



SOLUÇÃO ANALÍTICA DO SEGUNDO COEFICIENTE DO VIRIAL PARA O POTENCIAL DE LENNARD-JONES E ANÁLISE COMPARATIVA DA TEMPERATURA DE BOYLE PELO MÉTODO DO TRAPÉZIO

Luiz Pedro Silva¹, Apiano Ferreira Moraes²

Resumo: O potencial de Lennard-Jones, $U(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$, descreve a interação entre moléculas, combinando repulsão de curto alcance e atração de longo alcance. A partir da relação entre esse potencial e o segundo coeficiente do virial, é possível determinar a temperatura de Boyle — condição em que as forças atrativas e repulsivas se compensam e o gás apresenta comportamento próximo ao ideal. Nesse sentido, este trabalho tem como objetivo obter uma solução analítica para o segundo coeficiente do virial associado ao potencial de Lennard-Jones e comparar a temperatura de Boyle resultante com aquela calculada pelo método numérico do trapézio. Inicialmente, aplicamos o potencial de Lennard-Jones na função de Mayer, $\Phi(r) = \exp[-U(r)/k_B T] - 1$ e substituímos na integral do segundo coeficiente do virial, $B_2 = -2\pi\sigma^3 \int_0^\infty \Phi(r) r^2 dr$. Desse modo, a integral foi tratada analiticamente por meio de integração por partes, regra de L'Hôpital, mudanças de variável, séries de Taylor e uso da função especial Gama (Γ). A expressão resultante foi implementada em Python (ambiente Spyder) para determinar a temperatura reduzida de Boyle, $T^* = \frac{k_B T}{\epsilon}$, e compará-la aos valores obtidos numericamente pelo método do trapézio com *cutoff adaptativo*. Para a avaliação numérica, a integral de B_2 foi dividida em contribuições repulsiva e atrativa, $B_2 = B_2^{\text{rep}} + B_2^{\text{att}}$, no qual $B_2^{\text{rep}} = -2\pi\sigma^3 \int_{r_{\min}}^1 \Phi(r) r^2 dr$ e $B_2^{\text{att}} = -2\pi\sigma^3 \int_1^{r_{\text{cut}}} \Phi(r) r^2 dr$. O limite inferior de integração para a parte repulsiva foi $r_{\min} = 0,01$, visando evitar singularidades em $r = 0$. Já o limite superior da região atrativa, r_{cut} , foi determinado pela condição $|U(r_{\text{cut}})| < 0,001 \text{ máx } |U(r)|$, onde $\text{máx } |U(r)|$ é o valor absoluto máximo do potencial no intervalo $r \in [1, 10]$. Ademais, a discretização das integrais foi realizada pelo método do trapézio, dado por: $\int_a^b \Phi(r) r^2 dr \approx \sum_{i=0}^{M-1} \frac{\Phi(r_i) r_i^2 + \Phi(r_{i+1}) r_{i+1}^2}{2} \Delta r$. Por fim, a comparação entre a expressão analítica e o método numérico foi realizada por meio do erro percentual entre os valores de T^* obtidos por cada abordagem. Assim, por meio da, função especial Gama e da manipulação da integral, obtemos a seguinte expressão para B_2 em função T^* : $B_2(T^*) = \frac{2\pi\sigma^3}{3} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{4}{T^*}\right)^{\frac{n}{2} + \frac{1}{4}} \left[\Gamma\left(\frac{2n+3}{4}\right) - \right.$

¹ Universidade Regional do Cariri, email: luiz.pedro28@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: apiano.morais@urca.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVENBRO de 2025

Tema: “UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030”



$\frac{1}{\sqrt{T^*}} \Gamma\left(\frac{2n+1}{4}\right)]$. A partir dessa expressão, a temperatura reduzida de Boyle foi determinada como a $T_1^* \approx 3,417$, enquanto o método do trapézio forneceu $T_2^* \approx 3,340$, resultando em um erro percentual de 2,3 %. Esses resultados demonstram que a solução analítica para o segundo coeficiente do virial do potencial de Lennard-Jones é altamente precisa, fornecendo uma estimativa da temperatura de Boyle em excelente concordância com o método numérico do trapézio.

Palavras-chave: Física Matemática. Potencial de Lennard-Jones. Temperatura de Boyle. Segundo Coeficiente do Virial.

Agradecimentos: L.P.S. agradece à Universidade Regional do Cariri pela bolsa de Iniciação Científica. A.F.M. agradece o apoio financeiro do CNPq (Processo nº 104550/2025-2).