

DESENVOLVIMENTO DE CÓDIGO PARA O CÁLCULO DO SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL

Alberto Seleteo de Souza¹ (USP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Patrícia Regina Pereira Barreto² (INPE, Orientadora)

RESUMO

Esse trabalho foi iniciado em agosto de 2020, e visa desenvolver um programa *web based* denominado *Viriális* na linguagem computacional *Python* para determinar o segundo coeficiente virial de moléculas diatômicas *AB* e poliatômicas, clusters de Van der Waals do tipo *AB-CD*. As moléculas usadas até então foram: HF, H₂, F₂, N₂, CO, e NO (diatômicas), e H₂ ∝ F₂, F₂ ∝ F₂ e H₂ ∝ Cl₂ (poliatômicas). Os dados ab initio dessas moléculas são provenientes de simulações computacionais realizadas previamente pelo grupo QCC/LABAP. Uma vez que tais pontos são inseridos no *Viriális*, ele realiza um ajuste não linear, gerando uma superfície de energia potencial analítica (SEP) de acordo com a função de Rydberg generalizada de quinto grau ou com a função ILJ, Improved Lennard-Jones. Assim, é plotado o fitting da SEP, comparando-os com os pontos ab initio, e os momentos de energia, que estão relacionados com a anisotropia do sistema. Em sequência, o *Viriális* retorna o valor do segundo coeficiente virial em função da temperatura, por meio da integração do termo clássico e suas correções quânticas. Para calcular essas equações, foi necessário implementar o método de integração de Monte Carlo, por meio do algoritmo *VEGAS*. O *Viriális*, também, utiliza a equação virial do estado para misturas, utilizando dados experimentais para os diátomos *AB* e *CD*, a fim de obter dados de referência do sistema, que possam ser comparados com os valores recém calculados. Por fim, utiliza-se a biblioteca *streamlit* para criar uma interface gráfica, disponível online.

Palavras-chave: Integração de Monte Carlo. Superfície de Energia Potencial. Segundo Coeficiente Virial. Interface Gráfica. Ajuste não linear

¹ Aluno do curso de Bacharelado de Engenharia Física - **E-mail: albertoseleto@usp.br**

² Pesquisadora do INPE - **E-mail: patricia.barreto@inpe.br**