



## **EQUAÇÕES DE ESTADO PARA SÓLIDOS E CORRELAÇÃO ENTRE O MÓDULO VOLUMÉTRICO E SUA PRIMEIRA DERIVADA EM RELAÇÃO À PRESSÃO**

Lucas da Rosa Silva (PIBIC-CNPq), Laura Hübner Tessari Braz, Giovani Luís Rech, Claudio Antonio Perottoni (Orientador(a))

A equação de estado (EOS) é um modelo matemático que relaciona as grandezas de estado termodinâmico (pressão  $p$ , volume  $V$  e temperatura  $T$ ) e permite descrever o comportamento volumétrico de um sistema físico sujeito a diferentes condições experimentais. Dentre as EOSs temos as equações de estado sólido que apresentam como parâmetros o módulo volumétrico (*bulk modulus*)  $B_0$  e a sua primeira derivada em relação à pressão  $B_0'$ . Essas equações são essenciais para a compreensão do efeito de altas pressões sobre as propriedades dos materiais, com aplicações que incluem desde processos industriais até o estudo da matéria nuclear em estrelas de nêutrons. Este trabalho tem como objetivo aplicar a equação de estado de Rose-Vinet na descrição do comportamento volumétrico do ouro (Au) e, também, investigar a correlação entre os parâmetros  $B_0$  e  $B_0'$ . A partir de dados experimentais de volume da cela unitária *versus* pressão para o ouro (Au), publicados em artigo científico, utilizou-se o ambiente computacional Google Collaboratory em linguagem de programação Python, de modo a representar graficamente a relação pressão-volume e, posteriormente, ajustar a EOS de Rose-Vinet usando a biblioteca LMFIT. O resultado demonstra que os parâmetros  $B_0$  e  $B_0'$  são altamente correlacionados, mesmo quando a equação de estado é linearizada mediante mudança de variáveis. Alternativas para a redução desta correlação entre  $B_0$  e  $B_0'$ , inclusive usando dados obtidos de cálculos DFT (*Density Functional Theory*), estão sendo avaliadas.

Palavras-chave: Equação de estado, Módulo volumétrico, análise da dados

Apoio: UCS, CNPq