



ČESKÝ OBRANNÝ STANDARD

102507 2. vydání	ODVOZENÍ TERMOCHEMICKÝCH HODNOT PRO VÝPOČTY VNITŘNÍ BALISTIKY
-----------------------------------	--

ZAVÁDÍ	STANAG 4400, Ed. 1 DERIVATION OF THERMOCHEMICAL VALUES FOR INTERIOR BALLISTIC CALCULATIONS Odvození termochemických hodnot pro výpočty vnitřní balistiky
NAHRAZUJE	ČOS 102507, 1. vydání, Změna 1 ODVOZENÍ TERMOCHEMICKÝCH HODNOT PRO VÝPOČTY VNITŘNÍ BALISTIKY

(VOLNÁ STRANA)

ČESKÝ OBRANNÝ STANDARD
ODVOZENÍ TERMOCHEMICKÝCH HODNOT PRO VÝPOČTY VNITŘNÍ
BALISTIKY

Základem pro tvorbu tohoto standardu byl následující originál dokumentu:

STANAG 4400, Ed. 1 DERIVATION OF THERMOCHEMICAL VALUES
FOR INTERIOR BALLISTIC CALCULATIONS

Odvození termochemických hodnot pro výpočty vnitřní
balistiky

OBSAH

	Strana
1 Předmět standardu.....	5
2 Nahrazení standardů (norem)	5
3 Související dokumenty	5
4 Zpracovatel ČOS.....	5
5 Použité pojmy, jejich definice a symboly	5
5.1 Pojmy a jejich definice.....	5
5.2 Použité symboly	6
6 Všeobecná ustanovení.....	7
7 Vztahy a definice termochemických vlastností	7
8 Výpočet poměru „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit	10
9 Metodika výpočtu druhých a třetích viriálních koeficientů.....	11
9.1 Čistá složka	11
9.2 Směsi	14
10 Koeficienty tepelné kapacity, entalpie a entropie	22
11 Atomové hmotnosti a konstanty	27
12 Tabulka vzorců, entalpií a složek hnacích hmot.....	28
13 Přehled charakteristik hnací hmoty	31
14 Vybraná literatura	33

1 Předmět standardu

ČOS 102507, 2. vydání zavádí STANAG 4400, Edice 1 Odvození termochemických hodnot pro výpočty vnitřní balistiky (Derivation of Thermochemical Values for Interior Ballistic Calculations) do prostředí ČR. Předmětem tohoto českého obranného standardu (dále ČOS) je stanovení a standardizace metod a postupů pro odvození termochemických hodnot pro použití ve výpočtech vnitřní balistiky. Odvození termochemických hodnot pro výpočty vnitřní balistiky tvoří část vstupních údajů pro výpočet parametrů vnitřní balistiky s použitím unifikovaného termodynamického modelu vnitřní balistiky s celkovými parametry. Přijetí tohoto modelu zajistí, že termochemické hodnoty získané při výrobě, zkoušení a používání děl nebo munice jedním státem budou shodné s hodnotami stanovenými jinými státy NATO a mohou být účinně využívány všemi ostatními zeměmi, zejména v souvislosti s použitím již zmiňovaného unifikovaného modelu vnitřní balistiky.

2 Nahrazení standardů (norem)

Tento standard nahrazuje ČOS 102507, 1. vydání, Změna 1.

3 Související dokumenty

V tomto standardu jsou odkazy na dále uvedené dokumenty, které se tímto stávají jeho normativní součástí. U odkazů, v nichž je uveden rok vydání souvisejícího standardu, platí tento související standard bez ohledu na to, zda existují novější vydání tohoto souvisejícího standardu. U odkazů na dokument bez uvedení data jeho vydání platí vždy poslední vydání citovaného dokumentu.

STANAG 4367 THERMODYNAMIC INTERIOR BALLISTIC MODEL WITH GLOBAL PARAMETERS

Termodynamický model vnitřní balistiky s celkovými parametry.

ČOS 137601 ORGANIZACE A METODY SCHVALOVÁNÍ ZPŮSOBILOSTI VÝBUŠNIN PRO VOJENSKÉ ÚČELY

ČOS 137604 DEFINOVÁNÍ A STANOVENÍ BALISTICKÝCH VLASTNOSTÍ DĚLOSTŘELECKÝCH PRACHOVÝCH NÁPLNÍ

4 Zpracovatel ČOS

Vojenský technický ústav, s.p., odštěpný závod VTÚVM Slavičín, Ing. Pavel Menša.

5 Použité pojmy, jejich definice a symboly

5.1 Pojmy a jejich definice

Český pojem	Anglický ekvivalent	Definice
měrná energie hnací hmoty, f_p	Propellant Force, f_p	Je to veličina používaná ve vnitřní balistice. Představuje pracovní schopnost hnací hmoty a je úměrná energii uvolněné jednotkovým množstvím hnací hmoty při dané teplotě.

kovolum	Covolume	Kovolum je ve vnitřní balistice definován Noble-Abelovou stavovou rovnicí $P \cdot (V - \eta) = n \cdot R \cdot T_f$, kde η je nazýváno kovolum.
„zamrzlý“	„Frozen“	Přídavné jméno „zamrzlý“ se vztahuje na skutečnost, že dvě tepelné kapacity směsi horkých plynů hnací hmoty jsou vypočítávány zcela jako vážený molární součet tepelných kapacit jednotlivých složek; chemické rovnováhy jsou považovány jako „zamrzlé“ a neovlivňují tepelnou kapacitu.
poměr „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit, κ	Ratio of „Frozen“ Specific Heat Capacities, κ	Poměr „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit je poměr mezi měrnými tepelnými kapacitami směsi plynů při konstantním tlaku a konstantním objemu v „zamrzlém“ chemickém složení při výbuchové teplotě.
poměr měrných tepelných kapacit při rovnováze, γ	Ratio of Specific Heats at Equilibrium, γ	Poměr měrných tepelných kapacit při rovnováze je definován jako parciální derivace přirozeného logaritmu tlaku vzhledem k přirozenému logaritmu hustoty při konstantní entropii a může být vyjádřen rovnicí ve tvaru:
		$\gamma = \left(\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right)_s$
zkrácená viriální stavová rovnice	Truncated Virial Equation of State	Stavová rovnice směsi plynů se předpokládá ve tvaru:
		$\frac{P \cdot V}{n \cdot R \cdot T} = 1 + \frac{n \cdot B}{V} + \frac{n^2 \cdot C}{V^2},$
		kde:
		B a C jsou nazývány druhými a třetími viriálními koeficienty. Jednotkami pro B jsou m^3/mol a pro C jsou $(\text{m}^6/\text{mol}^2)$.

5.2 Použité symboly

Symbol	Definice	Jednotky SI
a_{ij}	Stechiometrické koeficienty, počet atomů prvku i v molu látky j	-
a_i ($i=0$ až 6)	Koeficienty nejmenších čtverců	různé
b_i	Množství atomů prvku i v kilogramu směsi	mol/kg
b_i^0	Stanovené množství atomů prvku i v kilogramu všech reagujících složek	mol/kg

B	Druhý viriální koeficient	m^3/mol
C	Třetí viriální koeficient	$\text{m}^6/(\text{mol}^2)$
C_p^0	Standardní stavová molární tepelná kapacita při konstantním tlaku	$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
f	Helmholtzova energie směsi	J/kg
f_p	Měrná energie hnací hmoty	J/kg
F	Helmholtzova energie s omezeními	J/kg
g	Gibbsova energie směsi	J/kg
G	Gibbsova energie směsi s omezeními	J/kg
H_T^0	Standardní molární entalpie	J/mol
n	Počet molů plynu na kilogram	mol/kg
n_j	Množství molů látky j v kilogramu směsi	mol/kg
P	Tlak	Pa
R	Molární plynová konstanta	$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
S_T^0	Standardní molární entropie	$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
T	Termodynamická teplota	K
T_f	Adiabatická výbuchová teplota	K
V	Měrný objem	m^3/kg
ΔH_f	Entalpie soustavy	J/mol
μ_j	Chemický potenciál látky j	J/mol
η	Kovolum hnací hmoty	m^3/kg
λ_j	Lagrangeův multiplikátor	J/mol

6 Všeobecná ustanovení

Tímto standardem je definováno stanovení termochemických hodnot pro použití ve vnitrobalistických výpočtech. Hodnoty jsou používány v termodynamickém modelu vnitřní balistiky s celkovými parametry, popsaném ve STANAG 4367. Tento dokument obsahuje rovněž odsouhlasené údaje, které budou používány u zmiňovaného modelu. Data jsou však nezávislá na modelu, který je zvolen pro vnitrobalistický výpočet.

7 Vztahy a definice termochemických vlastností

7.1 Pro výpočet termochemických hodnot používaných ve vnitřní balistice může být využito mnoho různých přístupů. Aby byl zabezpečen unifikovaný přístup, jsou přijaty následující předpoklady:

- produkty hoření jsou v termochemické rovnováze a v průběhu hoření nevzniká žádná tepelná ztráta,
- je používána viriální stavová rovnice, zkrácená po třetím členu nebo jakákoliv jiná rovnice, která je ekvivalentní třetímu řádu,

- c. termochemická rovnováha je získána minimalizací volné energie, podmíněná příslušným omezením (například určitým objemem nebo určitou energií),
- d. kompozice hnacích hmot obsahují minimálně následující prvky:
C, H, O, N, S, K, Al, Na, Ba, Mg, F a Pb,
- e. je počítán poměr „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit. Metodika je uvedena v kapitole 8.

7.2 Zkrácená viriální stavová rovnice je:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \cdot \left[1 + \frac{n \cdot B}{V} + \left(\frac{n}{V} \right)^2 \cdot C \right],$$

kde B a C jsou druhé a třetí viriální koeficienty. Seznam symbolů, použitých v této příloze, je uveden v kapitole 5.2. Druhé a třetí viriální koeficienty jsou vypočítány metodikou uvedenou v kapitole 9.

7.3 Minimalizace Gibbsovy energie:

Pro směsi o m látkách je Gibbsova energie na kilogram směsi g dána:

$$g = \sum_{j=1}^m \mu_j \cdot n_j,$$

kde chemický potenciál na mol látky j je definován jako:

$$\mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial n_j} \right)_{T, P, n_{i \neq j}},$$

podmínkou pro chemickou rovnováhu je minimalizace energie. Minimalizace je podmíněna následujícími omezeními hmotnostní bilance:

$$b_i - b_i^0 = 0 \quad i = 1, \dots, l,$$

kde:

$$b_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} \cdot n_j \quad i = 1, \dots, l,$$

kde stechiometrické koeficienty a_{ij} je počet atomů prvků i v molu látky j a b_i^0 je stanovené množství atomů prvků i v kilogramu všech reagujících složek. Definování výrazu G je následující:

$$G = g + \sum_{i=1}^l \lambda_i \cdot \left(\sum_{j=1}^m a_{ij} \cdot n_j - b_i^0 \right),$$

kde λ_i jsou Lagrangeovy multiplifikátory, podmínka pro rovnováhu nastává:

$$\delta G = \sum_{j=1}^m \left(\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i \cdot a_{ij} \right) \delta n_j + \sum_{i=1}^l (b_i - b_i^0) \delta \lambda_i = 0.$$

7.4 Minimalizace Helmholtzovy energie:

Rovnice, které jsou zde uvedené, jsou podobné rovnicím uvedeným v předcházející kapitole. Tyto dvě volné energie mají následující termodynamický vztah:

$$f = g - P \cdot V,$$

kde f je Helmholtzova energie na kilogram směsi a g je uvedeno v bodě 7.3, tj.:

$$f = \sum_{j=1}^m \mu_j \cdot n_j - P \cdot V,$$

chemický potenciál μ_i může být vyjádřen jako následující termodynamická odvozenina:

$$\mu_j = \left(\frac{\partial f}{\partial n_j} \right)_{T, V, n_{i \neq j}},$$

jestliže:

$$F = f + \sum_{i=1}^l \lambda_i \cdot (b_i - b_i^0),$$

podmínka pro rovnováhu založená na minimalizaci Helmholtzovy energie podmíněná omezeními hmotnostní bilance je:

$$\delta F = \sum_{j=1}^m \left(\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i \cdot a_{ij} \right) \delta n_j + \sum_{i=1}^l (b_i - b_i^0) \delta \lambda_i = 0.$$

7.5 Termodynamické údaje:

Pro každou reagující látku termodynamické funkce, měrná tepelná kapacita, entalpie a entropie jako funkce teploty jsou dány ve tvaru koeficientů nejmenších čtverců následovně:

$$C_p^0 = R \cdot \left[a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3 + a_4 \cdot T^4 \right],$$

$$H_T^0 = R \cdot T \cdot \left[a_0 + \frac{a_1}{2} \cdot T + \frac{a_2}{3} \cdot T^2 + \frac{a_3}{4} \cdot T^3 + \frac{a_4}{5} \cdot T^4 + \frac{a_5}{T} \right],$$

$$S_T^0 = R \cdot \left[a_0 \cdot \ln T + a_1 \cdot T + \frac{a_2}{2} \cdot T^2 + \frac{a_3}{3} \cdot T^3 + \frac{a_4}{4} \cdot T^4 + a_5 \right]$$

a

$$H_T^0 = (\Delta H_f)_{298.15} + \int_{298.15}^T C_p^0 dT,$$

$$S_T^0 = S_{298,15}^0 + \int_{298,15}^T C_p^0 d(\ln T).$$

Pro každou látku jsou přiřčeny dvě sady koeficientů pro dva sousední teplotní intervaly, 300 až 1000 K a 1000 až 5000 K. Údaje byly omezeny tak, aby si byly rovny při 1000 K. Příklady koeficientů jsou uvedeny v Kapitole 10. Standardní stav je definován jako stabilní forma čistého prvku při tlaku 0,1 MPa a teplotě 298,15 K, pro kterou $\Delta H_f = H_f^0 = 0$. Teplota je získána vyrovnáním vnitřní energie produktů hoření s vnitřní energií hnačí hmoty.

Kapitola 11 obsahuje atomové hmotnosti a konstanty, Kapitola 12 obsahuje tabulku vzorců a entalpií složek hnačí hmoty. Formulář (tabulka) pro souhrnné charakteristiky hnačí hmoty je uveden v Kapitole 13.

Údaje uvedené v Kapitolách 10 až 12 jsou pouze příklady požadovaných údajů, poněvadž vždy podléhají revizi. Francie je zodpovědná za udržování a aktualizaci referenční databáze, která je zpřístupněna všem státům.

7.6 Kovolum hnačí hmoty η je definován jako $V - f_p/P$, kde f_p je měrná energie hnačí hmoty a je rovna $(n \cdot R \cdot T_f)$. Kovolum je vypočítáván z druhých a třetích viriálních koeficientů, B a C , podle následující rovnice:

$$\eta = \frac{n \cdot B \cdot V^2 + n^2 \cdot C \cdot V}{V^2 + n \cdot B \cdot V + n^2 \cdot C}.$$

8 Výpočet poměru „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit

Výpočet κ , poměru mezi měrnými tepelnými kapacitami C_p a C_v je proveden následovně:

Měrné tepelné kapacity C_p jsou používány k výpočtu příslušné hodnoty pro konstantní objem podle vztahu používaného u ideálních plynů:

$$C_{v \text{ id}} = C_{p \text{ id}} - R,$$

$C_{v \text{ real}}$ vztahující se na reálné plyny může pak být vypočítáno z údajů stavové rovnice pro reálné plyny beroucí v úvahu závislost na objemu a tlaku:

$$C_{v \text{ real}} = C_{v \text{ id}} + T \cdot \int_{\infty}^V \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right) dV,$$

v tomto případě je $\partial^2 P / \partial T^2$ získáno dvojí derivací viriální stavové rovnice řešenou pro P :

$$P = n \cdot R \cdot T \cdot \left[\frac{1}{V} + \frac{B(T)}{V^2} + \frac{n^2 \cdot C(T)}{V^3} \right],$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{P}{T} + \frac{n^2 \cdot R \cdot T}{V^2} \cdot \left[B'(T) + \frac{n \cdot C'(T)}{V} \right],$$

kde B' a C' jsou druhé a třetí viriální koeficienty derivované vzhledem k teplotě.

Pro druhou derivaci platí:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} = \frac{2 \cdot n^2}{V^2} \cdot \left[B'(T) + \frac{n \cdot C'(T)}{V} \right] + \frac{n^2 \cdot R \cdot T}{V^2} \cdot \left[B''(T) + \frac{n \cdot C''(T)}{V} \right],$$

integrací této parciální diferenciální rovnice dospějeme nakonec k výrazu, který umožňuje stanovení $C_{v \text{ real}}$:

$$\int_{\infty}^V \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right) dV = \frac{n^2 \cdot R}{V} \cdot [2 \cdot B'(T) + T \cdot B''(T)] + \frac{n^3 \cdot R}{2 \cdot V^2} \cdot [2 \cdot C'(T) + T \cdot C''(T)],$$

nyní je $C_{v \text{ real}}$ stanoveno, $C_{p \text{ real}}$ může být určeno pomocí následujícího vztahu:

$$C_{p \text{ real}} = C_{v \text{ real}} - T \cdot \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V^2}{\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T},$$

opět jsou dvě druhé derivace přístupné pomocí viriální stavové rovnice, z $C_{p \text{ real}}$ a $C_{v \text{ real}}$ je možno získat poměr „zamrzlých“ měrných tepelných kapacit:

$$K_{\text{real}} = \frac{C_{p \text{ real}}}{C_{v \text{ real}}}.$$

9 Metodika výpočtu druhých a třetích viriálních koeficientů

9.1 Čistá složka

Tato metoda pochází od Hirschfeldera (viz. kapitola 14). Pro nepolární molekuly je používána (6-12) Lennard-Jonesova potenciálová funkce. U této funkce jsou vzaty v úvahu vzájemné přitažlivé síly mezi molekulami na větší vzdálenosti a odpuzování vzniklé při „těsném přiblížení“. Rovnice je:

$$\Phi(r) = 4 \cdot \varepsilon \cdot \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

kde ε je maximální energie přitažlivé síly nebo hloubka potenciálové jámy a nastává při $r = 2^{1/6} \sigma$.

σ je taková hodnota r , při které je potenciálová funkce rovna nule. Neurčitost hodnot σ a ε je přibližně 10 %.

Druhý viriální koeficient pro plyny je dán vztahem:

$$B(T) = 2 \cdot \pi \cdot N \cdot \int_0^{\infty} \left[1 - e^{-\Phi(r)/kT} \right] r^2 dr,$$

kde k je Boltzmannova konstanta ($k = 1,380658 \cdot 10^{-23}$ J/K),

A je Avogadrova konstanta ($R = kN$) ($N = 6,022137 \cdot 10^{23}$ mol⁻¹).

Pro nepolární plyny je možno tuto rovnici rozšířit:

$$B(T) = b_0 \cdot \sum_{j=0}^{\infty} b^{(j)} \cdot \left(\frac{k \cdot T}{\varepsilon} \right)^{-(2 \cdot j + 1) / 4},$$

kde
$$b_0 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot N \cdot \sigma^3$$

a
$$b^{(j)} = -\frac{2^{j+1/2}}{4j!} \cdot \Gamma\left(\frac{2j-1}{4}\right),$$

$b^{(j)}$ je uvedeno v následující tabulce č. 1.

TABULKA č. 1 Hodnoty $b^{(j)}$

j	$b^{(j)}$	j	$b^{(j)}$	j	$b^{(j)}$	j	$b^{(j)}$
0	1,7330010	11	-6,3872683E-4	21	-9,2768372E-9	31	-1,5742194E-14
1	-2,5636934	12	-2,3818733E-4	22	-2,6673193E-9	32	-3,8108431E-15
2	-8,6650050E-1	13	-8,5982461E-5	23	-7,5168046E-10	33	-9,0935023E-16
3	-4,2728224E-1	14	-3,0100597E-5	24	-2,0778030E-10	34	-2,1397782E-16
4	-2,1662512E-1	15	-1,0236007E-5	25	-5,6376036E-11	35	-4,9670392E-17
5	-1,0682056E-1	16	-3,3872440E-6	26	-1,5024114E-11	36	-1,1378186E-17
6	-5,0545862E-2	17	-1,0913390E-6	27	-3,9350796E-12	37	-2,5730157E-18
7	-2,2890120E-2	18	-3,4305829E-7	28	-1,0135315E-12	38	-5,7457408E-19
8	-9,9286513E-3	19	-1,0530464E-7	29	-2,5684633E-13	39	-1,2674099E-19
9	-4,1329383E-3	20	-3,1597475E-8	30	-6,4073832E-14	40	-2,7623753E-20
10	-1,6547753E-3						

Podobně třetí viriální koeficient je dán vztahem:

$$C(T) = b_0^2 \cdot \sum_{j=0}^{\infty} c^{(j)} \cdot \left(\frac{k \cdot T}{\varepsilon} \right)^{-(j+1) / 2},$$

kde $c^{(j)}$ jsou uvedeny dále v následující tabulce č. 2.

TABULKA č. 2 Hodnoty $c^{(j)}$

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$c^{(j)}$	1,729	-3,203	-1,519	0,958	0,429	0,059	-0,140	-0,210	-0,208
j	9	10	11	12	13	14	15	16	17
$c^{(j)}$	-0,168	-0,123	-0,084	-0,059	-0,035	-0,020	-0,011	-0,006	-0,004

Pro polární molekuly je používána Stockmayerova potenciálová funkce, která bere v úvahu vzájemné působení dipól – dipól. Touto funkcí je:

$$\Phi(r, \theta_1, \theta_2, \Phi_1 - \Phi_2) = 4 \cdot \varepsilon \cdot \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - \frac{\mu^2}{r^3} \cdot g(\theta_1, \theta_2, \Phi_2 - \Phi_1),$$

kde $g(\theta_1, \theta_2, \Phi_2 - \Phi_1) = 2 \cdot \cos \theta_1 \cdot \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \cos(\Phi_2 - \Phi_1)$.

μ = dipólový moment,

$\theta_1, \theta_2, \Phi_2 - \Phi_1$ = úhly orientace molekul, σ a ε zde mají mírně odlišný výklad než v Lennard-Jonesovu potenciálu.

Rovnice pro B a C jsou velmi komplikované. Rovnice pro $B(T)$ může být vyjádřena ve tvaru:

$$B(T) = b_0 \cdot B^*(T^*, t^*),$$

kde:

$$T^* = \frac{T \cdot k}{\varepsilon},$$

$$t^* = \frac{\sqrt{8} \cdot \mu^2}{\varepsilon \cdot \sigma^3},$$

$$\mu^* = \frac{\mu}{\sqrt{\varepsilon \cdot \sigma^3}}$$

a

$$C(T) = b_0^2 \cdot C^*(T^*, t^*).$$

Hodnoty ε a σ a μ pro některé plyny jsou uvedeny v tabulce 3. Jsou převzaty z knihy od Hirschfeldera.

Potenciální parametry pro Lennard-Jonesův (6-12) potenciál a Stockmayerův potenciál jsou uvedeny v tabulkách 4 a 5.

TABULKA č. 3 Hodnoty σ , ε , μ

Plyn	σ [nm]	ε/k [K]	μ [Debye]
CO ₂	0,407	205	-
N ₂	0,370	95	-
CO	0,376	100	-
H ₂	0,293	37	-
NO	0,317	131	-
O ₂	0,358	118	-
CH ₄	0,382	148	-
HCl	0,336	328	1,08
NH ₃	0,315	358	1,47
H ₂ O	0,252	775	1,85
CH ₃ CN	0,402	400	3,5
N ₂ O	0,385	229	-

Hodnoty pro ostatní plyny mohou být nalezeny z údajů o viskozitě a z „Tabulky elektrických dipólových momentů“ od L.G. Websonna, MIT, The Technology Press (1948).

B^* a C^* jsou pro různé hodnoty T^* a t^* uvedeny v tabulkách 4 a 5.

Všimněte si, že požadavek zohlednění polarit nezbytně vyžaduje použití třetího parametru μ (dipólový moment), což je novým zdrojem neurčitosti.

Kromě toho, Hirsfelderovy tabulky udávají hodnoty pro C^* pouze v malém rozsahu a neudávají hodnoty pro první a druhé derivace B^* a C^* .

9.2 Směsi

9.2.1 Dosud byl výpočet omezen na vzájemné působení mezi molekulami stejných chemických látek. Pro směsi mohou být použity empirické kombinace pravidel. Jako nejjednodušší bylo předpokládáno pravidlo dle Cornera, které je uvedeno dále:

$$n \cdot B(T) = \sum_{i=1}^m n_i \cdot B_i(T),$$

$$n \cdot C(T) = \sum_{i=1}^m n_i \cdot C_i(T),$$

$$n = \sum_{i=1}^m n_i.$$

9.2.2 Tímto je zásadně zanedbáváno vzájemné působení mezi molekulami různých druhů. Přesnější metoda využívá následující postup:

$$n^2 \cdot B(T) = \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m n_a \cdot n_b \cdot B_{ab}(T),$$

$$n^3 \cdot C(T) = \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m \sum_{c=1}^m n_a \cdot n_b \cdot n_c \cdot C_{abc}(T),$$

zde B_{ab} jsou stanoveny použitím následujících rovnic:

$$\sigma_{ab} = \frac{(\sigma_a + \sigma_b)}{2},$$

$$\varepsilon_{ab} = (\varepsilon_a \cdot \varepsilon_b)^{1/2}$$

a

$$t_{ab}^* = \frac{\mu_a \cdot \mu_b}{\sqrt{8} \cdot \varepsilon_{ab} \cdot \sigma_{ab}^3},$$

pro vzájemné působení mezi polárními – polárními a nepolárními – nepolárními molekulami. Pro vzájemná působení mezi polárními (p) a nepolárními (n) molekulami jsou použity následující kombinace pravidel:

$$\sigma_{np} = \frac{1}{2} \cdot (\sigma_a + \sigma_b) \cdot \xi^{-1/6},$$

$$\varepsilon_{np} = \sqrt{\varepsilon_n \cdot \varepsilon_p} \cdot \xi^2,$$

kde:

$$\xi = \left[1 + \frac{1}{4} \cdot \frac{\alpha_n \cdot \mu_p^{*2}}{\sigma_n^3} \cdot \left(\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n} \right)^{1/2} \right],$$

kde α_n je polarizovatelnost nepolární molekuly. Výpočet $C_{abc}(T)$ je velmi komplikovaný a je dostatečně přesný při použití jednoduchého kombinačního pravidla zanedbávajícího vzájemné působení mezi molekulami různých druhů.

Je možno vidět, že zohlednění polaritý jisté molekuly vyžaduje vzetí v úvahu polarizovatelnosti nepolárních molekul, čímž vzniká další zdroj neurčitosti.

Při uvažování všech dalších zdrojů neurčitosti je moudřejší uvažovat všechny molekuly nepolární a upravit σ a ε pro minimalizaci chyby.

Přesná výpočetní metodika uvedená výše podstatně zvyšuje složitost při velmi malých přínosech v přesnosti.

Naopak, Cornerova metodika představuje závažnou nevýhodu. Chemický potenciál každé látky může být napsán jako:

$$\mu_j = U_j - T \cdot S_j + \frac{P \cdot V}{n} + R \cdot T \cdot \left[\ln \left(\frac{n_j \cdot R \cdot T}{P \cdot V} \right) + \frac{n}{V} \cdot B_j + \frac{n^2}{2 \cdot V^2} \cdot C_j \right],$$

postup řešení rovnice pro podmínky rovnováhy:

$$\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i \cdot a_{ij} = 0,$$

vede jednoduše k dosti komplikovaným výpočtům, zvláště v případě, kde směs obsahuje kondenzované látky, jejichž molární objem nemůže být zanedbán.

9.2.3 Proto jako ve francouzském zákonu Bagheera a při vysokých tlacích asi nad 400 – 500 MPa je výhodnější používat odlišnou aproximaci podle Agamata, která je právě tak jednoduchá a lépe verifikovaná, než aproximace Cornerova. Agamatova aproximace vede k mnohem jednodušším rovnicím než jsou výsledné rovnice z Cornerovy aproximace a není důležitá přítomnost kondenzovaných látek.

Připustíme:

$$V = \sum_{j=1}^m n_j \cdot V_j,$$

$$U = \sum_{j=1}^m n_j \cdot U_j,$$

$$\mu_j = H_j - T \cdot S_j + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{n_j}{n} \right),$$

kde V_j je molární objem.

První řešení pro molární objem se skládá z rozvinutí viriální rovnice vyjádřené jako funkce tlaku. Je nutné použít funkci, která vyhovuje následujícím podmínkám:

$$\left(\frac{\partial V_j}{\partial T}\right)_P > 0 \quad \forall T, \forall P,$$

$$\left(\frac{\partial V_j}{\partial P}\right)_T < 0 \quad \forall P, \forall T,$$

$$\lim_{P \rightarrow \infty} V_j \geq 0 \quad \forall T$$

a do třetího řádu musí být identická s viriální stavovou rovnicí.

Vhodná funkce je následující:

$$V_j = \frac{R \cdot T}{P} + \frac{\beta_{1j}}{1 + \alpha_{1j} \cdot P} - \frac{\beta_{2j}}{1 + \alpha_{2j} \cdot P},$$

kde:

$$\beta_{1j} - \beta_{2j} = B_j$$

a

$$\alpha_{1j} \cdot \beta_{1j} - \alpha_{2j} \cdot \beta_{2j} = \frac{B_j^2 - C_j}{R \cdot T}.$$

Řešení je získáno ponížením indexu j :

$$\beta_1 = 1,7330010 \cdot b_0 \cdot \left(\frac{k \cdot T}{\varepsilon}\right)^{-1/4} \quad \text{a} \quad \alpha_2 = \frac{\beta_2}{R \cdot T},$$

pak

$$\beta_2 = \beta_1 - B$$

a

$$\alpha_1 = \frac{\beta_2^2 + B^2 - C}{\beta_1 \cdot R \cdot T}.$$

Opravy, které je nutno provést z důvodu vlivu výrazu $\beta/(1 + \alpha \cdot P)$ jsou:

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\beta}{1 + \alpha \cdot P}\right)\right)_P = \frac{\beta' \cdot (1 + \alpha' \cdot P) - \beta \cdot \alpha' \cdot P}{(1 + \alpha \cdot P)^2},$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\beta}{1 + \alpha \cdot P}\right)\right)_T = \frac{-\beta \cdot \alpha}{(1 + \alpha \cdot P)^2},$$

$$U : \frac{\beta \cdot (\alpha + T \cdot \alpha') - T \cdot \beta \cdot \alpha'}{\alpha^2} \cdot \ln(1 + \alpha \cdot P) - \frac{\beta \cdot (\alpha + T \cdot \alpha') \cdot P}{\alpha \cdot (1 + \alpha \cdot P)},$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_P : T \cdot \frac{(\beta \cdot \alpha'' - \beta'' \cdot \alpha) \cdot \alpha - 2 \cdot (\beta \cdot \alpha' - \beta' \cdot \alpha) \cdot \alpha'}{\alpha^3} \cdot \ln(1 + \alpha \cdot P) + \frac{2 \cdot T \cdot (\beta \cdot \alpha' - \beta' \cdot \alpha) \cdot \alpha' - (\beta \cdot T \cdot \alpha'' + \beta' \cdot \alpha) \cdot \alpha}{\alpha^2 \cdot (1 + \alpha \cdot P)} \cdot P + \frac{\beta \cdot (\alpha + T \cdot \alpha') \cdot \alpha' \cdot P^2}{\alpha \cdot (1 + \alpha \cdot P)^2},$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial P}\right)_T : \frac{-T \cdot \beta'}{1 + \alpha \cdot P} + \frac{\beta \cdot (\alpha + T \cdot \alpha') \cdot P}{(1 + \alpha \cdot P)^2},$$

$$\mu_j : \frac{\beta}{\alpha} \cdot \ln(1 + \alpha \cdot P),$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\mu_j}{R \cdot T}\right)\right)_P : \frac{T \cdot \beta' \cdot \alpha - \beta \cdot (\alpha + T \cdot \alpha')}{R \cdot T^2 \cdot \alpha^2} \cdot \ln(1 + \alpha \cdot P) + \frac{\beta \cdot \alpha' \cdot P}{R \cdot T \cdot \alpha (1 + \alpha \cdot P)},$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\mu_j}{R \cdot T}\right)\right)_P : \frac{\beta}{R \cdot T \cdot (1 + \alpha \cdot P)}.$$

Druhý viriální koeficient pro polární plyny (Stockmayerova potenciálová funkce) je uveden v následující tabulce č. 4.

$$B(T) = b_0 \cdot B^*(T^*, t^*),$$

$$T^* = \frac{k \cdot T}{\varepsilon},$$

$$= b_0 \cdot \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot N^2 \cdot \sigma^3,$$

$$t^* = 8^{-1/2} \cdot \mu^{*2} = \frac{8^{-1/2} \cdot \mu^{23}}{\varepsilon \cdot \sigma^3}.$$

TABULKA č. 4 Druhý viriální koeficient pro polární plyny $B^*(T^*; t^*)$

T^*	t^*	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7
0,30		-31,129	-42,968	-72,01				
0,35		-20,355	-25,879	-38,07	-64,11			
0,40		-14,717	-17,777	-24,090	-36,28	-60,4		
0,45		-11,339	-13,241	-16,985	-23,733	-35,92	-58,8	
0,50		-9,1199	-10,401	-12,841	-17,026	-24,11	-36,36	-59,
0,55		-7,5631	-8,4786	-10,181	-12,996	-17,53	-24,91	-37,3
0,60		-6,4159	-7,1001	-8,3495	-10,360	-13,477	-18,33	-26,0
0,65		-5,5381	-6,0677	-7,0213	-8,5234	-10,789	-14,185	-19,34
0,70		-4,8460	-5,2675	-6,0183	-7,1813	-8,8965	-11,394	-15,05
0,75		-4,2871	-4,6304	-5,2364	-6,1627	-7,5043	-9,413	-12,13
0,80		-3,8268	-4,1116	-4,6110	-5,3659	-6,4433	-7,9476	-10,040
0,85		-3,4414	-3,6815	-4,1000	-4,7271	-5,6113	-6,8267	-8,486
0,90		-3,1142	-3,3193	-3,6758	-4,2045	-4,9432	-5,9457	-7,292
0,95		-2,8330	-3,0103	-3,3166	-3,7695	-4,3961	-5,2373	-6,3523
1,00		-2,5889	-2,7437	-3,0102	-3,4021	-3,9406	-4,6567	-5,5953
1,05		-2,3750	-2,5114	-2,7455	-3,0881	-3,5559	-4,1732	-4,9744
1,10		-2,1862	-2,3072	-2,5145	-2,8167	-3,2271	-3,7649	-4,4572
1,15		-2,0183	-2,1265	-2,3113	-2,5799	-2,9430	-3,4160	-4,0203
1,20		-1,8680	-1,9653	-2,1312	-2,3716	-2,6952	-3,1146	-3,6471
1,25		-1,7328	-1,8208	-1,9706	-2,1870	-2,4773	-2,8519	-3,3249
1,30		-1,6105	-1,6905	-1,8264	-2,0223	-2,2844	-2,6211	-3,0442
1,35		-1,4994	-1,5724	-1,6963	-1,8746	-2,1124	-2,4168	-2,7976

1,40	-1,3980	-1,4649	-1,5784	-1,7413	-1,9581	-2,2348	-2,5795
1,45	-1,3051	-1,3667	-1,4710	-1,6205	-1,8190	-2,0717	-2,3854
1,50	-1,2197	-1,2766	-1,3728	-1,5106	-1,6931	-1,9247	-2,2115
1,55	-1,1410	-1,1937	-1,2827	-1,4101	-1,5785	-1,7917	-2,0549
1,60	-1,0681	-1,1171	-1,1998	-1,3179	-1,4738	-1,6708	-1,9133
1,65	-1,0006	-1,0462	-1,1232	-1,2330	-1,3778	-1,5604	-1,7846
1,70	-0,93775	-0,98038	-1,0523	-1,1547	-1,2896	-1,4594	-1,6674
1,75	-0,87917	-0,91908	-0,98633	-1,0821	-1,2079	-1,3662	-1,5597
1,80	-0,82445	-0,86190	-0,92498	-1,0147	-1,1325	-1,2804	-1,4610
1,85	-0,77322	-0,80844	-0,86772	-0,95197	-1,0625	-1,2011	-1,3699
1,90	-0,72516	-0,75834	-0,81417	-0,89345	-0,99736	-1,1275	-1,2858
1,95	-0,67998	-0,71130	-0,76398	-0,83873	-0,93662	-1,0590	-1,2078
2,00	-0,63745	-0,66707	-0,71686	-0,78747	-0,87985	-0,99526	-1,1353
2,10	-0,55947	-0,58607	-0,63076	-0,69408	-0,77679	-0,87993	-1,0048
2,20	-0,48969	-0,51373	-0,55409	-0,61121	-0,68573	-0,77850	-0,89060
2,3	-0,42693	-0,44877	-0,48540	-0,53721	-0,60472	-0,68865	-0,78989
2,4	-0,37020	-0,39012	-0,42354	-0,47076	-0,53224	-0,60856	-0,70049
2,5	-0,31868	-0,33695	-0,36576	-0,41079	-0,46702	-0,53676	-0,62063
2,6	-0,27172	-0,28852	-0,31668	-0,35642	-0,40807	-0,47205	-0,54292
2,7	-0,22875	-0,24426	-0,27025	-0,30692	-0,35453	-0,41347	-0,48420
2,8	-0,18929	-0,20366	-0,22774	-0,26167	-0,30572	-0,36020	-0,42552
2,9	-0,15295	-0,16630	-0,18867	-0,22018	-0,26106	-0,31159	-0,37210
3,0	-0,11937	-0,13182	-0,15266	-0,18200	-0,22005	-0,26705	-0,32330
3,1	-0,08828	-0,09991	-0,11937	-0,14677	-0,18229	-0,22612	-0,27854
3,2	-0,05941	-0,07030	-0,08852	-0,11417	-0,14740	-0,18839	-0,23738
3,3	-0,03254	-0,04277	-0,05986	-0,08393	-0,11509	-0,15351	-0,19940
3,4	-0,00748	-0,01710	-0,03318	-0,05580	-0,08509	-0,12118	-0,16427
3,5	+0,01594	+0,00688	-0,00828	-0,02959	-0,05717	-0,09115	-0,13169
3,6	0,03787	0,02931	+0,01501	-0,00511	-0,03113	-0,06318	-0,10140
3,7	0,05844	0,05035	0,03682	+0,01780	-0,00680	-0,03708	-0,07318
3,8	0,07778	0,07011	0,05729	0,30928	+0,01598	-0,01268	-0,04684
3,9	0,09597	0,08869	0,07653	0,05944	0,03736	+0,01018	-0,02219
4,0	0,11312	0,10620	0,09465	0,07841	0,05744	0,03163	+0,00091
4,1	0,12930	0,12272	0,11173	0,09628	0,07633	0,05180	0,02259
4,2	0,14460	0,13833	0,12786	0,11314	0,09414	0,07078	0,04298
4,3	0,15907	0,15309	0,14310	0,12907	0,11095	0,08868	0,06218
4,4	0,17279	0,16708	0,15754	0,14414	0,12684	0,10558	0,08029
4,5	0,18580	0,18034	0,17122	0,15841	0,14187	0,12155	0,09740
4,6	0,19815	0,19293	0,18420	0,17194	0,15611	0,13668	0,11357
4,7	0,20990	0,20489	0,19652	0,18478	0,16962	0,15101	0,12888
4,8	0,22107	0,21627	0,20825	0,19699	0,18245	0,16461	0,14340
4,9	0,23172	0,22711	0,21941	0,20860	0,19465	0,17752	0,15718
5,0	0,24187	0,23744	0,23004	0,21965	0,20625	0,18980	0,17026
6,0	0,32187	0,31877	0,31360	0,30634	0,29699	0,28552	0,27191
7,0	0,37532	0,37302	0,36918	0,36380	0,35687	0,34838	0,33832
8,0	0,41284	0,41106	0,40809	0,40393	0,39857	0,39201	0,38424
9,0	0,44012	0,43870	0,43633	0,43301	0,42873	0,42349	0,41729
10,0	0,46049	0,45932	0,45738	0,45466	0,45116	0,44687	0,44179
20,0	0,52527	0,52495	0,52441	0,52367	0,52271	0,52153	0,52014

30,0	0,52687	0,52672	0,52647	0,52611	0,52566	0,52510	0,52444
40,0	0,51854	0,51845	0,51830	0,51809	0,51782	0,51749	0,51710
50,0	0,50834	0,50828	0,50818	0,50804	0,50876	0,50764	0,50738
60,0	0,49820	0,49815	0,49808	0,49798	0,49785	0,49769	0,49750
70,0	0,48864	0,48861	0,48855	0,48847	0,48838	0,48826	0,48811
80,0	0,47978	0,47976	0,47971	0,47965	0,47957	0,47948	0,47937
90,0	0,47161	0,47159	0,47155	0,47150	0,47144	0,47136	0,47127
100,0	0,46406	0,46405	0,46402	0,46398	0,46392	0,46386	0,46379
200,0	0,41143	0,41142	0,41142	0,41140	0,41139	0,41137	0,41135
300,0	0,38013	0,38012	0,38012	0,38011	0,38011	0,38010	0,38009
400,0	0,35835	0,35835	0,35835	0,35834	0,35834	0,35833	0,35833

TABULKA č. 4 Druhý viriální koeficient pro polární plyny – pokračování

T^*	t^*	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
0,55		-58,8							
0,60		-38,5	-59,7						
0,65		-27,3	-40,0						
0,70		-20,50	-28,8	-41,8					
0,75		-16,05	-21,78	-30,4	-43,5				
0,80		-12,973	-17,14	-23,2	-32,0	-45,8			
0,85		-10,759	-13,90	-18,4	-24,7	-34,4	-47,0		
0,90		-9,103	-11,612	-14,92	-19,61	-26,3	-35,7	50,3	
0,95		-7,828	-9,790	-12,42	-16,00	-21,0	-27,9	37,8	-52,0
1,00		-6,820	-8,440	-10,54	-13,36	-17,2	-22,3	-29,8	-40,0
1,05		-6,008	-7,342	-9,08	-11,35	-14,3	-18,4	-24,3	-31,0
1,10		-5,3413	-6,4696	-7,915	-9,780	-12,21	-15,42	-19,6	-25,4
1,15		-4,7855	-5,7520	-6,976	-8,534	-10,53	-13,13	-16,5	-21,1
1,20		-4,3161	-5,1537	-6,203	-7,524	-9,20	-11,34	-14,1	-17,7
1,25		-3,9152	-4,6483	-5,559	-6,693	-8,11	-9,90	-12,2	-15,1
1,30		-3,5690	-4,2164	-5,014	-5,998	-7,21	-8,74	-10,7	-13,1
1,35		-3,2676	-3,8438	-4,5484	-5,4111	-6,471	-7,780	-9,41	-11,46
1,40		-3,0030	-3,5193	-4,1466	-4,9092	-5,839	-6,976	-8,38	-10,12
1,45		-2,7691	-3,2345	-3,7970	-4,4762	-5,298	-6,296	-7,51	-9,00
1,50		-2,5609	-2,9829	-3,4903	-4,0994	-4,831	-5,714	-6,78	-8,08
1,55		-2,3745	-2,7591	-3,2192	-3,7688	-4,426	-5,212	-6,15	-7,29
1,60		-2,2069	-2,5589	-2,9783	-3,4768	-4,069	-4,774	-5,612	-6,62
1,65		-2,0554	-2,3788	-2,7629	-3,2173	-3,7548	-4,3909	-5,145	-6,045
1,70		-1,9180	-2,2165	-2,5697	-2,9860	-3,4760	-4,0532	-4,735	-5,541
1,75		-1,7923	-2,0685	-2,3943	-2,7770	-3,2256	-3,7517	-4,370	-5,097
1,80		-1,6775	-1,9340	-2,2357	-2,5889	-3,0014	-3,4831	-4,046	-4,706
1,85		-1,5720	-1,8110	-2,0912	-2,4183	-2,7990	-3,2419	-3,758	-4,359
1,90		-1,4749	-1,6981	-1,9591	-2,2630	-2,6156	-3,0244	-3,498	-4,049
1,95		-1,3852	-1,5941	-1,8380	-2,1211	-2,4487	-2,8273	-3,265	-3,771
2,00		-1,3021	-1,4982	-1,7265	-1,9910	-2,2963	-2,6479	-3,053	-3,520
2,10		-1,1531	-1,3268	-1,5285	-1,7610	-2,0282	-2,3342	-2,6846	-3,0857
2,20		-1,0234	-1,1785	-1,3580	-1,5643	-1,8002	-2,0693	-2,3758	-2,7248
2,30		-0,90957	-1,0490	-1,2100	-1,3943	-1,6044	-1,8431	-2,1138	-2,4204
2,40		-0,80895	-0,93509	-1,0803	-1,2461	-1,4345	-1,6479	-1,8889	-2,1606

2,50	-0,71944	-0,83413	-0,96584	-1,1159	-1,2860	-1,4780	-1,6940	-1,9368
2,60	-0,63934	-0,74412	-0,86421	-1,0008	-1,1551	-1,3289	-1,5239	-1,7423
2,70	-0,56729	-0,66342	-0,77343	-0,89828	-1,0391	-1,1972	-1,3742	-1,5719
2,80	-0,50216	-0,59072	-0,69191	-0,80654	-0,93559	-1,0802	-1,2416	-1,4215
2,90	-0,44304	-0,52492	-0,61833	-0,72400	-0,84275	-0,97554	-1,1235	-1,2879
3,00	-0,38917	-0,46511	-0,55165	-0,64940	-0,75908	-0,88152	-1,0177	-1,1687
3,10	-0,33989	-0,41054	-0,49096	-0,58168	-0,68333	-0,79663	-0,92240	-1,0616
3,20	-0,29466	-0,36057	-0,43552	-0,51998	-0,61449	-0,71967	-0,83625	-0,96505
3,30	-0,25302	-0,31468	-0,38472	-0,46355	-0,55167	-0,64962	-0,75801	-0,87758
3,40	-0,21459	-0,27239	-0,33800	-0,41179	-0,49417	-0,58562	-0,68671	-0,79805
3,50	-0,17900	-0,23332	-0,29493	-0,36415	-0,44135	-0,52697	-0,62149	-0,72546
3,60	-0,14598	-0,19713	-0,25510	-0,32018	-0,39270	-0,47305	-0,56164	-0,65899
3,7	-0,11527	-0,16352	-0,21818	-0,27949	-0,34776	-0,42333	-0,50657	-0,59792
3,8	-0,08664	-0,13225	-0,18388	-0,24176	-0,30615	-0,37736	-0,45574	-0,54166
3,9	-0,05989	-0,10308	-0,15193	-0,20667	-0,26752	-0,33476	-0,40870	-0,48968
4,0	-0,03486	-0,07582	-0,12213	-0,17397	-0,23158	-0,29519	-0,36507	-0,44155
4,1	-0,01140	-0,05030	-0,09426	-0,14345	-0,19807	-0,25834	-0,32451	-0,39687
4,2	+0,01064	-0,02636	-0,06815	-0,11490	-0,16677	-0,22397	-0,28673	-0,35530
4,3	0,03137	-0,00387	-0,04366	-0,08814	-0,13747	-0,19184	-0,25145	-0,31655
4,4	0,05089	+0,01729	-0,02064	-0,06302	-0,11000	-0,16175	-0,21846	-0,28033
4,5	0,06932	0,03723	+0,00103	-0,03941	-0,08421	-0,13353	-0,18755	-0,24645
4,6	0,08672	0,05605	0,02145	-0,01717	-0,05995	-0,10702	-0,15854	-0,21469
4,7	0,10318	0,07383	0,04073	+0,00380	-0,03709	-0,08207	-0,13127	-0,18486
4,8	0,11877	0,09065	0,05896	0,02360	-0,01554	-0,05856	-0,10560	-0,15681
4,9	0,13355	0,10659	0,07620	0,04232	+0,00483	-0,03637	-0,08140	-0,13039
5,0	0,14758	0,12170	0,09255	0,06004	0,02409	-0,01540	-0,05855	-0,10548
6,0	0,25614	0,23818	0,21799	0,19554	0,17077	+0,14364	+0,11409	+0,08206
7,0	0,32667	0,31341	0,29853	0,28199	0,26379	0,24389	0,22225	0,19885
8,0	0,37524	0,36502	0,35355	0,34082	0,32682	0,31154	0,29494	0,27702
9,0	0,41012	0,40197	0,39283	0,38270	0,37157	0,35942	0,34625	0,33203
10,0	0,43593	0,42927	0,42180	0,41353	0,40444	0,39453	0,38379	0,37221
20,0	0,51854	0,51672	0,51468	0,51243	0,50996	0,50728	0,50438	0,50125
30,0	0,52367	0,52281	0,52184	0,52077	0,51960	0,51833	0,51695	0,51547
40,0	0,51665	0,51613	0,51556	0,51493	0,51423	0,51348	0,51266	0,51179
50,0	0,50707	0,50673	0,50635	0,50593	0,50546	0,50496	0,50441	0,50383
60,0	0,49729	0,49704	0,49676	0,49646	0,49613	0,49576	0,49537	0,49495
70,0	0,48795	0,48776	0,48755	0,48732	0,48707	0,48679	0,48650	0,48618
80,0	0,47924	0,47909	0,47893	0,47874	0,47854	0,47833	0,47810	0,47784,
90,0	0,47117	0,47105	0,47091	0,47077	0,47061	0,47043	0,47024	0,47004
100,0	0,46370	0,46360	0,46349	0,46337	0,46323	0,46309	0,46293	0,46276
200,0	0,41132	0,41129	0,41126	0,41123	0,41119	0,41115	0,41110	0,41105
300,0	0,38008	0,38006	0,38005	0,38003	0,38001	0,37999	0,37997	0,37994
400,0	0,35832	0,35831	0,35830	0,35829	0,35828	0,35827	0,35825	0,35824

Třetí viriální koeficient pro polární plyny (Stockmayerova potenciálová funkce) je uveden v následující tabulce č. 5.

$$C(T) = b_0 \cdot C^* \cdot (T^*, t^*), \quad T^* = \frac{k \cdot T}{\varepsilon}, \quad b_0 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot N^2 \cdot \sigma^3, \quad t^* = \frac{8^{-1/2} \cdot \mu^2}{\varepsilon \cdot \sigma^3}.$$

TABULKA č. 5 Třetí viriální koeficient pro polární plyny $C^*(T^*; t^*)$

T^*	t^*	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	1,0	1,2
1,0		0,4297	0,4440	0,5304	0,740							
1,2		0,5924	0,6177	0,7162	0,9216	1,268	1,78	2,5	3,4	4,6	7	
1,4		0,5683	0,5900	0,6679	0,8221	1,075	1,451	2,0	2,7	3,7	6,3	9
1,6		0,5180	0,5351	0,5940	0,7075	0,8899	1,158	1,53	2,03	2,69	4,72	7,0
1,8		0,4728	0,4861	0,5311	0,6161	0,7507	0,9455	1,214	1,572	2,03	3,36	5,2
2,0		0,4371	0,4476	0,4826	0,5478	0,6496	0,7957	0,995	1,257	1,595	2,46	4,0
2,5		0,3811	0,3873	0,4076	0,4445	0,5195	0,5807	0,6871	0,825	0,999	1,482	2,19
3,0		0,3523	0,3563	0,3692	0,3924	0,4275	0,4761	0,5403	0,6223	0,7248	1,002	1,401
4,0		0,3266	0,3286	0,3350	0,3463	0,3630	0,3859	0,4156	0,4529	0,4986	0,6194	0,7857
6,0		0,3077	0,3085	0,3109	0,3151	0,3213	0,3296	0,3401	0,3532	0,3690	0,4095	0,4640
8,0		0,2962	0,2966	0,2978	0,3000	0,3031	0,3072	0,3124	0,3188	0,3265	0,3459	0,3715
10,0		0,2861	0,2863	0,2871	0,2884	0,2902	0,2926	0,2957	0,2995	0,3039	0,3151	0,3297

10 Koeficienty tepelné kapacity, entalpie a entropie

Prvotním referenčním zdrojem pro tyto údaje jsou tabulky JANAF. Druhou referencí jsou NASA-Lewis expanzní koeficienty, které vycházejí z tabulek JANAF.

LEGENDA:

ŘÁDEK 1: V pořadí: název (EXAMPLE NAME), zdroj (SOURCE), kódový vzorec (CODED FORMULA), fáze (PHASE-P), teplotní rozsah (TEMP, RANGE) a molekulová hmotnost Wt (FORM, WT).

ZDROJE: J = JANAF,

L = nepublikovaná data vypočtená v LEWIS RESEARCH CENTER,

RUS = ruská literatura,

Číslo se vztahuje na měsíc a rok, kdy údaje byly publikovány nebo vypočteny (12/65 je prosinec 1965).

FÁZE: G = plyn,

S = pevná látka,

L = kapalina.

EXAMPLE NAME	SOURCE	CODED FORMULA	P	TEMP. RANGE	FORM. WT
FORMALDEHYDE	J 3/61	C 1.H 2.0 1.0	Ø.G	300.000 5000.000	30.02620

LINES 2-4: The 7 coefficients for T => 1000K,
followed by the 7 coefficients for T <= 1000 K

FORMALDEHYDE	J 3/61C	1.H 2.0 1.0	Ø.G	300.000 5000.000	30.02620	1
Ø.28364249E 01	Ø.68605298E-02	Ø.26882647E-05	Ø.47971258E-09	Ø.32118406E-13		2
-Ø.15236031E 05	Ø.78531169E 01	Ø.37963783E 01	-Ø.25701785E-02	Ø.18548815E-04		3
-Ø.17869177E-07	Ø.55504451E-11	Ø.15088947E 05	Ø.47548163E 01	Ø.00000000		4
FORMIC ACID	L 4/85C	1.H 2.0 2.	Ø.G	300.000 5000.000	46.02560	1
Ø.57752972E 01	Ø.75786225E-02	Ø.31151440E-05	Ø.54887672E-09	Ø.35043661E-13		2
-Ø.48186055E 05	Ø.64609318E 01	Ø.21402845E 01	Ø.11024252E-01	Ø.29930725E-05		3
-Ø.85536520E-08	Ø.31486766E-11	Ø.46671035E 05	Ø.14387356E 02	Ø.45531584E 05		4
CH4	L 5/84C	1.H 4.	Ø. Ø.G	300.000 5000.000	16.04260	1
Ø.21737833E 01	Ø.89936592E-02	Ø.27855467E-05	Ø.39775117E-09	Ø.19976425E-13		2
-Ø.10216566E 05	Ø.70773563E 01	Ø.20428148E 01	Ø.25153728E-02	Ø.79085839E-05		3
-Ø.47495483E-08	Ø.14244910E-12	Ø.10056824E 05	Ø.45714579E 01	Ø.90051691E 04		4

METHANOL	L 9/85C	1.H	4.0	1.	Ø.G	300.000	5000.000	32.04200	1
Ø.40351191E 01	Ø.93647204E-02	Ø.30427000E-05	Ø.43397752E-09	Ø.22082799E-13					2
-Ø.26160109E 05	Ø.23450985E 01	Ø.26642971E 01	Ø.73133595E-02	Ø.72366365E-05					3
-Ø.88595620E-08	Ø.24143231E-11	Ø.25353945E 05	Ø.11214846E 02	Ø.24184880E 05					4
CO	J 9/65C	1.0	1.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	28.01040	1
Ø.29840696E 01	Ø.14891390E-02	Ø.57899684E-06	Ø.10364577E-09	Ø.69353550E-14					2
-Ø.14245228E 05	Ø.63479156E 01	Ø.37100928E 01	Ø.16190964E-02	Ø.36923594E-05					3
-Ø.20319674E-08	Ø.23953344E-12	Ø.14356310E 05	Ø.29555351E 01	Ø.00000000					4
COS	J 3/61C	1.0	1.S	1.	Ø.G	300.000	5000.000	60.07040	1
Ø.52392000E 01	Ø.24100584E-02	Ø.96064522E-06	Ø.17778347E-09	Ø.12235704E-13					2
-Ø.18480455E 05	Ø.30910517E 01	Ø.24625321E 01	Ø.11947992E-01	Ø.13794370E-04					3
Ø.80707736E-08	Ø.18327653E-11	Ø.17803987E 05	Ø.10792556E 02	Ø.00000000					4
CO2	J 9/65C	1.0	2.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	44.00980	1
Ø.44608041E 01	Ø.30981719E-02	Ø.12392571E-05	Ø.22741325E-09	Ø.15525954E-13					2
-Ø.48961442E 05	Ø.98635982E 00	Ø.24007797E 01	Ø.87350957E-02	Ø.66070878E-05					3
Ø.20021861E-08	Ø.63274039E-15	Ø.48377527E 05	Ø.96951457E 01	Ø.94054000E 05					4
H	J 3/77H	1.	Ø.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	1.00790	1
Ø.25000000E 01	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000					2
Ø.25474390E 05	Ø.45989841E 00	Ø.25000000E 01	Ø.00000000	Ø.00000000					3
Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.25474390E 05	Ø.45989841E 00	Ø.00000000					4
HCN	L12/69H	1.C	1.N	1.0	Ø.G	300.000	5000.000	27.02560	1
Ø.37068121E 01	Ø.33382803E-02	Ø.11913320E-05	Ø.19992917E-09	Ø.12826452E-13					2
Ø.14962636E 05	Ø.20794904E 01	Ø.24513556E 01	Ø.87208371E-02	Ø.10094203E-04					3
Ø.67255698E-08	Ø.17626959E-11	Ø.15213002E 05	Ø.80830085E 01	Ø.00000000					4
HCO RAD	J12/70H	1.C	1.0	1.0	Ø.G	300.000	5000.000	29.01830	1
Ø.34738348E 01	Ø.34370227E-02	Ø.13632664E-05	Ø.24928645E-09	Ø.17044331E-13					2
Ø.39594005E 04	Ø.60453340E 01	Ø.38840192E 01	Ø.82974448E-03	Ø.77900809E-05					3
-Ø.70616962E-08	Ø.19971730E-11	Ø.40563860E 04	Ø.48354133E 01	Ø.00000000					4
HNCO	J12/70H	1.N	1.C	1.0	1.G	300.000	5000.000	43.02500	1
Ø.51300390E 01	Ø.43551371E-02	Ø.16269022E-05	Ø.28035605E-09	Ø.18276037E-13					2
-Ø.14101787E 05	Ø.22010995E 01	Ø.23722164E 01	Ø.13664040E-01	Ø.13323158E-04					3
Ø.64475457E-08	Ø.10402894E-11	Ø.13437059E 05	Ø.11588263E 02	Ø.00000000					4

HNO	RUS 78H 1.N 1.0 1.	Ø.G	298.150	5000.000	31.01400	1
	Ø.33290296E 01 Ø.27934155E-02-Ø.32555667E-06-Ø.61905698E-10 Ø.10403731E-13					2
	Ø.11117372E 05 Ø.66846734E 01 Ø.45979450E 01-Ø.61655900E-02 Ø.19782938E-04					3
	-Ø.18561387E-07 Ø.60914812E-11 Ø.11033783E 05 Ø.14702991E 01 Ø.12271608E 05					4
HNO2	RUS 78H 1.N 1.0 2.	Ø.G	298.150	5000.000	47.01340	1
	Ø.55079788E 01 Ø.42014907E-02-Ø.16471376E-05 Ø.29774130E-09-Ø.20308472E-13					2
	-Ø.11459164E 05-Ø.25059193E 01 Ø.25418194E 01 Ø.13185470E-01-Ø.11504606E-04					3
	Ø.47032510E-08-Ø.58616939E-12-Ø.10687376E 05 Ø.12601301E 02-Ø.94360387E 04					4
H2	J 3/77H 2. Ø. Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	2.01580	1
	Ø.30558196E 01 Ø.59740400E-03-Ø.16747471E-08-Ø.21247544E-10 Ø.25195487E-14					2
	-Ø.86168476E 03-Ø.17207073E 01 Ø.29432327E 01 Ø.34815509E-02-Ø.77713819E-05					3
	Ø.74997496E-08-Ø.25203379E-11-Ø.97695413E 03-Ø.18186137E 01 Ø.00000000					4
H2O	J 3/79H 2.0 1. Ø. Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	18.01520	1
	Ø.26340654E 01 Ø.31121899E-02-Ø.90278449E-06 Ø.12673054E-09-Ø.69164732E-14					2
	-Ø.29876258E 05 Ø.70823873E 01 Ø.41675564E 01-Ø.18106868E-02 Ø.59450878E-05					3
	-Ø.48670871E-08 Ø.15284144E-11-Ø.30289546E 05-Ø.73087997E 00 Ø.00000000					4
H2S	J 6/77H 2.S 1. Ø. Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	34.07580	1
	Ø.27452199E 01 Ø.40434607E-02-Ø.15384510E-05 Ø.27520249E-09-Ø.18592095E-13					2
	-Ø.34199444E 04 Ø.80412439E 01 Ø.39323476E 01-Ø.50260905E-03 Ø.45928473E-05					3
	-Ø.31807214E-08 Ø.66497561E-12-Ø.36505359E 04 Ø.23023599E 01 Ø.00000000					4
K	J 6/62K 1. Ø. Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	39.09830	1
	Ø.25673650E 01-Ø.14933596E-03 Ø.12342444E-06-Ø.53394240E-10 Ø.11948426E-13					2
	Ø.99550531E 04 Ø.46642081E 01 Ø.24930967E 01 Ø.50164177E-04-Ø.12751224E-06					3
	Ø.13540491E-09-Ø.51145936E-13 Ø.99786360E 04 Ø.50560438E 01 Ø.00000000					4
KCN	J 3/66K 1.C 1.N 1. Ø.G	300.000	5000.000	65.11600	1	
	Ø.58007120E 01 Ø.17200786E-02-Ø.70791074E-06 Ø.13199247E-09-Ø.91908323E-14					2
	Ø.77272628E 04-Ø.31719981E 01 Ø.50810711E 01 Ø.55265956E-02-Ø.91157121E-05					3
	Ø.84488817E-08-Ø.30051548E-11 Ø.78662161E 04 Ø.17318296E 00 Ø.00000000					4
KH	J 3/63K 1.H 1. Ø. Ø.G	300.000	5000.000	40.10620	1	
	Ø.39603386E 01 Ø.72190323E-03-Ø.26918715E-06 Ø.52617300E-10-Ø.37872683E-14					2
	Ø.13501837E 05 Ø.84218060E 00 Ø.28157756E 01 Ø.39871060E-02-Ø.33410548E-05					3
	Ø.88602942E-09 Ø.11402847E-12 Ø.13805838E 05 Ø.67120145E 01 Ø.00000000					4

KOH	J12/70K	1.0	1.H	1.0	Ø.G	300.000	5000.000	56.10560	1
Ø.56400949E 01	Ø.12510226E-02	Ø.34984547E-06	Ø.44566993E-10	Ø.20870279E-14					2
-Ø.29698732E 05	Ø.40568187E 01	Ø.40733441E 01	Ø.97217945E-02	Ø.15988804E-04					3
Ø.12148353E-07	Ø.33709342E-11	Ø.29506558E 05	Ø.29222373E 01	Ø.00000000					4
NH2	RUS 78N	1.H	2.	Ø.	Ø.G	298.150	5000.000	16.02250	1
Ø.26364064E 01	Ø.36010668E-02	Ø.11903551E-05	Ø.20318811E-09	Ø.13761458E-13					2
Ø.21997335E 05	Ø.75913284E 01	Ø.41350202E 01	Ø.15922608E-02	Ø.57789300E-05					3
-Ø.41822865E-08	Ø.10971418E-11	Ø.21646478E 05	Ø.13205505E 00	Ø.22851898E 05					4
NH3	J 6/77N	1.H	3.	Ø.	Ø.G	298.150	5000.000	17.03040	1
Ø.23172706E 01	Ø.62831974E-02	Ø.21245407E-05	Ø.34004532E-09	Ø.21457956E-13					2
-Ø.64266256E 04	Ø.82962119E 01	Ø.37912795E 01	Ø.94953142E-03	Ø.12079642E-04					3
-Ø.12401333E-07	Ø.42744577E-11	Ø.66928361E 04	Ø.14179045E 01	Ø.55203546E 04					4
NO	RUS 78N	1.0	1.	Ø.	Ø.G	298.150	5000.000	30.00610	1
Ø.31486543E 01	Ø.14151823E-02	Ø.57574881E-06	Ø.10738529E-09	Ø.73900199E-14					2
Ø.99610628E 04	Ø.69670936E 01	Ø.42484931E 01	Ø.48661106E-02	Ø.11634155E-04					3
-Ø.99768494E-08	Ø.30483948E-11	Ø.98418042E 04	Ø.21434823E 01	Ø.10976729E 05					4
N2	J 3/77N	2.	Ø.	Ø.	Ø.G	298.150	5000.000	28.01340	1
Ø.28536374E 01	Ø.16014368E-02	Ø.62888336E-06	Ø.11428932E-09	Ø.77953822E-14					2
-Ø.89020951E 03	Ø.63942727E 01	Ø.37034288E 01	Ø.14179405E-02	Ø.28625094E-05					3
-Ø.12018374E-08	Ø.13475522E-13	Ø.10639421E 04	Ø.22379315E 01	Ø.00000000					4
O	J 3/770	1.	Ø.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	15.99940	1
Ø.25342961E 01	Ø.12478170E-04	Ø.12562724E-07	Ø.69029862E-11	Ø.63797095E-15					2
Ø.29231108E 05	Ø.49628591E 01	Ø.30309401E 01	Ø.22525853E-02	Ø.39824540E-05					3
-Ø.32604921E-08	Ø.10152035E-11	Ø.29136526E 05	Ø.26099342E 01	Ø.00000000					4
OH	J 6/770	1.H	1.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	17.00730	1
Ø.28897814E 01	Ø.10005879E-02	Ø.22048807E-06	Ø.20191288E-10	Ø.39409831E-15					2
Ø.38857042E 04	Ø.55566427E 01	Ø.38737300E 01	Ø.13393772E-02	Ø.16348351E-05					3
-Ø.52133639E-09	Ø.41826974E-13	Ø.35802348E 04	Ø.34202406E 00	Ø.00000000					4
O2	J 3/770	2.	Ø.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	31.99880	1
Ø.36122139E 01	Ø.74853166E-03	Ø.19820647E-06	Ø.33749008E-10	Ø.23907374E-14					2
-Ø.11978151E 04	Ø.36703307E 01	Ø.37837135E 01	Ø.30233634E-02	Ø.99492751E-05					3
-Ø.98189101E-08	Ø.33031825E-11	Ø.10638107E 04	Ø.36416345E 01	Ø.00000000					4

S	J 9/77S	1.	Ø.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	32.06000	1
	Ø.29171783E	Ø1-Ø.57194760E-03	Ø.28890940E-06	Ø.52911339E-10	Ø.33647474E-14				2
	Ø.32484363E	Ø5 Ø.37503810E	Ø1 Ø.28695579E	Ø1 Ø.63609306E-03	Ø.34420074E-05				3
	Ø.40332507E-08	Ø.15123007E-11	Ø.32453195E	Ø5 Ø.37536114E	Ø1 Ø.00000000				4
SH	J 6/77S	1.H	1.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	33.06790	1
	Ø.30014537E	Ø1 Ø.13394957E-02	Ø.46789663E-06	Ø.78804015E-10	Ø.50280453E-14				2
	Ø.15905320E	Ø5 Ø.62711902E	Ø1 Ø.44420322E	Ø1-Ø.24359197E-02	Ø.19064576E-05				3
	Ø.99166630E-09	Ø.95740762E-12	Ø.15523258E	Ø5-Ø.11579273E	Ø1 Ø.00000000				4
SO2	J 6/61S	1.O	2.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	64.05880	1
	Ø.52451364E	Ø1 Ø.19704204E-02	Ø.80375769E-06	Ø.15149969E-09	Ø.10558004E-13				2
	-Ø.37558227E	Ø5-Ø.10873524E	Ø1 Ø.32665338E	Ø1 Ø.53237902E-02	Ø.68437552E-06				3
	-Ø.52810047E-08	Ø.25590454E-11	Ø.36908148E	Ø5 Ø.96513476E	Ø1 Ø.00000000				4
S2	J 9/77S	2.	Ø.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	64.12000	1
	Ø.39886069E	Ø1 Ø.55775051E-03	Ø.50189278E-07	Ø.15470319E-10	Ø.26661771E-14				2
	Ø.14198015E	Ø5 Ø.44777479E	Ø1 Ø.28585754E	Ø1 Ø.51758355E-02	Ø.65493434E-05				3
	Ø.33998643E-08	Ø.40156766E-12	Ø.14412402E	Ø5 Ø.98778348E	Ø1 Ø.00000000				4
S2O	J 9/65S	2.O	1.	Ø.	Ø.G	300.000	5000.000	80.11940	1
	Ø.59037524E	Ø1 Ø.12369975E-02	Ø.54570790E-06	Ø.10659842E-09	Ø.76688243E-14				2
	-Ø.87752090E	Ø4-Ø.22833860E	Ø1 Ø.28414257E	Ø1 Ø.12188410E-01	Ø.16000241E-04				3
	Ø.10309289E-07	Ø.26449120E-11	Ø.80603015E	Ø4 Ø.12904686E	Ø2 Ø.00000000				4
C(GR)	J 3/78C	1.	Ø.	Ø.	Ø.S	300.000	5000.000	12.01100	1
	Ø.14324054E	Ø1 Ø.17555871E-02	Ø.71889423E-06	Ø.14015109E-09	Ø.10069094E-13				2
	-Ø.68498756E	Ø3-Ø.83936690E	Ø1-Ø.39942085E	Ø0 Ø.50285536E-02	Ø.33566391E-06				3
	-Ø.47166280E-08	Ø.23510115E-11	Ø.99185350E	Ø2 Ø.14885486E	Ø1 Ø.00000000				4
H2O(L)	J 3/79H	2.O	1.	Ø.	Ø.L	273.150	500.000	18.01520	1
	Ø.28630800E	Ø2-Ø.20260986E	Ø0 Ø.78529479E-03	Ø.13653020E-05	Ø.91326966E-09				2
	-Ø.38579539E	Ø5-Ø.11895046E	Ø3 Ø.28630800E	Ø2-Ø.20260986E	Ø0 Ø.78529479E-03				3
	-Ø.13653020E-05	Ø.91326966E-09	Ø.38579539E	Ø5-Ø.11895046E	Ø3 Ø.00000000				4
KOH(L)	J12/70K	1.O	1.H	1.0	Ø.L	679.000	5000.000	56.10560	1
	Ø.99956469E	Ø1 Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000				2
	-Ø.52620731E	Ø5-Ø.45334392E	Ø2 Ø.99956469E	Ø1 Ø.00000000	Ø.00000000				3
	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.52620731E	Ø5-Ø.45334392E	Ø2 Ø.00000000				4
K2CO3(L)	J 3/66K	2.C	1.O	3.	Ø.L	1174.000	5000.000	138.20580	1
	Ø.25161469E	Ø2 Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000				2
	-Ø.14740138E	Ø6-Ø.13110730E	Ø3 Ø.25161469E	Ø2 Ø.00000000	Ø.00000000				3
	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.14740138E	Ø6-Ø.13110730E	Ø3 Ø.00000000				4
K2CO3(S)	J 3/66K	2.C	1.O	3.	Ø.S	300.000	1174.000	138.20580	1
	Ø.22824341E	Ø2-Ø.13580993E-01	Ø.87409890E-05	Ø.11494425E-07	Ø.67588149E-11				2
	-Ø.14577844E	Ø6-Ø.11048665E	Ø3 Ø.84398632E	Ø1 Ø.18836256E-01	Ø.46827483E-06				3
	-Ø.10519610E-07	Ø.64318412E-11	Ø.14166744E	Ø6-Ø.34894424E	Ø2 Ø.00000000				4
K2S(L)	J 3/78K	2.S	1.	Ø.	Ø.L	1221.000	5000.000	110.25660	1
	Ø.12142927E	Ø2 Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.00000000				2
	-Ø.46520349E	Ø5-Ø.54716043E	Ø2 Ø.12142927E	Ø2 Ø.00000000	Ø.00000000				3
	Ø.00000000	Ø.00000000	Ø.46520349E	Ø5-Ø.54716043E	Ø2 Ø.00000000				4

END

11 Atomové hmotnosti a konstanty

Konstanty, atomové hmotnosti nebo relativní atomové hmotnosti prvků dále uvedených vždy podléhají revizi. Musí být použity nejposlednější hodnoty udávané IUPAC Commission on Atomic Weights jak byly publikovány v časopise „Pure and Applied Chemistry“ nebo v nejnovějším vydání „Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry“. Všimněte si, že použité atomové hmotnosti změní hodnoty v příloze E pro molekulové hmotnosti.

TABULKA č. 6 Atomové hmotnosti prvků

Prvek	Atomové hmotnosti
Hliník	26,982
Barium	137,327
Uhlík	12,011
Fluor	18,998
Vodík	1,0079
Olovo	207,2
Hořčík	24,305
Dusík	14,0067
Kyslík	15,9994
Draslík	39,0983
Sodík	22,9898
Síra	32,066

KONSTANTY:

R, universální plynová konstanta = 8,314510 J/(mol,K).

12 Tabulka vzorců, entalpií a složek hnacích hmot

Dále uvedená tabulka č. 7 obsahuje slučovací entalpie (tepla) pro hlavní složky hnací hmoty používané u hnacích hmot pro hlavňové zbraně. Aby byly stanoveny termochemické vlastnosti hnacích hmot používaných ve vnitrobalistických výpočtech pro hlavňové zbraně, jsou požadovány slučovací energie. Použitím $H = U + PV$ a za předpokladu chování ideálního plynu, je potom možno tyto získat ze slučovacích entalpií podle následujícího vzorce:

$$\Delta U_f = \Delta H_f - \Delta n \cdot R \cdot T,$$

kde:

Δn - rozdíl počtu molů plynů při tvorbě látky z prvků,

R - plynová konstanta (8,314510 J/(mol,K)),

T - referenční teplota (298,15 K),

ΔU_f - slučovací energie,

ΔH_f - slučovací entalpie

a součin PV kondenzovaných fází je zanedbán; potom platí, že:

$$U_f^0 = \Delta U_f^0 - (P \cdot V)_{\text{reagujících složek}}$$

Hodnoty termochemických vlastností, které budou počítány, jsou silně závislé na použitých slučovacích entalpiích. Tyto hodnoty se mohou případ od případu podstatně měnit. Údaje uvedené v další tabulce byly vybrány z „Heats of Formation of Components for Rocket Propellants, Gun Propellants and High Explosives“ od Volka, F. a Bathelta, H., Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie, T/RF 11/K 0001/K 1100, leden 1990. Údaje pro složky hnacích hmot neuvedených v následující tabulce mají být převzaty z této zprávy. Jestliže tomu tak není, pak musí být udán zdroj slučovací entalpie.

TABULKA č. 7 Slučovací entalpie (tepla) složek hnací hmoty

Složka	Složení molekuly									Entalpie sestavy (kJ/mol)	
	%N	C	H	O	N	O	N	O	N	O	
Nitrocelulóza	11,00	%N	C	6	H	8,031	0	8,939	N	1,969	-756,13
Nitrocelulóza	11,10	%N	C	6	H	8,003	0	8,994	N	1,997	-753,37
Nitrocelulóza	11,20	%N	C	6	H	7,975	0	9,050	N	2,025	-750,53
Nitrocelulóza	11,30	%N	C	6	H	7,946	0	9,107	N	2,054	-747,68
Nitrocelulóza	11,40	%N	C	6	H	7,918	0	9,165	N	2,082	-744,79
Nitrocelulóza	11,50	%N	C	6	H	7,889	0	9,223	N	2,111	-741,91
Nitrocelulóza	11,60	%N	C	6	H	7,859	0	9,281	N	2,141	-738,94
Nitrocelulóza	11,70	%N	C	6	H	7,830	0	9,340	N	2,170	-735,97
Nitrocelulóza	11,80	%N	C	6	H	7,800	0	9,400	N	2,200	-732,99
Nitrocelulóza	11,90	%N	C	6	H	7,770	0	9,460	N	2,230	-729,94

TABULKA č. 7 Slučovací entalpie (tepla) složek hnací hmoty - dokončení

Složka	Složení molekuly							Entalpie sestavy (kJ/mol)			
Nitrocelulóza	12,00	%N	C	6	H	7,739	0	9,521	N	2,261	-726,89
Nitrocelulóza	12,10	%N	C	6	H	7,709	0	9,583	N	2,291	-723,79
Nitrocelulóza	12,20	%N	C	6	H	7,677	0	9,645	N	2,323	-720,65
Nitrocelulóza	12,30	%N	C	6	H	7,646	0	9,708	N	2,354	-717,51
Nitrocelulóza	12,40	%N	C	6	H	7,614	0	9,772	N	2,386	-714,29
Nitrocelulóza	12,50	%N	C	6	H	7,582	0	9,836	N	2,418	-711,07
Nitrocelulóza	12,60	%N	C	6	H	7,549	0	9,901	N	2,451	-707,81
Nitrocelulóza	12,70	%N	C	6	H	7,517	0	9,967	N	2,483	-704,50
Nitrocelulóza	12,80	%N	C	6	H	7,483	0	10,033	N	2,517	-701,15
Nitrocelulóza	12,90	%N	C	6	H	7,450	0	10,100	N	2,550	-697,81
Nitrocelulóza	13,00	%N	C	6	H	7,416	0	10,168	N	2,584	-694,38
Nitrocelulóza	13,10	%N	C	6	H	7,382	0	10,237	N	2,618	-690,95
Nitrocelulóza	13,20	%N	C	6	H	7,347	0	10,306	N	2,653	-687,43
Nitrocelulóza	13,30	%N	C	6	H	7,312	0	10,376	N	2,688	-683,92
Nitrocelulóza	13,40	%N	C	6	H	7,276	0	10,447	N	2,724	-680,36
Nitrocelulóza	13,50	%N	C	6	H	7,240	0	10,519	N	2,760	-676,76
Nitrocelulóza	13,60	%N	C	6	H	7,204	0	10,592	N	2,796	-673,12
Nitrocelulóza	13,70	%N	C	6	H	7,167	0	10,665	N	2,833	-669,40
Nitrocelulóza	13,80	%N	C	6	H	7,130	0	10,740	N	2,870	-665,67
Nitrocelulóza	13,90	%N	C	6	H	7,093	0	10,815	N	2,907	-661,91
Nitrocelulóza	14,00	%N	C	6	H	7,055	0	10,891	N	2,945	-658,10
Nitrocelulóza	14,10	%N	C	6	H	7,016	0	10,968	N	2,984	-654,21
Nitrocelulóza	14,14	%N	C	6	H	7,000	0	11,000	N	3,000	-652,66
Aceton			C	3	H	6	0	1	N	2	-248,11
Akardit			C	14	H	14	0	1	N	2	-106,69
Dusičnan amonný			H	4	O	3	N	2			-365,14
Dusičnan barnatý			O	6	N	2	Ba	1			-991,86
Uhličitan vápenatý			C	1	O	3	Ca	1			-1206,96
Diacetát celulózy			C	10	H	14,069	O	7,035			-1374,86
Triacetát celulózy			C	10	H	13,290	O	6,586			-1325,49
Dekahydronaftalen			C	10	H	18					-230,71
Dibutylftalát			C	16	H	22	O	4			-842,66
Diglykoldinitrát (DEGDN)			C	4	H	8	O	7	N	2	-415,89
1,1-dimetylhydrazin (UDMH)			C	2	H	8	N	2			+49,79
4,2-dinitrodifenylamin (NNDP)			C	12	H	9	O	4	N	3	+22,59

TABULKA č. 7 Slučovací entalpie (tepla) složek hnací hmoty - dokončení

Složka	Složení molekuly								Entalpie sestavy (kJ/mol)
2,4 – dinitrotoluen	C	7	O	4	O	4	N	2	-71,55
2,3 – dinitrotoluen	C	7	H	6	O	4	N	2	-15,90
2,5 – dinitrotoluen	C	7	H	6	O	4	N	2	-34,31
2,6 – dinitrotoluen	C	7	H	6	O	4	N	2	-51,13
3,4 – dinitrotoluen	C	7	H	6	O	4	N	2	-14,64
3,5 – dinitrotoluen	C	7,	H	6	O	4	N	2	-43,51
Difenylamin	C	12	H	11	N	1			+116,86
Difenyluretan	C	15	H	15	O	2	N	1	-338,07
Etanol	C	2	H	6	O	1			-227,90
Etylcentralit (carbamite)	C	17	H	20	O	1	N	1	-105,02
Etylendiamindinitrát	C	2	H	10	O	6	N	4	-651,87
Etylenglykol	C	2	H	6	O	2			-454,93
Etylfenyluretan	C	11	H	15	O	2	N	1	-463,59
Glycerin	C	3	H	8	O	3			-668,60
Hexogen (RDX)	C	3	H	6	O	6	N	6	+66,53
Hydrazin	H	4	N	2					+50,63
Hydrazinnitrát	H	5	O	3	N	3			-251,58
Hydroxylamoniumnitrát	H	4	O	4	N	2			-344,76
Isopropylamoniumnitrát	C	3	H	10	O	3	N	2	-414,22
Metrioltrinitrát	C	5	H	9	O	9	N	3	-443,50
Metylcentralit	C	15	H	16	O	1	N	2	-61,09
Kyselina dusičná	H	1	O	3	N	1			-173,47
2-nitrodifenylamin	C	12	H	10	O	2	N	2	+64,43
Nitroglycerin	C	3	H	5	O	9	N	3	-370,70
Nitroguanidin	C	1	H	4	O	2	N	4	-92,88
Oktogen (HMX)	C	4	H	8	O	8	N	8	+75,02
Pentaerylthritoltetranitrát (PETN)	C	5	H	8	O	12	N	4	-538,90
Dusičnan draselný	O	3	N	1	K	1			-492,71
Síran draselný	O	4	S	1	K	2			-1433,86
Fluorid sodno-hlinitý (kryolit)	Na	3	Al	1	F	6			-3301,18
Dusičnan sodný	O	3	N	1	Na	1			-467,44
Triacetin	C	9	H	14	O	6			-1330,93
Trietylenglykoldinitrát	C	6	H	12	O	8	N	2	-606,68
Trimetylamoniumnitrát (TMAN)	C	3	H	10	O	3	N	2	-305,85
Voda	H	2	O	1					-285,85

13 Přehled charakteristik hnací hmoty

ČÍSLO HNACÍ HMOTY		INFORMACE ZÍSKANÁ OD		
ZEMĚ PŮVODU		JMÉNO		
VÝROBCE		ORGANIZAČNÍ JEDNOTKA		
OZNAČENÍ KOMPOZICE		DATUM		
SPECIFIKACE				
1. TYP HNACÍ HMOTY				
2. ZPŮSOB VÝROBY		(rozpouštědlově-extrudovaná, válcovaná atd.)		
3. URČENÉ POUŽITÍ				
4. DALŠÍ SOUVISEJÍCÍ KOMPOZICE				
5. NABÍJECÍ HUSTOTA				
6. KOMPOZICE				
SLOŽKA		% HMOTNOSTI Nominální ± TOLERANCE		OSTATNÍ INFORMACE
Nitrocelulóza				N% v NC:
Celkové těkaviny				
Celková vlhkost				
Zbytkové rozpouštědlo				
Popel				
7. STABILITNÍ ZKOUŠKY (ČOS 137601 a další metodiky)				
TEPLOTA °C	POUŽITÁ METODA	VÝSLEDKY	POŽADAVKY	REFERENCE
ČÍSLO HNACÍ HMOTY				
8. VÝBUCHOVÉ TEPLLO (Q) (při 25 °C, H ₂ O kapal.)		J/kg		J/kg
		(Experimentální)	(Vypočtené)	
ZPŮSOB VÝPOČTU				
9. HUSTOTA PEVNÉ HNACÍ HMOTY				kg/m ³
10. ISOCHORICKÁ ADIABATICKÁ VÝBUCHOVÁ TEPLOTA (T_v)				K

14 Vybraná literatura

1. Bac, J.P. Bagheera, A Ballistic Thermodynamic Code, 3rd International Gun Propellant Symposium, Picatinny Arsenal, Dover, New Jersey, 30 Oct – 1 Nov 1984.
2. Hunt F.R.W. Internal Ballistic, HMSO, 1951.
(Editor)
3. Corner J. Tables of Pressure-Corrections in the Thermochemistry of Propellant Explosions, ARD Theoretical Research Report 8/43, Dec 1943.
4. Corner J. Tables of Pressure-Corrections in the Thermochemistry of Propellant Explosions, ARD Theoretical Research Report 9/43, Dec 1943.
5. Pike H.H.M. Thermochemical Data for Propellant Ingredients and their Products of Explosion, ARE Theoretical Research Report 4/49, Dec 1949.
6. IUPAC Atomic Weights of the Elements Pure and Applied Chemistry on Atomic Weights 1972, 30, p 639-649.
Commision
7. Jacquemin P. Calcul des Performances Thermodynamiques des Poudres aux Hautes Densites de Chargement, Proceedings of the 5th International Symposium on Ballistics, France 1980.
Nicolas M.
8. Longdon L.W. Textbook of Ballistics and Gunnery, Volume 1, HMSO, 1987.
(Editor)
9. Stiefel L. Gun Propulsion Technology, Volume 109 in AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics Series, 1988.
(Editor)
10. Chase M,W, JANAF Thermochemical Tables, Journal of Physical Chemistry Reference Data, Vol 14, Suppl. 1, 1985.
(Editor)
11. Corner J. Theory of Interior Ballistics of Guns, John Wiley and Sons, Inc. 1950.
12. Press W.H. Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, 1986.
Flarmery B.P.
Tenkolsky S.A.
Vetterling W.T.
13. Hirschfelder Molecular Theory of Gases and Liquids, Wiley, New York 1954.
J.O.
Curtiss C.F.
Bird R.B.

14. Zeleznik F.J.
Gordon S. NASA Technical Note D-473, An Analytical Investigation of Three General Methods of Calculating Chemical Equilibrium Compositions, 1960.
15. Zeleznik F.J.
Gordon S. Calculation of Complex Chemical Equilibria, Ind Eng Chem, Vol 60, No 6 pp 27-57, June 1968.
16. Gordon S.
Mc. Bride NASA SP273 Interim Revision 1976, Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shock and Champan-Jouquet Detonations, 1976.
17. Gill P.E.
Murray W.
Wright M.H. Practical Optimisation, Academic Press, 1981.
18. Sutterlin R. Cours de Munitions, Livre II, Physique des Explosifs, Tome II, 1964.
19. Vidart A. Laboratoire de la Commission des Substances Explosives Calcul des Caracteristiques des Explosifs Condenses, 1960.
20. Corner J.
Tavernier M.P. Balistique Interieure Theorique, Resume et Adaptation de „Theory of Interior Ballisitcs of Guns“, 1956.
21. Corner M.J. Properties Thermodynamiques des Produits de la Combustion sous haute Pression, M.A.F Tome 26. 3e Fascicule 1952.
22. Krier H.
Summerfield M. Interior Ballistics of Guns, Vol 66 of AIAA Progress in Astronautics, 1979.
- 22a Krier H.
Summerfield M. Balistique Interieure des Canons, p380, Translation SNPE/CRB sous la direction de B Zellerm, 1984.
23. Volk F.
Bathelt H. Propellants and Explosives 1, p7-14 (1976), Application of Virial Equation of State in Calculating Interior Ballistics Quantities, 1976.
24. Daree K. Coefficients du Viriel et Potentiel Intermoleculaire, report ISL R102/84, 1984.
25. Jacquemin P.
Nicolas M. Calcul des Performances Thermodynamiques des Poudres aux Hautes Densites de Chargement, SNPE/CRB N.T. No. 66/80/CRB/NP, 1980.
26. Jacquemin P. Programme ONYX: Description Theorique et Informatique, SNPE N.T. No. 26/82/CRB/NP, 1982.

(VOLNÁ STRANA)

Účinnost českého obranného standardu od: **2. října 2017**

Změny:

Změna číslo	Účinnost od	Změnu zpracoval	Datum zpracování	Poznámka

Upozornění: Oznámení o českých obranných standardech jsou uveřejňována měsíčně ve Věstníku Úřadu pro technickou normalizaci, metrologii a státní zkušebnictví v oddíle „Ostatní oznámení“ a Věstníku MO.

V případě zjištění nesrovnalostí v textu tohoto ČOS zasílejte připomínky na adresu distributora.

Rok vydání: 2022, obsahuje 18 listů

Distribuce: Odbor obranné standardizace Úř OSK SOJ, nám. Svobody 471, 160 01 Praha 6

Vydal: Úřad pro obrannou standardizaci, katalogizaci a státní ověřování jakosti
oos.army.cz

NEPRODEJNÉ
