



E0647

VALIDAÇÃO DE MÉTODO PARA A PREVISÃO DE COEFICIENTES VIRIAIS PARA LÍQUIDOS E VIDROS: ACELERADORES DE LEVIN

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

A equação original de Van der Waals foi alterada, a fim de se obter uma equação que melhor representasse o comportamento de fluidos estáveis, desde densidades baixas (gases) até altas (líquidos próximos do seu ponto tríplice). Com esta abrangência, tal equação poderia ser utilizada para prever o comportamento de estados não estáveis da matéria (líquidos em pressões negativas, vidros), comportamento este difícil de obter experimentalmente. O presente estudo objetivou a validação da nova equação, onde as pressões originais da parcela repulsiva e atrativa foram substituídas e os coeficientes viriais de ordem alta foram obtidos por meio do método matemático denominado aceleradores de Levin. Utilizando o metano como molécula de estudo, buscou-se verificar a aplicabilidade da equação, anteriormente testada apenas para o argônio, átomo que se aproxima mais do modelo de esferas rígidas do que a molécula tetraédrica de metano. Através de uma leve alteração no critério de convergência anteriormente empregado, foi obtido para o argônio um método ainda mais eficiente que o originalmente proposto, no que se refere à aderência aos resultados experimentais. Utilizando este novo método para o metano, concluiu-se que, apesar de a nova molécula testada se distanciar mais do modelo de esferas rígidas, foram obtidos resultados bem satisfatórios.

Coeficientes viriais - Líquidos e vidros - Aceleradores de Levin