



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIX SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS **SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2025**

Estudo de Propriedades Termodinâmicas de Sólidos submetido a Altas Pressões

João Victor Souza Guimarães¹; Franz A. Farias²

1. João Victor Souza Guimarães, PROBIC/UEFS, FÍSICA, e-mail: joaovictorsouzags@gmail.com

2. Franz Peter Alves Farias, DEPARTAMENTO DE FÍSICA, e-mail: franz.farias@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Equação de estado; deformação; sólidos; altas pressões.

INTRODUÇÃO

Quando sólidos são submetidos a altas pressões ($> 0,5$ Mbar ou 50 GPa) sofrem deformações em suas redes cristalinas de uma maneira não-linear. A Teoria Clássica da Elasticidade Infinitesimal descreve deformações limitadas à elasticidade linear. A ruptura deste postulado da linearidade leva a uma nova descrição para o comportamento dos sólidos sob altas pressões com a Teoria de Deformação Finita (TDF) proposta por Francis D. Murnaghan (Murnaghan, 1937).

A TDF tem sido aplicada extensamente ao estudo geofísico do interior da Terra através de equações de estado ditas semiempíricas, em que os parâmetros são determinados empiricamente. Essas equações de estado permitem testar hipóteses e modelos a respeito da constituição e propriedades físicas das camadas interiores da Terra (Anderson, 1989). Outra importância prática do tema dos sólidos sob altas pressões revela-se na síntese de novos materiais, além do teste crítico de conceitos teóricos e sua sistemática subjacente (Schilling, 1998). Isto envolve os semicondutores, os nanomateriais, os sólidos de gases raros, os metais alcalinos, entre outros.

Francis Birch considerando a teoria de Murnaghan na condição de tensão inicial como uma grande pressão hidrostática, estabelece a relação formal entre a compressão $\eta = V/V_0$ (ou volume relativo) e a deformação ϵ (Stacey, 1981), como:

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left(1 - \eta^{-\frac{2}{3}} \right) \quad (1)$$

O resultado essencial a partir da relação expressa pela equação (2) é uma equação de estado isotérmica (EoS) para a pressão em função do volume V , ou do volume relativo η .

A obtenção da EoS isotérmica se faz aqui por meio de uma expansão infinita, mas convergente, do potencial termodinâmico energia livre de Helmholtz F do sólido em termos da deformação ϵ . No presente trabalho, considera-se apenas a contribuição devido ao potencial interatômico (para $T = 0$ K) à energia livre de Helmholtz, considerando $E(\epsilon) = F - E_{ST}$. Expandindo em série de Taylor a $E(\epsilon)$ (Orson, 1995),

$$E(\epsilon) = B_0 V_0 \sum_{p=2}^{\infty} \left(\frac{C_p}{p!} \right) \epsilon^p \quad (3)$$

em que B_0 e V_0 são o módulo de incompressibilidade e o volume, respectivamente, quando a pressão P é zero. É considerando a equação (3) e as relações termodinâmicas que se estabelecem as denominadas equações de estado isotérmicas de Birch-Murnaghan de segunda e terceira ordem (BM-2 e BM-3, respectivamente):

$$P(\eta) = \frac{3}{2}B_0 \left(\eta^{-\frac{7}{3}} - \eta^{-\frac{5}{3}} \right) \quad (4)$$

e

$$P(\eta) = \frac{3}{2}B_0 \left(\eta^{-\frac{7}{3}} - \eta^{-\frac{5}{3}} \right) \left(1 + \frac{3}{4}(B'_0 - 4) \left(\eta^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) \right) \quad (5)$$

Este trabalho também aborda a equação de Murnaghan,

$$P = \left(\frac{B_0}{B'_0} \right) (\eta^{-B'_0} - 1) \quad (6)$$

que é mais simples, mas descreve bem o comportamento da pressão até altas compressões.

MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

Esta pesquisa consistiu-se numa revisão de literatura; artigos e textos-base sobre equações de estado isotérmicas para sólidos e seus respectivos desempenhos no regime de altas pressões.

RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO (ou Análise e discussão dos resultados)

Para comparar o desempenho dessas equações na situação de altas pressões, da ordem de dezenas de giga pascais (GPa), foram primeiramente utilizados dados de compressão para o mineral periclase, ou óxido de magnésio (MgO). É mostrado o gráfico de dispersão para os valores da pressão P em função do volume relativo η na Figura 1 para esse mineral.

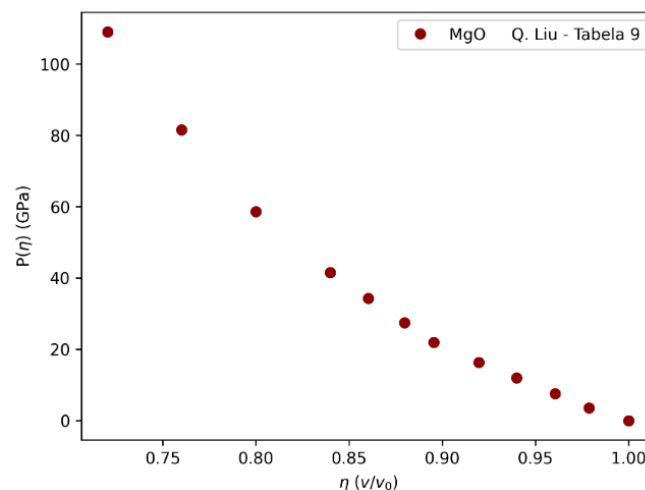


Figura 1: Dados da pressão P em GPa em função do volume relativo η (Liu, 2009).

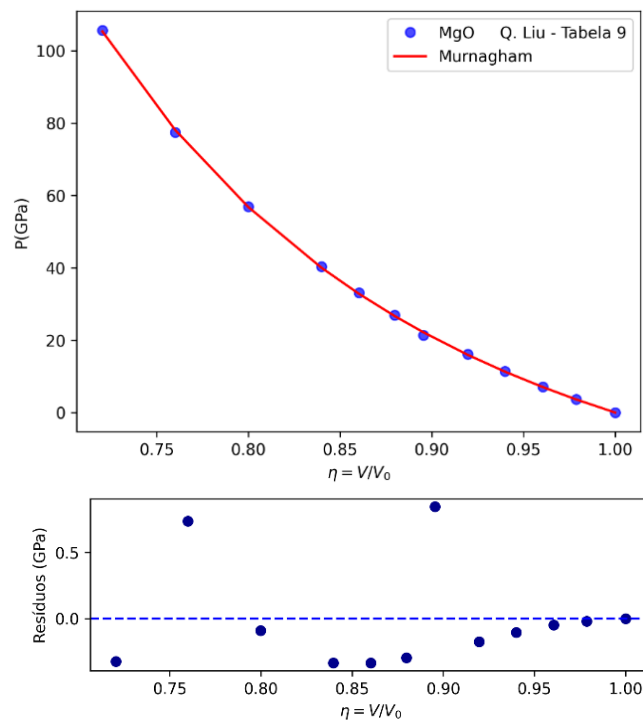


Figura 2: Gráfico do ajuste da equação de Murnaghan. Abaixo, o gráfico de resíduos do ajuste.

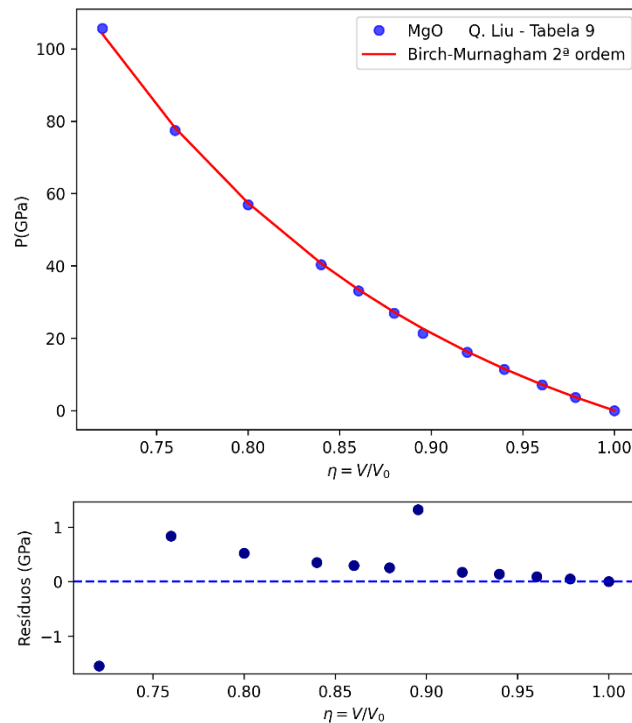


Figura 3: Gráfico do ajuste da equação de BM-2. Abaixo, o gráfico de resíduos do ajuste.

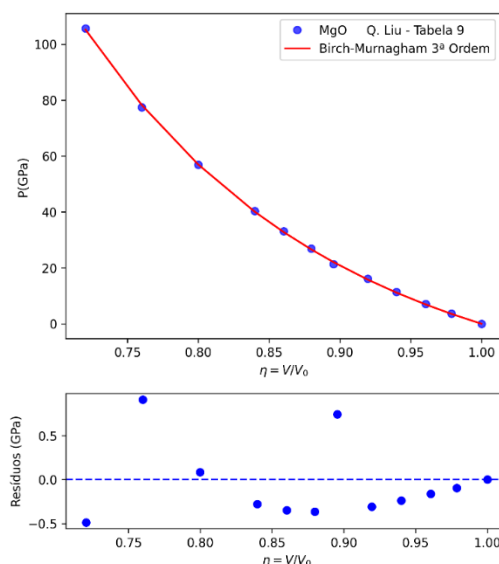


Figura 4: Gráfico do ajuste da equação de BM-3. Abaixo, o gráfico de resíduos do ajuste.

As Figuras 2 – 4 mostram o resultado do ajuste para cada equação de estado.

Tabela 1. Resultados estatísticos para os três ajustes Murnaghan, BM-2 e BM-3, valores calculados dos parâmetros e número de iterações ($N^{\circ} I$) até a convergência.

EoS	B_0	B'_0	χ^2_v	R^2	$\delta_{\%}(B_0)$	$\delta_{\%}(B'_0)$	$N^{\circ} I$
Murnaghan	161,67	3,8	0,17	0,99984	0,2%	8,0%	16
BM 2 ^a	164,43	1,0	0,54	0,99957	1,5%	—	13
BM 3 ^a	157,61	4,3	0,21	0,99981	2,7%	4,1%	13

Neste caso, o ajuste da equação BM-3 foi a que melhor determinou os valores finais dos parâmetros B_0 e B'_0 , com o menor erro relativo combinado. Em termos dos resíduos, por outro lado, a equação de Murnaghan prevê valores da pressão sistematicamente menores dos que os valores experimentais medidos para o óxido de magnésio (MgO), principalmente para baixas compressões η , na faixa de (0,8 – 1,0), como é atestado pelas Figuras 2 – 4. O mesmo comportamento é observado para o ajuste da equação de BM-3; a pressão calculada é menor para compressões intermediárias e aumenta com altas compressões (menores valores do volume relativo V/V_0).

O oposto ocorre para BM-2, em que as pressões obtidas são maiores que as dos dados em praticamente toda o intervalo de compressão.

Devido à dificuldade na obtenção de dados de compressão para o sólido de gás raro Argônio (Ar), ainda não foi possível finalizar o estudo comparativo para este caso experimental. No entanto, esta parte final do trabalho está sendo continuada, com prazo de finalização máximo de duas semanas.

CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

Os ajustes demonstraram bom desempenho geral, em termos dos coeficientes de determinação, destacando a equação BM-3 como ligeiramente superior em termos de erro relativo combinado para os parâmetros B_0 e B'_0 .

Para o MgO, o estudo comparativo indicou melhor performance geral para BM-3, corroborando a relevância das EoS Birch-Murnaghan em contextos geofísicos.

Apesar das dificuldades enfrentadas, como a limitação de dados experimentais para o sólido de gás raro Argônio (Ar), o trabalho consolidou o entendimento das teorias de elasticidade e deformação, principalmente através de sua aplicação ao caso experimental do óxido de magnésio (MgO).

Por fim, agradecimentos aos pesquisadores e colegas do Grupo Física no Campos (FisCampus), em especial ao professor Álvaro Santos Alves pela orientação na parte computacional da pesquisa.

REFERÊNCIAS

- MURNAGHAN, F. D. Finite deformations of an elastic solid. *American Journal of Mathematics*, v. 59, n. 20, p. 235, 1937.
- BIRCH, F. Elasticity and constitution of the Earth's interiors. *Journal of Geophysical Research*, v. 57, n. 2, p. 227, 1952.
- STACEY, F. D.; BRENNAN, B. J.; IRVINE, R. D. Finite strain theories and comparisons with seismological data. *Geophysical Survey*, v. 4, p. 189, 1981.
- STACEY, F. D. High pressure equations of state and planetary interiors. *Reports on Progress in Physics*, v. 68, p. 341, 2005.
- GRÜNEISEN, E. The state of a solid body. Tradução de "Zustand des festen Körpers". *Handbuch der Physik*, Berlim, 1926. Washington: NASA RE 2-18-59W, 1959.
- SCHILLING, J. S. The use of high pressure in basic and materials science. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, v. 59, n. 4, p. 553, 1998.
- AHMAD, J. F.; ALKAMMASH, I. Y. Theoretical study of some thermodynamical properties for solid under high pressure using finite-strain EOS. *Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences*, v. 12, p. 17, 2012.
- ANDERSON, D. L. *Theory of the Earth*. Oxford: Blackwell Scientific Publications, 1989.
- SCHROEDER, D. V. *An introduction to thermal physics*. San Francisco: Addison-Wesley, 2000.
- ANDERSON, O. L. *Equations of state of solids for geophysics and ceramic science*. Oxford: Oxford University Press, 1995.
- KITTEL, C. *Introduction to solid state physics*. 8. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2005.