

TERMODINÀMICA I MECÀNICA ESTADÍSTICA

SIMULACIONS PER ENTREGAR

Data límit d'entrega: 5/5/2017

- El treball de simulació es presentarà en grups de 2 o 3 persones (AVÍS: qui no segueixi aquesta norma tindrà una penalització a la nota).

El que s'haurà d'entregar és la resposta a les 10 qüestions que es plantegen aquí en el format que vosaltres escolliu (es valorarà que intenteu utilitzar tant com sigui possible taules i gràfics per il·lustrar les respostes). A l'enunciat teniu marcada la puntuació corresponent a cada qüestió.

1. Gas d' esferes dures

(i) Descarregueu el programa `gas.py` en la versió que trobareu al Campus Virtual, on es simula la dinàmica molecular d'un gas d'esferes dures. Observeu el codi i intenteu entendre els detalls del programa (Nota: La sintaxi de Python pot ser bastant críptica per als qui no n'estiguin acostumats. Tot i així, feu l'esforç d'intentar entendre què fa cada línia del programa).

b) Descarregueu-vos el software lliure Vpython per tal de poder compilar l'arxiu, i una vegada compilat feu-lo córrer per veure què passa.

Q1. (0.75p) Un dels outputs del programa és un gràfic on es mostra l'evolució temporal de la distribució de velocitats de les partícules. Interpreteu els resultats que s'observen en aquest gràfic, tenint en compte les condicions inicials usades i l'evolució a mida que passa el temps. Digueu què passaria si en comptes d'un gas d'esferes dures féssim la simulació amb un gas estrictament ideal (sense interacció de cap tipus).

Q2. (1p) Comproveu que l'estadística de Maxwell s'acompleix, tot modificant el programa per tal que us doni com a sortida les components de la velocitat, i caracteritzant estadísticament la distribució que se n'obté.

Q3. (0.5p) Fixeu $N = 500$ per apropar-nos una mica més al límit termodinàmic (i a partir d'ara treballem sempre amb aquest valor). Feu algunes proves donant diferents valors al paràmetre *Ratom*. Discutiu quins problemes poden aparèixer si un utilitza valors massa petits o massa grans d'aquest paràmetre, i en base a això escolliu quin valor de *Ratom* fareu servir a partir d'ara.

Q4. (1.25p) Modifiqueu el programa de manera que pugui reproduir un procés de Joule (expansió lliure). Comenteu en detall com ho heu fet i estudieu el cas en què el gas s'expandeix des del seu volum inicial V_0 fins a $2V_0$. Mostreu la variació de temperatura del gas al llarg del procés i compareu els resultats de la simulació amb els que s'obtenen teòricament (i) per un gas ideal, i (ii) per un gas de van der Waals.

Q5. (1.25p) Deixeu que el gas de la simulació assoleixi l'equilibri a la temperatura inicial $T = 300$. Aleshores poseu-lo en contacte amb un termostat de Andersen a temperatura $2T$ i deixeu evolucionar el sistema fins assolir el nou equilibri. Mostreu el gràfic de la pressió en funció del temps i discutiu si el procés és quasiestàtic o no. Comenteu com hauríem de fer l'experiment per garantir que el sistema evoluciona del mateix estat d'equilibri inicial al mateix estat d'equilibri final, però de forma quasiestàtica.

2. Equació d'estat d'un gas real

- (i) Aneu a la pàgina web del OpenSourcePhysics (<http://www.opensourcephysics.org/>) i busqueu el paquet de simulació anomenat “Chemical potentials by Monte Carlo simulations”.
- (ii) Descarregueu l'aplicació Java corresponent i comproveu que podeu obrir-la. Llegiu les indicacions i l'ajuda, que us serviran com a introducció.

Q6. (0.75p) Utilitzant l'opció NVT proveu a córrer la simulació utilitzant $N = 500$ i els tres conjunts de valors següents: (i) $\rho_1 = 0.1$, $T = 1.3$ (ii) $\rho_1 = 0.8$, $T = 1.0$ (iii) $\rho_1 = 1.0$, $T = 0.2$. Deixeu que la simulació assoleixi un estat d'equilibri i interpreteu físicament què està passant en cada cas, ajudant-vos de la informació que us dona el gràfic de la distribució radial $g(r)$ i dels gràfics que apareixen amb les pestanyes “Vapor-liquid” i “3D view” (Nota: la $g(r)$ que mostra la simulació està normalitzada respecte els valors que s'obtindrien per un gas ideal) Expliqueu per què apareix en l'últim cas una pressió negativa.

Q7. (1.25p) Utilitzant l'opció NVT proveu a obtenir la corba $P(\rho)$ per diferents valors de T , i la corba $P(T)$ per diferents valors de ρ . Feu una comparació gràfica amb els resultats teòrics corresponents a un gas de van der Waals, i discuteu els resultats.

Q8. (0.5p) Ara intentarem afinar els resultats de l'apartat anterior fent servir una equació d'estat més sofisticada que la de van der Waals per aproximar el fluid de Lenard-Jones. En primer lloc llegiu les seccions I i II de l'article de Song & Mason que trobareu adjunt amb els arxius del treball (*Avís: No cal que entengueu tots els detalls, però sí la idea general*). A partir d'això expliqueu, només de manera QUALITATIVA i amb les vostres pròpies paraules, quina és la millora de l'equació d'estat que ells proposen respecte a l'equació de van der Waals.

Q9. (1.25p) Utilitzant l'equació d'estat que Song & Mason finalment proposen (Eq. 26), determineu numèricament (podeu utilitzar el software de càlcul que vulgueu) la pressió per un fluid de Lenard-Jones a diferents temperatures i densitats (observeu que teniu les figures 4 i 6 de l'article de Song & Mason com a referència). Compareu els valors obtinguts amb les corbes de les simulacions de la qüestió Q7, i discuteu els resultats.

3. Comportament crític a les transicions de fase

- (i) Aneu a la pàgina web del OpenSourcePhysics (<http://www.opensourcephysics.org/>) i busqueu el paquet de simulació anomenat “Gas-Liquid Coexistence by Gibbs Ensemble Model”.
- (ii) Descarregueu l'aplicació Java corresponent i comproveu que podeu obrir-la. Llegiu les indicacions i l'ajuda, que us serviran com a introducció.

Q10. (1.25p) Feu córrer la simulació amb els parametres per defecte excepte $N_1 = N_2 = 256$. Aneu pujant a poc a poc la temperatura i aneu comprovant quin és l'efecte que això té sobre les fluctuacions de la densitat (gràfic RDF). Observeu què succeeix a mida que us apropau a $T = 1.3$ i feu la interpretació física corresponent. Trobeu alguna manera d'avaluar numèricament el valor de l'exponent crític associat a la transició que té lloc en aquell punt.