

Cálculo do segundo coeficiente do virial para dímeros de Césio - Pôster

A. B. Santos^a, M. Alves^a e M. Y. Ballester^a

a) Universidade Federal de Juiz de Fora, Departamento de Física

Resumo

A interação entre os átomos de um sistema diatômico, como o dímero de césio (Cs_2), pode ser analisada com ajuda das curvas de energia potencial. A partir da função que descreve a curva é possível calcular propriedades termodinâmicas do sistema, como o Segundo Coeficiente do Virial. Trata-se de uma grandeza que corrige a descrição do comportamento de um gás real em relação ao comportamento de gás ideal. A função potencial analítica proposta por Araújo e Ballester descreve a curva de energia potencial para um determinado estado do sistema analisado. Para utilizar essa função, foram calculados os coeficientes necessários para o estado fundamental da molécula e realizada a simulação computacional da curva de energia potencial deste estado. A partir da integração numérica da função de Mayer, obtida da função partição canônica que descreve o sistema, foram obtidos valores do segundo coeficiente do virial para diferentes temperaturas. Os Resultados são satisfatórios comparados a literatura do segundo coeficiente do virial para o Cs_2 .