

DESENVOLVIMENTO DE CÓDIGO PARA CÁLCULO DO SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL

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

Patrícia Regina Pereira Barreto² (LABAP/INPE/ Orientadora)

RESUMO

Esse trabalho foi iniciado em agosto de 2021, e tem como objetivo criar um programa na linguagem computacional Python para determinar o segundo coeficiente virial de moléculas poliatômicas, do tipo *AB-CD*. O segundo coeficiente virial é definido por:

$$B = \frac{N_a}{4} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta_1 \int_0^{2\pi} \sin\theta_2 \int_0^{\infty} \left[e^{\left(\frac{U(r)}{kT}\right)} - 1 \right] r^2 dr d\theta_1 d\theta_2 d\varphi$$

Onde $U(r)$ é a energia potencial em função da distância r e dos ângulos θ_1 , θ_2 , φ , T é a temperatura e N_a é o número de Avogadro.

Para desenvolver tal código, é necessário ter dados de entrada, que são provenientes de simulações computacionais das interações das moléculas estudadas. O grupo de estudos já havia realizado tais simulações para as moléculas $H_2 \propto H_2$, $H_2 \propto F_2$ e $H_2 \propto Cl_2$. A partir destes dados de entrada, foi possível gerar a curva de energia potencial, resolver a integral acima numericamente, e também as correções quânticas. Para isso, foi necessário implementar o método de integração de Monte Carlo, por meio do algoritmo VEGAS. Uma vez que as integrais foram calculadas, utiliza-se a equação virial do estado para misturas para encontrar dados de referência que possam ser comparados com os valores recém calculados, e assim obter bons resultados. O código ainda gera as figuras das configurações principais do potencial, dos termos isotrópico e anisotrópico e principalmente do segundo coeficiente virial, comparando com dados de referência. Finalmente, o código também deve ser postado online em um website, para facilitar e aumentar o seu uso. O segundo coeficiente virial é importante pois ele está relacionado com as propriedades termodinâmicas das moléculas.

Palavras-chave: Superfície de Energia Potencial, Segundo Coeficiente Virial, Integrais de Monte Carlo, Interação Molecular, Código em Python, Virial State Equation of Mixture,

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

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

¹ Aluno do Curso de Engenharia Física – E-mail: albertoseleto@usp.br
² Pesquisadora da Divisão LABAP – E-mail: patricia.barreto@inpe.br