

## 중등 과학 영재교육에서의 인공지능 활용 탐구 사례 연구: 기체의 압력과 부피 관계 심화 탐구를 통하여

강병훈<sup>1</sup> · 강세은<sup>2</sup> · 김수찬<sup>2</sup> · 김찬희<sup>3</sup> · 오윤준<sup>2</sup> · 장일우<sup>4</sup> · 김유진<sup>5</sup> · 박종호<sup>5,6\*</sup>

<sup>1</sup>전주서신중학교, 전주 54950, <sup>2</sup>전라중학교, 전주 55146

<sup>3</sup>전주온빛중학교, 전주 54862, <sup>4</sup>원광중학교, 익산 54547

<sup>5</sup>전북대학교 사범대학 과학교육학부, 전주 54896, <sup>6</sup>전북대학교 융합과학연구소, 전주 54896

### A Case Study on the Utilization of Artificial Intelligence in Secondary Science Gifted Education: Through an In-depth Inquiry into the Pressure-Volume Relationship of Gases

Byung-Hoon Kang<sup>1</sup>, Se-Un Kang<sup>2</sup>, Suchan Kim<sup>2</sup>, Chan Hui Kim<sup>3</sup>, Yun Jun Oh<sup>2</sup>, Ilwoo Jang<sup>4</sup>, Yujin Kim<sup>5</sup>, and Jong-Ho Park<sup>5,6\*</sup>

<sup>1</sup>Jeonju Seosin Middle School, Jeonju 54950, Korea

<sup>2</sup>Jeolla Middle School, Jeonju 55146, Korea

<sup>3</sup>Jeonju Onbit Middle School, Jeonju 54862, Korea

<sup>4</sup>Wonkwang Middle School, Iksan 54547, Korea

<sup>5</sup>Division of Science Education, Jeonbuk National University, Jeonju 54896, Korea

<sup>6</sup>Institute of Fusion Science, Jeonbuk National University, Jeonju 54896, Korea

**초 록:** 본 연구는 중등 과학 실험에서 흔히 다루는 보일의 법칙(Boyle's Law) 실험에서 관찰되는 실제 기체의 비 이상적 거동을 정량적으로 분석하고, 이를 설명하기 위해 생성형 인공지능(ChatGPT)을 도구로 활용한 탐구 사례를 제시한다. 질소(N<sub>2</sub>)와 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)를 이용한 압력-부피 측정 실험 결과, 두 기체 모두 보일의 법칙에 따른 이론 값보다 높은 압력을 나타내며 이상기체 거동에서 벗어나는 현상을 보였다. 이러한 편차는 기체 분자 간 상호작용과 분자 자체의 부피를 고려한 반데르발스(van der Waals) 방정식을 통해 설명될 수 있으나, 이는 고차 방정식의 해석을 요구하여 중등 교육과정 수준에서 접근하기 어려운 한계가 있다. 이에 본 연구에서는 ChatGPT를 활용하여 실험 데이터에 대한 곡선 맞춤(Curve Fitting)을 수행, 반데르발스 상수를 도출하고 분자 구조에 따른 상호작용의 차이를 규명하였다. 연구 결과, 도출된 상수값은 문헌값과 유의미한 상관관계를 보였으며, 특히 분자의 크기와 전자 수가 더 많은 이산화탄소가 질소보다 더 큰 분자 간 인력을 가짐을 확인하였다. 본 연구는 인공지능 도구가 복잡한 데이터 해석 과정을 지원함으로써 학생들의 탐구 깊이를 심화시킬 수 있음을 시사한다.

**중심어:** 보일의 법칙, 인공지능, ChatGPT, 반데르발스

\*Corresponding Author: Jong-Ho Park

Phone: +82-(0)63-270-2814

E-mail: proton@jbnu.ac.kr



All the content in Journal of Science & Science Education(JSSE) is Open Access, meaning it is accessible online to everyone, without fee and authors' permission. All JSSE content is published and distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). Under this license, the authors retain full ownership of their work, while permitting anyone to use, distribute, and reproduce the content in any medium, as long as the original authors and source are cited. For any reuse, redistribution, or reproduction of a work, users must clarify the license terms under which the work was produced.

**Abstract:** This study presents an inquiry case utilizing generative artificial intelligence (ChatGPT) to quantitatively analyze the non-ideal behavior of real gases observed in Boyle's Law experiments, a common topic in secondary science education. Pressure-volume measurements of nitrogen ( $N_2$ ) and carbon dioxide ( $CO_2$ ) revealed that both gases exhibited pressures higher than the theoretical values predicted by Boyle's Law, demonstrating a clear deviation from ideal gas behavior. Although such deviations can be explained by the van der Waals equation—which accounts for intermolecular interactions and finite molecular volume—applying this model in secondary education is challenging due to the mathematical complexity of solving high-order equations. To overcome this educational barrier, this study employed ChatGPT to perform curve fitting on the experimental data, thereby deriving van der Waals constants and elucidating differences in intermolecular interactions based on molecular structure. The derived constants showed a significant correlation with literature values; specifically, it was confirmed that carbon dioxide, with its larger molecular size and greater number of electrons, exhibits stronger intermolecular attraction than nitrogen. These findings suggest that AI tools can effectively support complex data interpretation processes, thereby deepening students' scientific inquiry capabilities beyond the limitations of traditional calculation methods.

**Keywords:** Boyle's Law, Artificial Intelligence, ChatGPT, van der Waals

## I. 서 론

지구의 일반적인 환경에서 대부분의 물질은 서로 다른 세 가지 상태인 고체, 액체, 기체 중 하나로 존재하며 온도나 압력이 변하면 상태도 변할 수 있다. 기체는 액체나 고체에 비해 분자 사이의 거리가 멀어 분자 사이의 상호작용이 매우 작다. 이때문에 기체는 같은 양의 액체와 고체에 비해서 부피가 크고 밀도가 작다. 또한 부피가 일정하지 않아 용기에 따라 부피와 모양이 달라지며, 외부에서 압력을 가하면 쉽게 압축되어 부피가 줄어든다. 뿐만 아니라 온도가 높아지면 기체 분자의 운동에너지가 높아져서 부피와 압력이 증가한다. 따라서 고체와 액체와는 달리 기체는 압력과 부피, 그리고 온도의 변화에 민감하며 서로 밀접한 관계가 있다.

17세기에 보일은 압력과 부피는 반비례 관계에 있다는 것을 밝혀냈다. 즉, 일정한 온도에서, 특정 부피에서 특정 압력을 나타내는 기체의 부피를 증가시키면 압력이 감소하며 그 역도 성립한다. 단순한 반비례 관계뿐만 아니라, 각 상태에서 부피와 압력의 곱은 일정한데, 부피를 변화시키기 전의 부피와 압력의 곱과, 부피를 변화시킨 후의 새로운 부피와 압력의 곱은 같다는 것이다. 이를 '보일의 법칙(Boyle's law)'이라고 한다. 18세기에는 샤를이 온도와 부피는 정비례 관계에 있음을 알아내었다. 따라서 온도가 증

가하면 기체의 부피가 증가하고 온도가 감소하면 부피도 감소한다. 이를 '샤를의 법칙(Charles's law)'라고 한다. 보일의 법칙과 샤를의 법칙은 고체나 액체에는 적용할 수 없고 기체에만 적용되는 법칙이다.

보일의 법칙과 샤를의 법칙은 중고등학교의 과학 시간에서 다루어지고 있다[1,2]. 특히 보일의 법칙은 간단한 감압 실험으로 체험할 수 있는데, 큰 용기에 적당히 부풀린 풍선을 넣고 뚜껑을 닫은 후 용기의 공기를 빼내어 압력을 낮추면 풍선이 크게 부풀다. 또한 잠수부가 물속에서 내뿜은 공기 방울이 수면으로 올라갈수록 크기가 커지는 것도 보일의 법칙의 예이다. 그러나 이런 실험이나 현상은 정성적인 것으로서 압력과 부피가 서로 반비례한다는 사실만 알아낼 수 있다. 압력 변화에 따른 부피 변화, 또는 반대로, 부피 변화에 따른 압력 변화를 측정하는 정량적인 실험을 수행한다면 부피와 압력의 곱은 일정하다는 것을 추가로 알아낼 수 있을 것으로 예상된다. 그러나 중고등학교의 실험실에서는 압력을 정확하게 측정하는 것에 한계가 있으므로 이러한 정량적인 실험보다는 정성적인 관계를 알아내는 것에 만족하고 있다.

따라서 정밀한 실험을 수행하여 서로 다른 두 상태의 부피와 압력을 측정하고 그 곱을 구하여 비교해 보는 것은 보일의 법칙을 알아보고, 나아가서 기체의 특성을 이해하는데 필요하다. 그런데 만약 서로 다른 두 상태의 부피와 압력의 곱이 일정하지 않고 약간의

차이가 발생한다면 이것은 무엇을 의미하는지, 그리고 그 차이는 무엇 때문에 발생하는지를 알아볼 필요가 있다.

이상기체는 기체의 분자 간 상호작용을 무시하고, 분자 자체의 부피도 무시할 수 있다는 가정을 통해 기체의 거동을 이상적으로 설명하는 모델이다. 이상기체는 온도와 압력에 관계없이 항상 이상적인 거동을 보이며, 이를 설명하는 방정식이 이상기체 상태방정식이다. 이 방정식은 식 (1)와 같이 주어진다[3].

$$PV = nRT \quad (1)$$

여기서  $R$ 은 기체상수로서  $8.317 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ 이고  $T$ 는 절대온도(K)를 나타낸다. 이 식은 기체의 압력, 부피, 온도 간의 관계를 설명하며, 기체가 높은 온도나 낮은 압력 조건에서 이상기체와 가깝게 행동할 때 매우 유용하게 적용된다. 이상기체 모델의 핵심 가정은 두 가지이다. 첫째, 기체 분자 사이에는 상호작용(인력이나 반발력)이 없다는 가정이다. 즉, 분자들이 서로 간섭 없이 독립적으로 운동한다고 본다. 둘째, 기체 분자의 부피는 매우 작아서 무시할 수 있다는 가정이다. 즉, 기체 분자는 점과 같으며 크기나 부피가 없다. 이러한 가정 덕분에 이상기체 방정식은 매우 간단하며, 기체의 물리적 거동을 예측하는 데 유용하다.

그러나 현실에서 모든 기체는 어느 정도 분자 사이의 상호작용을 가지며 분자의 크기도 완전히 무시할 수 없다. 따라서 기체가 낮은 온도나 높은 압력에서 이상기체 방정식에서 벗어난 거동을 보인다. 이런 경우에는 실제 기체의 상호작용을 반영하여 식 (2)와 같은 반데르발스(Van der Waals) 방정식과 같은 수정된 모델이 필요하다[4].

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT \quad (2)$$

여기서  $a$ 는 분자 간 인력을 나타내는 상수로서 단위는  $\frac{\text{atm}\cdot\text{m}^3}{\text{mol}^2}$  이고,  $b$ 는 분자 자체의 부피를 고려한 상수로서 단위는  $\frac{\text{L}}{\text{mol}}$  이다. 이 상수들은 각 기체의 특성에 따라 다르다.

본 연구에서는 기체 상태의 질소와 이산화탄소를 일정 부피의 용기에 포집을 한 후 이때의 압력을 정확히 측정하고 기체의 부피를 변화시켜 변화된 압력을 다시 측정함으로써 보일의 법칙이 성립하는지를 알아본다. 뿐만 아니라 부피 변화 전과 후의, 부피와 압력의 곱을 비교한다. 이를 위해서, 기체를 용기에 포집하기 위한 장치와 기체의 부피를 변화시키며 압력을 측정할 수 있는 특수한 목적의 진공 장치를 직접 제작한다. 이 연구를 통해 실제 기체를 이루는 분자 사이의 상호작용이 어떻게 작용하는지를 탐구하고, 나아가 물질의 세 가지 상태 중 하나인 기체에 대한 이해도를 높인다. 또한 중학생 수준에서 해결할 수 없는 고차원의 계산 문제에 대해서 생성형 인공지능인 ChatGPT를 활용함으로써 과학 분야에서 인공지능의 활용 가능성에 대해 알아보려고 한다.

## II. 연구방법

### 2.1. 기체 준비용 진공 라인

저장플라스크(SF)에 기체를 준비하기 위한 용도로 진공 라인을 활용한다. 진공라인은 여러 개의 포트가 달린 중심 유리관을 펌프에 연결하여 진공 조건을 유지할 수 있도록 되어 있다. 또한 중심 유리관에는 압력계가 연결되어 있어서 진공라인의 압력을 실시간으로 측정할 수 있다. 각 포트에는 밸브가 달려 있고 이를 통해서 플라스크나 기체통을 연결함으로써 기체통에서 플라스크로 기체를 옮겨 담을 수 있도록 되어 있다.

### 2.2. 기체의 부피에 따른 압력 변화 측정

기체의 부피에 따른 압력 변화 측정을 위한 장치는 그림 1와 같이, 밸브가 달린 저장플라스크 2개, 진공 펌프, 압력 게이지로 구성된다. 테플론 튜브와 튜브 연결 부품을 이용하여 진공펌프, 압력 게이지, 저장 플라스크 연결포트(2개)를 연결한다. 이때 진공펌프에는 밸브를 연결한다. 튜브 연결은 Swagelok의 튜브 연결 방법을 따른다. 밸브(밸브1, 밸브2)가 달린 저장 플라스크(1L 용량의 SF1와 3L 용량의 SF2)를 저장 플라스크 연결포트에 장착하여 장치 구성을 완성한다.

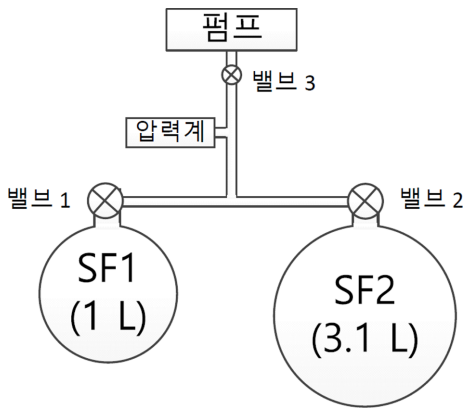


그림 1. 기체의 부피에 따른 압력 변화 측정을 위한 장치의 다이어그램

기체의 부피에 따른 압력 변화를 측정하기 위하여 먼저 밸브 1과 밸브 2를 닫은 후 진공 펌프를 작동시키고 밸브 3을 열어 진공 상태를 조성한다. 이후 밸브 1과 밸브 2를 열어 SF1과 SF2도 진공 상태로 만든다. 압력 측정기에 표시되는 압력값을 확인하며 장치가 최소의 압력이 유지되도록 펌프를 계속 작동시키는데, 더 이상 압력이 내려가지 않는 최소 압력에 도달하면 밸브 2를 닫은 후 밸브 3을 닫아 SF1만을 개방하였을 때의 시간에 따른 압력 변화를 기록한다. 또한 SF1과 SF2를 동시에 개방했을 때의 시간에 따른 압력 변화도 기록한다. 이를 통해 장치가 외부 압력으로부터 충분히 격리되는지를 알아볼 수 있다.

장치의 압력 유지가 확인된 후 질소와 이산화탄소 기체 각각의 부피에 따른 압력 변화를 측정한다. 이를 위해 진공 라인을 이용하여 SF1과 SF2를 진공 상태로 만들고 SF1에만 질소 기체를 약 800 mbar가 되도록 채운다. 이후 SF1과 SF2를 실험 장치의 연결 포트에 연결하고 밸브 3을 열어 실험 장치가 최저 압력에 도달할 때까지 펌프를 작동시킨다. 밸브 3을 닫고 밸브 1만 연 후 압력을 측정한다. 다음 밸브 2를 열고 10분이 지난 후 압력을 측정한다. 이산화탄소 기체에 대해서도 이런 과정을 반복한다.

### 2.3. 인공지능 활용

생성형 인공지능은 OpenAI 사의 ChatGPT 4.0o를 이용하였다. 반데르발스 방정식을 이용한 곡선 맞춤

을 수행하는 것은 중학생 수준에서 한계가 존재한다. 따라서 곡선 맞춤을 직접 수행하는 대신 생성형 인공지능인 ChatGPT를 이용하였다. 즉, ChatGPT에게 실험에 대한 상황을 설명한 후 파이썬 코드를 만들어 계산을 수행시킴으로써  $n$ 과  $a$ 를 계산하였다.

## III. 연구결과

### 3.1. 실험 장치의 압력 유지 상태 확인

실험에 앞서 실험 장치가 실험 결과에 영향을 미치지 않을 정도로 압력을 일정하게 유지할 수 있는지 확인하기 위해 진공 유지 테스트를 진행하였다. 펌프를 이용해 실험 장치 내부의 기체를 최대한 제거하고 압력을 측정 후, 그 압력이 얼마나 유지되는지 확인하는 방식으로 진공 유지 테스트를 수행하였으며 예상 실험 시간의 3배 정도의 시간 동안 압력을 잘 유지할 수 있다면 실험 결과에 큰 영향을 끼치지 못할 것으로 판단해 예상 실험 시간인 10분의 3배인 30분 동안 테스트를 진행하였다. SF1만 개방했을 때, SF1과 SF2를 모두 개방했을 때로 나누어 각각 2번씩 테스트를 진행하였다. 그 결과를 표 1과 2에 정리하였다. 표와 같이 두 번의 테스트에서 각각 0.134 mbar, 0.035 mbar 만큼 압력이 증가하였고 이는 장치에서 외부 기체가 새어들어감(leaking) 때문이다. 기체의 새어들어감은 장치의 봉인이 완벽하지 않기 때문인데, 이것은 실제 실험에서는 피할 수 없는 오차이다. SF1만을 개방했을 때보다 SF1과 SF2를 동시에 개방했을 때의 압력 증가가 작은 이유는 부피가 1L에서 4.1L로 증가하여 같은 양의 기체가 새어들어가도 압력에 기여하는 정도가 작기 때문이다.

진공 유지 테스트의 결과로서 관찰된 기체의 새어

표 1. SF1만을 개방했을 때의 진공 유지 테스트 결과

시간(분)	압력(mbar)	시간(분)	압력(mbar)
0	0.071	10	0.123
1	0.084	13	0.136
2	0.089	15	0.145
4	0.097	20	0.168
6	0.105	25	0.188
8	0.115	30	0.205

표 2. SF1과 SF2를 동시에 개방했을 때의 진공 유지 테스트 결과

시간(분)	압력(mbar)	시간(분)	압력(mbar)
0	0.069	10	0.088
1	0.079	13	0.091
2	0.080	15	0.092
4	0.083	20	0.096
6	0.084	25	0.100
8	0.085	30	0.104

들어감의 정도는 실험에 쓰일 기체의 압력인 800 mbar의 약 0.02% 수준으로서 매우 미미한 수준이다. 또한 실제 실험에서는 진공 유지 테스트와 같이 진공에 가까운 상태가 아닌 800 mbar 수준에서 진행하고 기체의 새어들어감은 압력차가 클수록 많아지므로 실제 실험에서는 이보다 새어들어감이 적을 것으로 예상된다. 따라서 실험 장치의 봉인이 완벽하지 않은 것 때문에 발생하는 기체의 새어들어감은 실제 실험 결과에 영향을 미치지 않을 수준이라고 판단할 수 있다.

### 3.2. 기체 부피 변화에 따른 압력 변화 관찰

실험 장치는 부피가 각각 1L와 3.1L인 저장플라스크 SF1과 SF2로 이루어져 있다. 플라스크와 압력 게이지, 펌프를 연결하는 진공 호스와 밸브가 추가로 부피를 차지한다. 그러나 이 부피는 0.015L로 계산되므로 플라스크의 부피에 비해 상당히 작아서 무시할 수 있다. 따라서 SF1에 기체가 들어 있을 때의 부피는 1L이며 SF2를 개방하여 기체가 SF1과 SF2를 차지할 때의 부피는 4.1L이다. 질소와 이산화탄소에 대하여, SF1에서의 압력을 측정 한 후, SF2를 개방하여 기체의 최종 부피를 4.1L로 변화시킨 후 압력을 측정하였다. 실험 결과의 신뢰성을 확인하기 위해 각 기체에 대해 두 번의 실험을 수행하였다.

표 3에 보이는 것과 같이, 질소를 SF1에만 채웠을 때의 압력은 811.2mbar이었다. 보일의 법칙을 따른다면, 밸브를 열어 SF1에만 있었던 질소 기체를 SF1 + SF2에 채워 최종 부피가 4.1L로 증가시켰을 때 압력은 식 (3)에서 얻은 것과 같이 197.9 mbar가 될 것으로 예상하였다.

$$P = 81.2\text{mbar} \times \frac{1\text{L}}{4.1\text{L}} = 197.9\text{mbar} \quad (3)$$

하지만 4.1L의 부피에서 측정된 실제 압력은 198.4 mbar로서 보일의 법칙으로 예상된 압력보다 약 0.5 mbar만큼 높았다. 같은 실험을 반복하였을 때 질소 기체의 부피가 1L에서 4.1L로 증가하면 압력은 828.5 mbar에서 202.3 mbar로 감소하였는데, 이 값은 보일의 법칙으로 예상된 압력인 202.1 mbar보다 0.2 mbar만큼 높은 압력이었다.

이산화탄소를 SF1에만 채웠을 때의 압력은 875.4 mbar이었다. 보일의 법칙을 따른다면, 밸브를 열어 SF1에만 있었던 질소 기체를 SF1 + SF2에 채워 최종 부피가 4.1L로 증가시켰을 때 압력은 식 (4)에서 얻은 것과 같이 213.5 mbar가 될 것으로 예상하였다.

$$P = 875.4\text{mbar} \times \frac{1\text{L}}{4.1\text{L}} = 213.5\text{mbar} \quad (4)$$

하지만 4.1L의 부피에서 측정된 실제 압력은 216.0 mbar로서 보일의 법칙으로 예상된 압력보다 약 2.5 mbar만큼 높았다. 같은 실험을 반복하였을 때 이산화탄소 기체의 부피가 1L에서 4.1L로 증가하면 압력은 801.5 mbar에서 198.8 mbar로 감소하였는데, 이 값은 보일의 법칙으로 예상된 압력인 195.5 mbar보다 3.3 mbar 만큼 높은 압력이었다.

실험을 통해 기체의 압력과 부피가 서로 반비례한다는 정성적 결과는 설명되지만, 정량적인 결과를 위해 정밀하게 측정하고 계산된 값에는 보일의 법칙으로 예상된 값과 실제 값에 차이가 있음을 알 수

표 3. 질소와 이산화탄소 기체의 부피 변화에 따른 압력 측정 결과

기체 종류	압력 (mbar)				
	SF1 (부피 1L)	SF1 + SF2 (부피 4.1L)			
		측정값	예상값	(측정값- 예상값)	
N <sub>2</sub>	1	811.2	198.4	197.9	+0.5
	2	828.5	202.3	201.1	+0.2
CO <sub>2</sub>	1	875.4	216.0	213.5	+2.5
	2	801.5	198.8	195.5	+3.3

있다. 그 차이는 질소의 경우, 예상되는 압력 값보다 각각 0.2 mbar, 0.5 mbar 만큼 실제 압력 값이 더 높았고, 이산화탄소의 경우 각각 2.5 mbar, 3.3 mbar 만큼 예상되는 압력 값보다 실제 압력 값이 더 높았다. 또한 질소에 비해 이산화탄소의 차이가 더 컸음을 알 수 있다. 실험 결과와 보일의 법칙으로 예상된 값을 표 3에 정리하였다.

이러한 결과의 원인으로는, 이번 연구에서 사용된 질소와 이산화탄소 기체는 이상기체와 달리 분자들 사이의 상호작용이 존재하기 때문이라고 판단된다. 즉 이상기체가 아닌 실제기체로서 설명해야만 한다.

### 3.3. 반데르발스 방정식에 의한 부피에 따른 압력 변화

실제기체는 이상기체와 달리 분자 사이의 상호작용과 분자의 크기를 고려해야 하는 기체이다. 모든 실제 기체는 분자 사이에 약한 인력(반데르발스 힘)과 반발력이 존재하며, 기체 분자 자체도 일정한 크기를 가지기 때문에 부피를 무시할 수 없다. 이러한 이유로 실제 기체는 이상기체 상태방정식에서 벗어나는 것을 보일 수 있다.

실제 기체를 더 정확하게 설명하기 위해 도입된 방정식인 반데르발스 방정식에서  $\frac{a}{V^2}$  항은 분자 간의 인력을 보정하여 압력을 증가시키는 역할을 한다. 기체 분자들이 차지하는 실제 부피를 고려해야 하기 때문에, 반데르발스 방정식에서는 부피를  $V-b$ 로 보정한다.  $b$ 는 기체 분자가 차지하는 실제 부피를 의미하며, 이 값은 기체의 특성에 따라 달라진다. 반데르발스 방정식은 특히 높은 압력이나 낮은 온도에서 실제 기체의 거동을 보다 정확하게 예측할 수 있다. 반데르발스 방정식은 기체 분자 사이의 상호작용과 분자의 크기를 고려하여 이상기체 방정식의 한계를 보완한다. 또한 기체 분자들 사이의 상호작용이 보일의 법칙에 어떤 영향을 미치는지 알아봄으로써 실제 기체가 어떻게 행동하는지를 이해하는데 도움을 줄 수 있다.

질소와 이산화탄소 기체의 부피 변화에 따른 압력 변화가 보일의 법칙에서 벗어난 것을 관찰하였으므로 이것을 반데르발스 방정식에 의해서 설명해야만 한다. 즉, 이번 연구에서 사용된 질소나 이산화탄소 기체는 분자들 사이의 상호작용이 존재하고( $a \neq 0$ )

분자 자체의 부피가 0도 아니다( $b \neq 0$ ). 특히 반데르발스 방정식을 이용하여 기체 분자 사이의 상호작용을 기술하기 위해서 각 기체의  $a$ 의 값을 구하는 것이 목적이다. 실제기체의 분자 사이의 상호작용의 정도는  $a$ 이다.  $a$ 가 클수록 분자 사이의 상호작용은 크다. 따라서 실험에 의해  $a$ 를 계산하여 구하면 기체 분자 사이의 상호작용의 정도를 알아낼 수 있다.

### 4.4. 생성형 인공지능(ChatGPT)을 이용한 $a$ 계산 방법

실제기체의 분자 사이의 상호작용의 정도인  $b$ 를 구하기 위해서는 기체 분자의 자체 부피인  $b$  알아야 한다.  $b$ 는 극한 환경(낮은 온도나 높은 압력)에서 정밀한 실험이나 높은 수준의 이론적 계산에 의해서 알아낼 수 있으나 이것을 중학생 수준에서 수행하기에는 많은 제한이 있다. 대신에  $b$ 는 액체 또는 고체와 같은 응축상의 밀도를 이용하여 추정 가능하다. 즉 질소는 액체질소의 밀도를, 이산화탄소는 드라이아이스의 밀도를 문헌에서 찾아서 식 (5)과 같이  $b$ 를 추정한다.

$$b = \frac{1mL}{dg} \times \frac{1L}{100mL} \times \frac{Mg}{mol} = \frac{M}{d \times 1000mol} \quad (5)$$

여기서 밀도는  $d \frac{g}{mL}$  이고 화학식량(분자량)은  $M \frac{g}{mol}$  이 사용되었다. 이를 이용하면 질소와 이산화 탄소의  $b$ 값은 각각 0.0347 L/mol과 0.0282 L/mol로 추정할 수 있다.

만약 기체의 몰수( $n$ )를 알고 있으면 압력과 부피 측정을 한 번만 해도 반데르발스 방정식에 의해  $a$ 를 구할 수 있다. 기체의 몰수는 진공 상태인 저장플라스크의 질량을 측정된 후 기체를 채워 넣은 후의 질량을 측정하여 질량 차이를 통해 구할 수 있다. 그러나 본 연구에서 사용한 저울이 측정 가능한 최대 질량의 한계 때문에 기체의 몰수를 구할 수 없다. 따라서  $n$ 과  $a$ 를 실험적으로 동시에 구하기 위해서는 연립방정식을 구해야만 한다.

미지수가 두 개이므로 방정식도 두 개를 얻어야 한다. 그러므로 부피를 변화시키며 그때의 압력을 측정하여 최소 두 점(두 쌍)의 ( $V$ ,  $P$ )를 구한다. 이후 연립방정식을 구해도 되지만 두 점의 ( $V$ ,  $P$ )를 이용하여  $1/V$ 에 대한  $P$ 의 곡선에 대해 곡선 맞춤(curve

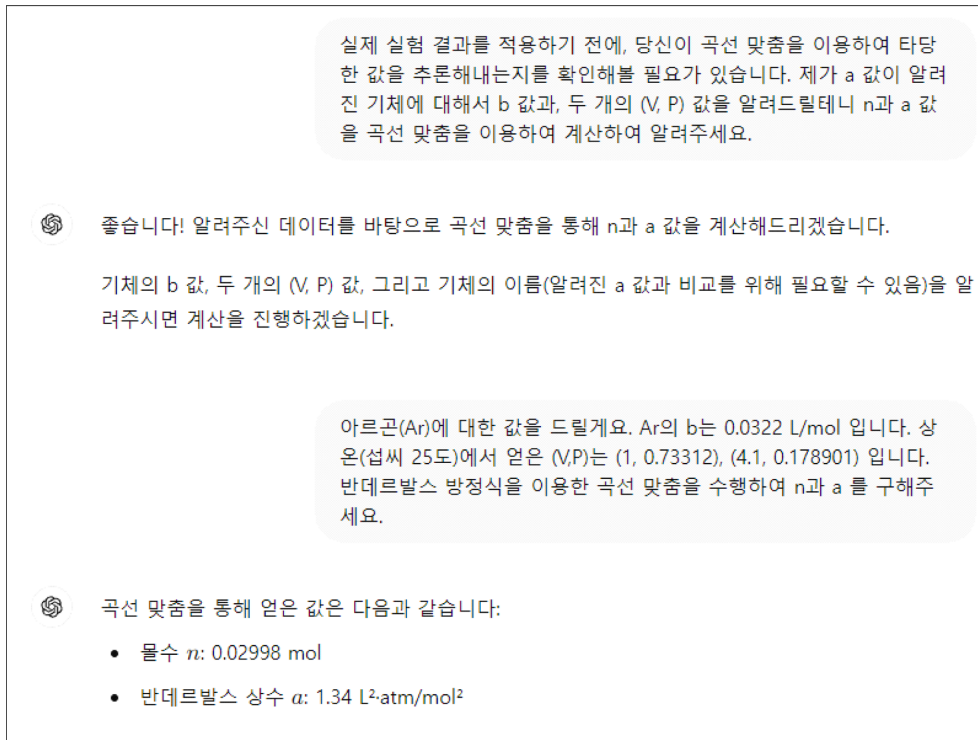


그림 2. 반데르발스 방정식 곡선 맞춤을 위한 ChatGPT 대화 (Ar)

fitting)을 수행하여 두 개의 미지수를 구할 수 있다. 그러나 반데르발스 방정식은 단순한 직선이 아니므로 중학생 수준에서 곡선 맞춤을 수행하는 것에는 한계가 존재한다. 따라서 곡선 맞춤을 직접 수행하는 대신 생성형 인공지능인 ChatGPT를 이용하였다. 즉, ChatGPT에게 실험에 대한 상황을 설명한 후 파이썬 코드를 만들어 계산을 수행시킴으로써 n과 a를 계산하였다.

#### 4.5. ChatGPT를 이용한 a와 b 값 도출의 유효성 검증

인공지능에게 곡선 맞춤을 수행시키기 전에, 인공지능이 높은 신뢰도로 계산을 수행하는지를 먼저 검증하였다. 이를 위해서 새로운 기체인 아르곤(Ar)과 수증기(H<sub>2</sub>O)에 대해서, 이미 알려진 문헌값을 찾아 a와 b를 알아내어 반데르발스 방정식을 완성하고 여기에 가상의 n과 V를 입력하여 P를 얻어내었다. 이렇게 생성된 (V, P)를 이용하여 인공지능인 ChatGPT에게 곡선 맞춤을 시켜 얻어낸 a를 문헌값과 비교하여 그 유효성을 판단한다.

Ar의 a와 b에 대해서 알려진 값(문헌값)은 각각 1.34 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>과 0.0322 L/mol이다. 25°C에서 0.03 mol의 Ar에 대해 문헌값에서 찾은 a와 b를 이용하여 이론적으로 얻은 부피와 압력값인 (V, P)는 (1, 0.73312), (4.1, 0.178901)이다. ChatGPT에게 b값과 두 쌍의 (V, P) 값을 주고 반데르발스 방정식에 대한 곡선 맞춤을 수행하여 a를 구하도록 하였다. ChatGPT와의 대화 중 이와 관련된 내용 일부를 그림 2에 나타내었다(더 자세한 대화 내용은 부록 1에 수록하였다). 또한 ChatGPT가 만든 파이썬 코드를 그림 3에 나타내었다. 또한 반데르발스 곡선 맞춤에 대해서 x축을 부피(V), 또는 부피의 역수(1/V)로 하고 y축을 압력(P)으로 하였을 때의 그래프를 그림 4에 나타내었다.

ChatGPT가 계산한 n과 a는 각각 0.029998 mol과 1.34 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>으로서 (V, P)를 생성시키는데 사용된 n인 0.03 mol과 a의 문헌값인 1.34 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>과 거의 일치하였다.

계산의 유효성 검증을 다시 한 번 더 수행하기 위

```

import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# Given data for Argon
b = 0.0322 # L/mol, Van der Waals constant for Argon
V_data = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters
P_data = np.array([0.73312, 0.178901]) # pressures in atm

# Van der Waals equation in terms of P
def van_der_waals(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b) - (a * n**2) / V**2

# Curve fitting to determine n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

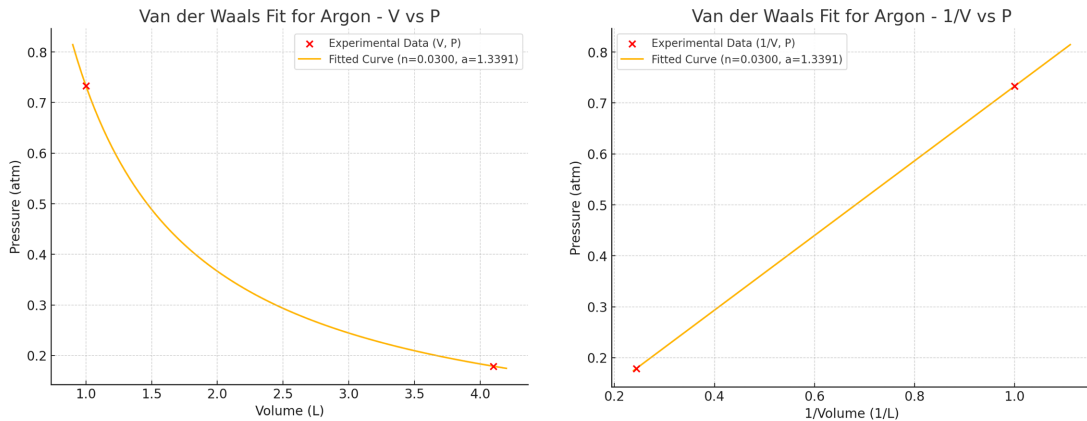
params, covariance = curve_fit(van_der_waals, V_data, P_data, p0=initial_guess)

n_fitted, a_fitted = params

print(f"Fitted n: {n_fitted}")
print(f"Fitted a: {a_fitted}")

```

그림 3. ChatGPT를 이용하여 생성한 파이썬 코드 (Ar)

그림 4. 반데르발스 방정식에 대한 곡선 맞춤 그래프 (Ar). (위)  $V$  대  $P$ , (아래)  $1/V$  대  $P$ 

해  $H_2O$  대해서 같은 과정을 한 번 더 반복하였다.  $H_2O$ 의  $a$ 와  $b$ 에 대해서 알려진 값(문헌값)은 각각  $5.45 \text{ L}^2 \cdot \text{atm}/\text{mol}^2$ 와  $0.0305 \text{ L}/\text{mol}$ 이다.  $25^\circ\text{C}$ 에서  $0.05 \text{ mol}$ 의 Ar에 대해 문헌값에서 찾은  $a$ 와  $b$ 를 이용하여 이론적으로 얻은  $(V, P)$ 는  $(1, 1.210911)$ ,  $(4.1, 0.297517)$ 이다. ChatGPT에게  $b$ 값과 두 쌍의  $(V, P)$  값을 주고 반데르발스 방정식에 대한 곡선 맞춤을 수행하여  $a$

를 구하도록 하였다. 곡선 맞춤 계산을 위한 파이썬 코드, 그리고  $V$ 대  $P$ ,  $1/V$ 대  $P$ 의 곡선 맞춤 그래프를 부록 2에 수록하였다.

그 결과 ChatGPT가 계산한  $n$ 과  $a$ 는 각각  $0.04997 \text{ mol}$ 과  $5.47 \text{ L}^2 \cdot \text{atm}/\text{mol}^2$ 으로서  $(V, P)$ 를 생성시키는데 사용된  $n$ 인  $0.05 \text{ mol}$ 과  $a$ 의 문헌값인  $5.45 \text{ L}^2 \cdot \text{atm}/\text{mol}^2$ 과 거의 일치하였다. ChatGPT의 계산에 대한 유

표 4. ChatGPT의 유효성 검증 자료

		Ar	H <sub>2</sub> O
문헌값	$a$ (L <sup>2</sup> ·atm/mol <sup>2</sup> )	1.34	5.45
	$b$ (L/mol)	0.0322	0.0305
입력값	$n$ (mol)	0.03	0.05
	(V, P)	(1, 0.73312) (4.1, 0.178901)	(1, 1.210911) (4.1, 0.297517)
ChatGPT 계산값	$n$ (mol)	0.029998	0.04997
	$a$ (L <sup>2</sup> ·atm/mol <sup>2</sup> )	1.34	5.47

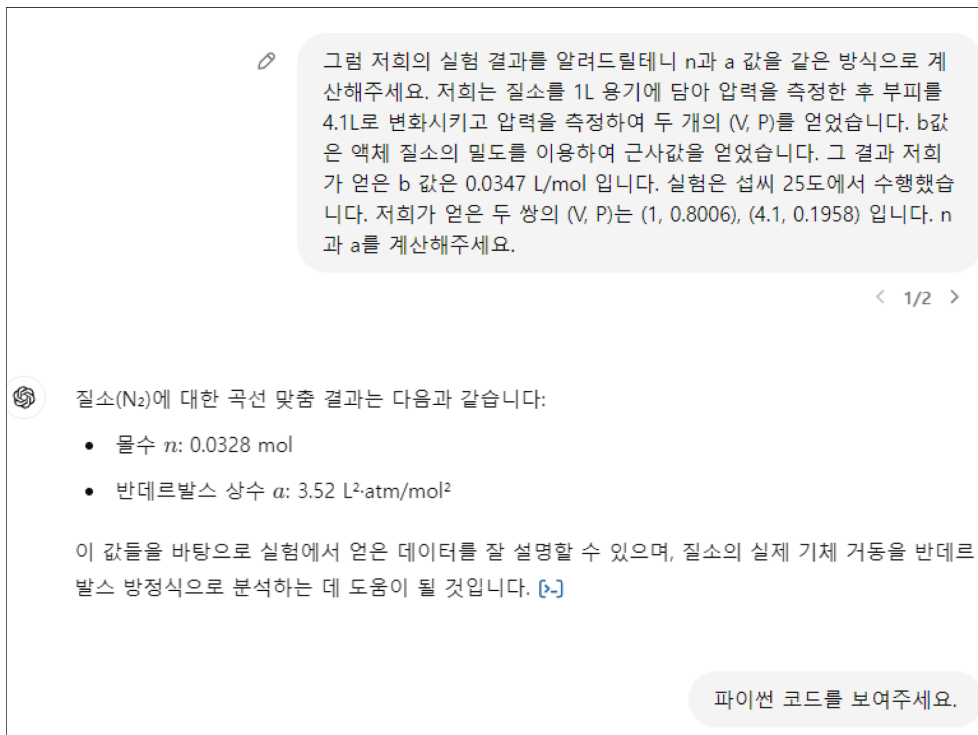


그림 5. 반데르발스 방정식 곡선 맞춤을 위한 ChatGPT 대화 (N<sub>2</sub>)

효성 검증 내용을 표 4에 정리하였다.

이를 통해서 ChatGPT를 이용하여 반데르발스 방정식에 기반한 곡선 맞춤을 수행함으로써 얻는  $a$ 값을 신뢰할 수 있음을 알 수 있다.

#### 4.6. ChatGPT를 이용한 기체 분자 상호작용 척도(a) 도출

ChatGPT를 이용하여 기체 분자 상호작용의 척도인  $a$ 를 도출하였다. 질소에 대한 곡선 맞춤을 위한 ChatGPT와의 대화 내용과 파이썬 코드, 그리고 반데르발스 방정식에 대한 곡선 맞춤 그래프를 각각

그림 5-7에 나타내었다. 또한 질소에 대한 추가 실험과 이산화탄소의 실험에 대한 파이썬 코드와 곡선 맞춤 그래프를 각각 부록 3와 4에 수록하였다.

질소(N<sub>2</sub>)와 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)에 대해 반데르발스 방정식에 기반한 곡선 맞춤을 위해 ChatGPT에게 입력한 자료와 결과값을 표 5에 정리하였다. 또한 두 기체에 대한 문헌값도 나타내었다.

질소에 대한 두 번의 실험 결과로 계산된  $a$ 는 3.52와 2.11 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>이고 이산화탄소에 대한  $a$ 는 11.10과 16.93 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>이었다. 이 결과에 따르면 질소와

```

import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# Given data for Nitrogen (N2)
b_n2 = 0.0347 # L/mol, Van der Waals constant for Nitrogen (approximate
from liquid density)
V_data_n2 = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters for N2
P_data_n2 = np.array([0.8006, 0.1958]) # pressures in atm for N2

# Van der Waals equation for Nitrogen
def van_der_waals_n2(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b_n2) - (a * n**2) / V**2

# Initial guess for n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

# Curve fitting to determine n and a for Nitrogen
params_n2, covariance_n2 = curve_fit(van_der_waals_n2, V_data_n2, P_data_n2,
p0=initial_guess)

n_fitted_n2, a_fitted_n2 = params_n2

print(f"Fitted n: {n_fitted_n2}")
print(f"Fitted a: {a_fitted_n2}")

```

그림 6. ChatGPT를 이용하여 생성한 파이썬 코드 (N<sub>2</sub>)

이산화탄소 기체는 이상기체와는 달리 분자들 사이의 상호작용이 존재함을 알 수 있다. 특히, 기체 분자들 사이의 상호작용은 이산화탄소가 질소보다 상당히 크다고 예상된다.

전자는 한 원자에만 단단히 붙어서 고정된 것이 아니라 분자 전체에 걸쳐서 마치 구름처럼 넓게 분포하고 있다. 그런데 어느 순간 전자가 공교롭게 한 쪽으로 치우치면, 전자는 음전하를 띠므로 그 부분이 순간적으로 음전하를 갖게되고 그 반대쪽은 상대적으로 양전하를 갖는다. 즉, 분자가 자체적으로 양과

음의 전하를 띠는 것이다. 이런 ‘순간쌍극자’가 생기면 그 옆의 분자는 정전기적인 인력에 의해서 비슷한 순간쌍극자가 생기면서 인력이 발생한다. 이런 힘을 ‘분산력’이라고 한다. 이때 분산력은 분자의 전자수가 많을수록, 그리고 분자가 클수록 크게 작용한다[4].

질소는 이산화탄소보다 크기가 작다. 특히 질소는 두 개의 질소 원자 사이에 삼중결합으로 단단하게 연결되어 있어서 원자 사이의 길이가 짧다. 그러나 이산화탄소는 탄소와 산소 원자가 이중결합으로 연결되어 있어서 원자 사이의 거리(C-O)가 길다. 또한

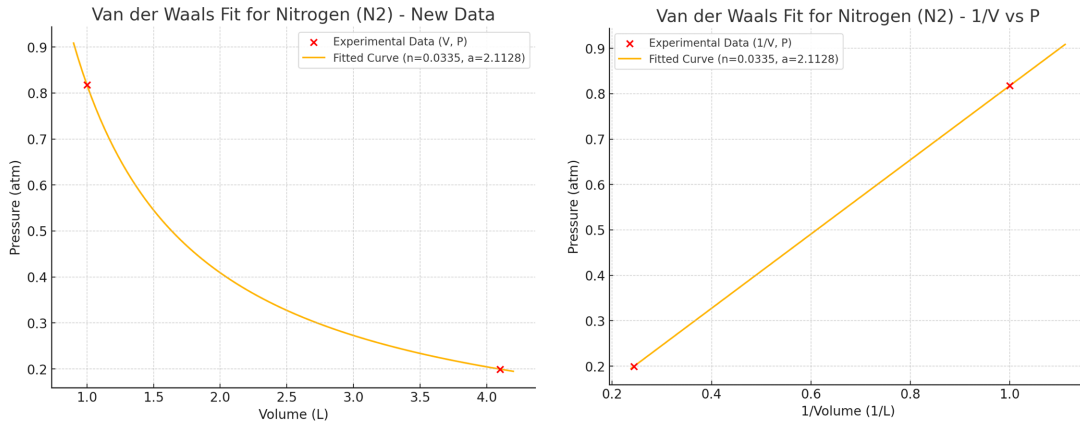


그림 7. 반데르발스 방정식에 대한 곡선 맞춤 그래프 (N<sub>2</sub>). (위) V 대 P, (아래) 1/V 대 P

표 5. ChatGPT 입력값과 계산값

		N <sub>2</sub>		CO <sub>2</sub>	
		0.0347		0.0282	
입력값	b	(1, 0.8006)	(1, 0.8177)	(1, 0.8640)	(1, 0.7910)
	(V, P)	(4.1, 0.1958)	(4.1, 0.1997)	(4.1, 0.2132)	(4.1, 0.1962)
ChatGPT	n	0.0328	0.0335	0.0359	0.0331
계산값	a	3.52	2.11	11.10	16.93
문헌값	a	1.39		3.59	
	b	0.0391		0.0427	

a의 단위 : L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>  
 b의 단위 : L/mol  
 n의 단위 : mol

이산화탄소에는 이런 C-O 결합이 두 개나 있다. 뿐만 아니라 이산화탄소에는 질소보다 훨씬 더 많은 전자가 존재한다. 이에 따라서 이산화탄소는 질소보다 분산력이 클 것으로 예상된다. 이것은 앞에서 a를 통해 예측한 것과 같다.

표 8에는 질소와 이산화탄소에 대한 a의 문헌값이 같이 보여지고 있다. 이에 따르면 본 연구에서 계산한 a값과 문헌값이 정확하게 일치하지는 않는다. 질소는 문헌값보다 2-3배 더 크게 계산되었고, 이산화탄소는 문헌값보다 4-5배 더 작게 계산되었다. 본 연구에서 활용한 압력 게이지의 정확도를 고려했을 때 이와 같은 차이는 크지 않다고 판단된다. 특히 문헌값도 질소보다 이산화탄소의 a가 더 큰 것으로 조사되었는데 이것은 본 연구에서 측정/계산된 값과 일치한다. 따라서 질소와 이산화탄소의 구조를 바탕으로

예상한 기체 분자들 사이의 상호작용이 실제와 일치한다는 걸 알 수 있다.

## V. 결 론

본 연구에서는 질소와 이산화탄소 기체의 부피 변화에 따른 압력 변화를 측정하여 보일의 법칙을 검증하고, 실제 기체의 특성을 분석하였다. 실험 결과, 보일의 법칙에 따른 예상 압력과 실제 측정된 압력 사이에 작은 차이가 존재했으며, 이는 기체 분자 간 상호작용과 분자 자체의 부피를 고려해야만 설명될 수 있었다. 이러한 차이는 반데르발스 방정식을 통해 해석할 수 있었으며 실제 기체의 상호작용이 실험 결과에 미치는 영향을 확인할 수 있었다.

특히, 중학생 수준에서 직접 고차원의 곡선 맞춤이

나 연립방정식을 풀기에는 한계가 있었으나, 생성형 인공지능(ChatGPT)을 활용함으로써 실험 데이터를 기반으로 한 정확한 계산을 수행할 수 있었다. ChatGPT는 기체의 부피와 압력 데이터를 기반으로 반데르발스 방정식의 상수 값을 추정하는 데 사용되었으며, 그 결과 문헌에 기재된 값들과도 높은 일치도를 보였다.

이를 통해 생성형 인공지능의 도구로서의 활용 가능성을 확인하였고, 실제 기체의 분자 간 상호작용에 대한 심도 있는 분석이 가능했다. 이번 연구는 과학 교육에서 인공지능을 활용하여 복잡한 계산을 처리할 수 있는 가능성을 제시하며, 앞으로의 기체 연구 및 교육에 중요한 기초 자료로 활용될 수 있을 것이다.

## 감사의 글

이 연구는 전북대학교 과학영재교육원의 지원을 받아 수행되었으며, 본 논문은 2024학년도 전북대학교 과학영재교육원 중등화학 사사과정 연구 산출물을 수정·보완한 것임을 밝힙니다.

## 참고문헌

- [1] “중등 중학교 교과서 과학 1”, 미래엔, 2021.
- [2] “중학교 과학 1”, 비상, 2021.
- [3] “고등학교 화학 II”, 천재교육, 2017.
- [4] S. S. Zumdahl, S. A. Zumdahl, D. J. DeCoste, “일반화학”, 제10판, CENGAGE, Seoul, 2019.

## [부록 1] 곡선 맞춤 계산을 위한 ChatGPT와의 대화 내용 (일부 발췌)

(이후 7페이지)

당신은 이제부터 물리학자입니다.

알겠습니다! 저는 이제부터 물리학자로서 도움을 드리겠습니다. 물리학과 관련된 어떤 질문이나 논의가 있으시면 언제든지 말씀해 주세요!

저는 이상기체(ideal gas)와 실제기체(real gas)의 차이를 알아보기 위해 실제기체의 부피를 변화시키며 압력을 측정하였습니다. 이상기체라면 보일의 법칙(boyle's law)을 만족시켜야 하므로 같은 온도에서 부피를 변화시키며 압력을 측정하면 부피와 압력의 곱이 항상 일정해야 합니다. 하지만 실제로 부피를 증가시킨 후 압력을 측정해보니 보일의 법칙으로 예상된 압력보다 약간 높았습니다. 이것은, 저희가 실험한 기체가 이상기체가 아닌 실제 기체이기 때문이라고 결론지었습니다. 그래서 이상기체에 적용되는 이상기체상태방정식 대신에, 실제 기체에 적용되는 반데르발스 방정식을 이용하여 이것을 설명해야 한다고 생각합니다. 당신은 이것을 어떻게 생각하시는지요?

메모리 업데이트됨

당신의 접근은 매우 타당합니다. 이상기체는 분자 간 인력이 없고, 분자의 부피를 무시할 수 있다고 가정하므로, 보일의 법칙을 포함한 이상기체 방정식에서 부피와 압력의 곱이 일정하게 유지됩니다. 하지만 실제 기체에서는 분자 간의 인력과 분자 자체의 부피가 무시될 수 없습니다. 이 때문에 실제 기체의 거동은 이상기체 방정식으로 설명되지 않는 경우가 많습니다.

실험에서 예상된 압력보다 측정된 압력이 더 높았다는 점은 분자 간의 인력이 충분히 큰 역할을 한다는 신호일 수 있습니다. 특히, 부피가 커질 때 분자 간의 거리가 멀어지면서 인력이 약해지고, 그 결과 반데르발스 방정식의 수정항이 압력에 영향을 줄 수 있습니다.

반데르발스 방정식은 실제 기체의 두 가지 중요한 요소를 고려합니다:

1. 분자 간의 인력 (**a 항**): 분자들이 서로 끌어당기므로, 실제 기체는 이상기체보다 압력이 더 낮을 수 있습니다.
2. 분자의 부피 (**b 항**): 실제로는 분자가 일정한 부피를 차지하기 때문에, 사용 가능한 부피는 이상기체보다 작습니다.

따라서, 반데르발스 방정식을 사용하여 실험 결과를 분석하면, 이상기체 상태방정식에서 설명할 수 없는 실제 기체의 거동을 더 잘 설명할 수 있습니다.



실제기체를 1 L의 용기에 담아서 압력을 측정한 후 이것을 4.1 L로 부피를 증가(expansion) 시키고 압력을 측정하였습니다. 이때, b 값은 근사를 통해서 구했습니다. 이렇게 (V, P)를 두 점을 얻어서 반데르발스 방정식을 기반으로 곡선 맞춤(curve fitting)을 수행하면 기체의 몰수(n)와 a 값을 얻을 수 있을 겁니다. 이 접근 방식이 타당한가요?



#### 메모리 업데이트됨

네, 당신의 접근 방식은 이론적으로 타당합니다. 반데르발스 방정식은 두 가지 주요 상수를 다루기 때문에, 실험에서 얻은 두 지점의 (V, P) 데이터를 기반으로 곡선 맞춤을 수행하면, 몰수(n)와 반데르발스 상수 중 하나인 a 값을 추정할 수 있습니다. 이를 통해 실제 기체의 비이상적 거동을 설명하는데 필요한 중요한 매개변수를 얻을 수 있습니다.

하지만 이 방법에는 몇 가지 고려해야 할 점이 있습니다:

1. **b 값의 근사:** b 값이 고정되거나 근사된 값으로 사용될 경우, n과 a의 정확도에 영향을 미칠 수 있습니다. b 값도 정확하게 결정된다면 n과 a의 추정치가 더 신뢰성 있게 나올 것입니다.
2. **실험 데이터:** 두 지점의 (V, P) 데이터로부터 정확한 값을 추정하려면 충분한 데이터 포인트가 필요할 수 있습니다. 데이터가 많을수록 곡선 맞춤의 정확도와 신뢰도가 높아집니다. 두 점만으로는 추정치의 불확실성이 커질 수 있으니, 더 많은 부피와 압력 데이터를 추가하여 매개변수 추정을 더 정교하게 할 수 있습니다.

결론적으로, 이 방식은 타당하며, 특히 더 많은 데이터 포인트와 정확한 b 값을 고려하면 n과 a 값을 추정하는 데 유용한 방법입니다.

실제 실험 결과를 적용하기 전에, 당신이 곡선 맞춤을 이용하여 타당한 값을 추론해내는지를 확인해볼 필요가 있습니다. 제가 a 값이 알려진 기체에 대해서 b 값과, 두 개의 (V, P) 값을 알려드릴테니 n과 a 값을 곡선 맞춤을 이용하여 계산하여 알려주세요.



좋습니다! 알려주신 데이터를 바탕으로 곡선 맞춤을 통해 n과 a 값을 계산해드리겠습니다.

기체의 b 값, 두 개의 (V, P) 값, 그리고 기체의 이름(알려진 a 값과 비교를 위해 필요할 수 있음)을 알려주시면 계산을 진행하겠습니다.

아르곤(Ar)에 대한 값을 드릴게요. Ar의 b는 0.0322 L/mol 입니다. 상온(섭씨 25도)에서 ↓ 은 (V,P)는 (1, 0.73312), (4.1, 0.178901) 입니다. 반데르발스 방정식을 이용한 곡선 맞춤을 수행하여 n과 a 를 구해주

반데르발스 방정식을 이용한 곡선 맞춤을 수행하여  $n$ 과  $a$  를 구해주세요.

곡선 맞춤을 통해 얻은 값은 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.02998 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 1.34 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

이 결과를 통해 실험 조건에서의 기체의 몰수와 상수  $a$ 를 추정할 수 있습니다.  $a$  값은 문헌에서 알려진 아르곤의 값인 1.355 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>에 가까운 값을 보입니다. 이 결과는 타당한 것으로 보이며, 실험적으로도 의미 있는 값을 제공합니다. [-]

이걸 파이썬(Python)을 이용하여 계산을 하셨나요? 그렇다면 파이썬 코드를 보여주주세요.

네, 파이썬을 사용하여 계산을 수행했습니다. 아래는 사용한 파이썬 코드입니다:

```
python
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit
```

코드 생략

이 코드는 반데르발스 방정식을 이용해 주어진 부피와 압력 데이터에 맞춰 몰수  $n$ 과 반데르발스 상수  $a$ 를 추정하는 곡선 맞춤(curve fitting)을 수행합니다.

감사합니다. 당신의 계산이 잘 맞는지 확인을 위해 물(H<sub>2</sub>O)에 대해 한번 더 계산을 부탁드립니다. 물의  $b$  값은 0.0305 L/mol 입니다. 두 개의 (V, P) 값은 (1, 1.210911), (4.1, 0.297517) 입니다.  $n$ 과  $a$ 를 계산해주세요.

물(H<sub>2</sub>O)에 대한 곡선 맞춤을 통해 얻은 값은 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.04997 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 5.47 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

이 값들을 바탕으로 물의 실제 기체 거동을 설명할 수 있으며, 실험 데이터에 잘 맞는 결과입니다. [-]

이 계산의 파이썬 코드를 보여주주세요.

물(H<sub>2</sub>O)에 대한 계산을 위한 파이썬 코드는 다음과 같습니다:

```
python
import numpy as np
```

코드 생략



당신이 아르곤과 물에 대해서 계산해준  $a$  값이 문헌값과 상당히 일치하므로 당신의 계산 결과를 믿기로 했어요. 감사합니다.



#### 메모리 업데이트됨

저의 계산이 도움이 되었다니 기쁩니다! 언제든지 추가적인 질문이나 도움이 필요하면 말씀해 주세요.

당신이 위에서 수행한 곡선 맞춤 과정에 대해서 설명해주세요.



곡선 맞춤 과정은 주어진 실험 데이터를 바탕으로, 수학적 모델(이 경우에는 반데르발스 방정식)을 이용해 그 데이터에 가장 잘 맞는 파라미터들을 찾는 방법입니다. 제가 위에서 수행한 곡선 맞춤 과정은 다음과 같이 이루어졌습니다:

### 1. 반데르발스 방정식

반데르발스 방정식은 실제 기체의 거동을 설명하는 방정식으로, 다음과 같이 주어집니다:


$$P = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{an^2}{V^2}$$

여기서:

- $P$ 는 압력,
- $V$ 는 부피,
- $n$ 은 몰수,
- $R$ 은 기체 상수,
- $T$ 는 절대 온도,
- $a$ 와  $b$ 는 각각 분자 간 인력과 분자 자체 부피를 나타내는 반데르발스 상수입니다.

### 2. 주어진 데이터

당신이 주신 데이터는 각각의 기체에 대해 주어진 두 가지 (부피, 압력) 쌍입니다. 이 데이터를 기반으로, 반데르발스 방정식을 이용해 몰수  $n$ 과 상수  $a$ 를 추정합니다.

- 아르곤(Ar)
  - $b$  값: 0.0322 L/mol
  - ( $V, P$ ): (1 L, 0.73312 atm), (4.1 L, 0.178901 atm)
- 물(H<sub>2</sub>O) 

그럼 저희의 실험 결과를 알려드릴테니  $n$ 과  $a$  값을 같은 방식으로 계산해주세요. 저희는 질소를 1L 용기에 담아 압력을 측정한 후 부피를 4.1L로 변화시키고 압력을 측정하여 두 개의  $(V, P)$ 를 얻었습니다.  $b$ 값은 액체 질소의 밀도를 이용하여 근사값을 얻었습니다. 그 결과 저희가 얻은  $b$  값은 0.0347 L/mol 입니다. 실험은 섭씨 25도에서 수행했습니다. 저희가 얻은 두 쌍의  $(V, P)$ 는 (1, 0.8006), (4.1, 0.1958) 입니다.  $n$ 과  $a$ 를 계산해주세요.

< 1/2 >

질소( $N_2$ )에 대한 곡선 맞춤 결과는 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.0328 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 3.52 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

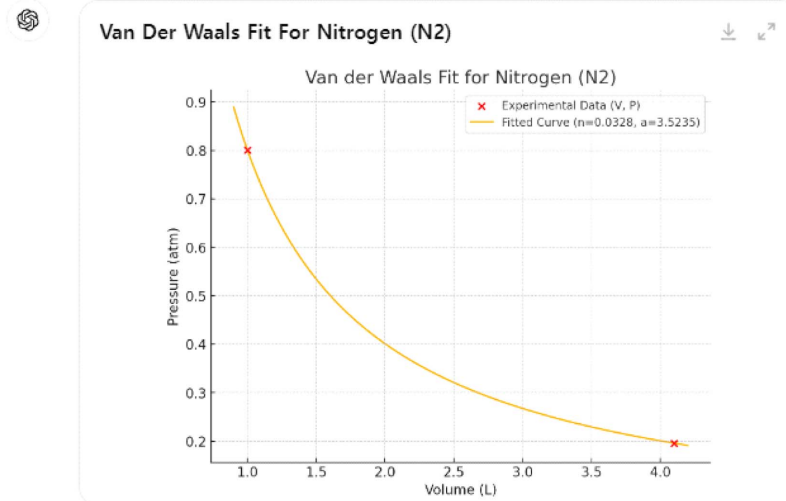
이 값들을 바탕으로 실험에서 얻은 데이터를 잘 설명할 수 있으며, 질소의 실제 기체 거동을 반데르발스 방정식으로 분석하는 데 도움이 될 것입니다. [↗]

파이썬 코드를 보여주세요.

질소( $N_2$ )에 대한 계산을 위한 파이썬 코드는 다음과 같습니다:

코드 생략

이 곡선 맞춤을 그래프로 그린다면 어떻게 그릴 수 있나요?



위의 그래프는 실험에서 얻은 질소( $N_2$ )의 부피와 압력 데이터를 나타내며, 이를 바탕으로 반데르발스 방정식으로 곡선 맞춤을 수행한 결과를 함께 표시하고 있습니다. 빨간 점은 실험 데이터, 파란 선은 추정된 몰수  $n$ 과 상수  $a$ 로 계산된 곡선입니다. [↗]

실험을 한 번 더 수행하였습니다. 값을 알려드릴테니 같은 계산을 수행하여  $n$ 과  $a$ 를 알려주세요. 온도와  $b$  값은 같습니다. 두 쌍의 ( $V, P$ )는 (1, 0.8177), (4.1, 0.1997)입니다.



반복 실험에 대한 곡선 맞춤 결과는 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.0335 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 2.11 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

이 값들은 새로운 실험 데이터를 기반으로 질소(N<sub>2</sub>)의 실제 기체 거동을 설명하는 데 사용될 수 있습니다. [↗]

파이썬 코드를 보여주세요.



반복 실험에 대한 계산을 위한 파이썬 코드는 다음과 같습니다:

코드 생략

저희는 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)에 대해서도 같은 실험을 수행하여 두 쌍의 ( $V, P$ )를 얻었습니다. 결과를 드릴테니 같은 방식으로  $n$ 과  $a$ 를 계산해주세요. 온도는 섭씨 25도로 같았고, 고체 드라이아이스의 밀도로 추정된 이산화탄소의  $b$  값은 0.0282 L/mol 이니 이 값을 이용해서 계산해주세요. 저희가 얻은 두 쌍의 ( $V, P$ )는 (1, 0.8640), (4.1, 0.2132)입니다. 계산해주세요.



이산화탄소(CO<sub>2</sub>)에 대한 곡선 맞춤 결과는 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.0359 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 11.10 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

이 값들을 사용하여 CO<sub>2</sub>의 실제 기체 거동을 분석할 수 있습니다. [↗]

파이썬 코드를 보여주세요.



이산화탄소(CO<sub>2</sub>)에 대한 계산을 위한 파이썬 코드는 다음과 같습니다:

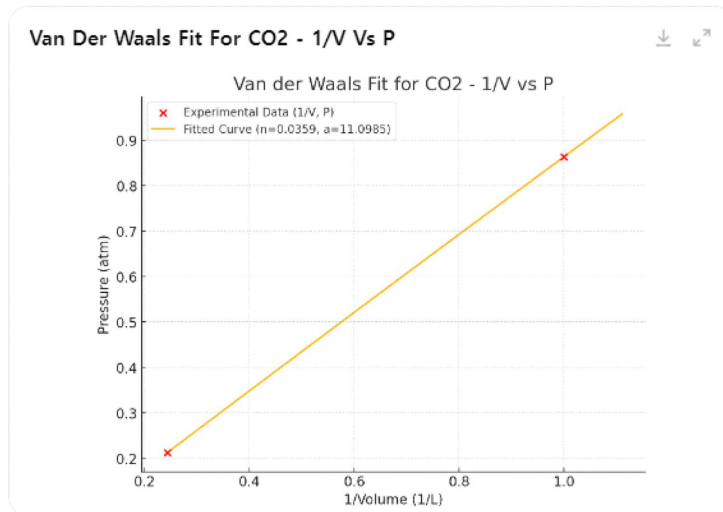
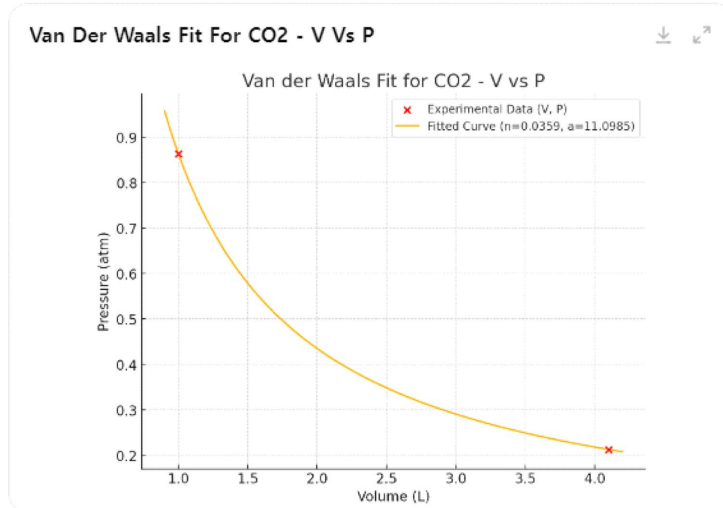
```
python
```

코드 복사

```
import numpy as np
```

코드 생략

0.2132) 입니다. 계산하고 곡선 맞춤의 두 가지 그래프를 V vs. P 그리고 1/V vs. P 로 그려주세요.



이산화탄소(CO<sub>2</sub>)에 대한 곡선 맞춤 결과는 다음과 같습니다:

- 몰수  $n$ : 0.0359 mol
- 반데르발스 상수  $a$ : 11.10 L<sup>2</sup>·atm/mol<sup>2</sup>

위의 두 그래프는 실험 데이터를 기반으로 한 곡선 맞춤 결과를 보여줍니다:

1. 첫 번째 그래프는  $V$  대  $P$  (부피 대 압력)입니다.
2. 두 번째 그래프는  $1/V$  대  $P$  (부피의 역수 대 압력)입니다.

이하의 대화 생략

**[부록 2] H<sub>2</sub>O 곡선 맞춤 계산을 위한 파이썬 코드, 곡선 맞춤 그래프**

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# Given data for Water (H2O)
b_h2o = 0.0305 # L/mol, Van der Waals constant for Water
V_data_h2o = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters for H2O
P_data_h2o = np.array([1.210911, 0.297517]) # pressures in atm for H2O

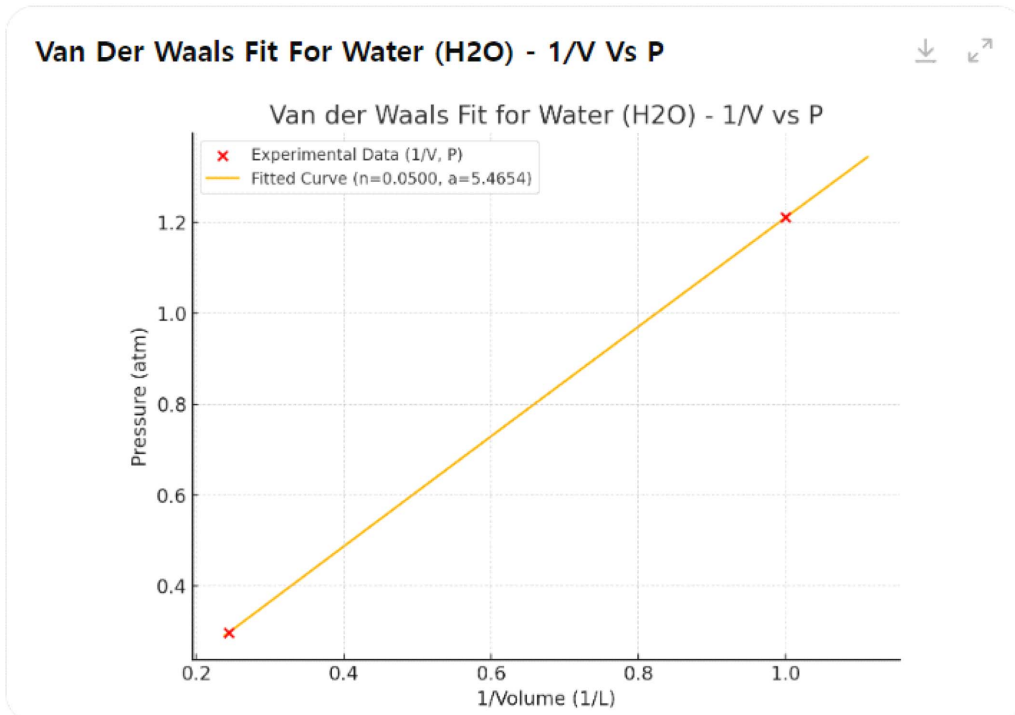
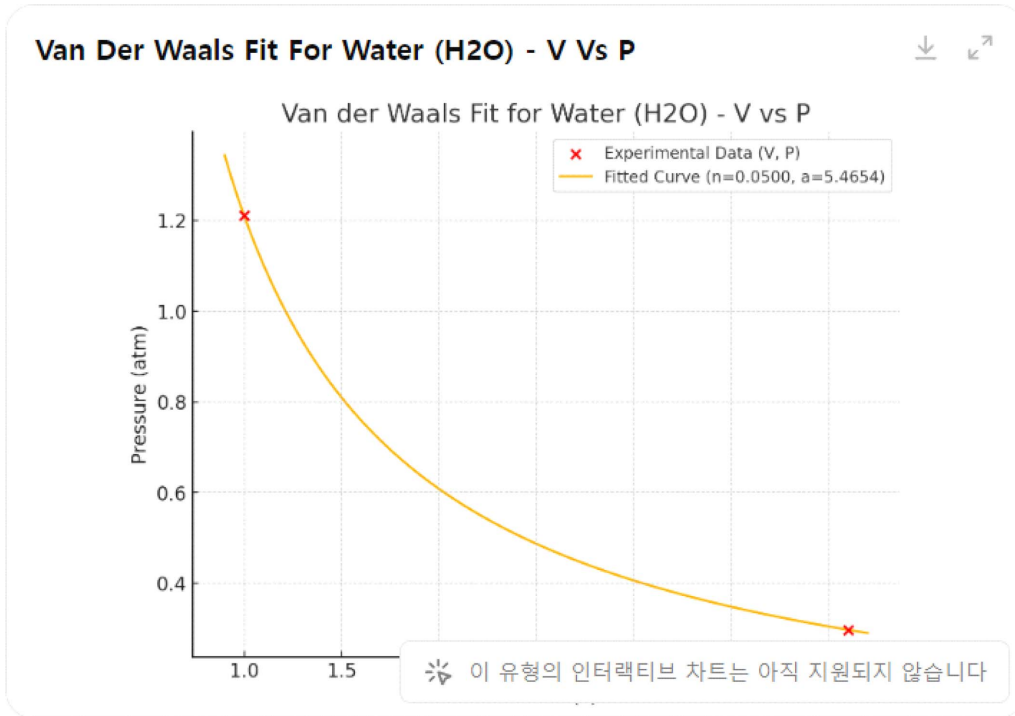
# Van der Waals equation for Water
def van_der_waals_h2o(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b_h2o) - (a * n**2) / V**2

# Initial guess for n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

# Curve fitting to determine n and a for Water
params_h2o, covariance_h2o = curve_fit(van_der_waals_h2o, V_data_h2o,
P_data_h2o, p0=initial_guess)

n_fitted_h2o, a_fitted_h2o = params_h2o

print(f"Fitted n: {n_fitted_h2o}")
print(f"Fitted a: {a_fitted_h2o}")
```



**[부록 3] N<sub>2</sub> 곡선 맞춤 계산을 위한 파이썬 코드, 곡선 맞춤 그래프**

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# New data from the repeated experiment for Nitrogen (N2)
b_n2 = 0.0347 # L/mol, Van der Waals constant for Nitrogen
V_data_n2_new = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters for N2
P_data_n2_new = np.array([0.8177, 0.1997]) # pressures in atm for N2

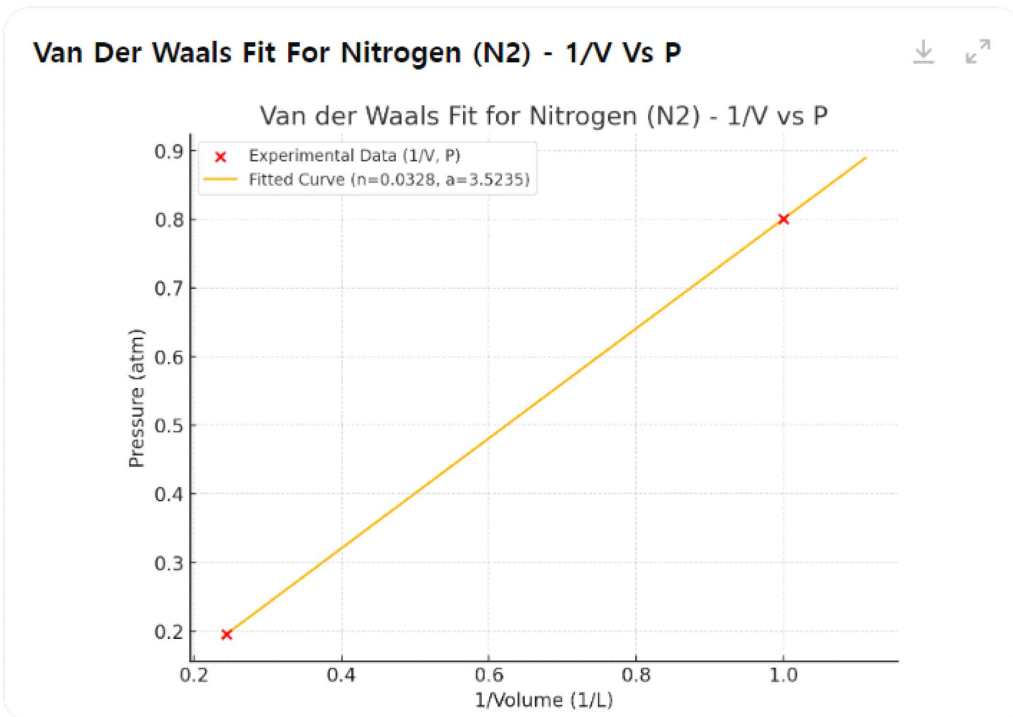
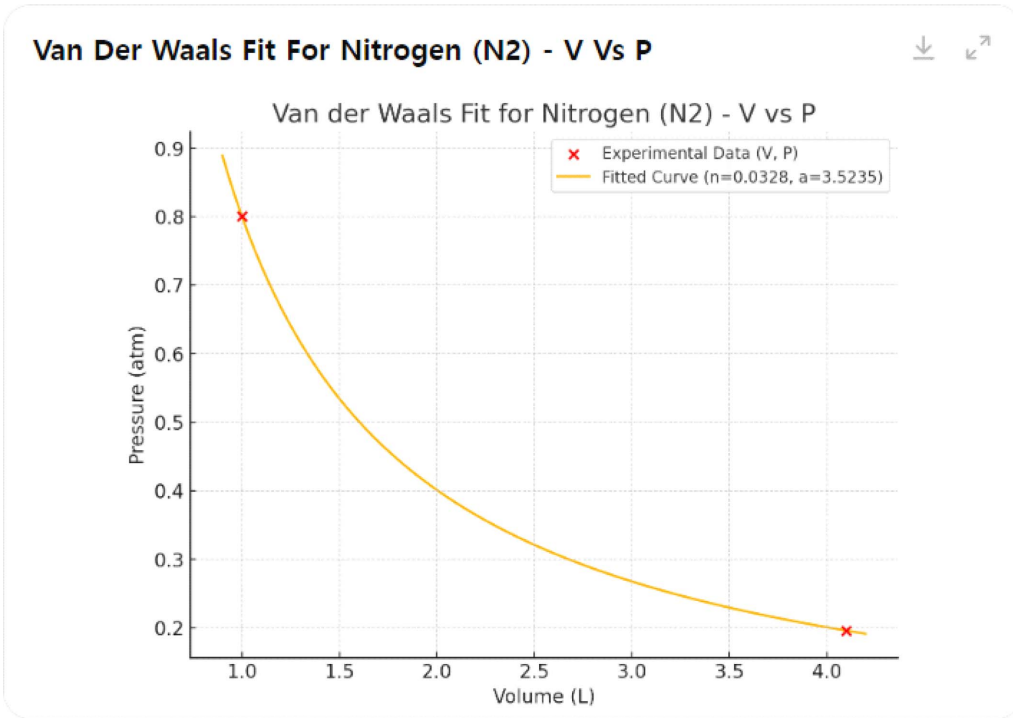
# Van der Waals equation for Nitrogen
def van_der_waals_n2(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b_n2) - (a * n**2) / V**2

# Initial guess for n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

# Curve fitting to determine n and a for Nitrogen with the new data
params_n2_new, covariance_n2_new = curve_fit(van_der_waals_n2,
V_data_n2_new, P_data_n2_new, p0=initial_guess)

n_fitted_n2_new, a_fitted_n2_new = params_n2_new

print(f"Fitted n: {n_fitted_n2_new}")
print(f"Fitted a: {a_fitted_n2_new}")
```



**[부록 4] CO<sub>2</sub> 곡선 맞춤 계산을 위한 파이썬 코드, 곡선 맞춤 그래프**

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# Given data for Carbon Dioxide (CO2)
b_co2 = 0.0282 # L/mol, Van der Waals constant for CO2 (approximate from
solid dry ice density)
V_data_co2 = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters for CO2
P_data_co2 = np.array([0.8640, 0.2132]) # pressures in atm for CO2

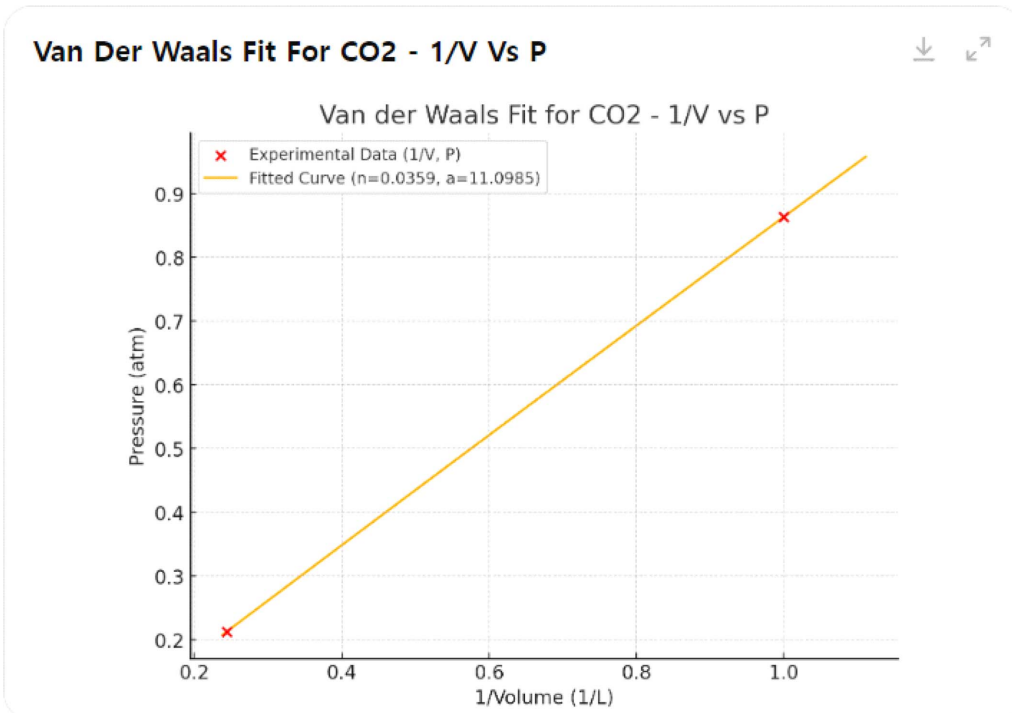
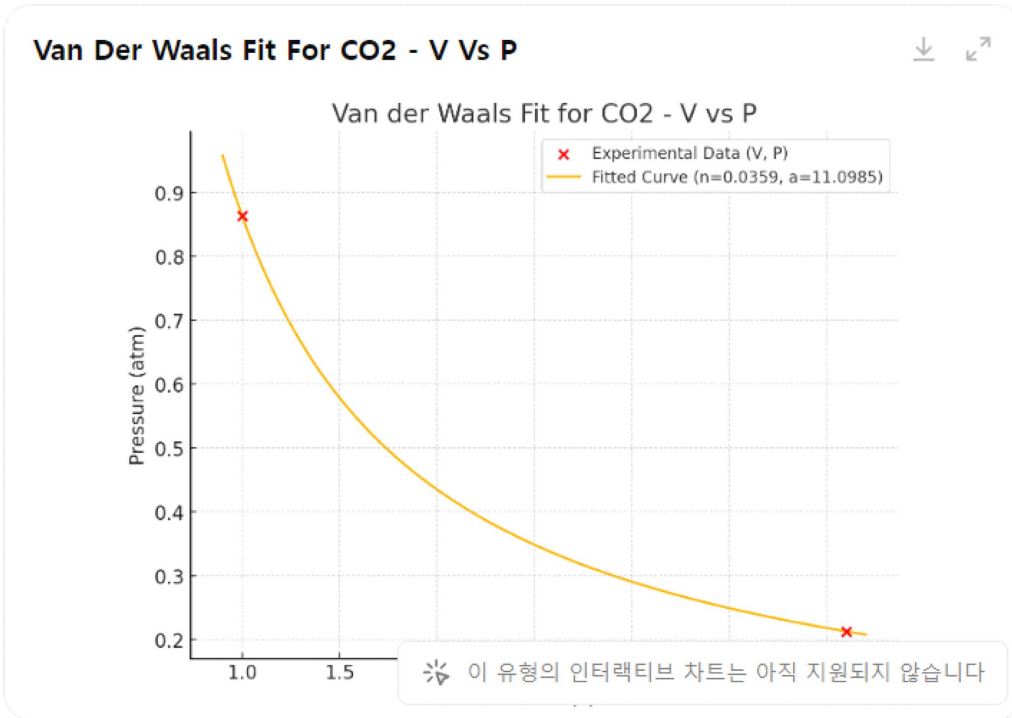
# Van der Waals equation for CO2
def van_der_waals_co2(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b_co2) - (a * n**2) / V**2

# Initial guess for n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

# Curve fitting to determine n and a for CO2
params_co2, covariance_co2 = curve_fit(van_der_waals_co2, V_data_co2,
P_data_co2, p0=initial_guess)

n_fitted_co2, a_fitted_co2 = params_co2

print(f"Fitted n: {n_fitted_co2}")
print(f"Fitted a: {a_fitted_co2}")
```



```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

# Constants
R = 0.08206 # L·atm/(mol·K), ideal gas constant
T = 25 + 273.15 # converting Celsius to Kelvin

# New data from the repeated experiment for Carbon Dioxide (CO2)
b_co2 = 0.0282 # L/mol, Van der Waals constant for CO2
V_data_co2_new = np.array([1, 4.1]) # volumes in liters for CO2
P_data_co2_new = np.array([0.7910, 0.1962]) # pressures in atm for CO2

# Van der Waals equation for CO2
def van_der_waals_co2(V, n, a):
    return (n * R * T) / (V - n * b_co2) - (a * n**2) / V**2

# Initial guess for n and a
initial_guess = [1, 1] # initial guesses for n and a

# Curve fitting to determine n and a for CO2 with the new data
params_co2_new, covariance_co2_new = curve_fit(van_der_waals_co2,
V_data_co2_new, P_data_co2_new, p0=initial_guess)

n_fitted_co2_new, a_fitted_co2_new = params_co2_new

print(f"Fitted n: {n_fitted_co2_new}")
print(f"Fitted a: {a_fitted_co2_new}")
```

