

3ª Lista de Exercícios – Informática Aplicada à Química – Prof. Ary Cavalcante

Departamento de Química – ICE – UFAM – 2º semestre - 2013

Os seguintes exercícios devem ser preferencialmente resolvidos utilizando os recursos disponíveis em planilhas eletrônicas. Todos os gráficos devem dispor de legendas nos eixos e dimensionamento adequado para visualizarmos as informações de interesse.

1 – Utilizando uma planilha eletrônica, utilize a equação deduzida na aula para as linhas do espectro de emissão do hidrogênio na região do visível e verifique a validade da mesma para as linhas observadas na região do ultravioleta e do infravermelho no espectro eletromagnético.

2 – Utilizando o método dos mínimos quadrados, calcule os parâmetros que melhor reproduzem os dados experimentais do exercício 5 da 2ª lista de exercícios. (Dica: faça um gráfico da Concentração de fenolftaleína versus o tempo e coloque o eixo das ordenadas em escala logarítmica).

3 – Utilizando o método dos trapézios, calcule a integral da função e verifique o valor do resultado obtido utilizando: 4, 8, 16, 20, 40, 80 e 400 trapézios. Compare o resultado numérico com o respectivo resultado analítico e discuta as diferenças encontradas.

b) Utilizando o método dos trapézios em uma planilha eletrônica, calcule o trabalho realizado ao longo de uma expansão isotérmica de 1 mol de um gás perfeito à 300K onde o volume inicial é de 22,4 L e o volume final é 44,8 L.

4 – Utilize o método de Newton para o cálculo numérico da raiz quadrada de 2.

5 – Utilizando uma planilha eletrônica e o método numérico para o cálculo de derivadas, calcule a equação da reta tangente à função $f(x) = x^3 + 3x + 4$ no ponto $x = 4$.