

DESENVOLVIMENTO DE CÓDIGO PARA O CÁLCULO DO SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL

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

RESUMO

Esse trabalho foi iniciado em agosto de 2020, e visa desenvolver o programa *web Viriális* por meio da linguagem computacional *Python* para determinar o segundo coeficiente virial de moléculas diatômicas *AB* e poliatômicas, clusters de Van der Waals do tipo *AB-CD* e *A₂B-CD*. As moléculas usadas até então foram: HF, H₂, F₂, N₂, CO, e NO (diatômicas), e H₂ - H₂, 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 e com a função Improved Lennard-Jones (ILJ). Assim, é gerado o fitting da SEP, comparando-os com os pontos ab initio, e os momentos de energia, que estão relacionados com o termo isotrópico, que pode ser comparado com sistemas semelhantes e os termos anisotrópicos. Em sequência, o *Viriális* retorna o valor do segundo coeficiente virial em função da temperaturas, 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 as moléculas AB, CD e A₂B, a fim de obter dados de referência do sistema, que possam ser comparados com os valores recém calculados. Os resultados obtidos utilizando ILJ para o sistema H₂ - H₂ mostraram RMS médio de 85 para o virial clássico, e de 47.4 para o virial total. Já para o sistema F₂ - F₂, o RMS médio é de 28.6 para o virial clássico, e de 28.5 para o virial total. Estes resultados mostram a relevância dos cálculos das correções neste estudo.

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**