

Propriedades termodinâmicas a partir de superfícies de energia potencial - Pôster

M. D. S. Alves^a e M. Y. Ballester^a

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

Resumo

Para uma representação razoável de um estado termodinâmico, poucas variáveis independentes podem ser usadas. Uma escolha interessante seria definir temperatura, volume e composição (T, V, n) como variáveis independentes desse sistema ou usar temperatura, pressão e composição (T, p, n) como variáveis independentes. Nesse sentido, uma propriedade termodinâmica geral $X(T, V, n)$ ou $X(T, p, n)$ pode ser caracterizada a partir de um modelo apropriado para calcular o desvio correspondente. Neste sentido, é possível calcular funções residuais de grandezas termodinâmicas em função das variáveis citadas anteriormente. Em geral, para obter propriedades residuais, o fator de compressibilidade Z e suas derivadas devem ser calculados com precisão. Nesse sentido, a equação de estado do sistema é acurada de acordo com a quantidade de termos utilizados no cálculo do fator de compressibilidade. As propriedades termodinâmicas podem ser calculadas a partir de uma superfície de energia potencial molecular. Neste contexto, uma correção de primeira ordem para a equação de estado dos gases ideais é apresentada neste trabalho. O segundo coeficiente do virial clássico $B(T)$ foi obtido da função de partição de configuração dependendo explicitamente do potencial de interação.