



E0646

VALIDAÇÃO DE MÉTODO PARA A PREVISÃO DE COEFICIENTES VIRIAIS PARA LÍQUIDOS E VIDROS: APROXIMANTE DE PADÉ

Fernando Miyazaki (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Em 1873, J. D. van der Waals propôs uma equação, que levou seu nome e pela qual recebeu um Prêmio Nobel em 1910, para descrever o comportamento volumétrico de vapores e líquidos. Entretanto, ela não é muito precisa, apesar de famosa, por ter sido a primeira equação capaz de prever a transição entre líquido e vapor. Tendo isso em vista, adaptações foram inseridas na equação original por meio dos aproximantes de Padé, de modo a que ela representasse pontos experimentais para o argônio com mais fidelidade, desde as baixas densidades característica dos gases até densidades próximas à do líquido no ponto triplo. A equação modificada, no entanto, utiliza a pressão de esferas rígidas para o argônio, que é uma molécula monoatômica apolar que representa com razoável fidelidade uma esfera rígida. Neste projeto, inicialmente utilizou-se a metodologia já desenvolvida, para novamente testar o argônio. Em seguida, uma sistemática foi proposta para testar a equação de van der Waals modificada para o metano e a água. O primeiro possui geometria tetraédrica e é apolar, enquanto a segunda possui geometria plana angular e alta polaridade. Como previsto, obtiveram-se resultados satisfatórios para o metano, enquanto que para água não foi sequer possível aplicar a metodologia.

Coefficientes viriais - Líquidos e vidros - Aproximantes de Padé