

A UCS É  
PRA VOCÊ  
QUE CRIA O  
FUTURO.



XXIX Encontro de Jovens Pesquisadores  
e XI Mostra Acadêmica de Inovação e Tecnologia

De 5 a 7/10

Local: UCS - Cidade Universitária,  
Caxias do Sul

[jovenspesquisadores.com.br](http://jovenspesquisadores.com.br)



PIBIC-CNPq-Ensino Médio

## Análise de dados em Python aplicada à determinação da equação de estado do ouro PROJETO FISMAT

Laura Hübner Tessari Braz, Lucas da Rosa Silva, Giovani Luís Rech, Cláudio  
Antônio Perottoni



Grupo de Pesquisa em  
Física de Materiais e  
Cerâmicas Avançadas

### INTRODUÇÃO

O processo de análise de dados é essencial para o desenvolvimento de modelos computacionais em diversas áreas da Física. Um dos principais recursos para essa tarefa é atualmente a linguagem de programação Python, que oferece múltiplos recursos através de suas bibliotecas para o ajuste de modelos físicos e matemáticos a um conjunto de dados. Utilizando dados experimentais da literatura, visou-se estudar a relação de grandezas termodinâmicas, como a pressão ( $p$ ) e o volume ( $V$ ) através da Equação de Estado (EOS) de Vinet. O ajuste dos parâmetros dessa equação para o ouro nos permite determinar algumas propriedades do material, como o Módulo Volumétrico  $B_0$  e a sua derivada em relação à pressão  $B_0'$ , e o seu volume a pressão nula  $V_0$ . Esse estudo foi desenvolvido em cadernos Jupyter/Python no ambiente colaborativo do Google Collaboratory.

### OBJETIVO

Determinar os parâmetros da EOS de Vinet para o ouro, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura e obtidos com simulação computacional, de maneira a determinar  $B_0$ ,  $B_0'$  e  $V_0$  com recursos do LMFIT em Python.

### METODOLOGIA

Os dados experimentais de pressão e volume para a realização do trabalho foram obtidos do artigo "Isothermal equation of state for gold with a He-pressure medium". O ajuste da equação de estado aos dados experimentais foi realizado utilizando a biblioteca LMFIT (Non-Linear Least-Squares Minimization and Curve-Fitting for Python) da linguagem Python, permitindo a elaboração de gráficos e inclusão de dados de simulação. Para a aplicação e ajuste dos parâmetros da Equação de Vinet, foi utilizado o ambiente do Google Colab, similar ao Jupyter Notebook. Desse modo, é possível realizar a integração em um desenvolvimento coletivo para a análise de equações de sólidos e demonstrações das diversas correlações fornecidas a partir da literatura. Posteriormente, realizou-se o ajuste da forma integrada da EOS a dados de energia versus volume obtidos de simulações computacionais utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT).

### RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, determinou-se os parâmetros da Equação de Vinet mediante ajuste de curvas por mínimos quadrados aos dados experimentais de pressão e volume. O resultado do ajuste pode ser visto na Figura 1. Do ajuste é possível obter os valores de  $B_0$ ,  $B_0'$  e  $V_0$ , assim como a incerteza desses parâmetros.

Na segunda parte do trabalho, foram realizados cálculos DFT da energia do ouro. Na física do estado sólido, a teoria do funcional da densidade (DFT) permite determinar as propriedades do estado fundamental de materiais metálicos, semicondutores e isolantes. O ajuste da equação de Vinet aos dados de pressão e volume do ouro, obtidos dos cálculos DFT, encontra-se representado na Figura 2. A comparação entre os parâmetros da Equação de Vinet obtidos dos ajustes aos dados experimentais e aos dados de DFT é apresentada na Tabela 1.

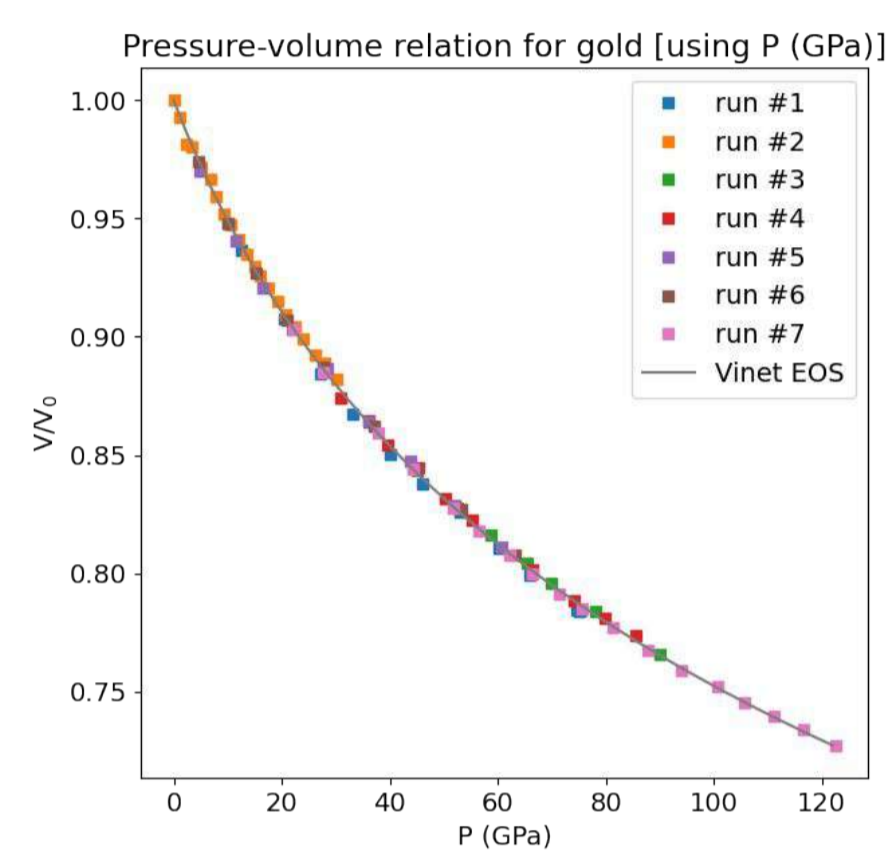


Figura 1. Relação entre a pressão e o volume do ouro - dados experimentais da literatura e equação de Vinet ajustada.

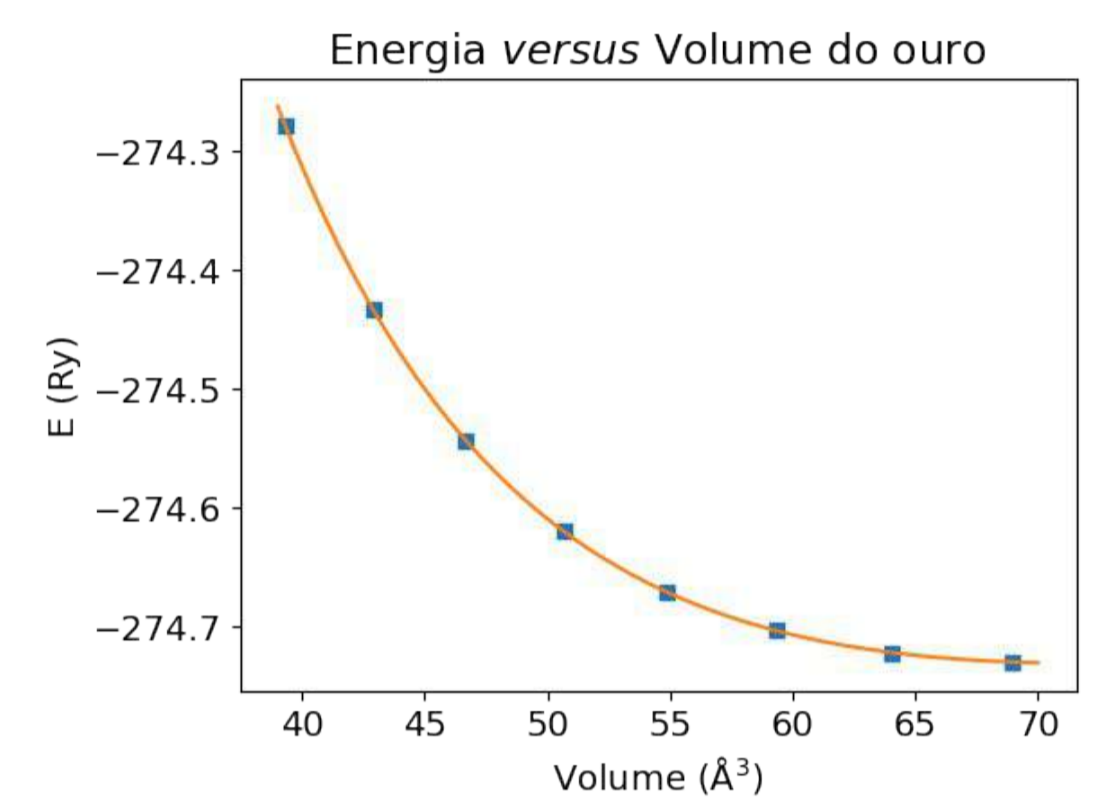


Figura 2. Relação entre a energia calculada pelo método DFT e o volume do ouro (quadrados). A linha contínua representa o ajuste da equação de Vinet integrada.

| Parâmetro               | Dados Experimentais | Dados de DFT  |
|-------------------------|---------------------|---------------|
| $V_0$ (Å <sup>3</sup> ) | 67.95228 (fixo)     | 71,84 ± 0,02  |
| $B_0$ (GPa)             | 165,6 ± 1,1         | 140,4 ± 0,4   |
| $B_0'$ (adimensional)   | 5,50 ± 0,06         | 6,027 ± 0,011 |

Tabela 1. Parâmetros ajustados da equação de Vinet e suas incertezas.

### CONCLUSÕES

Conclui-se que, com a exploração de apenas alguns de seus vários recursos, o Python demonstra ser extremamente útil e versátil para aplicações de ciência de dados. A análise de dados, de forma colaborativa, permitiu o aprofundamento no conhecimento relativo às equações de estado. A biblioteca LMFIT, nesse aspecto, tornou possível ajustar os parâmetros da equação, bem como suas incertezas, e realizar uma comparação apurada acerca dos dados experimentais e de simulação, que concordam razoavelmente entre si. O estudo em Python da relação pressão (ou energia) versus volume, para o ouro, permitiu analisar, de forma integrada, tanto os resultados experimentais quanto aqueles obtidos de simulações DFT.

### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- TAKEMURA, K.; DEWAELE, A. Isothermal equation of state for gold with a He-pressure medium. *Phys. Rev. B* 78, 104119 (2008).
- GOOGLE WORKSPACE MARKET: Collaboratory. 2021. Disponível em: <<https://workspace.google.com/marketplace/app/colaboratory/1014160490159>>. Acesso em 23 de agosto de 2021.
- JUPYTER. 2021. Disponível em: <<https://jupyter.org/>>. Acesso em: 19 de agosto de 2021.
- PYTHON. 2021. Disponível em: <<https://www.python.org/>>. Acesso em: 20 de agosto de 2021.