

Speaker 1: Hola, jo sóc l'Anna, de Barna (Barcelona), tot i que estic estudiant a Suïssa, a l'EPFL, que és l'Escola Politècnica Federal de Lausanne. I avui se suposa que us havia de parlar de superfícies d'energia potencial, però vaig pensar "pues vaya rollo" i, com és el meu vídeo i faig el que em dóna la gana, he decidit parlar de parcs d'atraccions i coses guays. Faig el meu cap petit així no ens molesta.

Doncs, què tenim aquí? Això és el Waterworld, que és un parc d'atraccions a Lloret de Mar, que tothom coneixerà, imagino. Com veieu, té aquests tobogans que acaben en una mena d'embut i la gent acaba caient per aquest forat, com aquest noi. Llavors, la meua pregunta era "Puc simular això amb un programa matemàtic?". Doncs sí, sí que puedes. Per exemple, amb el Wolfram Mathematica, que és el que he fet servir aquí. No fem cas del codi. Llavors, aquest és el meu embut que he fet, que he simulat.

Aquestes pilotes negres són les meves persones. Llavors, què passa quan deixo passar el temps una mica? S'acosten, més o menys, al centre del meu embut. Per què? Perquè la gravetat els empeny cap al final de l'embut, cap al cul de l'embut, diguem. Això és per culpa de l'energia gravitacional, que de fet és proporcional a l'alçada, height here.

Llavors, el que hem fet és fer una superfície d'energia potencial, però l'hem fet amb l'energia gravitacional. Podríem fer-ne una amb l'energia que sigui i podríem canviar les coordenades. Aquí l'energia depèn de l'espai, diguem. X i Y , li dic jo. Podria haver-li posat qualsevol altre nom. Aquí depèn de l'espai però l'energia podria dependre de moltes altres coses. Per exemple, la distància a la que estan dos àtoms, l'estat del sistema, el tipus d'estructura cristal·lina que tingui o qualsevol cosa d'aquest tipus.

Que l'energia depengui de les coordenades que jo estic dibuixant gràficament. Llavors, per a poder simular aquest tipus de coses, aquest tipus de sistemes, el que necessito és estadística. Com li dic jo al meu sistema que vull que simuli coses d'aquest tipus? El que jo li diré és el següent: jo tinc un estat que representaré amb una partícula que estarà tranquil·lament a l'estat inicial, initial state. Llavors, aquesta partícula farà una cosa, que és provar d'anar abaix o provar d'anar adalt. Té 50% de probabilitats d'intentar moure's cap abaix o cap adalt.

He de diferenciar entre dos termes: una cosa és intentar anar abaix o adalt i l'altra cosa és moure's. Una cosa és intentar moure's i l'altra cosa és moure's. Llavors, en l'intent de moure's té 50% de probabilitats d'anar abaix o d'anar adalt. Però a l'hora de moure's de veritat és diferent. Si la partícula intenta moure's abaix, la probabilitat de de fet moure's abaix és un, per tant, si s'intenta moure cap abaix, es mou cap abaix. Punto. No hay discusión. Però si s'intenta moure cap adalt, la probabilitat ja no és un.

Faig això més gran perquè sinó no vemos un pijo. Llavors, la probabilitat serà això. Com veieu, depèn de l'energia dos, que és de fet l'energia de l'estat superior, upper state, i l'energia un, que és l'energia inicial, initial state. Llavors, aquesta diferència entre l'energia on la meua partícula vol anar i l'energia a la que la meua partícula, que és aquest esglaó vermell, com més

gran sigui més difícil a aquest procés d'anar cap amunt. Llavors, com més gran sigui aquesta barrera més difícil és per la meua partícula moure's cap amunt.

A part d'això, hi ha una altra cosa que també farà que sigui més fàcil o més difícil per la meua partícula pujar, que és aquest terme, que és la temperatura. Com més temperatura posem al sistema, més fàcil és per la meua partícula pujar cap amunt. En aquest model estadístic, només estic mirant temperatura. Hi ha altres coses que podrien afectar, però en aquest moment jo vull fer una cosa senzilla i només m'estic fixant en la temperatura. La K aquesta és una constant, Constant de Boltzmann.

Doncs això és al que jo li diria el meu sistema. El que passa és que aquí he dibuixat un sistema que només depèn d'una coordenada. El meu sistema, com serà una superfície, dependrà de dues coordenades.

Llavors, en el que us acabo de descriure, la partícula pot anar cap amunt o cap avall. En veritat, pot anar cap a dos estats veïns, però en una superfície, la meua partícula podrà anar cap a vuit estats veïns, per tant, simular-ho és una mica més difícil, però es pot fer.

El que us vull ensenyar, de fet, és l'estat de transició, però per fer això us he d'explicar la potencial de Lennard Jones, que segur que molta gent està avorrida de sentir. El potencial de Lennard Jones és una corba potencial, no és una superfície, és una corba perquè només està descrit per una coordenada. Aquest sistema el que fa és descriure el comportament de l'energia a mesura que dos àtoms, que en aquest cas direm que són dos hidrogens, s'acosten.

Quan aquests dos hidrogens estan super lluny, l'energia és zero, perquè ni tan sols es veuen, és com a que ni m'interessa. Però si els acostem cada cop més, arribarà un punt en què l'energia del sistema decaurà. Arribarà aquest punt on l'energia és mínima, que seria el cul de l'embut en el parc d'atraccions, i d'això se'n diu un mínim. Llavors, el meu sistema intentarà arribar sempre al mínim perquè, com més energia tingui, més pateix el sistema. Doncs, el meu sistema sempre intenta minimitzar l'energia.

Llavors, si intentem juntar més els àtoms, l'energia puja, ja que dues partícules no poden estar (ocupar) al mateix lloc. Per tant, no volen solapar-se. Això és el potencial de Lennard Jones, el potencial que va inventar aquesta gent. Llavors, el que tenim aquí, el que jo vull descriure és una cosa que es diu "estat de transició". Aquests estats de transició de fet són molècules que existeixen durant un interval de temps super petit, tipus nanosegons o femtosegons.

Podríem dir que són inclús virtuals, existeixen durant tan poc temps que és impossible aïllar-los. Aquest sistema que jo vull descriure està descrit pel següent: un àtom d'hidrogen, que té un enllaç covalent, i aquest enllaç tindrà una distància entre aquest hidrogen i aquest hidrogen, i l'altra coordenada serà la distància entre aquest hidrogen i el fluor, perquè la molècula que jo vull escriure, l' H_2F , és una molècula triatòmica de dos hidrogens i un fluor. Aquí podeu veure la pinta que té el Lennard Jones Potential descrit. R és la distància. Ara faig la pantalla petita.

Lavors, el meu sistema anirà d'una molècula d' H_2 i un fluor que estarà perdut, a una molècula d' HF i un hidrogen. Això passa quan la distància entre l'hidrogen i el fluor es torni cada cop més petita. Podria ser per una col·lisió, per exemple de les partícules, la molècula i l'àtom. Ara bé, per passar d'un estat a l'altre, d' H_2+F a $HF+H$, o viceversa, normalment el sistema passa per un estat de transició, que és aquesta molècula HHF . Aquesta molècula té una superfície d'energia potencial, que és aquesta d'aquí. Té aquesta pinta. Lavors, com he dit abans, està descrita per dos potencials de forma Lennard Jones. En aquesta banda, el que podem veure és la distància entre els àtoms que quan és òptima, és a dir, quan el meu estat està en el punt mínim, el que tindrem és una molècula de HF i un hidrogen a algun lloc. I quan el nostre sistema es troba aquest límit, el que tindrem és la molècula de HH i el fluor a algun altre lloc.

Ara, normalment té un camí preferencial, que serà a través d'aquest sistema, que és el HHF . Aquesta molècula, aquest punt, aquest estat de transició no està en un punt trivial de la meua superfície. És un punt especial, és un punt d'inflexió, que en anglès es diu saddle point. És un punt que, on tot i que la derivada de l'energia és zero, no és ni un mínim ni és un màxim. De fet, és un mínim en una direcció i un màxim en una altra direcció, i aquest és el punt on és més fàcil per al meu sistema passar la barrera de potencial, que és l'esglaó que us he ensenyat abans a les escaletes vermelles.

Lavors, representaré el meu sistema amb partícules. Les partícules no són àtoms; les partícules que dibuixaré, com aquesta partícula vermella, són el sistema. Per tant, aquí, el meu sistema és H_2 , i el fluor, por ahí. Però si jo ara li dono energia suficient, el que farà, més probablement, la meua partícula és passar per aquí, que és l'estat de transició, que és HHF , i després caurà, segurament cap aquí, cap al mínim, que és el HH . Però jo vull simular això, no vull només dibuixar-ho i poder manipular-ho; vull simular-ho. Després d'introduir aquest codi, tenim aquest petit programa, que em deixa escollir el nombre de partícules, la temperatura i com de ràpid vull que es facin els càlculs.

266 partícules que són 266 estats del sistema crec que són suficient per veure més o menys com van les coses. Totes aquestes partícules són estats del mateix sistema, l'única cosa que jo he fet molts perquè vull veure la probabilitat. Tinc al costat de la meua superfície un histograma que em dirà la població, la quantitat d'estats que tinc en cada posició de la meua superfície. Lavors, jo ara li donaré una temperatura i li diré que simuli.

Les partícules van boges, perquè tenen tanta temperatura que poden saltar cap on vulguin, la barrera que vulguin, perquè tenen energia per a fer-ho. Però si jo ara redueixo la temperatura, el que passa és que les partícules aniran caient cap als mínims d'energia. Si torno a donar una mica de temperatura, veiem que el camí de les partícules que són els estats del nostre sistema mentre travessa aquest estat de transició, que és aquest punt d'inflexió.

Fins aquí el vídeo, tetes. Si teniu algun dubte de superfícies de potencials o de com he fet el codi, si voleu que us passi el codi. De fet, si feu servir matemàtiques i us interessa saber com ho he fet, quin és el codi exacte, podeu contactar-me en aquest mail. Estaré contenta d'expondre el que sigui, mentre no sigui spam. Si voleu preguntar-me coses també de la universitat, de la

EPFL. És una universitat molt bona i penso que, si hi ha gent interessada (no seria el primer cop que algú em pregunta coses) doncs sentir-vos lliures d'enviar-me un mail per al que sigui.

[END OF AUDIO]