

1ª Lista de Exercícios – Informática Aplicada à Química – Prof. Ary Cavalcante

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

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 – Elabore um gráfico com as funções trigonométricas $\sin\theta$, $\cos\theta$ e $\text{tg}\theta$, no intervalo de 0 a 2π .

2 – a) Utilize uma planilha eletrônica e verifique a validade da Lei empírica de Boyle-Mariotte para as isotermas do gás ideal.

b) Elabore um gráfico do tipo pressão versus volume com isotermas do gás ideal às temperaturas de 25, 30, 40, 50 e 60 °C. Indicando o sentido de deslocamento das isotermas com o aumento da temperatura.

3 – Elabore um gráfico do tipo pressão versus o inverso do volume com as mesmas isotermas do exercício anterior. Indique e explique as mudanças tipicamente observadas com o aumento da temperatura.

4 – Utilize uma planilha eletrônica para elaborar o gráfico de uma função do tipo oscilador amortecido, $f(x) = e^{-2x} \cos x$.

5 – De acordo com a Lei de Charles, quando uma amostra gasosa é armazenada sob pressão constante, o volume (V) é diretamente proporcional à temperatura absoluta (T/K). Para uma amostra de ar atmosférico armazenada em um recipiente equipado com um êmbolo que pode

se deslocar livremente foram medidas as seguintes densidades do ar atmosférico: $1,877 \text{ g.L}^{-1}$ a -85°C , $1,294 \text{ g.L}^{-1}$ a 0°C e $0,946 \text{ g.L}^{-1}$ a 100°C . Utilizando estes dados e assumindo a validade da Lei de Charles ($V = k.T$, à pressão constante), determine a temperatura do zero absoluto na escala Celsius.

Dicas:

1 – Utilize uma planilha eletrônica e construa um gráfico do tipo volume versus temperatura.

2 – As densidades citadas no exercício correspondem aos dados experimentais em três temperaturas. Considere uma massa fixa qualquer e calcule o volume dessa massa nas três temperaturas.

3 - Utilize uma planilha eletrônica para elaborar a equação da reta que passa pelos pontos citados neste exercício.

4 – Verifique o intercepto desta reta com o eixo das abscissas.

6 – Elabore uma planilha eletrônica com os seguintes dados de notas ao longo de um curso devidamente tabulados e calcule os valores indicados.

	Nota 01	Nota 02	Nota 03	Nota04	Prova final
Aluno 01	7,2	6,0	5,5	6,5	6,0
Aluno 02	2,0	3,0	2,5	4,0	2,0
Aluno 03	4,0	4,5	7,0	7,5	5,0
Aluno 04	9,0	8,5	4,0	6,0	7,0

- a) Considerando que as provas parciais têm peso 2 e a prova final tem peso 1, calcule o valor da nota final dos alunos listados.
- b) Considerando apenas as médias obtidas pelos alunos em cada uma das provas, calcule o desvio de cada aluno em relação a este valor médio em cada uma das provas.

7 – Utilizando uma planilha eletrônica, utilize o sistema de coordenadas polares para elaborar o gráfico da seguinte equação:

$$x^2 + y^2 = 1$$

8 – Utilizando uma planilha eletrônica, verifique graficamente e explique de forma clara o papel de cada um dos parâmetros amplitude (A), frequência (ω) e fase (ϕ) na seguinte equação da ondulatória:

$$f(t) = A\cos(\omega t + \phi)$$

9 – a) Utilizando os parâmetros empíricos da equação de van der Waals para o N_2 , $a = 1,408 \text{ atm}\cdot\text{L}^2\cdot\text{mol}^{-2}$ e $b = 3.913\cdot 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}$ faça o gráfico das isotermas de van der Waals para este gás em temperaturas distintas $T_1 = -250^\circ\text{C}$, $T_2 = -146,9^\circ\text{C}$, $T_3 = -50^\circ\text{C}$. Explique as diferenças observadas nas isotermas em cada temperatura.

10 – Utilizando uma planilha eletrônica, verifique graficamente o potencial de interação de Lennard Jones e identifique e explique de forma clara o papel do termo atrativo e repulsivo. O potencial de interação de Lennard-Jones para um par de partículas é dado pela seguinte equação:

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

Considere um par de átomos de argônio para o qual $\sigma \approx 0,340 \text{ nm}$ e $\varepsilon/k_B \approx 120 \text{ K}$.