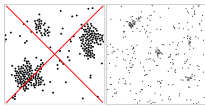


Výpočet kompresibilitního faktoru v NPT souboru

11/13
pch03

pro plyn provedeme v periodických okrajových podmínkách.
Za nízkého tlaku je vhodná MC simulace.

- Menu: **Boundary conditions** → **Periodic**
- V okénku cmd: nastavte teplotu na $\bar{T} = (T_1 + T_2)/2$: $T=čísla$ + **Enter**
- Nastavte tlak na \bar{p} : cmd: $P=čísla$ + **Enter**
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NVT (Metropolis)**
- Slider "ρ" na nejmenší hodnotu (řidký plyn)
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NPT (Metropolis)**
- Menu: **Show** → **Volume convergence profile** a **reset view** (vpravo dole)
- Lze trochu zkrátit slider "measurement block"
- Nechte ustálit, **zkontrolujte, zda vidíte stále plyn**, a vypněte **set MC move**
- Stiskněte **record** a simulujte aspoň 10 bloků
- Uložte výsledky pomocí **record**
- V posledním bloku dat v **simolant.txt** najděte hodnotu Z
- Také najděte entalpii H – bude potřeba k výpočtu později jako H(g)



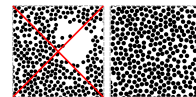
V produkčním MC běhu musí být velikosti pohybů konstantní

Výparná entalpie z NPT simulací

[start simolant/RESULTS.txt] 13/13
pch03

Opakujte postup z předchozího slajdu pro kapalinu. Periodické okrajové podmínky, teplotu a tlak již máte nastaveny. Pokračujte tedy takto:

- Stiskněte **set MC move**
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NVT (Metropolis)**
- Slider "ρ" posuňte nahoru tak, abyste dostali kapalinu
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NPT (Metropolis)**
- Nechte ustálit a vypněte **set MC move**
- Stiskněte **record** a simulujte aspoň 10 bloků
- Uložte výsledky pomocí **record**
- Najděte entalpii H kapaliny



V produkčním MC běhu musí být velikosti pohybů konstantní

- Vypočtěte výparnou entalpii: $\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}} = \frac{H(\text{g}) - H(\text{l})}{N}$ (N je počet částic)

- Srovnajte s hodnotou z Clausiovy–Clapeyronovy rovnice

Otázky: Která hodnota je přesnější a proč?
Která metoda je vhodnější v reálném experimentu?

Výpočet výparné entalpie z tlaků nasycených par

12/13
pch03

- Ze získaných hodnot vypočtete (používáme $k_B = 1$)

$$\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}} = -Z \frac{\ln(p_1/p_2)}{1/T_1 - 1/T_2}$$

- Nezapomeňte spočítat statistickou chybu výsledku! Ve výsledcích jsou uvedeny odhady standardních chyb⁵ stanovené z bloků dat.

Stačí uvažovat chyby v p_1 a p_2 , protože chyby v teplotách a Z jsou relativně malé:

$$\sigma(\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}}) = Z \frac{\sqrt{\sigma_{\text{rel}}(p_1)^2 + \sigma_{\text{rel}}(p_2)^2}}{|1/T_1 - 1/T_2|}$$

kde $\sigma_{\text{rel}}(p_i)$ jsou **relativní** chyby, v souboru **simolant.txt** jsou uvedeny v %

⁵Standardní chyba = směrodatná odchylka průměru způsobená náhodnými vlivy. Celková nejistota výsledku zahrnuje kritické posouzení náhodných i systematických chyb.