

TERMODINÀMICA I MECÀNICA ESTADÍSTICA

TREBALL DE SIMULACIÓ (Data límit d'entrega: 9/5/2025)

- El treball de simulació s'entregarà en **grups de 2 o 3 persones**.
- El que s'haurà de presentar és (en un únic arxiu) la resposta a les 8 qüestions que es plantegen aquí (és important que feu servir taules i gràfics allà on sigui possible per tal que els vostres resultats siguin senzills de visualitzar).

1. Gas d'esferes dures

Instruccions: Aneu a la web <https://www.glowscript.org/#/user/GlowScriptDemos/folder/Examples/> i descarregueu-vos (anant a View -> Download) l'arxiu del codi del programa 'HardSphereGas' en Python (extensió .py). Per poder-lo executar necessitareu un compilador de Python (jo recomano que descarregueu la plataforma Anaconda, que inclou l'editor Spyder). Per tal que el programa s'executi, segurament necessitareu instal·lar apart el paquet de visualització Vpython (en el cas de Spyder, podeu obrir la consola d'Anaconda i escriure "pip install vpython" per tal que us intal·li el paquet).

Q1. (1.5p) Fixeu $N_{atoms} = 500$ en el programa (i a partir d'ara trebal·leu sempre amb aquest valor). Modifiqueu el codi del programa per tal que us permeti obtenir el temps mitjà entre col·lisions per les partícules. Compareu el valor mitjà d'aquest temps entre col·lisions amb el teòric en funció de la mida de les partícules. Podeu trobar informació respecte el valor teòric esperat (pel cas del gas ideal) per exemple aquí: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Kinetics/06%3A_Modeling_Reaction_Kinetics/6.01%3A_Collision_Theory/6.1.04%3A_Collision_Frequency](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Kinetics/06%3A_Modeling_Reaction_Kinetics/6.01%3A_Collision_Theory/6.1.04%3A_Collision_Frequency).

Q2. (1.5p) Utilitzeu el concepte de termostat d'Andersen per a implementar en aquest codi un procés isòcor pel gas d'esferes dures. Comproveu fins a quin punt els resultats de la pressió en funció del temps que s'obtenen de la simulació corresponent encaixen amb el comportament esperat per un gas ideal en funció de la mida de les partícules. Discutiu breument com podem fer que el procés sigui quasiestàtic.

Q3. (1.5p) Utilitzeu el concepte de font tèrmica per a implementar un procés isoterm pel gas d'esferes dures (fent que una de les parets del recipient, en contacte amb la font, sigui mòbil per tal que el gas es pugui expandir o comprimir). Comproveu fins a quin punt els resultats de la pressió en funció del temps que s'obtenen de la simulació corresponent encaixen amb el comportament esperat per un gas ideal en funció de la mida de les partícules. Discutiu breument com podem fer que el procés sigui quasiestàtic.

Q4. (1p) En base als resultats de les qüestions anteriors, expliqueu com reproduir computacionalment un cicle de Stirling (format per dues isoterms i dues isòcores). En concret, expliqueu en paraules què cal fer per a simular cada un dels 4 processos del cicle i com es podria mesurar a nivell computacional el rendiment termodinàmic del cicle.

2. Fluid de Lennard-Jones

Instruccions: Aneu a la pàgina web del OpenSourcePhysics (<https://www.compadre.org/osp/>) i busqueu el paquet de simulació anomenat "Gas-Liquid Coexistence by Gibbs Ensemble Model". Descarregueu l'aplicació Java corresponent i comproveu que podeu obrir-la i fer-la funcionar. Feu córrer la simulació amb els paràmetres per defecte excepte $N_1 = N_2 = 256$, i activant totes les opcions de output (Output table, Densities, RDFunc, 3D Views) per visualitzar el màxim d'informació.

Q5. (1.5p) Al llarg de la coexistència líquid-gas cal esperar un comportament del tipus $\rho_l - \rho_g = A(1 - T/T_c)^\beta$, on ρ_l , ρ_g són les densitats de cada una de les fases, T_c és la temperatura crítica, β és el paràmetre d'ordre, i A és una constant positiva. A partir de la informació que apareix al diagrama de fases que podeu visualitzar en la simulació, justifiqueu quant val T_c . A continuació utilitzeu les simulacions per tal d'anar trobant punts d'equilibri per diferents temperatures i determinar així els valors de β i A (Nota: el valor teòric de β per un fluid de Lennard-Jones en 3D es pot trobar per Internet, per exemple a l'article 'Gibbs ensemble Monte Carlo' que us deixo al Moodle).

3. Creació d'una simulació de Monte Carlo pròpia

Instruccions: Haureu de generar un codi propi amb Python per simular (mitjançant tècniques de Monte Carlo) un gas ideal en col·lectivitat canònica en d dimensions (on el codi permet escollir entre $d = 1$, $d = 2$ o $d = 3$).

Q6. (0.5p) Adjunteu una còpia (amb comentaris identificant què fa cada part) del codi que heu generat.

Q7. (0.5p) Expliqueu com estudiar la capacitat calorífica d'aquest gas a partir del codi.

Q8. (2p) D'acord amb la resposta de la pregunta anterior, feu servir el vostre codi per comprovar que la capacitat calorífica mesurada computacionalment encaixa amb el valor esperat segons la teoria pels diferents valors de d .