

Desafio 1: Descrição do movimento de partículas

No presente trabalho foi produzido um modelo de simulação atomístico 2D de moléculas de Oxigênio e Hidrogênio. Na produção dessa simulação obedecemos aos princípios e leis físicas que envolvem o movimento e colisão das partículas, como a conservação de momento e a conservação de energia, assumindo se tratar de um sistema adiabático. Para realizar a análise da simulação consideramos a natureza estatística dessas partículas, a partir de variáveis termodinâmicas de gases ideais, como a distribuição Maxwell-Boltzmann.

1. Introdução

O estudo do movimento das partículas é uma área importante para a física e a química, logo a simulação atomística e a cinética química são abordagens que permitem a investigação e compreensão de átomos e moléculas em sistemas isolados.

A simulação atomística é uma técnica computacional que descreve o comportamento de partículas em escala atômica, onde cada átomo é representado individualmente, levando em conta suas características únicas e as possíveis interações com os demais átomos do sistema isolado em estudo. Esta abordagem permite analisar a dinâmica das partículas classicamente, fornecendo informações sobre as propriedades do sistema. Já a cinética química estuda a velocidade das reações químicas e os fatores que a influenciam, como pressão, temperatura e concentração dos reagentes, se baseando na teoria cinética dos gases, para descrever o comportamento das partículas de um gás ideal, afinal, nessa teoria é considerado que os átomos se movem aleatoriamente e colidem entre si. A partir disso um estudo estatístico pode ser realizado utilizando a distribuição de Maxwell-Boltzmann.

Nesse trabalho apresentaremos um modelo de simulação atomístico 2D de moléculas de Oxigênio e Hidrogênio

para compreender os comportamentos dessas moléculas, para isso utilizaremos métodos matemáticos e computacionais de matrizes para armazenar as posições iniciais, velocidades e possíveis combinações de colisões elásticas das partículas.

2. Objetivos

O objetivo deste trabalho é produzir uma simulação atomística inicial, focando em definir as condições iniciais do problema, as características únicas da reação, o movimento e colisões elásticas das partículas e realizar a distribuição de Maxwell-Boltzmann para adquirir caráter estatístico a simulação realizada.

3. Metodologia

Para a fundamentação teórica foram utilizados materiais bibliográficos, como ATKINS (2018) [1], MCQUARRIE (1997) [5] e SCHROEDER (2010) [6]. Os conceitos empregados estão relacionados as reações químicas, a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a colisão elástica entre as partículas.

A colisão entre as partículas e a distribuição de suas velocidades foram modeladas e calculadas por meio de um algoritmo programado em Python. Três bibliotecas foram essenciais para o desenvolvimento desse processo, o

Numpy para gerar as matrizes, o Itertools para fazer a combinação não repetitiva entre os possíveis pares de partículas em colisão, e o Matplotlib para gerar a visualização do movimento das partículas em colisão.

O algoritmo está disponibilizado no repositório do GitHub e pode ser acessado neste link: <https://github.com/Leprechas/Cinetica-quimica/tree/main>.

4. Fundamentação teórica

4.1 Colisões Elásticas

Uma colisão elástica é uma colisão do tipo que há conservação de momento linear e de energia cinética, logo, a energia do sistema, antes e depois da colisão, deve continuar a mesma e durante a colisão os corpos não sofrem deformações significativas. Podemos demonstrar tais características conservativas pelas seguintes equações 1,2,3.

$$\frac{1}{2}m_1v_{1i}^2 + \frac{1}{2}m_2v_{2i}^2 = \frac{1}{2}m_1v_{1f}^2 + \frac{1}{2}m_2v_{2f}^2$$

Equação 1: Conservação de energia cinética dos corpos.

$$m_1v_{1i} + m_2v_{2i} = m_1v_{1f} + m_2v_{2f}$$

Equação 2: Conservação de momento linear.

$$\vec{v}_1^{\text{colisão}} = \vec{v}_1 - \frac{(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\vec{v}_2^{\text{colisão}} = \vec{v}_2 - \frac{(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$$

Equação 3: Velocidades das partículas após a colisão. [3]

4.2 Colisões elásticas 2D

A colisão 2D, como feita na simulação, tem as mesmas características e equações citadas anteriormente, contudo, é importante ressaltar que a velocidade dos corpos pode mudar de direção, mas a velocidade relativa entre os dois corpos envolvidos permanece a mesma, portanto, para descrever a colisão uma decomposição vetorial das velocidades dos dois corpos que colidiram deve ser feita e isso

ocasionará na mudança de rota nos corpos, Fig. 1.

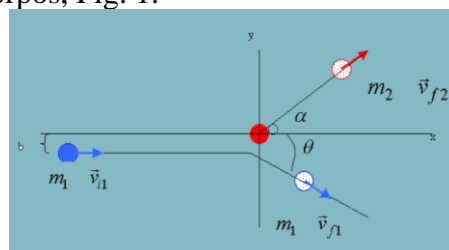


Fig. 1: Colisão 2D, mudança de rota dos corpos. Fonte:

<http://www.fisica.ufpb.br/~romero/gpea/nadilso/n/elastica%20em%20duas%20dimensoes.htm>

4.3 Distribuição de Maxwell-Boltzmann 3D

A distribuição de Maxwell-Boltzmann é uma função de distribuição de probabilidade que descreve a distribuição das velocidades das partículas de um gás ideal em um sistema 3D isolado a temperatura constante, ela é uma distribuição derivada da teoria cinética dos gases e é caracterizada por uma curva de sino, onde a maioria das partículas tende a velocidades próximas da função de distribuição de velocidades (equação 4 e figura 6). A partir dessa distribuição é possível obter a velocidade médias das partículas que foi adotada como a velocidade antes da colisão (equação 5).

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

Equação. 4: Equação da distribuição de Maxwell-Boltzmann 3D. Fonte: [2]

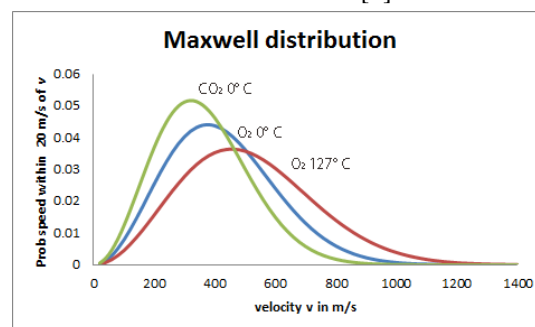


Fig. 2: Gráfico apresenta a curva da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann para gases ideais. A probabilidade é traçada ao longo do eixo y e a velocidade da molécula é definida ao longo do eixo x em m/s. Esta curva conecta precisamente a velocidade de uma molécula de gás com a probabilidade relativa de que ela tenha

essa velocidade. As curvas possuem picos proeminentes, correspondendo à velocidade mais provável de uma molécula à uma determinada temperatura do gás. Fonte: [4]

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{3K_B T}{M}}$$

Equação 5: Equação da raiz quadrada média da velocidade, correspondente à velocidade de uma partícula com energia cinética média. Fonte: [7]

4.4 Distribuição de Maxwell-Boltzmann em 2D

Assim como a distribuição tridimensional, a distribuição bidimensional utilizada na simulação é derivada da teoria cinética dos gases, contudo, a 2D seria uma aproximação, pois temos apenas os eixos X e Y, logo aplicamos a equação 6.

$$f(v) = \frac{mv}{kT} \exp\left(-\frac{m}{kT} \frac{v^2}{2}\right)$$

Equação 6: Equação da distribuição de Maxwell-Boltzmann 2D. Fonte: [6]

Note que em temperaturas baixas o termo kT no denominador é pequeno em relação à energia cinética das partículas, assim a exponencial aumenta e a distribuição das velocidades tende a ser mais concentrada. Em temperaturas mais altas, o termo kT se torna grande em relação à energia cinética e o exponencial diminui, fazendo com que a distribuição das velocidades fique mais espaçada, assim uma faixa ampla de velocidades terá uma probabilidade significativa de ocorrência. Esse fenômeno poderá ser analisado no experimento *in silico* realizado por meio da simulação computacional a seguir.

5. Resultados

A simulação conseguiu descrever o comportamento das moléculas em um sistema isolado, com as posições definidas aleatoriamente, Fig. 3, e realizar a distribuição de Maxwell-Boltzmann para as moléculas, inclusive conseguimos comparar e

analisar o comportamento da distribuição em temperaturas diferentes, Fig. 4 e 5.

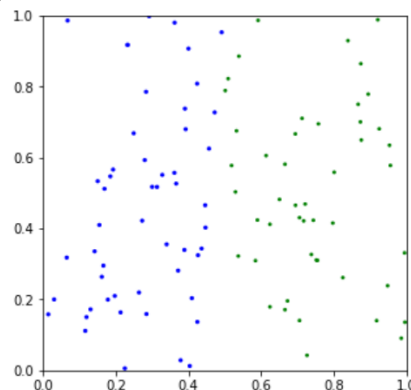


Fig. 3: Simulação da distribuição das moléculas de oxigênio em azul à esquerda e hidrogênio em verde à direita. Fonte: Autoria própria.

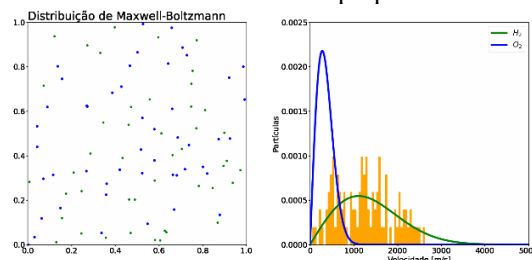


Fig. 4: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para a temperatura a 298,15K na simulação. (Eixo X é a velocidade [m/s] e o eixo Y é a probabilidade $f(v)$). Curva em azul corresponde ao O_2 e em verde ao H_2 . Fonte: Autoria própria.

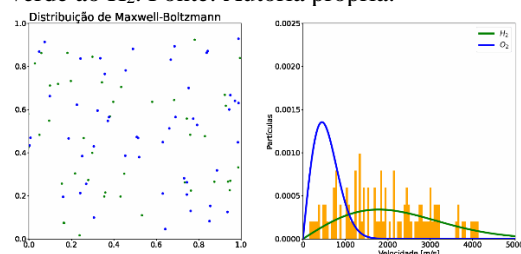


Fig. 5: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para a temperatura a 773,15K na simulação. (Eixo X é a velocidade [m/s] e o eixo Y é a probabilidade $f(v)$). Curva em azul corresponde ao O_2 e em verde ao H_2 . Fonte: Autoria própria.

6. Discussão

Constata-se que a simulação está funcionando como esperado e a distribuição de Maxwell-Boltzmann apresenta um comportamento adequado para uma simulação 2D e para as variações de temperatura. As curvas são consideravelmente diferentes em temperaturas bastante distintas. A 298,15K o pico se desloca para a

esquerda, pois em temperaturas mais baixas as moléculas tendem a uma velocidade mais lenta, as colisões se tornam mais fracas, ocorrendo pouca variação dessas velocidades, sendo assim a distribuição se apresenta mais concentrada nesse pico mais proeminente. Enquanto a 773,15K a velocidade das partículas se torna mais difundida, apresentando uma curva mais achatada, visto que há mais energia disponível e as colisões ocorrem mais fortemente, impulsionando outras moléculas, nesse sentido é observado que as partículas alcançam velocidades maiores, o que é demonstrado pelas curvas abrangendo regiões mais à direita dos gráficos. Isso ocorre tanto para as moléculas de O_2 quanto de H_2 . Deve-se considerar ainda que estamos trabalhando com dois átomos compostos que possuem massas bem distintas e isso impacta na distribuição das velocidades entre eles. Com isso podemos prosseguir para a próxima etapa do trabalho, o desafio 2, que consiste em alterar a simulação de 2D para 3D e considerar os mecanismos que envolvem a reação escolhida, tais como as leis de velocidade de conversão e ordem de reação.

Referências Bibliográficas

- [1] ATKINS, Peter; JONES, Loretta; LAVERMAN, Leroy. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 7. ed. – Porto Alegre: Bookman, 2018.
- [2] DE MEDEIROS, Luciano Frontino; CROVADOR, Alvaro; SILVA, Hamilton Pereira Da. **Simulador Computacional para Demonstração das Propriedades um Gás Ideal em 2D**. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, v. 35, n. 2, p. 573–591, 2018. Disponível em: <<https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/2175-7941.2018v35n2p573>>. Acesso em: 29 ago. 2023.
- [3] K. FRENSEL; J. DELGADO. **Geometria Analítica – Capítulo 12**. Universidade Federal Fluminense – UFF. Disponível em: [https://www.professores.uff.br/katiafrensel/wp-](https://www.professores.uff.br/katiafrensel/wp-content/uploads/sites/115/2017/08/aula12.pdf)

[content/uploads/sites/115/2017/08/aula12.pdf](https://www.professores.uff.br/katiafrensel/wp-content/uploads/sites/115/2017/08/aula12.pdf).

Acesso em 29 ago. 2023.

- [4] **Maxwell's legacy: The Maxwell Distribution**. Disponível em: <<https://homepages.abdn.ac.uk/j.s.reid/pages/Mxwell/Legacy/MaxDistrb.html>>. Acesso em: 30 ago. 2023.

[5] MCQUARRIE, Donald A.; SIMON, John D. **Physical chemistry: a molecular approach**. Sausalito, Calif: Univ. Science Books, 1997.

[6] SCHROEDER, Daniel V. **An introduction to thermal physics**. San Francisco, CA: Addison Wesley, 2000.