

# Laboratorio: Termodinámica Computacional

Daniel Beltran Argueta

15 de enero, 2024

## Resumen de laboratorio

En este laboratorio se hacen, a través del uso de simulaciones, el cálculo de diferentes variables termodinámicas asociadas a una determinada transformación, y la reproducción de ciclos termodinámicos.

## Introducción

Usando el sistema de simulaciones PhET de la Universidad de Colorado Boulder, tomaremos datos de un sistema cerrado en diferentes puntos.

## Parte 1

La parte 1 de este laboratorio consiste en realizar cambios de temperatura a un sistema y calcular así diferentes variables termodinámicas asociadas a estas transformaciones.

El cambio que se hizo entre diferentes mediciones fue un aumento arbitrario de la temperatura  $T$ , y manteniendo constante el volumen  $V = 0.00073m^3$

En un principio, estos eran los valores iniciales registrados:

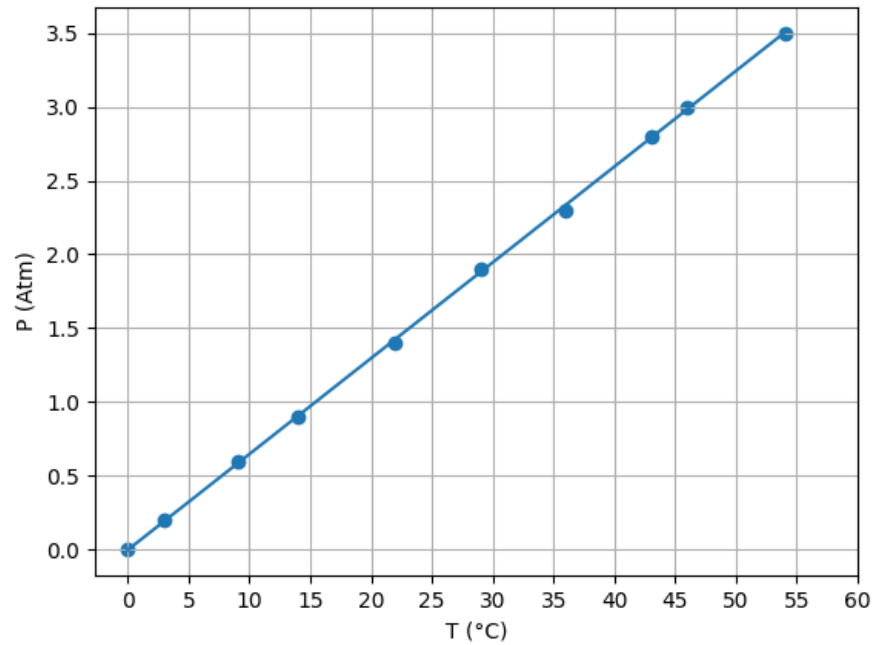
$$T_0 = 25^\circ C, P_0 = 19.4 \text{ atm}$$

Se registraron los cambios de presión que se daban con el aumento de la temperatura  $T$ , así como sus cambios ( $\Delta$ ) respecto a los valores iniciales:

Valor de $T$ ( $^\circ C$ )	Valor de $P$ ( $atm$ )	$\Delta T$ ( $^\circ C$ )	$\Delta P$ ( $atm$ )
25	19.4	0.0	0.0
28	19.5	3.0	0.2
34	19.9	9.0	0.6
39	20.3	14.0	0.9
47	20.8	22.0	1.4
54	21.3	29.0	1.9
61	21.7	36.0	2.3
68	22.1	43.0	2.8
71	22.4	46.0	3.0
79	22.8	54.0	3.5

Table 1: Tabla con datos registrados y sus respectivos Deltas

Estos datos se tomaron para crear, usando un script de Python, una gráfica mostrando una regresión lineal del cambio de  $\Delta P$  con respecto a  $\Delta T$ :



### Cálculo de variables termodinámicas asociadas a las transformaciones

Las variables a calcular son:

- $n$ : Cantidad de sustancia (mol)
- $W$ : Trabajo realizado por el sistema (J)
- $Q$ : Calor transferido al sistema (J)
- $\Delta U$ : Variación de la energía interna del sistema (J)
- $\Delta H$ : Variación de la entalpía del sistema (J)

Para calcular  $n$ , usamos la ecuación de estado de los gases ideales y la ajustamos al caso particular del sistema.

Primero necesitamos el valor de la pendiente  $a$  de la regresión lineal, esto es  $a = \frac{\Delta P}{\Delta T}$ .

Este valor lo obtenemos con el mismo script de python, y para los datos tomados es  $0.065 \text{ atm}/^\circ\text{C}$ . Esto en  $\text{Pa}/\text{K}$  es 6570.60

Podemos calcular el número de moles sabiendo el valor de  $a$ :

$$n = a \cdot \frac{V}{R}$$

$$n = 6570.60 \text{ Pa}/\text{K} \cdot \frac{0.00073 \text{ m}^3}{8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K}}$$

$$n = 0.58 \text{ mol}$$

El trabajo realizado por el sistema ( $W$ ) es 0, pues el volumen del gas es constante.

$$W = 0$$

Para calcular el calor transferido al sistema ( $Q$ ), tomamos en cuenta que el gas usado es un gas diatómico, por lo tanto el calor específico de este es  $\frac{5}{2} \cdot R$ , siendo  $R$  la constante universal de los gases ideales:

$$Q = nC_v\Delta T$$

$$Q = (0.58 \text{ mol})\left(\frac{5}{2} \cdot 8.31\right)(327.2^\circ\text{K})$$

$$Q = 3.9 \text{ kJ}$$

Ahora podemos calcular la variación de la energía interna del sistema ( $\Delta U$ ).

$$\Delta U = Q + W$$

Entonces:

$$\Delta U = 3.9 \text{ kJ}$$

De esto también se deduce que la variación de entalpía ( $\Delta H$ ) =  $\Delta U = 3.39 \text{ kJ}$

Así, tenemos que para estas transformaciones isocóricas:

- $n = 0.58 \text{ mol}$
- $W = 0.0$
- $Q = 3.9 \text{ kJ}$
- $\Delta U = 3.9 \text{ kJ}$
- $\Delta U = 3.9 \text{ kJ}$