

Difusión de partículas - Teoría

Santiago Ruiz Piedrahita¹

¹Instituto de Física, U de A, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

Octubre 2023

Resumen

En el presente documento se expone la teoría para entender la simulación de difusión de gases, partiendo de forma general del concepto de gas hasta la teoría cinética de los gases, que es el proceso por el cual se modelan los gases como partículas que chocan aleatoriamente entre sí y contra las paredes de un contenedor, para finalmente comentar de por qué se usa esta teoría en la simulación.

1. Introducción

Los gases están literalmente a nuestro alrededor: el aire que respiramos es una mezcla de gases. Otros gases son los que hacen que los panes y pasteles sean blandos, los que hacen que las bebidas sean efervescentes y los que se queman para calentar muchos hogares. Los motores y los refrigeradores dependen del comportamiento de los gases.

1.1. Conceptos fundamentales

El estudio del calor y la temperatura forma parte de un área de la física conocida como termodinámica, en la que se requiere que un sistema sea macroscópico, es decir, que esté formado por un número enorme (como 10^{23}) de moléculas. El sencillo modelo de un hipotético “gas ideal” describe con gran precisión propiedades como el volumen, la presión y la temperatura de un gas en muchas condiciones.

Para obtener una comprensión más completa de los gases, es necesario también examinar su comportamiento a nivel microscópico, es decir, considerar cómo las moléculas se relacionan entre sí en este estado. En el caso de los gases, estas moléculas interactúan de manera tenue, lo que hace que el comportamiento microscópico de los gases sea relativamente simple. Esto los convierte en una excelente introducción a sistemas compuestos por muchas moléculas. La representación molecular de los gases se conoce como la teoría cinética de los gases, y se trata de un ejemplo clásico de un modelo molecular que ayuda a explicar los fenómenos cotidianos.

1.1.1. Gases

El origen de la palabra **gas** se remonta al vocablo flamenco que denota **caos**, y fue empleado inicialmente por el químico del siglo XVII, J. B. van Helmont, para describir los vapores. Lo curioso es que este término resultó ser muy apropiado, dado que los gases consisten en moléculas que se desplazan y colisionan de manera aleatoria. Esta aleatoriedad facilita la relación entre los aspectos microscópicos y macroscópicos de manera más sencilla en el caso de los gases en comparación con los líquidos o sólidos.

¿Cuáles son las distinciones fundamentales entre los gases y los sólidos o líquidos? Bajo condiciones normales, como las que experimentamos con el aire que nos rodea, la diferencia principal radica en que las moléculas en los gases están considerablemente más distanciadas en comparación con las de los sólidos y los líquidos.

Esto se debe a que las distancias típicas entre moléculas son significativamente amplias en relación al tamaño de una molécula. En consecuencia, las fuerzas que actúan entre las moléculas se consideran en su mayoría insignificantes, salvo en el momento de colisiones entre ellas. Además, a temperaturas mucho mayores que el punto de ebullición, las moléculas de los gases se mueven rápidamente y se expanden rápidamente para llenar todo el espacio disponible. En contraste, en los líquidos y sólidos, las moléculas están mucho más cercanas entre sí, y su comportamiento está fuertemente influenciado por las interacciones mutuas. Las propiedades macroscópicas de estas sustancias dependen en gran medida de las fuerzas entre las moléculas, y dado que muchas moléculas interactúan entre sí, los “problemas de muchos cuerpos” resultantes pueden volverse extremadamente complicados.

1.1.2. Teoría cinética de los gases

La teoría cinética de los gases establece una relación entre las características observables de los gases y el movimiento de las moléculas que los conforman. Para ello, en primer lugar, formulamos dos suposiciones acerca de las moléculas en un gas ideal:

1. Existe un número extremadamente grande, N , de moléculas, todas idénticas, cada una con una masa m .
2. Las moléculas siguen las leyes de Newton y se encuentran en un movimiento constante, aleatorio e isotrópico, es decir, su movimiento es uniforme en todas las direcciones.

Con el fin de derivar la ley de los gases ideales y establecer la conexión entre las propiedades microscópicas, como la energía de una molécula típica, y las propiedades macroscópicas, como la temperatura, llevamos a cabo un análisis de una muestra de gas ideal contenida en un recipiente rígido, para lo cual realizamos dos suposiciones adicionales:

1. Las moléculas son mucho más pequeñas que la distancia promedio entre ellas, lo que significa que su volumen total es significativamente menor que el volumen del recipiente (con un volumen V).
2. Las moléculas colisionan de manera completamente elástica con las paredes del recipiente y entre sí. Cualquier otra fuerza que actúe sobre ellas, como la gravedad y las atracciones representadas por la constante a de van der Waals, se considera insignificante (lo cual es necesario para mantener la suposición de isotropía).

La derivación de la ley de los gases ideales no incluye las colisiones entre moléculas, y esto no afecta el proceso de derivación, ya que las colisiones entre moléculas en movimiento aleatorio simplemente resultan en nuevas velocidades aleatorias. Además, si las velocidades iniciales de las moléculas en un recipiente de gas no son aleatorias e isotrópicas, las colisiones moleculares son responsables de hacer que estas velocidades se vuelvan aleatorias e isotrópicas.

Realizamos algunas suposiciones adicionales para simplificar los cálculos, sin embargo, estas suposiciones no alteran el resultado. En primer lugar, asumimos que el recipiente tiene una forma de un rectángulo. En segundo lugar, inicialmente, consideramos gases monoatómicos, aquellos cuyas moléculas consisten en átomos individuales, como el helio. Por lo tanto, podemos suponer que estos átomos no poseen energía adicional, a excepción de su energía cinética traslacional; esto implica que no tienen energía rotacional ni vibracional, como ejemplo de simplificación.

En una muestra de gas contenida en un recipiente, la imprevisibilidad del movimiento molecular provoca variaciones en el número de colisiones que las moléculas tienen con las distintas partes de las paredes en un lapso de tiempo dado. No obstante, debido a que un gran número de moléculas impacta con la pared en un corto período, las fluctuaciones en el número de colisiones en términos de tiempo y espacio que podemos medir son mínimas y generalmente pasan desapercibidas en comparación con el promedio. Esta situación puede asemejarse a la de un casino, donde los resultados de las apuestas son aleatorios y los

ingresos del casino pueden oscilar de manera significativa durante minutos u horas. Sin embargo, en períodos más extensos, como un año, los ingresos del casino se aproximan notablemente a las expectativas basadas en las probabilidades. Un tanque de gasolina alberga una cantidad considerablemente mayor de moléculas en comparación con las apuestas realizadas en un casino a lo largo de un año, y las moléculas experimentan un número significativamente superior de colisiones en un segundo en comparación con las apuestas efectuadas en un casino.

El cálculo de la fuerza promedio ejercida por las moléculas contra las paredes del contenedor nos conduce a la ley de los gases ideales y al vínculo entre la temperatura y la energía cinética molecular. De hecho, efectuamos dos promedios en este proceso: uno a lo largo del tiempo para obtener la fuerza promedio generada por una molécula con una velocidad determinada y luego otro promedio que incluye moléculas con diversas velocidades.

1.1.3. Energía cinética promedio por molécula

La energía cinética promedio de una molécula es directamente proporcional a su temperatura absoluta:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}K_B T \quad (1)$$

Es importante destacar que nada en esta ecuación depende de la masa molecular ni de ninguna otra propiedad del gas, ni de la presión u otros factores aparte de la temperatura. Si tenemos muestras de gas de helio y xenón con masas moleculares muy diferentes y están a la misma temperatura, las moléculas tendrán la misma energía cinética promedio.

La energía interna de un sistema termodinámico se compone de la suma de las energías mecánicas de todas las moléculas que lo constituyen. Ahora podemos proporcionar una ecuación para la energía interna de un gas ideal monoatómico. En un gas de este tipo, la energía de las moléculas se limita a su energía cinética traslacional.

$$E = \frac{3}{2}N K_B T \quad (2)$$

1.1.4. Velocidad media cuadrática

La velocidad media cuadrática (*rms*) de una molécula es:

$$v_{rms} = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}} \quad (3)$$

La velocidad *rms* no es el promedio ni la rapidez más probable de las moléculas, como veremos en la sección Distribución de las velocidades moleculares, pero proporciona una estimación fácilmente calculable de la velocidad de las moléculas que está relacionada con su energía cinética.

1.1.5. Distribución de las velocidades moleculares

Las partículas en un gas ideal se mueven a velocidades generalmente elevadas, aunque no todas tienen velocidades idénticas. La velocidad cuadrática media (*rms*) constituye una forma de promedio, aunque muchas partículas se desplazan a mayores velocidades mientras que otras lo hacen a velocidades menores.

El movimiento de las moléculas en un gas se caracteriza por ser impredecible en cuanto a la magnitud y dirección en el caso de moléculas individuales. Sin embargo, cuando se trata de un gas compuesto por muchas moléculas, se observa una distribución predecible de las velocidades moleculares. A esta distribución predecible de velocidades moleculares se le denomina la distribución de Maxwell-Boltzmann.

$$f(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2K_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/(2K_B T)} \quad (4)$$

1.1.6. Difusión

La difusión de los gases es un proceso fundamental en la naturaleza que se refiere a la mezcla y dispersión de moléculas gaseosas en un espacio dado.

La difusión de los gases se debe al movimiento constante y aleatorio de las moléculas gaseosas individuales. Cada molécula de gas se mueve en una dirección y a una velocidad aleatoria, lo que resulta en un caos microscópico en el comportamiento de las moléculas. Aunque cada molécula sigue una trayectoria impredecible, con el tiempo, este movimiento aleatorio conduce a la dispersión y la mezcla uniforme de las moléculas en el espacio circundante.

Varios factores influyen en la velocidad y eficiencia de la difusión de los gases:

- **Diferencia de Concentración:** La difusión es más rápida cuando existe una gran diferencia de concentración entre dos regiones. Las moléculas tienden a moverse desde áreas de mayor concentración hacia áreas de menor concentración en un esfuerzo por igualar la concentración en todo el espacio.
- **Temperatura:** A temperaturas más altas, las moléculas de gas tienen una energía cinética más alta y, por lo tanto, se mueven más rápidamente. Esto puede acelerar la difusión de los gases.
- **Masa Molecular:** Las moléculas más ligeras se mueven más rápido que las moléculas más pesadas a una temperatura dada. Por lo tanto, los gases con moléculas más ligeras tienden a difundirse más rápidamente.

La difusión de los gases tiene importantes aplicaciones en diversas áreas, como por ejemplo:

- **Respiración:** En el proceso de respiración, el oxígeno se difunde desde el aire en los pulmones hacia la sangre, mientras que el dióxido de carbono se difunde desde la sangre hacia los pulmones para ser exhalado.
- **Reacciones Químicas:** En muchas reacciones químicas, la difusión de los reactivos es esencial para que ocurran las colisiones entre moléculas y se produzcan productos.
- **Industria Alimentaria:** La difusión de gases es esencial en la fabricación de alimentos y bebidas, como la carbonatación de refrescos y la fermentación de pan y cerveza.
- **Contaminación Atmosférica:** La difusión de contaminantes en la atmósfera puede tener un impacto significativo en la calidad del aire en las áreas urbanas.
- **Tecnología de Semiconductores:** En la fabricación de microchips y dispositivos electrónicos, la difusión de gases es fundamental para el proceso de deposición de películas delgadas.

1.1.7. Efusión

La efusión es un proceso relacionado con la difusión de gases, pero se centra en la salida de moléculas o partículas gaseosas a través de un pequeño orificio o poro en un contenedor.

La efusión ocurre cuando las moléculas de un gas se escapan de un contenedor a través de un orificio o abertura. Este proceso se rige por las mismas leyes de movimiento aleatorio de las moléculas que se aplican en la difusión. Las moléculas gaseosas se mueven constantemente en todas direcciones, pero algunas de ellas adquieren la energía necesaria para atravesar el orificio y escapar del contenedor.

2. Simulación

Esta simulación modela el comportamiento de partículas de gas en dos cajas separadas, permitiendo a los usuarios ajustar parámetros como el número de partículas, la masa, el radio y la temperatura, y observar cómo influyen estos parámetros en el comportamiento de las partículas a medida que se mueven y colisionan en las cajas. También se incluyen gráficos para visualizar la evolución del número de partículas en el tiempo.

Comportamiento de partículas de gas: La simulación está diseñada para representar cómo se comportan pequeñas partículas gaseosas dentro de dos cajas. En el mundo real, cuando tienes un gas, como el aire, está compuesto por una gran cantidad de partículas (átomos o moléculas) que se mueven en todas direcciones de manera constante y chocan entre sí. Esta simulación intenta capturar ese comportamiento.

Ajustar parámetros: La simulación permite a los usuarios cambiar algunas características de estas partículas, como cuántas hay, cuánto pesan, qué tan grandes son y cuánta energía (temperatura) tienen. Esto se hace a través de botones y deslizadores en la interfaz de usuario. Los usuarios pueden modificar estos parámetros para ver cómo afecta el comportamiento de las partículas.

Influencia de los parámetros: Cuando ajustas estos parámetros, afectas directamente cómo se comportan las partículas. Por ejemplo, si aumentas la temperatura, las partículas se vuelven más rápidas y tienen más energía cinética, lo que puede hacer que choquen con más fuerza y con mayor frecuencia. Cambiar la masa o el tamaño de las partículas también puede influir en su comportamiento, ya que afecta cómo se mueven y cómo interactúan entre sí.

Movimiento y colisiones en las cajas: Las partículas se mueven dentro de dos cajas separadas. Pueden moverse libremente dentro de cada caja y también pueden chocar entre sí y rebotar en las paredes de las cajas. La simulación calcula y muestra cómo estas partículas se mueven y colisionan en respuesta a los parámetros que el usuario ha establecido.

Gráficos para visualizar: Para ayudar a los usuarios a comprender lo que está sucediendo en la simulación, se muestran gráficos en la interfaz. Uno de los gráficos muestra cómo cambia el número de partículas en cada caja a medida que pasa el tiempo. Esto es útil para ver cómo las partículas se distribuyen y se comportan en las dos cajas a lo largo del tiempo.

En resumen, esta simulación es una herramienta interactiva que te permite experimentar con diferentes condiciones para un sistema de partículas gaseosas en dos cajas separadas. Puedes cambiar parámetros como la cantidad de partículas, su tamaño, masa y temperatura, y observar cómo estas modificaciones influyen en el comportamiento y la evolución del sistema, lo que te ayuda a comprender mejor los conceptos relacionados con la dinámica de gases.

Referencias

- Young, Freedman, R. A., Ford, A. L. (Albert L., Flores Flores, V. A., and Rubio Ponce, A. (2009). Sears - Zemansky física universitaria (12a ed.). Pearson Educacion de Mexico.
- William Moebs, Samuel J. Ling, Jeff Sanny. (2021, noviembre 17). Física universitaria Volumen II. Openstax.org. <https://openstax.org/details/books/f>