```
to bar = -16.5
to dm3 = -16.5
to cm3/mol = -16.5
sigp=0.001[bar] = 0.001 [bar]
```

Za teploty
`T=(300+rnd(78))*1[K] = 356 [K]` jsme měřili tlak SF_6 v nádobě o objemu
`V=(1+rnd(5))*1[L] = 3 [dm3]` . Získali jsme následující závislost absolutního tlaku na látkovém množství plynu v nádobě:

```
Tc=318.7[K] = 318.7 [K]
pc=3.76[MPa] = 37.6 [bar]
a=R**2*Tc**2.5/pc/9/(cbrt(2)-1) = 14.25 [m5 kg s-2 K0.5 mol-2]
b=(cbrt(2)-1)/3*R*Tc/pc = 61.06 [cm3/mol]
def RK=R*T/(Vm-b)-a/sqrt(T)/Vm/(Vm+b) = (defined)
```

n	p
`p=(0.38+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 3.973 [bar]` `Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 7253 [cm3/mol]` `n=V/Vm = 0.4136 [mol]`	`p+sigp*rnd(1) = 3.974 [bar]`
`p=(0.78+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 7.867 [bar]` `Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 3563 [cm3/mol]` `n=V/Vm = 0.842 [mol]`	`p+sigp*rnd(1) = 7.868 [bar]`
`p=(1.18+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 12.17 [bar]` `Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 2230 [cm3/mol]` `n=V/Vm = 1.345 [mol]`	`p+sigp*rnd(1) = 12.17 [bar]`
`p=(1.58+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 15.82 [bar]` `Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1666 [cm3/mol]` `n=V/Vm = 1.801 [mol]`	`p+sigp*rnd(1) = 15.82 [bar]`
`p=(1.98+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 20.04 [bar]` `Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1268 [cm3/mol]` `n=V/Vm = 2.366 [mol]`	`p+sigp*rnd(1) = 20.04 [bar]`

Vypočtěte druhý viriálový koeficient B za teploty
`T = 356 [K]` a fugacitní koeficient za téže teploty a tlaku

```
p=1.6[MPa]+0.1[MPa]*rnd(3) = 16 [bar] .
```

Bonus (+10 bodů) Která hodnota je zatížena menší chybou? Proč?

```
B2=b-a/R/T**1.5 = -194.1 [cm3/mol]
Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1645 [cm3/mol]
def Z=RK*Vm/R/T = (defined)
lnphi=ln(Vm/(Vm-b))+a/(R*T**(3/2)*b)*ln(Vm/(Vm+b))-ln(Z)+Z-1 = -0.1079
phi=exp(lnphi) = 0.8978
```

Návod – viriálový koeficient. Z tlakového viriálového rozvoje

$$V_{\mathrm{m}} = \frac{RT}{p} + B \tag{1}$$

dostaneme, že funkce

$$\tilde{B}(p) = V_{\mathrm{m}} - \frac{RT}{p} \tag{2}$$

konverguje pro $p \to 0$ k druhému viriálovému koeficientu B.

Vyneste proto (pomocí vhodného softwaru, případně na čtverečkovaný papír) závislost $\tilde{B}(p)$, kde V_{m} v rovnici (2) je ovšem $V_{\mathrm{m}} = V/n$. Pak proložte přímku nebo hladkou křivku danými body a stanovte limitu $\tilde{B}(p \to 0) = B$. Prokládat můžete od ruky. Uvědomte si, že data jsou zatížena konstantní nejistotou v měření tlaku, ale vzhledem k dělení tlakem je nejistota výrazu (2) větší pro menší tlaky, což znepříjemňuje extrapolaci. Prokládaná přímka či křivka nemusí procházet přesně všemi body, ale měla by být hladká s tím, že může spíš s nějakou nepřesností minout body pro nízký tlak.

Profesionální možností (nevyžadovanou v této úloze) je použít metodu nejmenších čtverců a nafitovat $\tilde{B}(p)$ na vhodný vzorec (zde stačí lineární funkce, jindy by byla vhodná kvadratická funkce). Tím dostanete extrapolovanou $B(0) = B$ včetně odhadu nejistoty. V případě fitování dejte bodům váhu úměrnou kvadrátu tlaku (tj. standardní chyba σ bodu je nepřímo úměrná tlaku). Příklad fitování v Excelu a LibreOfficu.

Návod – fugacitní koeficient. Pro fugacitní koeficient platí:

$$\ln \varphi = \int_0^p \left(\frac{V_{\mathrm{m}}}{RT} - \frac{1}{p'} \right) \mathrm{d}p' = \frac{1}{RT} \int_0^p \tilde{B}(p') \mathrm{d}p'. \tag{3}$$

Integrál od 0 do $p =$
`p = 16 [bar]` spočtete numericky, zde stačí lichoběžníkové pravidlo (jindy by bylo vhodné třeba Simpsonovo pravidlo).

Profesionálové mohou nafitovanou funkci $\tilde{B}(p)$ zintegrovat. Z rov. (3) pak dostanete $\ln \varphi$.