

Exercício 1

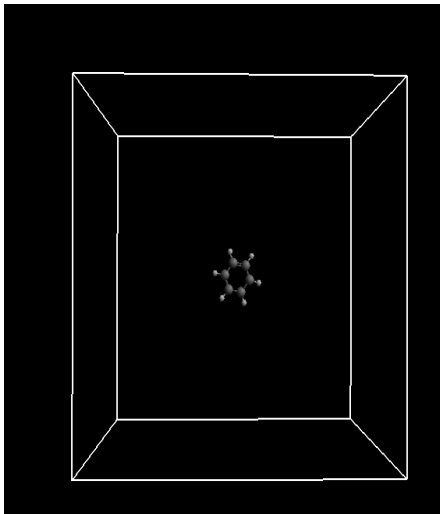


Figura 1 - Benzeno Centrado

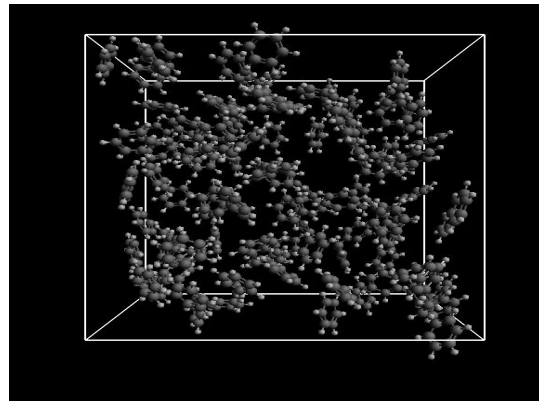


Figura 2 - 100 moléculas de benzeno

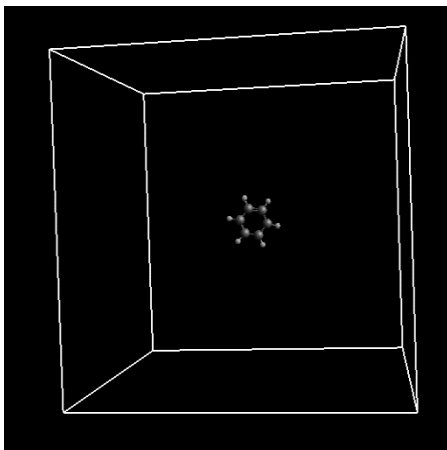


Figura 4 - Benzeno centrado NPT

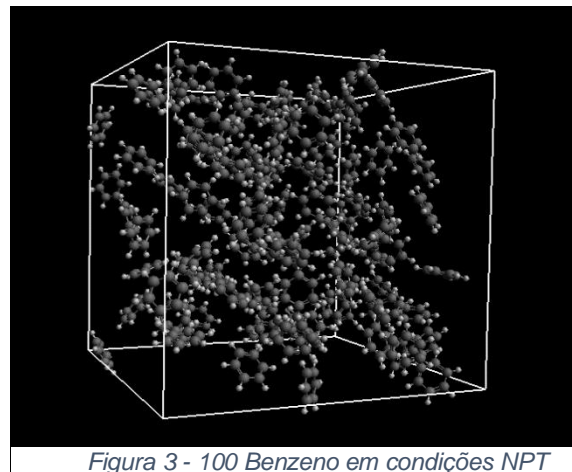


Figura 3 - 100 Benzeno em condições NPT

Exercício 2

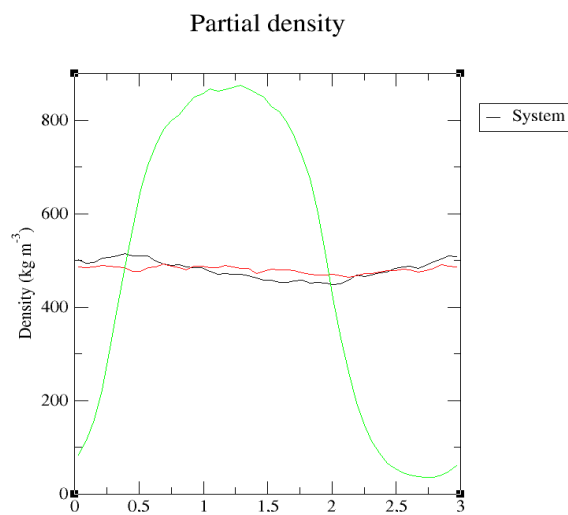


Figura 5 -Densidade Benzeno

Exercício 3

Com base na Figura 2 podemos perceber que a densidade do Benzeno na simulação é um valor perto de 880kg/m³. Sabendo que a densidade experimental do Benzeno é de 876 kg/m³ este valor apresenta uma variação de 0.4%.

Exercício 4

A energia potencial obtida foi de 943.125 J

Fazendo então as contas pela formula,

$$\Delta H_{vap} = U_{gas} - U_{liq}/N + RT/1000 \quad R = 8.314 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}; T = 298.15 \text{ K}$$

$$30.8 - (943.125/100) + 8.314 * 298.15/1000$$
$$23.8475691000000000000000$$