

Prática 3 – Laboratório de Química Tecnológica

Correcção da Difusão e aplicação da Equação de Stokes-Einstein

Todas as questões, gráficos e outros parâmetros, deverão ser apresentados num documento pdf no final deste bloco de aulas. Esta prática tem 2 questões.

1. Cálculo da correcção da difusão da água para o tamanho do sistema.

(a) Realiza uma correcção do coeficiente difusão da água TIP4P/2005, D_{MD} , para o tamanho do sistema usando a eq. (Yeh and Hummer, 2004),

$$D_0 = D_{MD} + \frac{2.837297 \times k_B T}{6\pi\eta L}$$

onde T é a temperatura em K (298 K), L é o comprimento do lado da caixa cúbica de volume 15 nm^3 , $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ e η é a viscosidade do modelo TIP4P/2005 a 298 K.

(b) Compara com o valor experimental – reporta o valor corrigido (D_0) e não corrigido (D_{MD}) e os respectivos erros relativos ao valor experimental numa tabela. Qual a percentagem de D_0 associada a esta correcção? O que podes concluir quanto à sua importância?

2. Estimativa do raio da molécula de água e da sua viscosidade

(a) Estima o raio hidrodinâmico da molécula de água real e TIP4P/2005 usando a eq. de Stokes-Einstein – usa ambos os valores de c (stick e slip boundary conditions) e compara os valores com o valor normalmente usado na literatura de $R_W = 0.14 \text{ nm}$.

$$D = \frac{k_B T}{c\pi\eta R}$$

(b) Usando $R_W = 0.14 \text{ nm}$ e os dados experimentais da viscosidade da água estima o $D(T)$ da água no intervalo de temperatura experimental [274 K - 318 K] (Mills, 1973 – Tabela III) para as duas condições fronteira ($c = 4$ e $c = 6$). Compara os valores calculados com os valores da difusão experimental num gráfico. Estima o erro relativo médio (“mean relative error” = MRE) em %.

$$\text{MRE} = 100\% \times \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{D_{SE} - D_{Exp}}{D_{Exp}}$$

A eq. de Stokes-Einstein tende a sobrestimar ou subestimar a viscosidade? Justifica a tua resposta com base no MRE obtido.

(c) Estima o valor de c que minimiza o MRE.