## Una que sabemos todos - Pv=nRT

## Exactas Programa

Verano 2023

Deben subir la resolución a:https://bit.ly/entregas-v2023.

## Sobre hombros de gigantes

## De la mesa de pool a los gases

Desde principios del siglo XIX se conocían las llamadas leyes de los gases ideales, las leyes de Boyle-Mariot, Gay-Lussac y el Principio de Avogadro, que vinculan la presión (P), el volumen (V), la temperatura (T) y el número de moles de partículas (n) usando la constante de los gases (R):

Ley de Boyle-Mariot 
$$P = \frac{cte}{V}$$

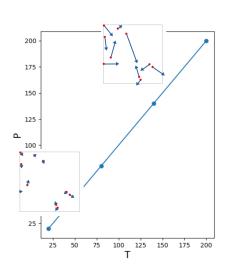
Ley de Gay Lussac
$$P = cte \times T$$

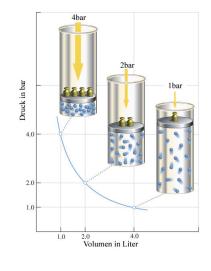
Principio de Avogadro  $P = cte \times n$ 

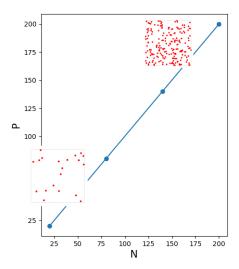
estas 3 leyes pueden resumirse en la famosa ecuación de los gases ideales:

$$PV = nRT$$

A finales del siglo XIX un grupo de científicos, propuso una idea revolucionaria: que los gases eran (casi) como una mesa de pool, donde las pelotas chocaban con las paredes del recipiente pero sin interactuar ente ellas. En ese modelo, además, decían que la temperatura era la energía cinética de esas partículas y la presión era el resultado de los choques por unidad de área con las paredes. Si variando la temperatura T, el número de partículas n y el volumen V, la presión P se ajusta a los resultados experimentales (como en los gráficos de abajo), esto indica que la teoría revolucionaria está bien encaminada.







1. Como vimos en la clase, queremos calcular la presión a través de la fórmula 1

$$P = \frac{\sum_{choques} |V_{choque}|}{tiempo \times 8L}.$$
 (1)

Para eso, modificar las funciones rebotar para que devuelva en una variable aparte el valor absoluto de la velocidad en la dirección del choque, y en caso de no haber choque que devuelva cero. Ayuda: usar la función abs(número).

2. Modificar la función pelicula\_muchas para que devuelva una lista con la presión en cada paso de la simulación usando la fórmula 1. Esto lo podemos hacer dividiendo el valor de velocidad acumulada en choques por el tiempo y el perímetro.

```
def pelicula_muchas(...):
    ...
    vel_acum=0 # al principio del codigo
    ...
    vel_acum = vel_acum + mod_v
    presion = vel_acum / (pasos * dt * 8 * L)
    ...
```

- 3. Calcule y grafique el valor de la presión a lo largo de una simulación de 100 pasos con 10 partículas y una velocidad máxima de 1 en una caja de lado 5. ¿Por qué varía? ¿Se vuelve constante? ¿Y si ponemos 100 partículas y 1000 pasos?
- 4. Recordemos que en nuestro modelo, la temperatura es proporcional a la energía cinética promedio de las partículas. Como la velocidad de cada partícula no cambia en el tiempo (hacen MRU), podemos calcular la temperatura sólo con las velocidades de las condiciones iniciales de la simulación. Hacer una función llamada temperatura que tome las velocidades iniciales de las partículas y el número de partículas y devuelva la temperatura usando

$$T = \frac{\sum_{part} \left(v_x^2 + v_y^2\right)}{n_{part}}. (2)$$

- 5. Modificar pelicula\_muchas para que devuelva la temperatura, el volumen calculado como V = (2\*L)\*\*2, y el último valor de presión de la lista presiones.
- 6. ¡Ya estamos en condiciones de verificar si se cumplen las leyes de los gases ideales y darle validez (o descartar) a nuestro modelo!. Primero verifiquemos la ley de Gay Lussac. Para eso, usar pelicula\_muchas con v\_max = [0.5, 1.0, 2.0, 3.0] para obtener distintas temperaturas, manteniendo el número de partículas n\_part = 100 y el volumen L = 5 constantes. Graficar la temperatura en el eje x y las presiones en el eje y usando

```
plt.plot(temperaturas, presiones, 'o-')
plt.show()
```

- 7. Hacer lo mismo que en el punto anterior, pero ahora variando el volumen L = [0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 2], con n\_part = 100 y v\_max = 1 constantes.
- 8. Hacer lo mismo que en el punto anterior, pero ahora variando el número de partículas n\_part = [10, 50, 100, 300, 500] y manteniendo v\_max = 1 y L = 5 constantes. En conclusión, ¿El modelo microscópico reproduce el comportamiento macroscópico esperado?