H) J}{(p + \Lambda J H)(q - \Lambda)}$$

5. Teplotní roztažnost

Hliníková plechovka má objem 250 mL. O kolik vzroste objem plechovky, jestliže se teplota změní z 0 °C na 100 °C? Změnu tlaku v plechovce neuvažujte. Součinitel lineární teplotní roztažnosti hliníku je $23 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

$$\Delta V = V \alpha \Delta T$$

$$\alpha = 23 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} = 2.3 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$$

$$250 \times \alpha \times 100 = 1.725 \text{ mL}$$

6. Stlačitelnost

Modul objemové pružnosti methanolu je 0.82 GPa. Hustota methanolu za teploty 25 °C a tlaku 1 bar je 792 kg m⁻³. O kolik % je větší hustota methanolu na dně 10 m vysokého zásobníku v porovnání s hladinou?

%10'0

$$KB=0.82e9 = \mathbf{8.2e+08} \text{ Pa}$$

$$Dp=10*9.81*792 = \mathbf{7.77e+04} \text{ Pa}$$

$$Dp/KB*100 = \mathbf{0.009475} \%$$

7. Kompresibilitní faktor

Kritická teplota helia je 5.19 K, kritický tlak 2.27 bar a kritický molární objem 57.8 cm³ mol⁻¹. Vypočítejte kritický kompresibilitní faktor.

108'0

$$Tc=5.19 = \mathbf{5.19} \text{ K}$$

$$pc=2.27e5 = \mathbf{2.27e+05} \text{ Pa}$$

$$Vmc=57.8e-6 = \mathbf{5.78e-05} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$Zc=pc*Vmc/R/Tc = \mathbf{0.3041}$$

8. Butan

Vypočítejte tlak butanu zaujímajícího při teplotě 250 °C molární objem 0.2 dm³ mol⁻¹. Při výpočtu aplikujte tyto rovnice:

- stavovou rovnici ideálního plynu, [21.75 MPa]
- van der Waalsovou stavovou rovnici, [17.31 MPa]
- Redlichovu-Kwongovu stavovou rovnici, [13.86 MPa]
- generalizovaný diagram kompresibilitních faktorů. [13.5 MPa]

Pro výpočet konstant a a b použijte následující kritická data: $T_c = 425.12$ K, $p_c = 3.796$ MPa. Získané hodnoty tlaků porovnejte s $p_{\text{exp}}=13.25$ MPa.

$$Vm=0.2e-3 = \mathbf{0.0002} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$T=250+273.15 = \mathbf{523.1} \text{ K}$$

$$Pid=R*T/Vm = \mathbf{2.175e+07} \text{ Pa}$$

$$Tc=425.12 = \mathbf{425.1} \text{ K}$$

$$Pc=3.796e6 = \mathbf{3.796e+06} \text{ Pa}$$

$$a=27/64*(Tc*R)**2/Pc = \mathbf{1.388} \text{ Pa m}^6 \text{ mol}^{-2}$$

$$b=1/8*Tc*R/Pc = \mathbf{0.0001164} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$PvdW=R*T/(Vm-b)-a/Vm**2 = \mathbf{1.731e+07} \text{ Pa}$$

$$PRK=13.86 = \mathbf{13.86} \text{ MPa viz aplikace}$$

$$Vr=Vm/(R*Tc/Pc) = \mathbf{0.2148}$$

$$Tr=T/Tc = \mathbf{1.231}$$

$$Z=0.61 = \mathbf{0.61} \text{ z kompresibilitního faktoru}$$

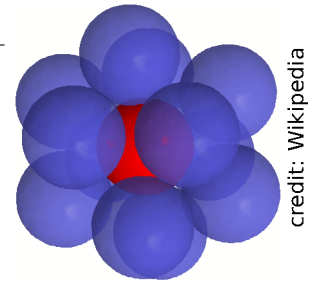
$$Pdiag=Z*R*T/Vm = \mathbf{1.327e+07} \text{ Pa}$$

$$Pr=3.6 = \mathbf{3.6} \text{ z redukovaného tlaku}$$

$$Pdiag=Pr*Pc = \mathbf{1.367e+07} \text{ Pa}$$

9. Lennard-Jonesův potenciál

Parametry Lennard-Jonesova potenciálu argonu jsou $\sigma = 3.4 \text{ \AA}$, $\varepsilon/k_B = 120 \text{ K}$.



- Jaká je vzdálenost jader v dimeru argonu za nízké teploty?
- Jaká síla působí mezi atomy ve vzdálenosti $r = \sigma$?
- *Odhadněte výparnou entalpii argonu. Kissing number ve 3D je 12.

$$a) \quad 2^{1/6} \sigma \approx 3.82 \text{ \AA}, \quad 117 \text{ pN}, \quad 9 \text{ kJ/mol}$$

$$\sigma = 3.4 \times 10^{-10} \text{ m} = \mathbf{3.4 \times 10^{-10} \text{ m}}$$

$$\varepsilon = 120 \times 1.380649 \times 10^{-23} \text{ J} = \mathbf{1.657 \times 10^{-21} \text{ J}}$$

$$r = \sigma = \mathbf{3.4 \times 10^{-10} \text{ m}}$$

$$4 \times \varepsilon \times (12 \times (\sigma/r)^{12} - 6 \times (\sigma/r)^6) / r = \mathbf{1.169 \times 10^{-10} \text{ N}}$$

okolo 1 atomu Ar je v kapalině cca 12 sousedů

$$U = 12/2 \times \varepsilon \times 6.22 \times 10^{23} = \mathbf{6183 \text{ J mol}^{-1}}$$

$$H = U + 80 \times 8.314 = \mathbf{6848 \text{ J mol}^{-1}}$$