# Teoría de líquidos simples

De manera intuitiva el estado líquido se entiende como un punto intermedio entre los estados sólido y gaseoso. Un punto de partida natural es el explorar la relación entre diferentes variables termodinámicas como presión P, volumen V y temperatura T a través de una ecuación de estado f(P,V,T)=0. Para el caso de la ecuación de van der Waals

$$\left(P + \frac{n^2a}{V^2}\right)(v - nb) - nRT = 0$$

donde a es un parámetro de atracción entre partículas, b es una medida del volumen excluido, n el número de moles del gas y  $R=k_BN_A$  es la constante de los gases ideales.

## Trabajando con Julia

Para su comodidad, hemos generado una colección de funciones para poder trabajar con la ecuación de estado de van der Waals, para importarlas vaya al directorio de la escuela y escriba dentro de su *script* la siguiente línea:

```
include("src\\van_der_Waals.jl")
```

#### Atención

Asegúrese de que la carpeta "src" se encuentre en el mismo directorio que el script.

Una vez cargada esta biblioteca podemos graficar la ecuación de estado escribiendo

```
T = 1.0
V = collect(0.4:0.001:5.0)
P = P_vdW.(V, T)
```

Para salvar el resultado como un arreglo de datos importamos algunas funciones de utilidad

```
include("src\\utils.jl")
```

y escribimos en el script

```
save_data("van_der_Waals.dat", [V P])
```

en la linea de comandos escribimos

```
usr> julia nombre_del_script.jl
```

y aparecerá el archivo "van\_der\_Waals.dat" en el mismo directorio que el script.

Para visualizar fácilmente el resultamos entramos a gnuplot y escribimos

```
gnuplot> set yrange[0 to 3]
gnuplot> plot "van_der_Waals.dat" w 1
```

#### Atención

Asegúrese que gnuplot está abierto en el directorio correcto o que gnuplot está incluido en el PATH.

El resultado de hacer esta gráfica será

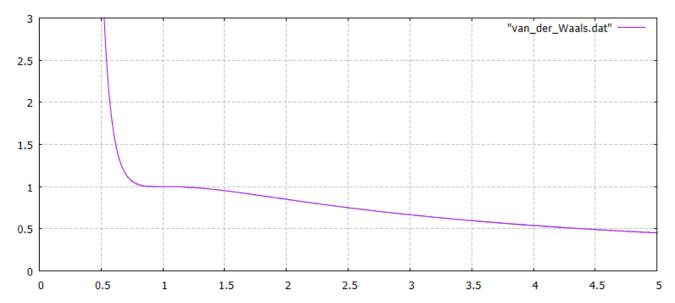


Fig1: Test de la ecuación de estado de van der Waals.

### **①** Ejercicio

Intenta variar el valor de la temperatura. ¿Qué pasa con temperaturas bajas¹?

# Región heterogénea

La diferencia esencial entre las isotermas de un gas real y las de un gas de van der Waals es que abajo de la temperatura crítica las isotermas exiben un máximo y un mínimo. Esto no ocurre en un gas real, esa región suele ser descrita por una línea recta.

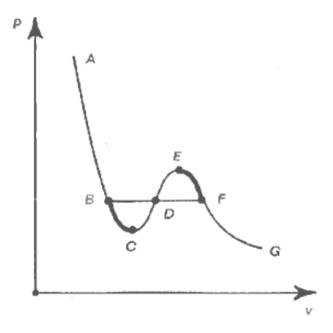


Fig2: Ecuación de estado de van der Waals para temperaturas menores a la remperatura crítica $^2$ 

Esta región no corresponde a estados homogéneos de la materia como estudiamos en cursos básicos de licenciatura. Para resolver esta inconsistencia utilizamos la regla de areas iguales de Maxwell. Esta ya se encuentra implementada en la biblioteca cargada previamente.

Para encontrar las raices de cada isoterma escribimos dentro de nuestro código

```
P_0 = areas_iguales(V, P)
index_r = roots_vdW(P, P_0)
V_maxwell = [V[index_r[1]], V[index_r[3]]]
P_maxwell = [P[index_r[1]], P[index_r[3]]]
```

#### Atención

Asegúrese de cargar la biblioteca "van\_der\_Waals.jl"

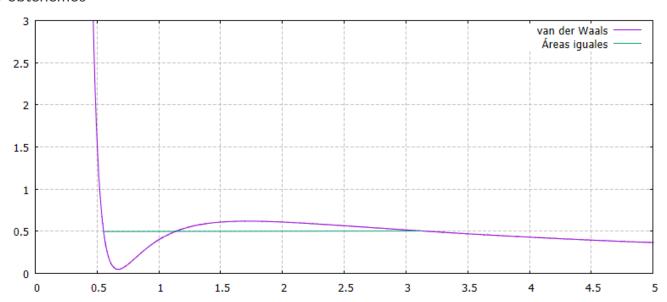
#### salvamos la curva

```
save_data("Regla_de_Maxwell.dat", [V_maxwell P_maxwell])
```

### Finalmente, graficamos

```
gnuplot> set yrange[0 to 3]
gnuplot> plot "van_der_Waals.dat" w 1 t "van der Waals", "Regla_de_Maxwell.dat" w 1 t "Áreas igua"
```

#### y obtenemos



### Curvas de transición

Si hacemos un barrido de los puntos donde se obedece la regla de Maxwell, así como los máximos y los mínimos de las curvas originales de la ecuación de van der Waals encontramos un par de curvas conocidas como *curva espinodal* y *curva binodal*.

#### ♠ Reto #1

- Generar las curvas espinodal y binodal utilizando las funciones antes mencionadas.
- ¿Cómo lucen estas curvas si graficas P vs 1/V?

TIP: en gnuplot puedes realizar operaciones básicas entre columnas, por ejemplo, si queres multiplicar por 5 la segunda columna de datos escribes gnuplot> plot

"nombre\_de\_tu\_archivo.dat" u 1:(5\*\$2)

#### Como resultado obtenemos

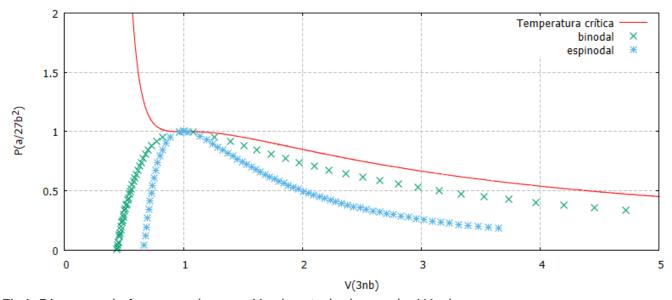


Fig4: Diagrama de fases para la ecuación de estado de van der Waals

Las diferentes propiedades de la Figura 4 se discutiran a más detalle en las siguientes sesiones de la escuela.

## **Anotaciones**

- 1. Bajas comparadas con la temperatura crítica del sistema. ←
- 2. Figura tomada del libro García Colín Scherer, Leopoldo Tipo de material: Texto Idioma: Español Detalles de publicación: México : Trillas, 2019 Edición: 4a. ed ↔