

Exercícios 1 – Laboratório de Química Tecnológica

A solução dos exercícios deverá ser apresentada num documento pdf identificado como E1 Respostas.

1. (a) Escrever a equação de Arrhenius numa forma linear e ajustar os dados de viscosidade no intervalo de temperaturas [298.15 K – 358.15 K] utilizando o Excel (sem o SOLVER) - ajuste linear (“add trendline” Linear). Apresentar a equação escrita na forma linear.
- (b) Ajustar os dados de viscosidade no mesmo intervalo de temperaturas usando o SOLVER e a equação de Arrhenius na forma exponencial.
- (c) Apresentar o valor dos parâmetros ajustados em (a) e (b) numa Tabela juntamente com o valor da soma do quadrado dos resíduos para os dois ajustes.
- (d) Apresentar um gráfico da viscosidade (mPa.s) em função da temperatura (K) para a viscosidade experimental e a viscosidade dada pela equação de Arrhenius com os dois conjuntos de parâmetros encontrados (ajuste linear e não linear).
- (e) Apresentar um gráfico dos resíduos em função da temperatura obtidos com os dois conjuntos de parâmetros.
- (f) O que podes concluir sobre a qualidade relativa dos dois ajustes em função da soma do quadrado dos resíduos?

Equação de Arrhenius

$$\eta = A \exp(E_a / RT) \quad (1)$$

E_a – Energia de activação molar

A – Factor pre-exponencial

R – Constante dos gases molar (8.314 Jmol⁻¹K⁻¹)

2. (a) Retirar os valores de difusão da água não deuterada experimentais da ref. [1] (Tabela III) e representa-os graficamente no Excel em unidades de 10⁻⁵ cm²s⁻¹ em função da temperatura em K.
- (b) Ajusta a equação de Arrhenius na forma exponencial (SOLVER) e na forma linear (sem o SOLVER).
- (c) Mostra os dois ajustes num único gráfico na forma exponencial.
- (d) Com base nas duas equações obtidas extrapola o valor da difusão à temperatura de 250 K. Sabendo que o valor experimental da difusão da água a esta temperatura é 0.341×10⁻⁵ cm²s⁻¹, calcula o erro dos valores estimados através da eq. de Arrhenius na forma exponencial e linear.
- (e) Com base nos valores extrapolados o que conclusis sobre a validade das equações ajustadas

para estimar a difusão da água líquida sobreaquecida?

(f) Compara o valor da E_A que obténs através do ajuste linear à forma linearizada da eq. de Arrhenius no intervalo de temperatura [15 °C – 45 ° C] com o valor reportado por Mills para este intervalo de temperatura (ver pagina 687 linhas por baixo da Fig. 1).

Referências:

[1] Mills, R., “Self-Diffusion in Normal and Heavy Water in the Range 1-45°”, The Journal of Physical Chemistry, 77, 685, **1973**