

CÁLCULO DO SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS

Alberto Selete de Souza¹ (EEL-USP/Bolsista PIBIC/CNPq)

Patrícia Regina Pereira Barreto² (LABAP/INPE/ Orientadora)

RESUMO

Esse trabalho foi iniciado em agosto de 2020, e tem como objetivo criar um programa na linguagem computacional Python para determinar o segundo coeficiente virial das moléculas diatômicas¹. Foi necessário fazer cálculos computacionais de estrutura eletrônica de algumas moléculas diatômicas com o objetivo de construir suas superfícies de energia potencial (SEP). Com base na disponibilidade de dados experimentais de referência, decidiu-se por trabalhar com as seguintes moléculas: H₂, O₂, F₂, CO, N₂, e NO. Para tal, foram utilizados os programas Gaussian, Columbus, e Molpro. A partir dos dados ab initio calculados, foi empregado o software GNUplot para obter o ajuste da SEP que retorna os parâmetros de entrada para o programa em Python, o qual também gera a curva de energia potencial em uma rotina paralela. No programa, calcula-se a integral numérica do coeficiente virial e as suas correções quânticas², e compara-se com os dados experimentais tabelados e gerando os gráficos. O segundo coeficiente virial é importante pois ele está relacionado com as propriedades termodinâmicas das moléculas.

REFERÊNCIAS

1. Dymond JH, Smith EB (2002). In: Frenkel M, Marsh K (eds) The virial coefficients of pure gases. Springer, Berlin
2. P.R.P. Barreto, A.C.P.S. Cruz, H.O. Euclides, A.F. Albernaz, E. Correa, J. Mol. Model. 26 (2020) 227, <https://doi.org/10.1007/s00894-020-04537-8>.

¹ Aluno do Curso de Engenharia Física – E-mail: albertoseleto@usp.br

² Pesquisadora da Divisão LABAP – E-mail: patricia.barreto@inpe.br