



E0412

APROXIMANTES DE PADÉ: UTILIDADE EM SÉRIES VIRIAIS PARA LÍQUIDOS PRÓXIMOS À TRANSIÇÃO VÍTREA

André de Oliveira Guerrero (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A obtenção de equações de estado que representem bem o estado líquido, mesmo quando extrapoladas para regiões correspondentes a estados fora do equilíbrio termodinâmico, é de grande importância para a compreensão de sistemas cujo estudo experimental seja dificultado. A expansão virial do fator de compressibilidade pode consistir em representar esse fator por uma série de potências da fração do espaço ocupada pelas esferas rígidas que se supõe representem as partículas. Porém, o cálculo dos coeficientes de maior ordem da expansão é muito trabalhoso. Sendo assim, para uma boa representação do líquido proposto, mesmo nas extrapolações para estados não estáveis, faz-se necessário um método de aproximação dos coeficientes viriais desconhecidos. Um método bastante utilizado para efetuar essa aproximação é a construção de aproximantes de Padé [L/M], onde se supõe que a série virial possa ser representada por uma divisão de polinômios, sendo o numerador de grau L e o denominador de grau M. Partindo-se dos primeiros L+M+1 coeficientes viriais, pode-se calcular L+M+1 diferentes aproximantes [L/M], de modo que, para fazer a melhor previsão dos coeficientes viriais desconhecidos, é necessária uma comparação das possíveis metodologias de aproximação.

Coefficientes viriais - Transição vítrea - Aproximantes de Padé