**Clausiova–Clapeyronova rovnice ve 2D – protokol o simulaci**

Postupujte podle [návodu](http://old.vscht.cz/fch/cz/pomucky/kolafa/pchem03.pdf) (http://old.vscht.cz/fch/cz/pomucky/kolafa/pchem03.pdf).

**#** je číslo slidu.

Do sloupce **hodnota** vyplňte vstupní hodnotu, výsledek simulace nebo vámi vypočtenou hodnotu (z výsledků simulací). Tam, kde to má smysl, uveďte odhad standardní chyby v závorce v jednotkách posledního platného místa nebo (je-li to vhodné) relativní chybu v %.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **#** | **veličina** | ***symbol*** | **hodnota(chyba)** |
| 7 | nastavený počet molekul | *N* |  |
| 8 | VLE: nastavená nižší teplota | *T*1 |  |
| 10 | VLE: nasimulovaná nižší teplota | *T*1 |  |
|  | VLE: nasimulovaný nižší tlak | *p*1 |  |
|  | VLE: počet použitých bloků | *n*1 |  |
| 9 | VLE: nastavená vyšší teplota | *T*2 |  |
| 10 | VLE: nasimulovaná vyšší teplota | *T*2 |  |
|  | VLE: nasimulovaný vyšší tlak vč. odhadu chyby | *p*2 |  |
|  | VLE: počet použitých bloků | *n*2 |  |
| 10 | vypočtená střední teplota | *T̅* |  |
|  | vypočtený střední tlak | *p̅* |  |
| 11 | plyn *NPT*: nasimulovaný kompresibilitní faktor | *Z* |  |
|  | plyn *NPT*: nasimulovaná entalpie | *H*(g) |  |
| 12 | entalpie z Clausiovy–Clapeyronovy rovnice (metoda 1) | Δvap*H*at(1) |  |
| 13 | kapalina *NPT*: nasimulovaná entalpie | *H*(l) |  |
|  | entalpie z *NPT* simulací plynu a kapaliny (metoda 2) | Δvap*H*at(2) |  |
| 14 | rozdíl Δ12 = Δvap*H*at(1) − Δvap*H*at(2)  | Δ12 |  |
|  | interval spolehlivosti Δ12 na hladině 95 % |  |  |

**Otázky:**

|  |  |
| --- | --- |
| Liší se výsledek Δvap*H*at(1) od Δvap*H*at(2) signifikantně (tj. na hladině 95 %)? |  |
| Která simulační metoda pro výpočet Δvap*H* je přesnější? |  |
| Jaká metoda je vhodnější pro stanovení Δvap*H* v reálném experimentu? |  |