

```
to bar = -51.5
to dm3 = -51.5
to cm3/mol = -51.5
sigp=0.001[bar] = 0.001 [bar]
```

Za teploty

$T=(300+\text{rnd}(78))*1[\text{K}] = 336 [\text{K}]$ jsme měřili tlak SF_6 v nádobě o objemu
 $V=(1+\text{rnd}(5))*1[\text{L}] = 2 [\text{dm}^3]$. Získali jsme následující závislost absolutního tlaku na látko-
vém 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/(cbirt(2)-1) = 14.25 [m5 kg s-2 K0.5 mol-2]
b=(cbirt(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
<pre>p=(0.38+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 4.164 [bar] Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 6488 [cm3/mol] n=V/Vm = 0.3082 [mol] p+sigp*rnd(1) = 4.165 [bar]</pre>	
<pre>p=(0.78+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 8.077 [bar] Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 3233 [cm3/mol] n=V/Vm = 0.6186 [mol] p+sigp*rnd(1) = 8.076 [bar]</pre>	
<pre>p=(1.18+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 11.82 [bar] Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 2133 [cm3/mol] n=V/Vm = 0.9377 [mol] p+sigp*rnd(1) = 11.82 [bar]</pre>	
<pre>p=(1.58+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 15.92 [bar] Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1519 [cm3/mol] n=V/Vm = 1.317 [mol] p+sigp*rnd(1) = 15.92 [bar]</pre>	
<pre>p=(1.98+0.04*rnd(0))*1[MPa] = 19.96 [bar] Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1158 [cm3/mol] n=V/Vm = 1.727 [mol] p+sigp*rnd(1) = 19.96 [bar]</pre>	

Vypočtěte druhý viriálový koeficient B za teploty

$T = 336 [\text{K}]$ a fugacitní koeficient za téže teploty a tlaku

`p=1.6[MPa]+0.1[MPa]*rnd(3) = 17 [bar] .`

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

`B2=b-a/R/T**1.5 = -217.2 [cm3/mol]`

`Vm=solve Vm=R*T/p RK-p = 1406 [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 = -0.1378`

`phi=exp(lnphi) = 0.8713`

Návod – viriálový koeficient. Z tlakového viriálového rozvoje

$$V_m = \frac{RT}{p} + B \quad (1)$$

dostaneme, že funkce

$$\tilde{B}(p) = V_m - \frac{RT}{p} \quad (2)$$

konverguje pro $p \rightarrow 0$ 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 $V_m = V/n$. Pak proložte přímkou nebo hladkou křivku danými body a stanovte limitu $\tilde{B}(p \rightarrow 0) = B$. 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 zneprůjemňuje 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 LibreOffice.**

Návod – fugacitní koeficient. Pro fugacitní koeficient platí:

$$\ln \varphi = \int_0^p \left(\frac{V_m}{RT} - \frac{1}{p'} \right) dp' = \frac{1}{RT} \int_0^p \tilde{B}(p') dp'. \quad (3)$$

Integrál od 0 do $p =$

`p = 17 [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 $\ln \varphi$.