



Univerza v Mariboru

*Fakulteta za kemijo in
kemijsko tehnologijo*

SEVERINA OREŠKI

RAČUNALNIŠTVO V KEMIJI

Navodila za računalniške vaje

1. izdaja

Maribor, 2012

Copyright 2012. Prva izdaja, junij 2012.

Severina Oreški, Računalništvo v kemiji, Navodila za računalniške vaje

Recenzent: doc. dr. Majda Krajnc

Avtor: doc. dr. Severina Oreški

Vrsta publikacije: navodila za vaje

Založnik: FKKT Univerze v Mariboru

Naklada: On-line

Dostopno na naslovu: <http://atom.uni-mb.si/stud/egradiva.php>

Dostopno tudi na univerzitetnem elektronskem portalu Moodle pri predmetih Računalništvo v kemiji in Procesnem računanju I.

Gradiva iz publikacije, brez dovoljenja avtorja, ni dovoljeno kopirati, reproducirati, objavljati ali prevajati v druge jezike.

ISBN 978-961-248-348-7



CIP - Kataložni zapis o publikaciji
Univerzitetna knjižnica Maribor

66.01:004.42(075.8)(076.1)

OREŠKI, Severina

Računalništvo v kemiji [Elektronski vir] :
navodila za računalniške vaje / Severina Oreški. -
1. izd. - El. učbenik. - Maribor : Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012

Način dostopa (URL):

<http://atom.uni-mb.si/stud/egradiva.php>

ISBN 978-961-248-348-7

COBISS.SI-ID 70495745

VSEBINA

	Predgovor	v
	SIMBOLI	vii
1	UVOD	1
1.1	Potek dela	1
1.2	Osnovne zahteve pri računalniških vajah	2
2	RISANJE DIAGRAMOV POTEKA	5
2.1	Grafični znaki oziroma simboli za risanje diagramov poteka	5
2.2	Grafični računalniški program SmartDraw	6
2.3	Primeri diagramov poteka	6
3	UPORABA PROGRAMSKEGA JEZIKA FORTRAN	11
3.1	Prvi program: Enostavno programiranje	11
3.2	Drugi program: Dimenzioniranje spremenljivk	13
3.3	Tretji program: Funkcijski podprogrami in podprogrami	16
4	UPORABA RAČUNALNIŠKEGA PROGRAMA EXCEL	21
5	PISANJE POROČILA	23
6	OCENJEVANJE RAČUNALNIŠKIH VAJ	25
7	NAVODILA ZA DELO Z RAČUNALNIKOM MICROVAX	27
7.1	Vključitev in izključitev iz sistema MicroVax	27
7.2	Koraki izvedbe programa	28
7.3	Drugi koristni ukazi	31
8	UPORABNI PRETVORNIKI MED MERSKIMI ENOTAMI	33
8.1	Dolžina	33
8.2	Masa	34
8.3	Prostornina	35
8.4	Temperatura	36
8.5	Tlak	37
8.6	Energija	38
8.7	Splošna plinska konstanta	39
9	PERIODNI SISTEM ELEMENTOV	41
10	LITERATURA	43

Predgovor

Navodila za vaje z naslovom *Računalništvo v kemiji*, *Navodila za računalniške vaje* so študentom pripomoček pri učenju uporabe programskega jezika Fortran in računalniškega programa Excel za reševanje problemov s področja kemije in kemijske tehnike pri predmetu Računalništvo v kemiji. Navodila so uporabna tudi za računalniške vaje pri predmetu Procesno računanje I v okviru vsebine tega predmeta.

Pri računalniških vajah se študentje seznanijo z osnovami programskega jezika Fortran, kar jim pomaga pri lažjem razumevanju dela z Excelom. Pri računalniških vajah se študentje seznanijo tudi z grafičnim programskim paketom SmartDraw, s katerim rišejo diagrame poteka za fortranske programe. Zaradi enostavne uporabe in dostopa do številnih knjižnic, ki jih SmartDraw omogoča, lahko študentje kasneje ta grafični paket uporabljajo za pripravo poročil pri drugih predmetih, seminarskih nalogah in pri pripravi diplomskega dela.

Navodila za vaje študente vodijo tudi skozi pravilno pripravo poročil o opravljenih računalniških vajah. Zahtevana poročila so običajno prva računalniško urejena poročila na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo z urejevalnikom besedila in urejevalnikom matematičnih enačb. Navodila vsebujejo ocenjevalni list za poročilo o računalniških vajah in informacije o ocenjevanju vaj.

Kot pomoč pri izvajanju računalniških vaj vsebujejo navodila tudi priloge: *Navodila za delo z računalnikom MicroVax*, *Uporabni pretvorniki med merskimi enotami* in *Periodni sistem elementov*.

Navodila za vaje dopolnjuje zbirka nalog *Računalništvo v kemiji*, *Naloge za računalniške vaje z rešitvami*¹, kjer je zbranih 200 nalog, ki se študentom dodeljujejo v reševanje.

Za strokovni pregled navodil in zbranih nalog ter koristne nasvete se zahvaljujem predavateljici predmetov Računalništvo v kemiji in Procesno računanje I dr. Majdi Krajnc, študentom pa želim uspešno izvajanje računalniških vaj.

Severina Oreški

Maribor, junij 2012

SIMBOLI

a	– parameter van der Waalsove enačbe, bar (cm ³ /mol) ²
b	– parameter van der Waalsove enačbe, cm ³ /mol
c_B	– koncentracija baze, mol/L
c_{B0}	– začetna koncentracija baze, mol/L
$c(i)$	– koncentracija kemijske komponente ali iona i , mol/L
c_K	– koncentracija kisline, mol/L
c_S	– koncentracija soli, mol/L
K_B	– konstanta disociacije baze, –
K_W	– ionski produkt vode, –
p	– tlak realnega plina, bar
p_i	– tlak idealnega plina, bar
R	– splošna plinska konstanta, cm ³ bar/(mol K)
T	– temperatura, K
V_B	– prostornina baze, cm ³
V_K	– prostornina kisline, cm ³
V_m	– molska prostornina, cm ³ /mol

1 UVOD

Računalniške vaje iz Računalništva v kemiji oziroma Procesnega računanja I potekajo 30 ur in sicer pet tednov po 6 ur v zimskem semestru študija. Pri računalniških vajah se študentje naučijo:

- osnove programiranja v programskem jeziku Fortran,
- osnove uporabe računalniškega programa Excel, ki ga nato dalje spoznavajo pri predmetih Procesne bilance, Kemijsko računanje II in Procesno računanje II, ter
- risanja z grafičnim računalniškim programom SmartDraw.

Svoje delo in rezultate predstavijo v pisnem poročilo o vajah, katerega računalniško uredijo.

1.1 Potek dela

V okviru vaj morajo študentje rešiti dobljeno nalogo s Fortranom in Excelom.

Pri reševanju s Fortranom je treba sprogramirati **vsaj tri računalniške programe** za dobljeno nalogo, v katerih mora biti predstavljenega čimveč osvojenega znanja iz programiranja v Fortranu. Računalniški programi morajo:

- prebrati in izpisati naslov naloge,
- za vnos podatkov uporabiti aritmetične vnose, DATA ali READ stavke,
- uporabiti zanko (standardno DO zanko, Vaxovo DO zanko, IF z GO TO zazankanjem),
- uporabiti pogojni stavek,
- rezultate podati v pregledni obliki (komentarji, preglednice) ter
- na koncu izpisati ime, kraj in datum.

Pri *prvem programu* je treba rešitev poiskati brez uporabe dimenzioniranja in podprogramov. Izbrati je treba enega od možnih načinov za vnos podatkov in vrsto zazankanja.

Drugi program mora vsebovati dimenzioniranje (enodimenzionalna polja). Izbrati je treba drugačen način vnosa podatkov in drugo vrsto zazankanja. Spremeniti je treba tudi način in obliko izpisa rezultatov.

Tretji program mora vsebovati funkcijski podprogram ali podprogram. Potrebni argumenti se morajo prenašati preko klicnih stavkov in preko COMMON stavkov. V programu je treba predstaviti način vnosa podatkov, vrsto zazankanja ter način in obliko izpisa rezultatov, kakršnih prva dva programa ne vsebujeta.

Če zahtevanega znanja ni možno predstaviti v treh računalniških programih, se lahko sprogramirajo tudi dodatni programi.

Dobljeno nalogo je treba rešiti tudi z računalniškim programom Excel in rezultate predstaviti z ustreznim grafom, narisanim z Excelom. Podatke, rezultate in graf je treba oblikovati in obrazložiti.

Diagrami poteka fortranskih računalniških programov morajo biti narisani z grafičnim računalniškim programom SmartDraw. Pri zapisu algoritmov je treba uporabiti urejevalnika teksta in matematičnih enačb.

Delo na računalniških vajah se predstavi v poročilu, urejenem z urejevalnikom teksta Word in urejevalnikom matematičnih enačb Microsoft Equation. Računalniške vaje so uspešno zaključene, če je poročilo o vajah ocenjeno pozitivno, to je vsaj z oceno 6.

1.2 Osnovne zahteve pri računalniških vajah

Osnovne zahteve pri računalniških vajah bodo predstavljene na dveh primerih s področja kemije in kemijske tehnike.

Uporaba Fortrana bo prikazana na primeru dodajanja močne kisline k šibki bazi (**primer 1**). Rešitev primera bo predstavljena s tremi diagrami poteka, narisanimi z grafičnim računalniškim programom SmartDraw, in s tremi ustreznimi računalniškimi programi, ki bodo pokrivali zahtevano računalniško znanje Fortrana.

Uporaba Excela bo prikazana na primeru izračuna spreminjanja tlaka dušika s temperaturo po van der Waalsovi enačbi stanja in splošni plinski enačbi (**primer 2**). Prikazani bodo numerični izračun, grafična predstavitev rezultatov in obdelava podatkov.

Primer 1: Dodajanje močne kisline k šibki bazi – uporaba Fortrana

60 mL raztopine NH_4OH s koncentracijo 0,1 mol/L dodajamo po 1 mL raztopine HCl s koncentracijo 0,2 mol/L. Vseh dodatkov je 50. Izračunaj pH po vsakem dodatku kisline ($K_B = 1,65 \times 10^{-5}$, $K_W = 1 \times 10^{-14}$).

Potrebne enačbe za rešitev primera 1 so:

a) pH šibke baze:

$$c(\text{OH}^-) = \sqrt{K_B c_{B0}}$$

$$\text{pOH} = -\lg c(\text{OH}^-)$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

b) pH pufra:

$$c_B = \frac{(V_B c_{B0} - V_K c_K)}{(V_B + V_K)}$$

$$c_S = \frac{V_K c_K}{(V_B + V_K)}$$

$$c(\text{OH}^-) = K_B \frac{c_B}{c_S}$$

$$\text{pOH} = -\lg c(\text{OH}^-)$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

c) pH ob hidrolizi:

$$c_S = \frac{V_B c_{B0}}{(V_B + V_K)}$$

$$c(\text{H}^+) = \sqrt{\frac{K_W c_S}{K_B}}$$

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}^+)$$

d) pH ob prebitku kisline:

$$c_K = \frac{(V_K c_K - V_B c_{B0})}{(V_B + V_K)}$$

$$c(\text{H}^+) = c_K$$

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}^+)$$

V enačbah so: K_B konstanta disociacije baze, K_W ionski produkt vode, $c(\text{H}^+)$ koncentracija H^+ ionov, $c(\text{OH}^-)$ koncentracija OH^- ionov, c_{B0} začetna koncentracija baze, c_B koncentracija baze, V_B prostornina baze, c_K koncentracija kisline, c_S koncentracija soli in V_K prostornina kisline.

Primer 2: Izračun tlaka dušika v odvisnosti od temperature – uporaba Excela

V temperaturnem območju od 100 K do 200 K moramo izračunati spreminjanje tlaka dušika po van der Waalsovi enačbi stanja in po splošni plinski enačbi, če je molska prostornina V_m dušika $222,5 \text{ cm}^3/\text{mol}$. Rezultate, dobljene po obeh enačbah, moramo primerjati med seboj in jih ustrezno grafično predstaviti.

Potrebne enačbe za rešitev primera 2 so:

Van der Waalsova enačba ima obliko

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2},$$

kjer sta a in b van der Waalsovi konstanti, ki imata za dušik vrednosti: $a = 1,369 \times 10^6 \text{ bar} (\text{cm}^3/\text{mol})^2$ in $b = 38,64 \text{ cm}^3/\text{mol}$.

Splošna plinska enačba ima obliko

$$p_i = \frac{RT}{V_m}$$

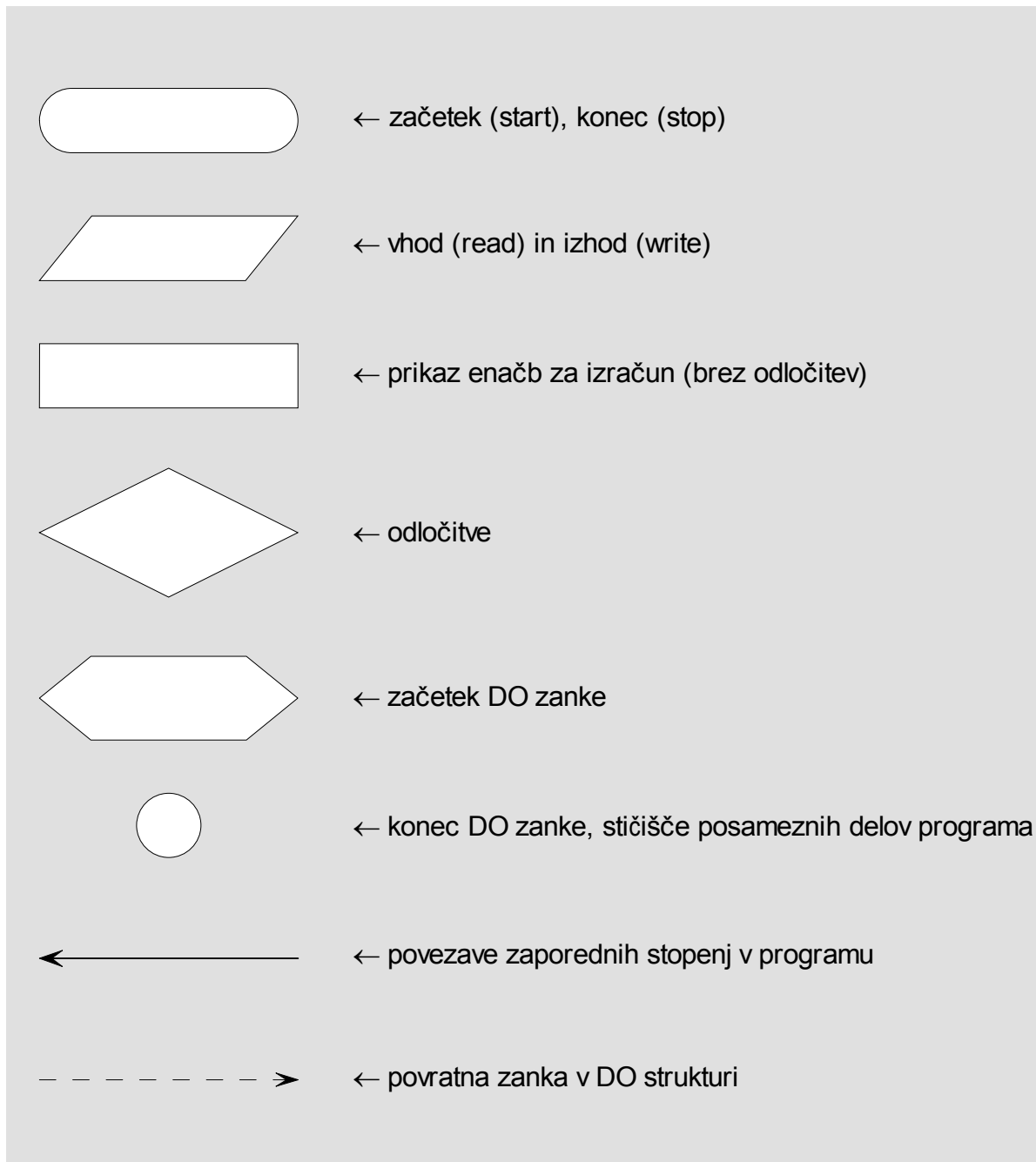
Ustrezna vrednost splošne plinske konstante R za molsko prostornino V_m v cm^3/mol je $83,14 \text{ cm}^3 \text{ bar}/(\text{mol K})$.

V enačbah je T temperatura v K, p tlak plina, izračunan po van der Waalsovi enačbi, in p_i tlak plina, izračunan po splošni plinski enačbi.

2 RISANJE DIAGRAMOV POTEKA

2.1 Grafični znaki oziroma simboli za risanje diagramov poteka

Za risanje diagramov poteka uporabljamo dovoljene grafične znake oz. simbole², predstavljene na **sliki 2-1**.



Slika 2-1: Dovoljeni grafični simboli za risanje računalniških diagramov poteka.

Grafični simboli so lahko prosojni ali obarvani. Z obarvanjem simbolov dosežemo večjo preglednost diagramov poteka. Tekst v grafičnih simbolih je lahko slovenski ali angleški. Ustrezne enačbe morajo biti spisane v matematični obliki in ne v Fortranski.

2.2 Grafični računalniški program SmartDraw

Pri računalniških vajah se študentje spoznajo z grafičnim računalniškim programom SmartDraw³. Uporabijo ga za računalniški izris vseh diagramov poteka. Izrisane diagrame poteka morajo vstaviti na ustrezna mesta v poročilo. Pri tem smejo uporabljati samo osebni računalnik. Uporaba računalniškega programa SmartDraw bo pojasnjena na vajah.

2.3 Primeri diagramov poteka

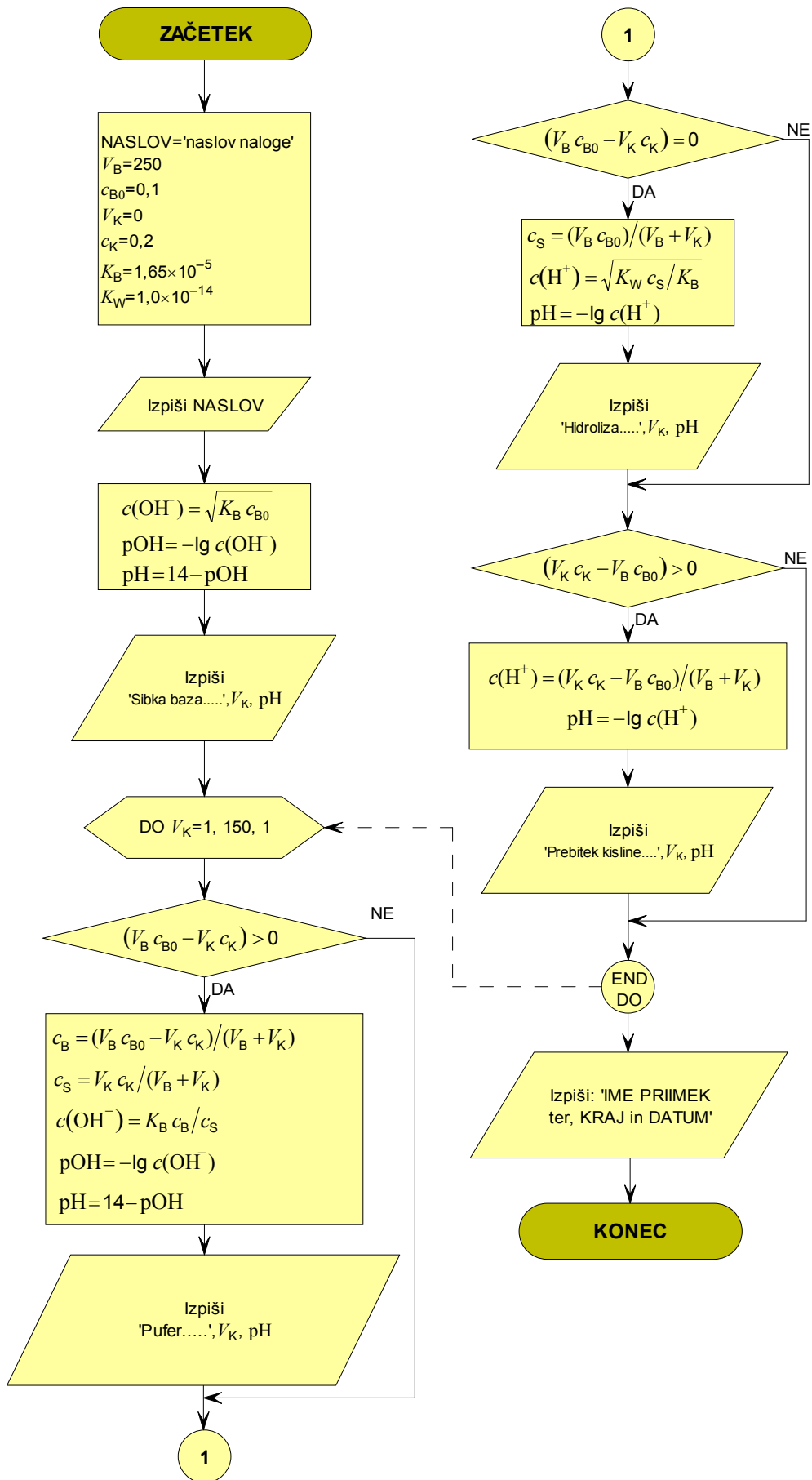
Na **slikah 2-2, 2-3 in 2-4** so prikazani trije diagrami poteka, ki predstavljajo algoritme za rešitev **primer 1**. Po diagramih poteka so narejeni trije FORTRANski programi za problem dodajanja močne kisline šibki bazi (**primer 1** na strani 2). Vsi trije diagrami poteka so bili narisani z zahtevanimi grafičnimi znaki s programskim paketom SmartDraw.

Diagramu poteka na **sliki 2-2** ustreza program na straneh 10 in 11. Diagramoma poteka na **slikah 2-3 in 2-4** ustrejata programa na straneh 13 in 14 ter 16 in 17.

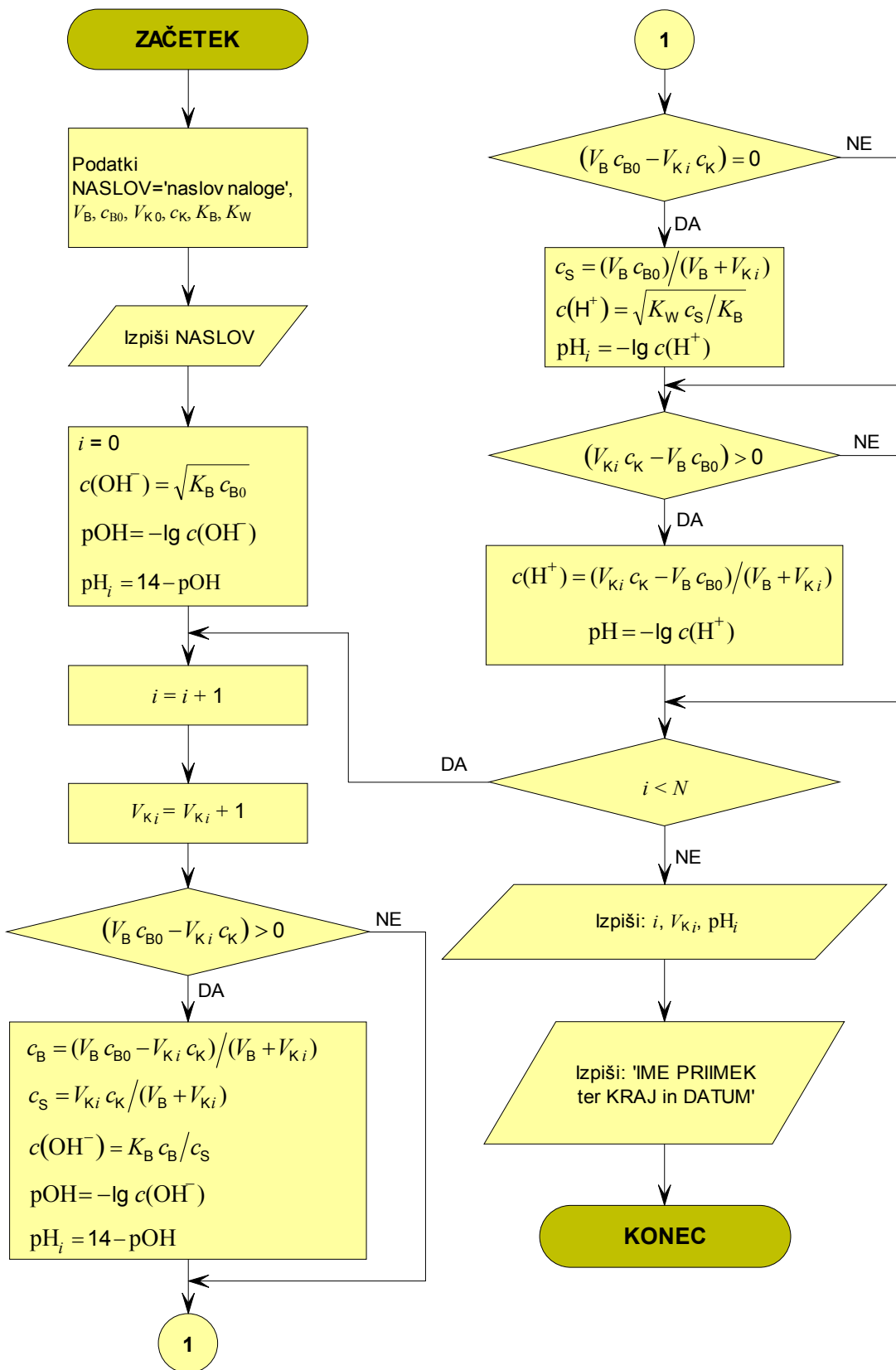
Namigi za hitrejše risanje v SmartDrawu

Pri risanju v SmartDrawu je dobro upoštevati naslednji vrstni red korakov:

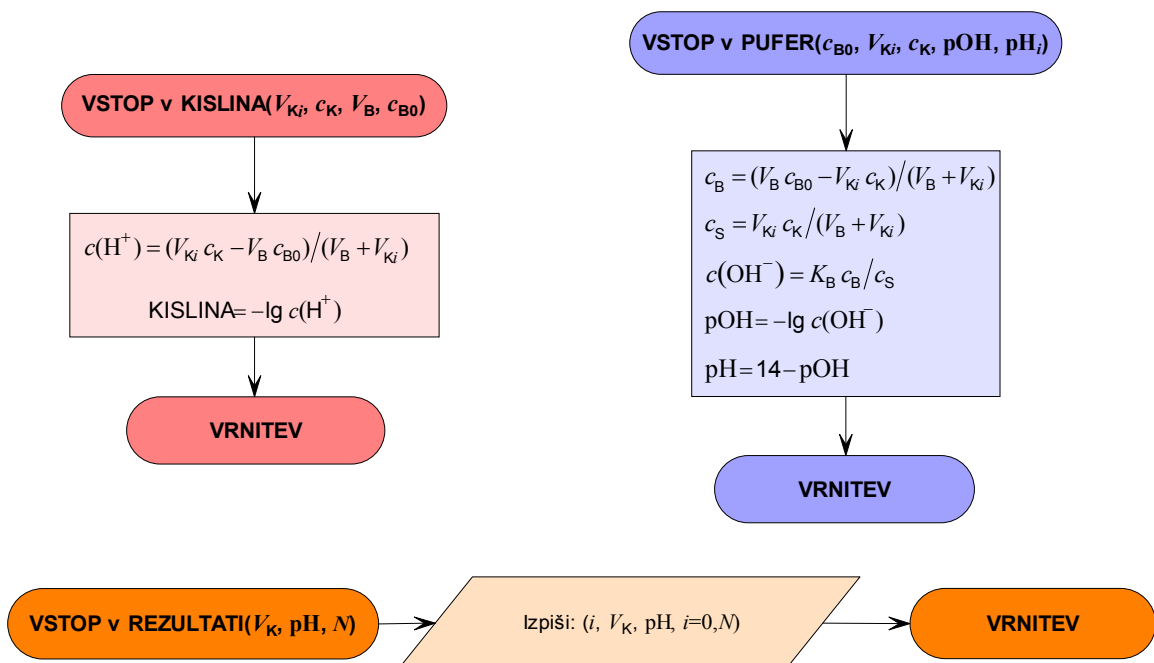
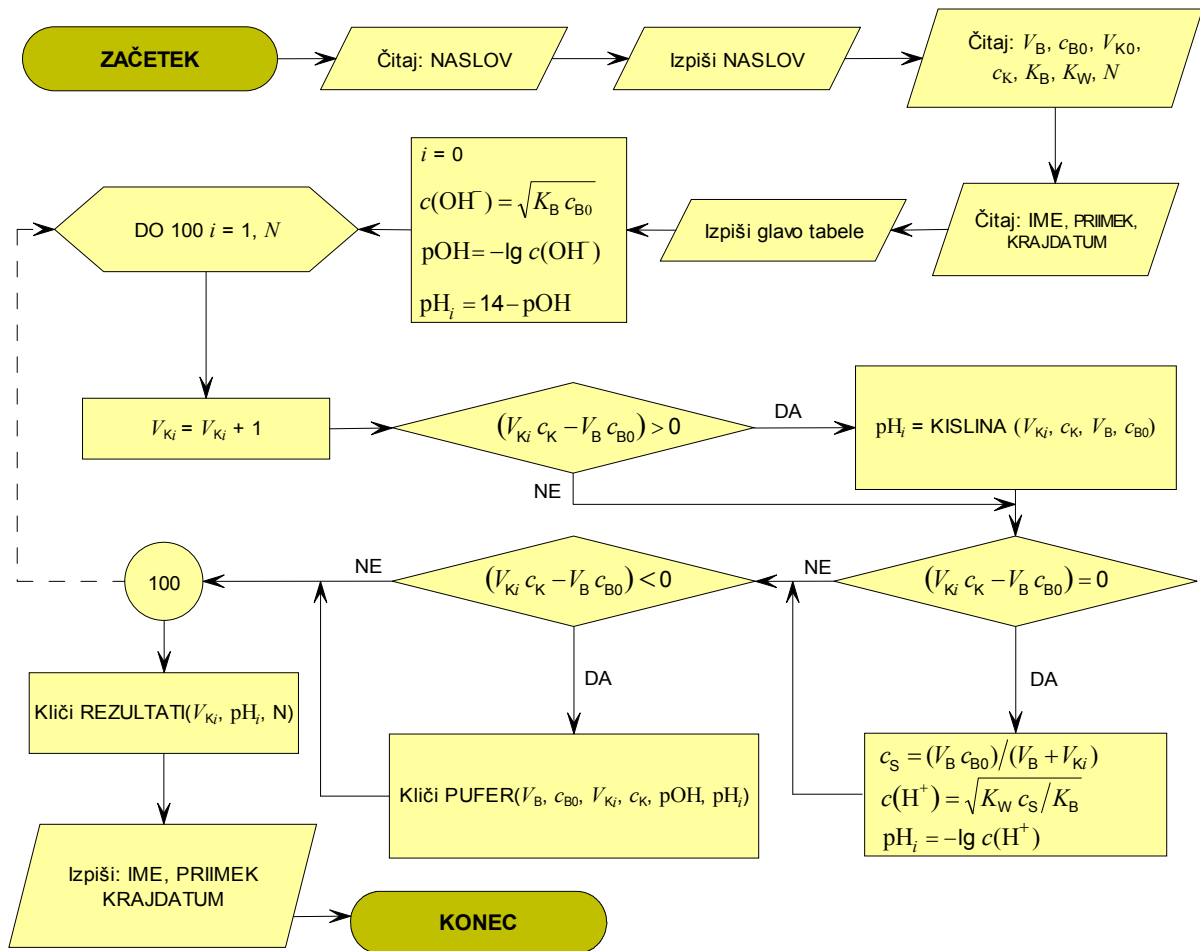
- a) pred začetkom risanja aktiviramo mrežo in nastavimo merilo v SI enotah (centimetri),
- b) iz orodne vrstice povlečemo željene grafične simbole,
- c) velikost vsakega grafičnega simbola prilagodimo sodemu številu kvadratkov mreže,
- d) v grafične simbole vpišemo željeni tekst (če je prostora za tekst premalo, grafični simbol povečamo na večje sodo število kvadratkov mreže)
- e) grafične simbole s tekstom poravnamo po navpični črti mreže, ki naj predstavlja sredinsko črtno povezavo bodočega diagrama poteka, in
- f) na koncu grafične simbole povežemo med seboj z ustreznimi tipi črt, katere opremimo s puščicami.



Slika 2-2: Diagram poteka za prvi program.



Slika 2-3: Diagram poteka za drugi program.



Slika 2-4: Diagram poteka za tretji program.

3 UPORABA PROGRAMSKEGA JEZIKA FORTRAN

Programiranje v Fortranu je prikazano za problem dodajanja močne kisline šibki bazi (**primer 1** na strani 2).

3.1 Prvi program: Enostavno programiranje

Prvi računalniški program mora vsebovati:

- čitanje in izpis naslova naloge,
- čitanje potrebnih podatkov,
- programsko zanko,
- rezultate v pregledni obliki in
- izpis priimka, imena in datuma.

Za čitanje podatkov je možna izbira med aritmetičnim vnosom podatkov, DATA stavki in READ stavki. Pri programski zanki lahko študent izbira med DO ali IF - GO TO zazankanjem. Rezultati se naj izpišejo na ekran in na datoteko z rezultati. Pri prvem programu ni dovoljena uporaba dimenzioniranih spremenljivk, funkcijskih podprogramov in pravih podprogramov.

Primer enostavnega programiranja

Pri enostavnem programiranju smo uporabili: samo nedimenzionirane spremenljivke, OPEN stavek za datoteko z rezultati, aritmetični vnos podatkov, REAL stavek za spremenljivki KB in KW, CHARACTER za alfanumerično spremenljivko NASLOV, DO zanko z realnim števcem, logične IF strukture. V aritmetičnih izrazih sta uporabljeni matematični funkciji SQRT in ALOG10. Za izpis rezultatov smo uporabili prosti FORMAT izpisa. Izpis programa:

```

PROGRAM pHzmesil
C   VB = prostornina baze
C   CK = koncentracija kisline
C   VK = prostornina kisline
C   CBo = koncentracija baze
C   CB = koncentracija baze
C   CS = koncentracija soli
C   H = koncentracija H+ ionov
C   PH = pH vrednost
C   OH = koncentracija OH- ionov
C   POH = pOH vrednost
C   KB = konstanta disociacije baze
C   KW = ionski produkt vode
REAL KB, KW
CHARACTER NASLOV*46
OPEN(7, STATUS='NEW', FILE='pHzmesil.rez')
NASLOV = 'Prvi program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi'
VB=60.

```

```

      CBo=0.1
      VK=0.
      CK=0.2
      KB=1.65*10**(-5.)
      KW=1.E-14
      WRITE(7,1) NASLOV
      WRITE(7,2)
*----Sibka baza
      OH=sqrt(KB*CBo)
      pOH=-alog10(OH)
      pH=14-pOH
      write(7,*)' Sibka baza.....',VK,pH
      DO VK = 1.,50.,1.
*----Puferna zmes
      IF((VB*CBo-VK*CK).gt.0.) THEN
        CB = (VB*CBo-VK*CK)/(VB+VK)
        CS = VK*CK/(VB+VK)
        OH=KB*CB/CS
        pOH = -alog10(OH)
        pH =14-pOH
        WRITE(7,*)' Pufer.....', VK,pH
      end if
*----Hidroliza
      IF(abs(VB*CBo-VK*CK).lt.0.00001) THEN
        CS = VB*CBo/(VB+VK)
        H = sqrt(KW*CS/KB)
        pH = -alog10(H)
        WRITE(7,*)' Hidroliza.....', VK,pH
      END IF
*----Prebitek kisline
      IF((VK*CK-VB*CBo).gt.0.) THEN
        H = (VK*CK-VB*CBo)/(VB+VK)
        pH = -alog10(H)
        WRITE(7,*)' Prebitek kisline..', VK,pH
      END IF
      END DO
      WRITE(7,3)
      STOP
1     FORMAT(1X,A)
2     FORMAT(/,27X,'VK',13X,'pH')
3     FORMAT(/,6X,'IME PRIIMEK,',5x,'MARIBOR, DATUM')
      END

```

Program zapiše rezultate na datoteko pHzmesi1.rez:

Prvi program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi

	VK	pH
Sibka baza.....	0.0000000E+00	11.10874
Pufer.....	1.000000	10.67988
Pufer.....	2.000000	10.36361
Pufer.....	3.000000	10.17173
Pufer.....	4.000000	10.03040
Pufer.....	5.000000	9.916454
Pufer.....	6.000000	9.819544
Pufer.....	7.000000	9.734114
Pufer.....	8.000000	9.656816
Pufer.....	9.000000	9.585461
Pufer.....	10.00000	9.518515
Pufer.....	11.00000	9.454845
Pufer.....	12.00000	9.393576
Pufer.....	13.00000	9.333990

Pufer.....	14.00000	9.275476
Pufer.....	15.00000	9.217484
Pufer.....	16.00000	9.159492
Pufer.....	17.00000	9.100979
Pufer.....	18.00000	9.041393
Pufer.....	19.00000	8.980124
Pufer.....	20.00000	8.916454
Pufer.....	21.00000	8.849507
Pufer.....	22.00000	8.778152
Pufer.....	23.00000	8.700854
Pufer.....	24.00000	8.615424
Pufer.....	25.00000	8.518515
Pufer.....	26.00000	8.404571
Pufer.....	27.00000	8.263242
Pufer.....	28.00000	8.071356
Pufer.....	29.00000	7.755085
Hidroliza.....	30.00000	5.196787
Prebitek kisline..	31.00000	2.658011
Prebitek kisline..	32.00000	2.361728
Prebitek kisline..	33.00000	2.190332
Prebitek kisline..	34.00000	2.070038
Prebitek kisline..	35.00000	1.977724
Prebitek kisline..	36.00000	1.903090
Prebitek kisline..	37.00000	1.840644
Prebitek kisline..	38.00000	1.787106
Prebitek kisline..	39.00000	1.740363
Prebitek kisline..	40.00000	1.698970
Prebitek kisline..	41.00000	1.661899
Prebitek kisline..	42.00000	1.628389
Prebitek kisline..	43.00000	1.597864
Prebitek kisline..	44.00000	1.569875
Prebitek kisline..	45.00000	1.544068
Prebitek kisline..	46.00000	1.520156
Prebitek kisline..	47.00000	1.497905
Prebitek kisline..	48.00000	1.477121
Prebitek kisline..	49.00000	1.457643
Prebitek kisline..	50.00000	1.439333

IME PRIIMEK, MARIBOR, DATUM

3.2 Drugi program: Dimenzioniranje spremenljivk

Poglavitna novost pri izdelavi drugega programa je vpeljava dimenzioniranih spremenljivk. Zahtevano je dimenzioniranje tistih spremenljivk, katerim se vrednost spreminja s korakom zanke in se pojavijo pri izpisu rezultatov. Rezultate je treba izpisati izven prve zanke. Druge spremenljivke se lahko dimenzionirajo po želji, ni pa potrebno.

Druge zahtevane spremembe so naslednje:

- drugačen vnos podatkov kot pri prvem programu (če je na primer pri prvem programu bil uporabljen aritmetični vnos podatkov, se lahko pri tem programu izbere med READ in DATA stavki) in

- drugačen tip programske zanke (če je bila pri prvem programu uporabljena na primer določena vrsta DO zanke, je pri tem programu potrebno to DO zanko zamenjati z drugim tipom DO zanke oziroma z IF – GO TO zazankanjem).

Uporaba funkcijskih podprogramov in podprogramov še ni dovoljena.

Primer programa z dimenzioniranimi spremenljivkami

Pri programu z dimenzioniranimi spremenljivkami smo uporabili: poleg nedimenzioniranih spremenljivk dve dimenzionirani spremenljivki, VK in pH, OPEN stavek za datoteko z rezultati, DATA stavka za spremenljivko NASLOV in potrebne aritmetične podatke, REAL stavek, CHARACTER za alfanumerično spremenljivko NASLOV. DO zazankanje smo nadomestili z IF – GO TO zazankanjem. Obdržali smo logične IF strukture. V aritmetičnih izrazih sta uporabljeni matematični funkciji SQRT in ALOG10. Za izpis rezultatov smo uporabili določen FORMAT izpisa. Izpis programa:

```

PROGRAM pHzmesi2
C   VB  =  prostornina baze
C   CK  =  koncentracija kisline
C   VK  =  prostornina kisline
C   CBo =  zacetna koncentracija baze
C   CB  =  koncentracija baze
C   CS  =  koncentracija soli
C   H   =  koncentracija H+ ionov
C   PH  =  pH vrednost
C   OH  =  koncentracija OH- ionov
C   POH =  pOH vrednost
C   KB  =  konstanta disociacije baze
C   KW  =  ionski produkt vode
C   N   =  stevilo dodatkov kisline
DIMENSION VK(0:100),pH(0:100)
REAL KB,KW
CHARACTER NASLOV*47
DATA NASLOV/'Drugi program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi'/
DATA VB,CBo,VK(0),CK,KB,KW,N/60.,0.1,0.,0.2,1.65E-05,1.E-14,50/
OPEN(7,STATUS='NEW',FILE='pHzmesi2.REZ')
WRITE(7,1) NASLOV
WRITE(7,2)
*----Sibka baza
I=0
OH=sqrt(KB*CBo)
pOH=-alog10(OH)
pH(I)=14-pOH
100 I=I+1
VK(I) = VK(I-1)+1
*----Pufer
IF((VB*CBo-VK(I)*CK).gt.0.) THEN
CB = (VB*CBo-VK(I)*CK)/(VB+VK(I))
CS = VK(I)*CK/(VB+VK(I))
OH=KB*CB/CS
pOH = -alog10(OH)
pH(I) =14-pOH
end if
*----Hidroliza
IF(abs(VB*CBo-VK(I)*CK).lt.0.00001) THEN

```

```

      CS = VB*CBo/(VB+VK(I))
      H = sqrt(KW*CS/KB)
      pH(I) = -alog10(H)
      END IF
*----Prebitek kisline
      IF((VK(I)*CK-VB*CBo).gt.0.) THEN
        H = (VK(I)*CK-VB*CBo)/(VB+VK(I))
        pH(I) = -alog10(H)
      END IF
      IF(I.LT.N) GO TO 100
      WRITE(7,3) (I,VK(I),pH(I),0=1,N)
      WRITE(7,4)
      STOP
1     FORMAT(A)
2     FORMAT(/,9X,'Dodatek',5X,'VK',7X,'pH')
3     FORMAT(10X,I3,6X,F5.1,5X,F4.1)
4     FORMAT(/,6X,'IME PRIIMEK,',5X,'MARIBOR, DATUM')
      END

```

Program je zapisal rezultate na datoteko pHzmesi2.rez:

Drugi program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi

Dodatek	VK	pH
0	0.0	11.1
1	1.0	10.7
2	2.0	10.4
3	3.0	10.2
4	4.0	10.0
5	5.0	9.9
6	6.0	9.8
7	7.0	9.7
8	8.0	9.7
9	9.0	9.6
10	10.0	9.5
11	11.0	9.5
12	12.0	9.4
13	13.0	9.3
14	14.0	9.3
15	15.0	9.2
16	16.0	9.2
17	17.0	9.1
18	18.0	9.0
19	19.0	9.0
20	20.0	8.9
21	21.0	8.8
22	22.0	8.8
23	23.0	8.7
24	24.0	8.6
25	25.0	8.5
26	26.0	8.4
27	27.0	8.3
28	28.0	8.1
29	29.0	7.8
30	30.0	5.2
31	31.0	2.7
32	32.0	2.4
33	33.0	2.2
34	34.0	2.1
35	35.0	2.0
36	36.0	1.9

37	37.0	1.8
38	38.0	1.8
39	39.0	1.7
40	40.0	1.7
41	41.0	1.7
42	42.0	1.6
43	43.0	1.6
44	44.0	1.6
45	45.0	1.5
46	46.0	1.5
47	47.0	1.5
48	48.0	1.5
49	49.0	1.5
50	50.0	1.4

IME PRIIMEK, MARIBOR, DATUM

3.3 Tretji program: Funkcijski podprogrami in podprogrami

Poglavitna novost pri tretjem programu je uporaba funkcijskih podprogramov in pravih podprogramov. Ti se lahko vključijo v en sam program ali v več programov. Vsebina funkcijskih podprogramov in pravih podprogramov je svobodna. Za prenos potrebnih parametrov je treba uporabiti:

- argumente v klicnih stavkih in
- COMMON stavke.

Vhodne podatke je treba programu priskrbeti na drugačen, še ne uporabljen način (npr. če sta že bila uporabljena aritmetični vnos podatkov in DATA stavke, je treba pri tretjem programu izbrati READ stavke). Izbira dimenzioniranih ali nedimenzioniranih spremenljivk je svobodna. Spremeniti je treba tip programske zanke (če npr. zamenjava DO zanke z IF – GO TO zazankanjem še ni bila izvedena, jo je potrebno izvesti pri tretjem programu).

Primer programa s funkcijskim podprogramom in pravima podprogramoma

Pri zadnjem programu smo uporabili nedimenzionirane in dimenzionirane spremenljivke, OPEN stavke za podatkovno datoteko, OPEN stavke za datoteko z rezultati, READ stavke za alfanumerične spremenljivke NASLOV, IME, PRIIMEK in KRAJDATUM ter potrebne aritmetične podatke, REAL stavke, CHARACTER za alfanumerične spremenljivke NASLOV, IME, PRIIMEK in KRAJDATUM, DO zanko s celim števcem. V aritmetičnih izrazih sta uporabljeni matematični funkciji SQRT in ALOG10. Za izpis rezultatov smo uporabili določen FORMAT izpisa. Za zapis številčnih rezultatov smo uporabili implicitno zanko v podprogramu REZULTATI. Zadnji program vsebuje prava podprograma PUFER in REZULTATI ter funkcijski podprogram KISLINA. Vsi podprogrami se kličejo iz glavnega programa. V podprogramu PUFER se potrebni argumenti prenašajo preko seznama parametrov pri imenu

podprograma in preko COMMON stavka. Pri funkcijskem podprogramu KISLINA in pri pravem podprogramu REZULTATI se potrebni argumenti prenašajo samo preko seznama parametrov, navedenega ob imenu funkcijskega podprograma oziroma pravega podprograma. Študent mora izdelati računalniški program z enim tipom podprograma (podprogram ali funkcijski podprogram). Izpis programa:

```

PROGRAM pHzmesi3
C   VB  =  prostornina baze
C   CK  =  koncentracija kisline
C   VK  =  prostornina kisline
C   CBo =  zacetna koncentracija baze
C   CB  =  koncentracija baze
C   CS  =  koncentracija soli
C   H   =  koncentracija H+ ionov
C   PH  =  pH vrednost
C   OH  =  koncentracija OH- ionov
C   POH =  pOH vrednost
C   KB  =  konstanta disociacije baze
C   KW  =  ionski produkt vode
C   N   =  stevilo dodatkov kisline
DIMENSION VK(0:100),pH(0:100)
REAL KB,KW,KISLINA
CHARACTER NASLOV*48,IME*7, PRIIMEK*10, KRAJDATUM*16
COMMON KB
OPEN(5,STATUS='old',FILE='pHzmesi3.dat')
OPEN(7,STATUS='new',FILE='pHzmesi3.rez')
READ(5,1) NASLOV
WRITE(7,3) NASLOV
READ(5,*) VB,CBo,VK(0),CK,KB,KW,N
READ(5,1) IME,PRIIMEK,KRAJDATUM
WRITE(7,2)
*----Sibka baza
I=0
OH=sqrt(KB*CBo)
pOH=-alog10(OH)
pH(I)=14-pOH
DO I = 1,N
VK(I) = VK(I-1)+1
*----Puferna zmes
IF((VB*CBo-VK(I)*CK).gt.0.) THEN
CALL PUFER(VB,CBo,VK(I),CK,pOH,pH(I))
END IF
*----Hidroliza
IF(abs(VB*CBo-VK(I)*CK).lt.0.00001) THEN
CS = VB*CBo/(VB+VK(I))
H = sqrt(KW*CS/KB)
pH(I) = -alog10(H)
END IF
*----Prebitek kisline
IF((VK(I)*CK-VB*CBo).gt.0) THEN
pH(I)=KISLINA(VK(I),CK,VB,CBo)
END IF
END DO
CALL REZULTATI(VK,pH,N)
WRITE(7,3) IME, PRIIMEK, KRAJDATUM
STOP
1  FORMAT(A,2X,A,10X,A)
2  FORMAT(/,9X,'Dodatek',5X,'VK',7X,'pH')
3  FORMAT(/,1X,A,2X,A,10X,A)
END

```

```

SUBROUTINE PUFER (VB, CBo, VK, CK, pOH, pH)
COMMON KB
REAL KB
  CB = (VB*CBo-VK*CK) / (VB+VK)
  CS = VK*CK / (VB+VK)
  OH=KB*CB/CS
  pOH = -alog10 (OH)
  pH =14-pOH
RETURN
END

FUNCTION KISLINA (VK, CK, VB, CBo)
REAL KISLINA
H = (VK*CK-VB*CBo) / (VB+VK)
KISLINA = -alog10 (H)
RETURN
END

SUBROUTINE REZULTATI (VK, pH, N)
DIMENSION VK (0:100), pH (0:100)
WRITE (7, 1) (I, VK (I), pH (I), I=0, N)
1 FORMAT (10X, I3, 6X, F5.1, 5X, F4.1)
RETURN
END

```

Program potrebuje podatke, ki so shranjeni na datoteki pHzmesi3.dat:

Tretji program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi
60., 0.1, 0., 0.2, 1.65E-5, 1.E-14, 50
MojeIme MojPriimek Mesto, Datum

Program zapiše rezultate na datoteko pHzmesi3.rez:

Tretji program: Dodajanje mocne kisline sibki bazi

Dodatek	VK	pH
0	0.0	11.1
1	1.0	10.7
2	2.0	10.4
3	3.0	10.2
4	4.0	10.0
5	5.0	9.9
6	6.0	9.8
7	7.0	9.7
8	8.0	9.7
9	9.0	9.6
10	10.0	9.5
11	11.0	9.5
12	12.0	9.4
13	13.0	9.3
14	14.0	9.3
15	15.0	9.2
16	16.0	9.2
17	17.0	9.1
18	18.0	9.0
19	19.0	9.0
20	20.0	8.9
21	21.0	8.8

22	22.0	8.8
23	23.0	8.7
24	24.0	8.6
25	25.0	8.5
26	26.0	8.4
27	27.0	8.3
28	28.0	8.1
29	29.0	7.8
30	30.0	5.2
31	31.0	2.7
32	32.0	2.4
33	33.0	2.2
34	34.0	2.1
35	35.0	2.0
36	36.0	1.9
37	37.0	1.8
38	38.0	1.8
39	39.0	1.7
40	40.0	1.7
41	41.0	1.7
42	42.0	1.6
43	43.0	1.6
44	44.0	1.6
45	45.0	1.5
46	46.0	1.5
47	47.0	1.5
48	48.0	1.5
49	49.0	1.5
50	50.0	1.4

MojeIme MojPriimek

Mesto, Datum

4 UPORABA RAČUNALNIŠKEGA PROGRAMA EXCEL

Uporabo bomo prikazali na primeru računanja tlaka dušika v odvisnosti od temperature (**primer 2** na strani 4).

Vnos podatkov v Excel in dobljeni numerični rezultati so razvidni iz **slike 4-1**. V celice A2, A5, A8 in A11 smo vnesli vrednost molske prostornine V_m , vrednosti parametrov a in b van der Waalsove enačbe ter vrednost splošne plinske konstante R . V celice od C2 do C12 smo vpisali vrednosti temperatur.

Komentarje, ki pojasnjujejo podane vrednosti, smo vnesli v celice A1, A4, A7, A10, A13, A17, C1, D1 in E1. Z urejevalnikom matematičnih enačb Microsoft equation, ki ga lahko aktiviramo tudi v Excelu, smo za ilustracijo napisali van der Waalsovo enačbo in splošno plinsko enačbo ter ju postavili pod ustrezna komentarja v celicah A13 in A17. Enačbi smo obrobili z barvnimi črtami z uporabo okna Oblikovanje objekta (Format object).

V celico D2 smo za enačajem napisali van der Waalsovo enačbo kot formulo za izračun p .

	A	B	C	D	E
1	$V_m / (\text{cm}^3/\text{mol})$		T / K	p / bar	p_i / bar
2	222.5		100	17.57	37.37
3			110	22.09	41.10
4	$a / (\text{bar} (\text{cm}^3/\text{mol})^2)$		120	26.61	44.84
5	1.369E+06		130	31.13	48.58
6			140	35.65	52.31
7	$b / (\text{cm}^3/\text{mol})$		150	40.18	56.05
8	38.64		160	44.70	59.79
9			170	49.22	63.52
10	$R / (\text{bar}/(\text{mol K}))$		180	53.74	67.26
11	83.14		190	58.26	71.00
12			200	62.79	74.73
13	Van der Waalsova enačba				
14	$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$				
15					
16					
17	Idealna plinska enačba				
18	$p_i = \frac{RT}{V_m}$				
19					
20					

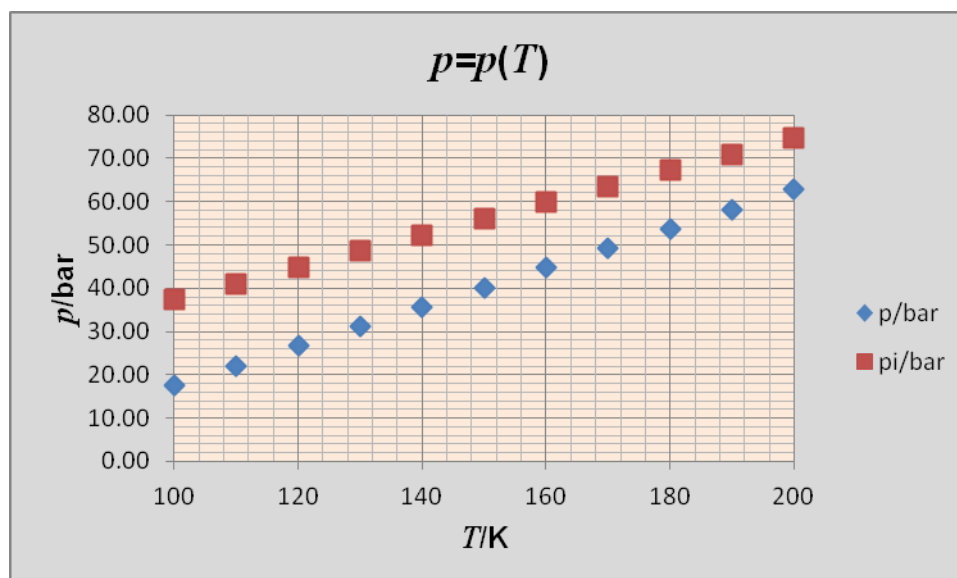
Slika 4-1: Podatki in numerični rezultati za izračun odvisnosti tlaka dušika od temperature po van der Waalsovi in splošni plinski enačbi (**primer 2**).

V formulo smo vrednosti za V_m , a , b in R vnesli z absolutnimi sklici na celice, kjer se nahajajo. Vrednost za T smo vnesli z relativnim sklicem na celico C2. Zapis van der Waalsove enačbe z navedenimi sklici v celico D2 je razviden v oknu pri funkciji f_x . Izračun pri drugih temperaturah smo dobili s potegom črnega kvadrata v desnem spodnjem kotu celice D2 z miško od celice D2 do celice D12.

Podobno smo v celico E2 za enačajem napisali splošno plinsko enačbo kot formulo za izračun p_i . V formulo smo vrednosti za V_m in R vnesli z absolutnimi sklici na celici, kjer se nahajata. Vrednost za T smo vnesli z relativnim sklicem na celico C2. Izračun pri drugih temperaturah smo dobili s potegom črnega kvadrata v desnem spodnjem kotu celice E2 z miško od celice E2 do celice E12.

Okno Oblikovanje celice (Format cells) smo uporabili za izbiro zapisa številčnih vrednosti, za izbiro pisave in poravnavo.

Dobljene rezultate smo predstavili s črtnim grafikonom, ki je primeren za prikaz spreminjanja tlakov p in p_i od temperature v temperaturnem območju z enakomernimi temperaturnimi presledki (**slika 4-2**).



Slika 4-2: Grafični prikaz odvisnosti tlaka dušika od temperature po van der Waalsovi in splošni plinski enačbi (**primer 2**).

Grafu smo preko jezička Postavitvev (Layout) dodali mrežne črte, naslove osi in naslov grafa ter obarvali področje grafa. Preko jezička Oblika (Format) smo obarvali celotno ozadje grafikona.

Podrobnejša razlaga se najde v zbranem gradivu Računalništvo v kemiji² avtorice Majde Krajnc.

5 PISANJE POROČILA

Opravljen delo pri računalniških vajah je treba predstaviti v poročilu. Poročilo mora biti napisano z urejevalnikom teksta Word. Pri pisanju je treba upoštevati SI zapis veličin in enot^{4, 5}. Poročilo mora vsebovati:

Naslov vaje oziroma naloge

1. Opis problema
2. Matematični model
3. Rešitev s Fortranom:
 - ❖ Diagrame poteka za
 - prvi program
 - drugi program
 - tretji program
 - ❖ Programsko opremo za
 - prvi program
 - drugi program
 - tretji program
 - ❖ datoteke z rezultati vseh fortranskih programov
4. Rešitev z Excelom:
 - ❖ Obrazložitev naloge
 - ❖ Numerično rešitev (vnos podatkov in izračun – prikaz formule)
 - ❖ Komentar numeričnega reševanja
 - ❖ Grafično predstavitev rezultatov
 - ❖ Komentar grafične predstavitve rezultatov
 - ❖ Oblikovanje podatkov, rezultatov in grafa
5. Zaključke in opažanja.

Pri *Opisu problema* je zaželen prepis vsebine dobljene naloge.

Matematični model mora vsebovati vse potrebne **matematično zapisane enačbe** v obliki, ki ustreza za pripravo računalniških programov. Za enačbami je treba razložiti pomen spremenljivk.

Pod točko *Diagrami poteka* je potrebno za vsak program v poročilo vstaviti ustrezen diagram poteka, narisani z grafičnim programskim paketom SmartDraw.

Pod točko *Programska oprema* se morajo v poročilu pri vsakem programu posebej navesti Fortranski stavki, uporabljeni v tem programu. Navedbi uporabljenih Fortranskih stavkov sledijo vstavljene datoteke:

- s podatki (če obstaja) in
- z računalniškim programom.

Pri *Rezultatih* se vstavijo rezultati, dobljeni z vsemi tremi programi.

Pod *Rešitev z Excelom* se opiše problem, ki se rešuje, vstavijo se podatki in rešitev naloge v obliki urejene preglednice in grafa. Pojasniti je treba potek reševanja ter izbor in risanje grafa. Podatke, rezultate in graf je treba oblikovati in jih opremiti s komentarji.

Pod *Opažanja in zaključki* se opišejo študentova opažanja in zaključki v zvezi z reševanjem naloge s Fortranom in Excelom ter risanjem s SmartDrawom.

Vsak graf, slika in preglednica, ki so podani v poročilu, morajo biti oštevilčeni in opremljeni s tekstom, ki mora vsebovati kratek komentar oziroma razlago.

6 OCENJEVANJE RAČUNALNIŠKIH VAJ

Pri oceni računalniških vaj iz Računalništva v kemiji oziroma Procesnega računanja I se upoštevata priprava in delo študenta pri vajah ter oddano delovno poročilo o računalniških vajah.

Pri pregledu poročila o vajah se ocenjujeta pravilnost rezultatov, dobljenih s fortranskimi programi in Excelom.

Pri uporabi Fortrana se ocenjuje vgrajeno znanje Fortrana v računalniške programe. Ocenjujejo se osnovni tipi priloženih fortranskih programov, vnosi podatkov, oblike branja/izpisa podatkov/rezultatov, programske zanke, podprogrami in preglednost rezultatov.

Pri uporabi Excela se ocenjujejo oblikovanje podatkov, komentarjev in rezultatov ter pravilnost in predstavitev numeričnih in grafičnih rezultatov.

Pri obliki poročila se ocenjuje, ali je poročilo spisano po točkah iz poglavja 5 Pisanje poročila.

Računalniške vaje so ocenjene pozitivno, če se zbere vsaj 60% možnih točk pri oceni poročila. Negativno ocenjena poročila se morajo popraviti. Podrobnosti so razvidne iz ocenjevalnega lista na **sliki 6-1**.

Študent:		Pripombe	Točke
A	PROGRAMIRANJE V FORTRANU		
1.	Programi		3
a)	Program 1 – nedimenzionirane spremenljivke brez podprogramov (1 t)		
b)	Program 2: - Dimenzionirane spremenljivke brez podprogramov (0,5 t) - Izpis rezultatov mora stati izven zanke, ki računa (0,5 t)		
c)	Program 3 – podprogrami na dimenzioniranih spremenljivkah: - Prenos argumentov preko klicnega stavka (0,5 t) - Prenos argumentov preko COMMON stavka (0,5 t)		
2.	Vnos podatkov		1,5
a)	Aritmetični (direktni) vnos podatkov (0,5 t)		
b)	READ stavek (0,5 t)		
c)	DATA stavek (0,5 t)		
3.	FORMAT čitanja/izpisa podatkov/rezultatov		1,5
a)	Prosti format (0,5 t)		
b)	Določen format (0,5 t)		
c)	CHARACTER in A določilo (0,5 t)		
4.	Zanke		2
a)	DO zanka (1 t)		
c)	IF – GO TO zazankanje (1 t)		
5.	Podprogram		1
a)	Podprogram (SUBROUTINE ali FUNCTION) (1 t)		
6.	Preglednost rezultatov		1
a)	Rezultati morajo imeti naslov naloge ($\frac{1}{3}$ t)		
b)	Rezultati morajo biti opremljeni z imeni fizikalnih veličin, katere predstavljajo, in z enotami ($\frac{1}{3}$ t)		
c)	Izpisati je treba ime in priimek avtorja programa ter kraj in datum ($\frac{1}{3}$ t)		
B	UPORABA RAČUNALNIŠKEGA PROGRAMA EXCEL		5
a)	Oblikovanje podatkov in rezultatov (1 t)		
b)	Numerična rešitev (vnos podatkov in izračun – prikaz formule) (1 t)		
c)	Komentar numeričnega reševanja (0,5 t)		
d)	Grafična predstavitev rezultatov (1t)		
e)	Komentar grafične predstavitve rezultatov (0,5 t)		
f)	Uporaba pogojnih stavkov (1 t)		
C	OBLIKA POROČILA		5
a)	Poročilo mora vsebovati tri diagrame poteka, narisane s SmartDrawom (3t)		
b)	Poročilo mora biti spisano z Wordom po točkah iz navodil za računalniške vaje (stran 23) (1t)		
c)	Enačbe morajo biti napisane z urejevalnikom enačb (1t)		
Doseženo število točk od 20 možnih			
Ocena			

Slika 6-1: Ocenjevalni list za poročilo o računalniških vajah pri predmetu Računalništvo v kemiji.

7 NAVODILA ZA DELO Z RAČUNALNIKOM MICROVAX

7.1 Vključitev in izključitev iz sistema MicroVax

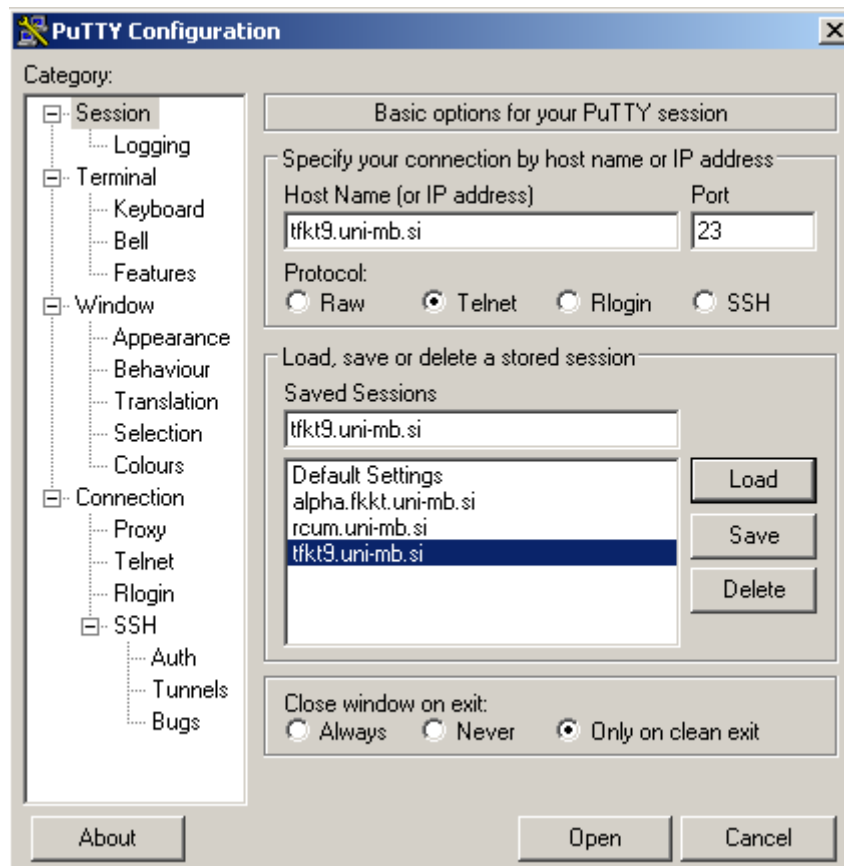
Vključitev v sistem

Na računalnik se prijavimo preko osebnega računalnika s klikom na ikono z imenom `putty` (slika 7-1):



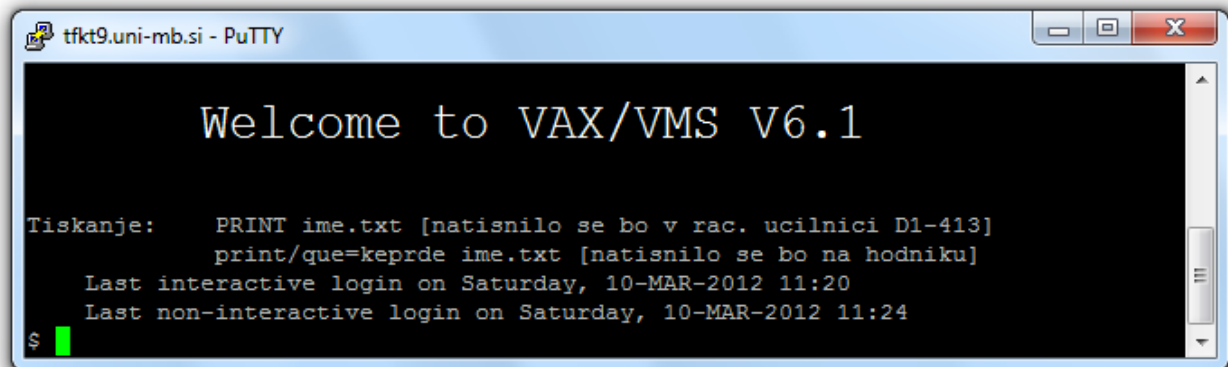
Slika 7-1: Ikona na namizju za dostop do računalnikov `alpha`, `rcum` in `tfkt9`.

Odpre se nam okno, prikazano na **sliki 7-2**, ki nam preko omrežja omogoči dostop do drugih računalnikov. Izmed možnih računalnikov izberemo računalnik `tfkt9.uni-mb.si` oziroma krajše `tfkt9`, ki predstavlja računalnik MicroVax na fakulteti, izbrani računalnik naložimo z `Load` in kliknemo `Open`.



Slika 7-2: Dostop do računalnikov `alpha`, `rcum` in `tfkt9`.

Odpre se nam okno, v katerega vpišemo dodeljeno IME za Username in GESLO za Password (slika 7-3).



Slika 7-3: Prijava na MicroVax z dodeljenim Username in Password.

Osebni računalnik ima sedaj funkcijo terminala, le da je namesto tipke <RETURN> tipka <ENTER>.

Izključitev iz sistema

Na osebнем računalniku se iz sistema in iz putty-ja izključimo z enim ukazom `lo`, ki ga zapišemo za \$ v ukazni vrstici.

Izključiti se moramo obvezno po zaključenem delu.

7.2 Koraki izvedbe programa

1. korak: ED IME.FOR

Z navedenim korakom odpremo prazno datoteko, v katero lahko vnesemo računalniški program. Če datoteka že obstaja, jo s tem ukazom ponovno odpremo. Glavno tipkovnico uporabljamo za vnašanje programskega teksta. Tipke na levi strani tipkovnice omogočajo:

<RETURN>	←	zaključí vrstico in prehod v novo vrsto
<BACK SPACE>	←	skoči na začetek tekoče vrstice
<DELETE>	←	zbríše predhodén znak
<CAPS LOCK>	←	omogoča pisanje z malimi oz. velikimi črkami

Tastatura na desni strani ima v urejevalniku poseben pomen (**slika 7-4**). Tipke omogočajo:

<DEL L>	← zbriše vrstico
<GOLD DEL L>	← vrne izbrisano vrstico
<DEL W>	← zbriše besedo
<GOLD DEL W>	← vrne izbrisano besedo
<DEL C>	← zbriše znak
<GOLD DEL C>	← vrne znak
<EOL>	← skoči na konec vrstice
<LINE>	← skoči na začetek naslednje vrstice
<GOLD OPEN LINE>	← odpre novo vrstico
<GOLD TOP>	← skoči na začetek datoteke
<GOLD BOTTOM>	← skoči na konec datoteke
<ADVANCE>	← označi pomikanje navzdol
<BACKUP>	← označi pomikanje navzgor
<SECT>	← skoči za 16 vrstic glede na <ADVANCE> ali <BACKUP>
<SELECT>	← označi vrstice, ki bi jih radi prenašali
<CUT>	← 'odreže' vrstice, označene s <SELECT>
<PASTE>	← vrne vrstice, 'odrezane' s <CUT>.
<APPEND>	← 'odreže' vrstice, označene s <SELECT> in jih doda že prej 'odrezanim' vrsticam.
<GOLD FIND>	← izpiše na dnu ekrana besedo SEARCH FOR: (s pripisom niza alfanumeričnih znakov in tipke <ENTER> se v datoteki poišče identični niz).
<FINDXT>	← poišče naslednji niz, predhodno določen z <GOLD FIND>.
<HELP>	← pokaže tipke na desni strani tipkovnice in CTRL možnosti.

<GOLD COMMAND>	← izpiše na dnu ekrana besedo COMMAND:
	– s pripisom številke in <ENTER> skočimo v vrstico, označeno s to številko,
	– s pripisom QUIT in <ENTER> se datoteka ob vrnitvi iz urejevalnika ne shrani.
	– s pripisom EX in <ENTER> se vrnemo iz urejevalnika in obenem shranimo novo verzijo datoteke .
<REPLACE>	← zbriše s tipko <SELECT> izbrani tekst in ga zamenja s shranjeno vsebino.
<SUBS>	← zamenja niz s shranjeno vsebino.
<CHNGCASE>	← spremeni male črke v velike in obratno
<SPECINS>	← vstavi posebne ASCII kode v tekst
<WORD>	← izvrši pomik do konca besede.
<DEL EOL>	← izbriše vrstico od kurzorja do konca besede.
<PAGE>	← izvrši pomik za eno stran v nastavljeni smeri.

Če ukazov ne vemo na pamet, si lahko v editorju osvežimo spomin s pritiskom na tipko <HELP>. Na ekranu se nam prikaže izpis kot ga vidimo na **sliki 7-4**. S pritiskom na posamezno željeno tipko dobimo natančnejšo razlago o pomenu te tipke.

2. korak: FOR IME (.FOR)

Prevajanje programa, iskanje slovničnih napak. Če ni slovničnih napak, gremo na 3. korak, drugače se vrnemo na 1. korak tolikokrat, da odpravimo vse slovnične napake.

3. korak: LINK IME (.OBJ)

Povezovanje programa s svojimi ali sistemskimi podprogrami, iskanje nepravilnosti pri povezovanju programskih enot. Dokler nepravilnosti niso odpravljene, se moramo vračati na 1. korak.

4. korak: RUN IME(.EXE)

Izvajanje programa, iskanje logičnih napak. Logične napake prav tako odpravljamo z vračanjem na 1. korak. Če napak ni več, dobimo rezultate. Rezultate si moramo kritično ogledati in oceniti njihovo realnost, saj so lahko okvarjeni zaradi nepravilnih aritmetičnih izrazov (sami jim lahko s tipkarskimi napakami spremenimo pomen, a so s stališča programiranja pravilni), nepravilnih prenosov med programskimi enotami, itd. Pri ugotavljanju, ali so rezultati realni, si pomagamo z znanjem kemije (na primer, tlak ne more biti negativen). Tudi s kalkulatorjem lahko izračunamo vrednosti, dobljene v enem (začetnem ali končnem) koraku zanke, in jih primerjamo z vrednostmi, ki jih je izračunal računalnik.

↑ UP	DOWN ↓	← LEFT	→ RIGHT
DELETE	Delete character		
LINEFEED	Delete to beginning of word		
BACKSPACE	Backup to beginning of line		
CTRL/A	Compute tab level		
CTRL/D	Decrease tab level		
CTRL/E	Increase tab level		
CTRL/K	Define key		
CTRL/R	Refresh screen		
CTRL/T	Adjust tabs		
CTRL/U	Delete to beginning of line		
CTRL/W	Refresh screen		
CTRL/Z	Exit to line mode		
Press a key for help on that key. To exit, press the spacebar.			

GOLD	HELP	FNDNXT	DEL L
		FIND	UND L
PAGE	SECT	APPEND	DEL W
COMMAND	FILL	REPLACE	UND W
ADVANCE	BACKUP	CUT	DEL C
BOTTOM	TOP	PASTE	UND C
WORD	EOL	CHAR	ENTER
CHNGCASE	DEL EOL	SPECINS	
LINE		SELECT	SUBS
OPEN LINE		RESET	

Slika 7-4: Možni ukazi pri urejanju teksta.

7.3 Drugi koristni ukazi

Drugi koristni ukazi so:

COPY ← skopira datoteko v njeno kopijo (z drugim imenom). Primer:

```
COPY IME1.TIP IME2.TIP
```

(obstajata IME1.TIP in IME2.TIP)

RENAME ← preimenuje ime datoteke. Primer:

	<code>RENAME IME1.TIP IME2.TIP</code> (IME1.TIP ne obstaja več).
<code>PURGE</code>	← zbriše vse verzije (razen zadnje) vseh datotek.
<code>HELP</code>	← izpiše in razloži pomen sistemskih ukazov.
<code>DIR</code>	← omogoča izpis imen, tipov in verzij datotek, njihovo velikost...
<code>APPEND</code>	← doda vsebino ene ali več datotek na konec druge datoteke.
<code>PRINT</code>	← izpiše željene datoteke na tiskalnik v računalniški učilnici D1-413. Primer: <code>\$PRINT IME.FOR, IME.DAT, IME.REZ</code>
<code>PRINT/QUE=KEPRDE</code>	← izpiše eno ali več datotek na tiskalnik na hodniku. Primer: <code>\$PRINT/QUE=KEPRDE IME.FOR, IME.DAT, IME.REZ</code>
<code>P4</code>	← izpiše datoteke v računalniški učilnici D1-413. Primer: <code>\$P4 IME.FOR, IME.DAT, IME.REZ</code>

Za vse ukaze velja:

- Če verzijo datoteke izpustimo, računalnik vzame najvišjo.
- Skoraj vsi ukazi dopuščajo zamenjavo in s tem posplošitev imena, tipa ali verzije ali samo katerega njihovega dela z zvezdico '*'. Primer: ukaz `DIR *.FOR` izpiše na ekran vse datoteke s poljubnim imenom in tipom `FOR`.

8 UPORABNI PRETVORNIKI MED MERSKIMI ENOTAMI

Pretvorniki med merskimi enotami so vzeti iz priročnika Perry's Chemical Engineers' Handbook⁹. Dober vir pretvornikov je tudi Mednarodni sistem merskih enot in znakov⁴. Omenjeni priročnik je zelo koristen pripomoček, v katerem so poleg pretvornikov zbrane tudi informacije o zakonitih merskih enotah, merskem sistemu, znakih in številih, fizikalnih veličinah, veličinah in enotah v kemiji in drugem.

8.1 Dolžina

Da pretvoriš iz	v	pomnoži z
ångström	inch	$3,937 \times 10^{-9}$
ångström	meter	1×10^{-10}
ångström	mikron	1×10^{-4}
centimeter	ångström	1×10^8
centimeter	foot	0,03281
centimeter	inch	0,3937
centimeter	meter	0,01
centimeter	micron	10000
fathom	foot	6
fathom	meter	1,8288
foot	meter	0,3048
furlong	meter	201,168
furlong	milja	0,125
hand	meter	0,1016
inch	meter	0,0254
kilometer	milja	0,6214
mikron	meter	1×10^{-6}
mikromikron	mikron	1×10^{-6}
mikron	ångström	1×10^4
mikron	meter	1×10^{-6}
milja (nautična)	foot	6080
milja (nautična)	milja (US statut)	1,1516
milja	foot	5280
milja	meter	1609,3
milimeter	meter	0,001
milimikron	mikron	0,001
mil	inch	0,001
mil	meter	$2,54 \times 10^{-5}$
svetlobno leto	meter	$9,46055 \times 10^{15}$
yard	meter	0,9144

8.2 Masa

Da pretvoriš iz	v	pomnoži z
carat (metric)	gram	0,2
drams (zdravila ali zlato)	gram	3,888
dram	gram	1,7719
grain	gram	0,06480
grain	pound	1/7000
gram	dram	0,5644
gram	dram (zdravila in zlato)	0,2572
gram	grain	15,432
gram	kilogram	0,001
gram	pound	0,0022046
gram	pound (zdravila in zlato)	0,002679
kilogram	pound	2,2046
ounce	kilogram	0,02835
ounce	ounce (zdravila ali zlato)	0,9115
pound	grain	7000
pound	kilogram	0,45359
pound	pound (zlato ali zdravila)	1,2153
slug	gee pound	1
slug	kilogram	14,594
slug	pound	32,17
ton (long)	kilogram	1016
ton (long)	pound	2240
ton (metric)	kilogram	1000
ton (metric)	pound	2204,6
ton (metric)	ton (short)	1,1023
ton (short)	kilogram	907,18
ton (short)	pound	2000

8.3 Prostornina

Da pretvoriš iz	v	pomnoži z
acre-feet	kubični meter	1233
barrel (oil)	kubični meter	0,15899
barrel (oil)	gallon	42
barrel (US liquid)	kubični meter	0,11924
barrel (US liquid)	gallon	31,5
board foot	cubic foot	1/12
bushel (US dry)	cubic foot	1,2444
bushel (US dry)	kubični meter	0,03524
cord	cubic foot	128
kubični centimeter	cubic foot	$3,532 \times 10^{-5}$
kubični centimeter	gallon	$2,6417 \times 10^{-4}$
kubični centimeter	ounce (US fluid)	0,03381
kubični centimeter	quart (US fluid)	0,0010567
cubic foot	bushel	0,8036
cubic foot	kubični centimeter	28317
cubic foot	kubični meter	0,028317
cubic foot	cubic yard	0,03704
cubic foot	gallon	7,481
cubic foot	liter	28,316
cubic inch	kubični meter	$1,6387 \times 10^{-5}$
cubic yard	kubični meter	0,76456
gallon (US liquid)	barrel (US liquid)	0,03175
gallon	kubični meter	0,003785
gallon	cubic foot	0,13368
gallon	gallon (imperial)	0,8327
gallon	liter	3,785
gallon	ounce (US fluid)	128
liter	cubic foot	0,03532
liter	kubični meter	0,001
liter	gallon	0,26418
mililiter	kubični centimeter	1
minim (US)	kubični centimeter	0,06161
ounce (US fluid)	kubični meter	$2,957 \times 10^{-5}$
pint (US liquid)	kubični meter	$4,732 \times 10^{-4}$
quart (US liquid)	kubični meter	$9,464 \times 10^{-4}$
ton (British shipping)	cubic foot	42
ton (US shipping)	cubic foot	40

8.4 Temperatura

iz enote	Da pretvoriš v enoto	Vstavi temperaturo v izraz
°C	K	$T/K = t/^{\circ}\text{C} + 273,15$
°F	K	$T/K = \left(\frac{5}{9}\right)(t/^{\circ}\text{F} + 459,67)$
°R	K	$T/K = \left(\frac{5}{9}\right)T/^{\circ}\text{R}$
K	°C	$t/^{\circ}\text{C} = T/K - 273,15$
°F	°C	$t/^{\circ}\text{C} = \left(\frac{5}{9}\right)(t/^{\circ}\text{F} - 32)$
°R	°C	$t/^{\circ}\text{C} = \left(\frac{5}{9}\right)T/^{\circ}\text{R} - 273,15$
K	°F	$t/^{\circ}\text{F} = \left(\frac{9}{5}\right)(T/K - 459,67)$
°C	°F	$t/^{\circ}\text{F} = \left(\frac{9}{5}\right)t/^{\circ}\text{C} + 32$
°R	°F	$t/^{\circ}\text{F} = T/^{\circ}\text{R} - 459,67$
K	°R	$T/^{\circ}\text{R} = \left(\frac{9}{5}\right)T/K$
°C	°R	$T/^{\circ}\text{R} = \left(\frac{9}{5}\right)(t/^{\circ}\text{C} + 273,15)$
°F	°R	$T/^{\circ}\text{R} = t/^{\circ}\text{F} + 459,67$

$$0^{\circ}\text{C} = 32,2^{\circ}\text{F} = 273,15\text{K} = 491,67^{\circ}\text{R}$$

8.5 Tlak

Da pretvoriš iz	v	pomnoži z
atmosfera	milimeter Hg (pri 32 °F)	760
atmosfera	dyn per square centimeter	$1,0133 \times 10^6$
atmosfera	newton na kvadratni meter	101325
atmosfera	foot of H ₂ O (pri 39,2 °F)	33,9
atmosfera	gram na kvadratni centimeter	1033,3
atmosfera	inch of Hg (pri 32 °F)	29,921
atmosfera	pound per square foot	2116,3
atmosfera	pound per square inch	14,696
bar	atmosfera	0,9869
bar	newton na kvadratni meter	100000
bar	pound per square inch	14,504
centimeter Hg (pri 0 °C)	atmosfera	0,013158
centimeter Hg (pri 0 °C)	foot of H ₂ O (pri 39,2 °F)	0,4460
centimeter Hg (pri 0 °C)	newton na kvadratni meter	1333,22
centimeter Hg (pri 0 °C)	pound per square foot	27,845
centimeter Hg (pri 0 °C)	pound per square inch	0,19337
centimeter H ₂ O (pri 4 °C)	newton na kvadratni meter	98,064
foot of H ₂ O (pri 39,2 °F)	newton na kvadratni meter	2989
gram na kvadratni centimeter	pound per square foot	2,0482
gram na kvadratni centimeter	pound per square inch	0,014223
inch of Hg (pri 60 °F)	newton na kvadratni meter	3376,9
inch of H ₂ O (pri 60 °F)	newton na kvadratni meter	248,84
inch of Hg (pri 60 °F)	newton na kvadratni meter	3386,389
inch of H ₂ O (pri 39,2 °F)	newton na kvadratni meter	249,082
kilogram na kvadratni centimeter	pound per square inch	14,223
pound-force per square foot	newton na kvadratni meter	47,88
milimeter Hg (pri 0 °C)	newton na kvadratni meter	133,32
milibar	newton na kvadratni meter	100
pascal	newton na kvadratni meter	1
pound per square foot	atmosfera	$4,725 \times 10^{-4}$
pound per square foot	kilogram na kvadratni meter	4,882
pound per square inch	atmosfera	0,06805
pound per square inch	kilogram na kvadratni centimeter	0,07031
pound per square inch	newton na kvadratni meter	6894,8
torr (pri 0 °C)	newton na kvadratni meter	133,322

8.6 Energija

Da pretvoriš iz	v	pomnoži z
B.t.u.	kalorija	252
B.t.u.	centigrade heat unit	0,55556
B.t.u.	foot pound	777,9
B.t.u.	horsepower hour	$3,929 \times 10^{-4}$
B.t.u.	joule	1055,10
B.t.u.	liter atmosfera	10,41
B.t.u.	cubic foot atmosphere	0,3676
B.t.u.	kilowatt-ura	$2,930 \times 10^{-4}$
kalorija	B.t.u.	$3,968 \times 10^{-3}$
kalorija	foot pound	3,087
kalorija	joule	4,1868
kalorija	liter atmosfera	$4,130 \times 10^{-2}$
kalorija	horsepower hour	$1,559 \times 10^{-6}$
centigrade heat unit	B.t.u.	1,8
erg	joule	$1,0 \times 10^{-7}$
elektron volt	joule	$1,60210 \times 10^{-19}$
cubic foot atmosphere	foot pound	2116,3
cubic foot atmosphere	liter atmosfera	28,316
foot poundal	B.t.u.	$3,995 \times 10^{-5}$
foot poundal	joule	0,04214
foot poundal	liter atmosfera	$4,159 \times 10^{-4}$
foot pound	B.t.u.	0,0012856
foot pound	kalorija	0,3239
foot pound	foot poundal	32,174
foot pound	horsepower hour	$5,051 \times 10^{-7}$
foot pound	kilowatt-ura	$3,766 \times 10^{-7}$
foot pound	liter atmosfera	0,013381
foot pound-force	joule	1,3558
joule (abs)	B.t.u. (poprečna)	$9,480 \times 10^{-4}$
joule (abs)	kalorija (poprečna)	0,2389
joule (abs)	cubic foot atmosphere	0,3485
joule (abs)	foot pound	0,7376
joule (abs)	kilowatt-ura	$2,7778 \times 10^{-7}$
joule (abs)	liter atmosfera	0,009869
kilokalorija	joule	4186,80
kilokalorija	kilowatt-ura	0,0011626
kilowatt-ura	B.t.u.	3414
kilowatt-ura	foot pound	$2,6552 \times 10^6$
liter atmosfera	cubic foot atmosphere	0,03532
liter atmosfera	foot pound	74,74
centigrade heat unit	B.t.u.	1,8
watt-ura	joule	3600

8.7 Splošna plinska konstanta

Vrednost <i>R</i>	Enota za					
	<i>R</i>	<i>T</i>	<i>p</i>	<i>V</i>	<i>n</i>	energijo
1,9872	cal/(mol K)	K	–	–	mol	cal
8,31434	J/(mol K)	K	Pa=N/m ²	m ³	mol	J
8,3130	J/(mol K)	K	Pa	m ³	mol	J (int)
8,31434×10 ⁷	erg/(mol K)	K	N/dm ²	mm ³	mol	erg
82,057	cm ³ atm/(mol K)	K	atm	cm ³	mol	atm cm ³
0,082057	(L atm)/(mol K)	K	atm	L	mol	atm L
62,361	mmHg L/(mol K)	K	mmHg	L	mol	mmHg L
0,08314	bar L/(mol K)	K	bar	L	mol	bar L
0,08478	(kg/cm ² L)/(mol K)	K	kg/cm ²	L	mol	kg/cm ² L
8314,34	J/(kmol K)	K	Pa=N/m ²	m ³	kmol	J
8314,34	m ³ Pa/(kmol K)	K	Pa	m ³	kmol	J
8314,34	kg m ² /(s ² kmol K)	K	Pa=kg/(m s ²)	m ³	kmol	J=kg m ² /s ²
0,082057	m ³ atm/(kmol K)	K	atm	m ³	kmol	atm m ³
6,319	cmHg m ³ /(kmol K)	K	cmHg	m ³	kmol	cmHg m ³
1,314	atm ft ³ /(lbmol K)	K	atm	ft ³	lbmol	atm ft ³
998,9	mmHg ft ³ /(lbmol K)	K	mmHg	ft ³	lbmol	mmHg ft ³
1,9872	chu ali pcu/(lbmol K)	K	–	–	lbmol	chu ali pcu
1,9872	Btu/(lbmol °R)	°R	–	–	lbmol	Btu
1545,3	ft lbf/(lbmol °R)	°R	–	–	lbmol	ft lb _f
0,0007805	hp hr/(lbmol °R)	°R	–	–	lbmol	hp hr
0,0005819	kw hr/(lbmol °R)	°R	–	–	lbmol	kw hr
0,7302	atm ft ³ /(lbmol °R)	°R	atm	ft ³	lbmol	atm ft ³
21,85	inHg ft ³ /(lbmol °R)	°R	inHg	ft ³	lbmol	inHg ft ³
555,0	mmHg ft ³ /(lbmol °R)	°R	mmHg	ft ³	lbmol	mmHg ft ³
10,731	lb ft ³ /(in ² lbmol °R)	°R	lb/in ²	ft ³	lbmol	lb ft ³ /in ²
10,731	ft ³ lbf/(in ² lbmol °R)	°R	lbf/in ²	ft ³	lbmol	lbf/in ² ft ³
10,731	psi ft ³ /(lbmol °R)	°R	psi	ft ³	lbmol	psi ft ³
1545,0	ft lb/(lbmol °R)	°R	lb/ft ² _{abs}	ft ³	lbmol	ft lb

9 PERIODNI SISTEM ELEMENTOV¹⁰

Periodni sistem elementov

I		II		III	IV	V	VI	VII	VIII	
1,01 H 1	6,94 Li 3	9,01 Be 4	23,0 Na 11	24,3 Mg 12	10,8 B 5	12,0 C 6	14,0 N 7	16,0 O 8	19,0 F 9	20,2 Ne 10
39,1 K 19	85,5 Rb 37	87,6 Sr 38	39,1 K 19	40,1 Ca 20	27,0 Al 13	28,1 Si 14	31,0 P 15	32,1 S 16	35,5 Cl 17	39,9 Ar 18
39,1 K 19	85,5 Rb 37	87,6 Sr 38	45,0 Sc 21	40,1 Ca 20	69,7 Ga 31	72,6 Ge 32	74,9 As 33	79,0 Se 34	83,8 Kr 36	83,8 Kr 36
85,5 Rb 37	88,9 Y 39	87,6 Sr 38	88,9 Y 39	91,2 Zr 40	65,4 Zn 30	69,7 Ga 31	74,9 As 33	79,0 Se 34	83,8 Kr 36	83,8 Kr 36
133 Cs 55	137 Ba 56	137 Ba 56	139 La 57	178 Hf 72	114 In 49	115 In 49	122 Sb 51	128 Te 52	131 Xe 54	131 Xe 54
(223) Fr 87	(226) Ra 88	(226) Ra 88	(227) Ac 89	(261) Rf 104	201 Hg 80	204 Tl 81	209 Pb 82	(209) Po 84	(222) Rn 86	(222) Rn 86
					108 Pd 46	108 Pd 46	108 Pd 46	108 Pd 46	108 Pd 46	108 Pd 46
					109 Mt 109	109 Mt 109	109 Mt 109	109 Mt 109	109 Mt 109	109 Mt 109
					110 Ds 110	110 Ds 110	110 Ds 110	110 Ds 110	110 Ds 110	110 Ds 110
					(272) Rg 111	(272) Rg 111	(272) Rg 111	(272) Rg 111	(272) Rg 111	(272) Rg 111
					159 Tb 65	159 Tb 65	159 Tb 65	159 Tb 65	159 Tb 65	159 Tb 65
					165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67
					169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69
					173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70
					175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71
					(252) Es 99	(252) Es 99	(252) Es 99	(252) Es 99	(252) Es 99	(252) Es 99
					(251) Cf 98	(251) Cf 98	(251) Cf 98	(251) Cf 98	(251) Cf 98	(251) Cf 98
					(247) Bk 97	(247) Bk 97	(247) Bk 97	(247) Bk 97	(247) Bk 97	(247) Bk 97
					(243) Am 95	(243) Am 95	(243) Am 95	(243) Am 95	(243) Am 95	(243) Am 95
					(244) Pu 94	(244) Pu 94	(244) Pu 94	(244) Pu 94	(244) Pu 94	(244) Pu 94
					(237) Np 93	(237) Np 93	(237) Np 93	(237) Np 93	(237) Np 93	(237) Np 93
					(238) U 92	(238) U 92	(238) U 92	(238) U 92	(238) U 92	(238) U 92
					(237) Pm 61	(237) Pm 61	(237) Pm 61	(237) Pm 61	(237) Pm 61	(237) Pm 61
					(145) Pm 61	(145) Pm 61	(145) Pm 61	(145) Pm 61	(145) Pm 61	(145) Pm 61
					150 Sm 62	150 Sm 62	150 Sm 62	150 Sm 62	150 Sm 62	150 Sm 62
					152 Eu 63	152 Eu 63	152 Eu 63	152 Eu 63	152 Eu 63	152 Eu 63
					157 Gd 64	157 Gd 64	157 Gd 64	157 Gd 64	157 Gd 64	157 Gd 64
					163 Dy 66	163 Dy 66	163 Dy 66	163 Dy 66	163 Dy 66	163 Dy 66
					165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67	165 Ho 67
					169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69	169 Tm 69
					173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70	173 Yb 70
					175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71	175 Lu 71
					(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103
					(259) No 102	(259) No 102	(259) No 102	(259) No 102	(259) No 102	(259) No 102
					(258) Md 101	(258) Md 101	(258) Md 101	(258) Md 101	(258) Md 101	(258) Md 101
					(257) Fm 100	(257) Fm 100	(257) Fm 100	(257) Fm 100	(257) Fm 100	(257) Fm 100
					(255) Ds 109	(255) Ds 109	(255) Ds 109	(255) Ds 109	(255) Ds 109	(255) Ds 109
					(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103	(262) Lr 103

kovine
 nekovine
 polkovine

relativna atomska masa
simbol
 vrstno število

Lantanoidi

Aktinoidi

10 LITERATURA

1. S. Oreški, *Računalništvo v kemiji, Naloge za računalniške vaje z rešitvami*, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Maribor, 2012, <http://atom.uni-mb.si/stud/egradiva>
2. M. Krajnc, *Računalništvo v kemiji*, zbrano gradivo za študijsko leto 2011/2012, FKKT Univerze v Mariboru, dostopno na portalu MOODLE pri predmetih Računalništvo v kemiji in Procesno računanje I.
3. SmartDraw.com, *Getting Started with SmartDraw*, San Diego, 2005.
4. P. Glavič, *Mednarodni sistem merskih enot in znakov*, 2. popravljena in dopolnjena izdaja, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Maribor, 1997.
5. P. Glavič, *Veličine in enote SI (Système International)*, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Maribor, 2001.
6. M. Drofenik, *Zbrana gradiva iz splošne in anorganske kemije*, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Maribor, 1999.
7. R. C. Reid, J. M. Prausnitz in B. E. Poling, *The Properties of Gases and Liquids*, Fourth Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 1987.
8. B. E. Poling, J. M. Prausnitz in J. P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, Fifth Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 2001.
9. H. R. Perry in D. W. Green, *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, Seventh Edition, McGraw-Hill, New York, 1997.
10. <http://vedez.dzs.si/dokumenti/dokument.asp?id=636>, *Periodni sistem elementov*.

