

Gases

ExactasPrograma

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

Verano 2019



GASES

En el siglo XVII
Boyle-Mariot

$$PV = k_1$$

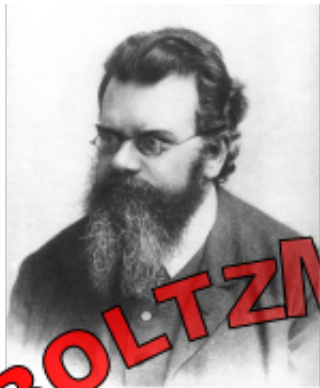
Gay Lussac

$$P/T = k_2$$

Ecuación de estado de un gas ideal

$$PV = nRT$$

y en eso llegó ...



BOLTZMANN

(En realidad fueron unos cuantos, empezando por Daniel Bernoulli, J. C. Maxwell entre otros)

Idea absurda

- Los gases están compuestos por partículas que casi no interactúan entre ellas (salvo por choques esporádicos).
- La presión es producida por los choques de las partículas contra las paredes.

Idea absurda

- Los gases están compuestos por partículas que casi no interactúan entre ellas (salvo por choques esporádicos).
- La presión es producida por los choques de las partículas contra las paredes.
- La temperatura está relacionada con el promedio de energía cinética de esas partículas.

$$\frac{\sum_j^{npart} \frac{1}{2} m_j |V_j|^2}{npart} = \langle Ec \rangle = \frac{3}{2} K_B T \quad (1)$$

donde K_B es la constante de Boltzmann ($K_B = \frac{R}{N_A}$).

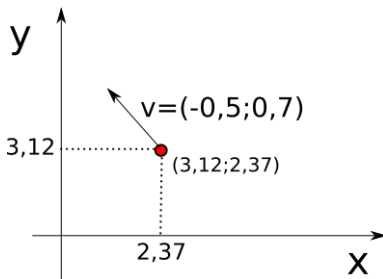
¿Cómo saber si el modelo está bien?

Tengo dos opciones:

- 1 Hago un modelo muy simplificado y resuelvo con lápiz y papel.
- 2 Hago un modelo menos simplificado y **simulo** usando una computadora.

¡A modelar!

- Cómo dijo un gran filósofo contemporáneo “paso a paso”. Empecemos con una partícula en una caja.
- Primera simplificación: **sólo dos dimensiones**.
- Ahora la posición tiene dos componentes: x e y (ó puedo llamar $pos(x, y)$).
- A la velocidad le pasa lo mismo: V_x y V_y (o $V(v_x, v_y)$).



Puedo tratar x e y independientemente

Ya estuvimos jugando con MRUV, volvemos a usarlo:

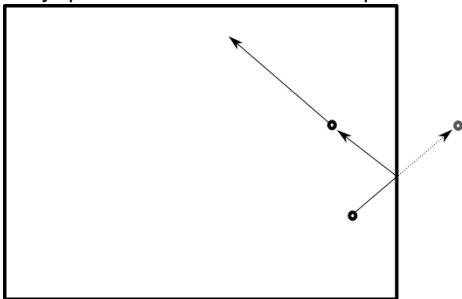
$$x(t + \Delta t) = x(t) + v_x(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_x\Delta t^2$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + v_y(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_y\Delta t^2$$

donde $a_x = f_x/m$ y $a_y = f_y/m$

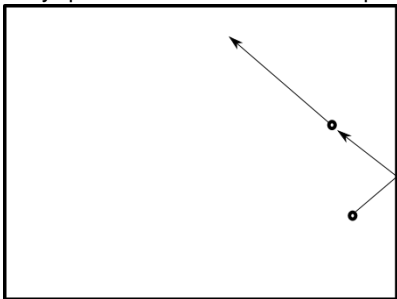
Ahora pongámosla en una caja

Hay que tener en cuenta los choques con las paredes:



Ahora pongámosla en una caja

Hay que tener en cuenta los choques con las paredes:

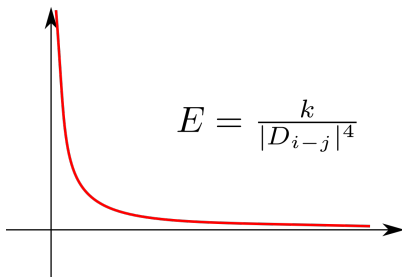


Una manera:

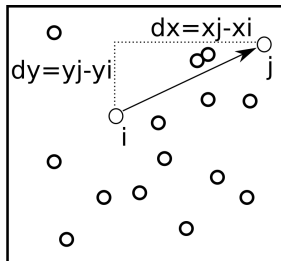
- Si $x > x_{max} \Rightarrow vx = -vx$
- y $x = x - 2(x - x_{max})$
- y a las cosas de “y” no les pasa nada.

Bolas que chocan

En el modelo de gases las partículas (átomos o moléculas) pueden chocar. Una forma de hacerlo es poniendo un potencial repulsivo entre pares:



$$E = \frac{k}{|D_{i-j}|^4}$$



Que la fuerza esté contigo

- D es la distancia entre las partículas i y j :

$$|D_{i-j}| = \sqrt{(x(i) - x(j))^2 + (y(i) - y(j))^2} \quad (2)$$

- La fuerza que siente la partícula i por su interacción con la partícula j :

$$F_x^j(i) = -\frac{\partial E}{\partial X(i)} = -4k \frac{(x(i) - x(j))}{|D_{i-j}|^6} \quad (3)$$

- La fuerza total sería:

$$F_x^{total}(i) = 4k \sum_{j \neq i} \frac{(x(i) - x(j))}{|D_{i-j}|^6} \quad (4)$$

$$F_y^{total}(i) = 4k \sum_{j \neq i} \frac{(y(i) - y(j))}{|D_{i-j}|^6} \quad (5)$$

1 Definir las posiciones y velocidades iniciales.

2 Calcular las fuerzas para cada partícula:

```
for i in range(npart):  
    for j in range(npart):  
        if i != j:  
            Fx(i) = -4*k*(x[i]-x[j])/|Dij|**6
```

Truco

Puedo usar $D2_{i-j} = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$.

Entonces: $|D_{i-j}|^6 = D2_{i-j}^3$.

- 1 Definir las posiciones y velocidades iniciales.
- 2 Calcular las fuerzas para cada partícula:

```
for i in range(npart):  
    for j in range(npart):  
        if i != j:  
            Fx(i) = -4*k*(x[i]-x[j])/|Dij|**6
```

Truco

Puedo usar $D2_{i-j} = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$.
Entonces: $|D_{i-j}|^6 = D2_{i-j}^3$.

- 3 calculo las velocidades nuevas según:
$$V_x[i] = V_x[i] + \frac{F_x[i]}{m} * dt$$
- 4 Luego calculo las nuevas posiciones (MRU):
$$x[i] = x[i] + V_x[i] * dt$$
- 5 veo si chocan con las paredes y vuelvo al punto 2.

- 1 Definir las posiciones y velocidades iniciales.
- 2 Calcular las fuerzas para cada partícula:

```
for i in range(npart):  
    for j in range(npart):  
        if i != j:  
            Fx(i) = -4*k*(x[i]-x[j])/|Dij|**6
```

Truco

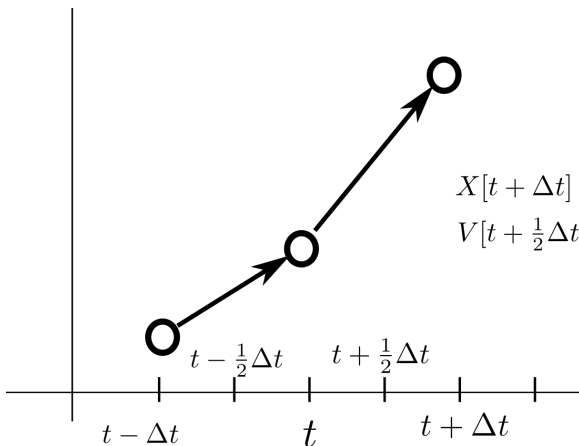
Puedo usar $D_{i-j}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$.
Entonces: $|D_{i-j}|^6 = D_{i-j}^3$.

- 3 calculo las velocidades nuevas según:
$$V_x[i] = V_x[i] + \frac{F_x[i]}{m} * dt$$
- 4 Luego calculo las nuevas posiciones (MRU):
$$x[i] = x[i] + V_x[i] * dt$$
- 5 veo si chocan con las paredes y vuelvo al punto 2.

Crear o reventar

Esto es equivalente a los que hicieron en MRUV

Sólo si están preguntones



$$X[t + \Delta t] = X[t] + V[t + \frac{1}{2}\Delta t] * \Delta t$$

$$V[t + \frac{1}{2}\Delta t] = V[t - \frac{1}{2}\Delta t] + a[t] * \Delta t$$

Una consideración

Para poder ver las dinámicas vamos a usar VMD (Visualizing Molecular Dynamics). Tenemos que escribir los datos en un archivo.

primero lo abrimos con: `salida=open("salida.xyz","w")`

```
salida=open("salida.xyz", "w")
```

“salida” es el nombre con el cual lo vamos a llamar adentro del código, `salida.xyz` es el nombre del archivo que generará y con “w” le decimos a Python que lo vamos a escribir.

Luego hacemos el `print` casi como siempre:

```
print ("quiero escribir a un archivo", file=salida)
```

Escribiendo un archivo .xyz

Formato:

- En la primer línea va el número de partículas (digamos `npart`)
- Luego una línea vacía.
- luego `npart` líneas con: tipo de átomo `coordx coordy coordz` (separado por espacios)

```
print (npart, file=salida)
print (" ", file=salida)
for jj in range(npart):
    print ("6", x[jj], y[jj], "0", file=salida)
```