

```

! 1. Nevratné ztuhnutí =====
m=1500      ! [g]
Cvoda=4.2   ! [JK-1g-1]
Dhtani=334  ! [Jg-1]
T=-15+273.15 ! [K]
T0=273.15  ! [K]
mled=m*Cvoda*(T0-T)/Dhtani ! [g]
DS=Cvoda*m*ln(T0/T)-mled*Dhtani/T0 ! [JK-1]
!
! 2. (4.47) Nevratné ztuhnutí =====
Cvoda=73.3  ! [JK-1mol-1]
Cled=37.7   ! [JK-1mol-1]
Dhtani=6008 ! [Jmol-1]
!
! a) t=0°C
T=273.15   ! [K]
DH=-Dhtani ! [Jmol-1] Delta H tuhnutí
DS=DH/T    ! [JK-1mol-1]
DG=DH-T*DS ! musí vyjít nula: vratný děj za [p,T]
!
! b) t=-5°C
!
! voda -5°C    led -5°C  (T1)
! |           ↑
! | Q1        | Q3
! V          Q2 |
! voda 0°C ---> led 0°C  (T0)
!
T1=273.15-5 ! [K]
T0=273.15   ! [K]
Q1=Cvoda*(T0-T1)
Q2=-Dhtani
Q3=Cled*(T1-T0)
DH=Q1+Q2+Q3 ! [Jmol-1] změna entalpie
! nebo Kirchhoff: přepočítáváme tuhnutí z 0°C na
-5°C
DH=-Dhtani+(Cled-Cvoda)*(T1-T0)
! stejně entropie:
DS1=Cvoda*ln(T0/T1) ! integral[T1,T0] Cvoda dT
DS2=-Dhtani/T0
DS3=Cled*ln(T1/T0)
DS=DS1+DS2+DS3 ! [JK-1mol-1] změna entropie
! nebo obdobně Kirchhoff:
DS=-Dhtani/T0+(Cled-Cvoda)*ln(T1/T0)
DG=DH-T1*DS ! [Jmol-1] změna Gibsovy energie
! pozn.:
! DG<0 (samovolně probíhající děj při [p,T])
! protože poč. a konc. teploty jsou stejné,
! nepotřebujeme absolutní entropie!
!
! 3. (4.124a) Jouleův-Thomsonův jev =====
T1=300      ! [K]
p1=20       ! [MPa]
p2=0.1      ! [MPa]
muJT=-0.232 ! [KMPa-1]
T2=T1+muJT*(p2-p1) ! [K]
!
! 4. (4.120) =====
dHdp=(660.3-661.3)/(0.55-0.5) ! [kcal kg-1 MPa-1]
Cp=(0.560+0.575)/2           ! [kcal kg-1 K-1]
muJT=-dHdp/Cp                ! [KMPa-1]
!
! 5. (4.117ab) Inverzní teplota =====
a=2.087e4 ! [MPa cm6 mol-2]
b=16.75   ! [cm3 mol-1]
Vm=9e99   ! [cm3 mol-1]
Ta=2*a/R/b*((Vm-b)/Vm)2 ! [K]
Vm=30e3   ! [cm3 mol-1]
Tb=2*a/R/b*((Vm-b)/Vm)2 ! [K]
p=R*T/(Vm-b)-a/Vm2 ! [MPa]

```

! 6. (3.70) Nevratná adiabatická expanze =====

! $CV_m \cdot R \cdot (T_2 - T_1) = -p_{vn} \cdot (R \cdot T_2 / p_2 - R \cdot T_1 / p_1)$
 solve T2 $1.5 \cdot R \cdot (T_2 - 400) + 1e5 \cdot R \cdot (T_2 / 1e5 - 400 / 2e5)$
 320

! 8. Expanze do vakua =====

p=1e5 ! [Pa] $1 \cdot 10^{+05}$
 T=300 ! [K] 300
 V=0.8e-3 ! [m³] 0.0008
 n=p*V/R/T ! [mol] 0.032073
 DS=n*R*ln(1e-3/V) ! [JK⁻¹] 0.059505

! 9. (4.96) Fugacita =====

phi=0.986 0.986
 p=101.3e3 ! [Pa] $1.013 \cdot 10^{+05}$
 fg=p*phi ! [Pa] 99882
 fl=fg ! rovnováha 99882
 p2=10e6 ! [Pa] $1 \cdot 10^{+07}$
 T=373.15 ! [K] 373.15
 Vm=18.8e-6 ! [m³ mol⁻¹] $1.88 \cdot 10^{-05}$
 f2=f1*exp((p2-p)*Vm/R/T) ! Pa $1.0606 \cdot 10^{+05}$

! 10. Fugacita a Gibbsova energie =====

T=298 ! [K] 298
 Tc=154.6 ! [K] 154.6
 pc=5.04 ! [MPa] 5.04
 Tr=298/Tc 1.9276
 p=20 ! [MPa] 20
 pr=p/pc 3.9683
 phi=0.93 ! z diagramu 0.93
 f=phi*p 18.6
 DG=0+R*T*ln(f/0.101325) 12915

! 11. Fugacita u směsi =====

p=10 ! [MPa] 10
 T=200 ! [K] 200
 ! kyslík
 Tc1=154.6 ! [K] 154.6
 pc1=5.04 ! [MPa] 5.04
 Tr=T/Tc1 ! [K] 1.2937
 pr=p/pc1 1.9841
 phi1=0.74 ! z diagramu 0.74
 f1=phi1*0.2*p ! [MPa] 1.48

! dusík
 Tc2=126.2 ! [K] 126.2
 pc2=3.39 ! [MPa] 3.39
 Tr=T/Tc2 1.5848
 pr=p/pc2 2.9499
 phi2=0.83 ! z diagramu 0.83
 f2=phi2*0.8*p ! [MPa] 6.64

! dodatková Gibbsova energie
 GE=R*T*(0.2*ln phi1+0.8*ln phi2) ! [J mol⁻¹] -348.02
 ! one-fluid
 pc=0.2*pc1+0.8*pc2 3.72
 Tc=0.2*Tc1+0.8*Tc2 131.88
 pr=p/pc 2.6882
 Tr=T/Tc 1.5165
 phi=0.8 ! z diagramu 0.8
 GE=R*T*ln phi -371.06

!
 !
 !
 !
 !
 !
 !
 !
 !
 !
 !

! 12. Opakování -- generalizovaný diagram z =====

V=20e-3	! [m ³]	0.02
m=4000	! [g]	4000
M=0.5*M(N2)+0.5*M(O2)	! [g mol ⁻¹]	30.006
n=m/M	! [mol]	133.31
Vm=V/n	! [m ³ mol ⁻¹]	0.00015003
T=281	! [K]	281
! kyslík		
Tc1=154.6	! [K]	154.6
pc1=5.04e6	! [Pa]	5.04 · 10 ⁺⁰⁶
! dusík		
Tc2=126.2	! [K]	126.2
!		
pc2=3.39e6	! [Pa]	3.39 · 10 ⁺⁰⁶
VcNO=R*(0.5*Tc1/pc1+0.5*Tc2/pc2)		0.00028228
Vr=Vm/VcNO	! [m ³ mol ⁻¹]	0.53149
Tc=0.5*Tc1+0.5*Tc2		140.4
Tr=T/Tc		2.0014
z=0.96	! z diagramu	0.96
p=z*R*T/Vm	! [Pa]	1.495 · 10 ⁺⁰⁷