Introducción a la Simulación Computacional
Guía 0.1: Termodinámica

Segundo Cuatrimestre de 2021

Problema 1: Considere un sistema termodinámico cuya ecuación fundamental es:

$$U = (\frac{v_0 \theta}{R^2})\frac{S^3}{NV}$$

a) Hallar las tres ecuaciones de estado correspondientes.

b) Encuentre el valor de μ en función de T, V y N.

c) Muestre en un diagrama la dependencia de la presión con respecto al volumen a temperatura fija. Represente dos de tales isotermas indicando cuál de ellas corresponde a la temperatura más alta.

Problema 2: Transformada de Legendre

Sea una función $f = f(x_1, \ldots, x_n)$ de modo tal que $df = \sum_{i=1}^{n} u_i dx_i$, donde $u_i = (\frac{\partial f}{\partial x_i})_{x_j}$. Si definimos la función $g = f - \sum_{i=r+1}^{n} u_i x_i$, la transformada de Legendre de f es:

$$g = g(x_1, \ldots, x_r, u_{r+1}, \ldots, u_n) \text{ (transformada de Legendre de } f \text{)}$$

a) Sabiendo que la diferencial de la energía interna se expresa como

$$dE = TdS - p\,dV + \sum_i \mu_i dN_i,$$

Construya las transformadas de Legendre de la energía y exprese sus formas diferenciales, que sean funciones naturales de:

i) $(T,\, V,\, N)$: energía libre de Helmholtz A.

ii) $(T,\, p,\, N)$: energía libre de Gibbs G.

iii) $(S,\, p,\, N)$: entalpía H.

iv) Analice la transformación a las variables $(T,\, p, \mu)$. Es posible?

v) ¿Es posible realizar una transformación a las variables $(S,\, T,\, p)$? Justifique.

Problema 3: Es sabido que cuando se estira a cierta distancia un determinado resorte este se rompe. Antes de que esto suceda (pequeñas longitudes) la energía libre del resorte está dada por

$$\frac{A}{M} = \frac{1}{2}kx^2\,,$$

siendo M la masa del resorte y x su longitud por unidad de masa. Luego de romperse (grandes longitudes)

$$\frac{A}{M} = \frac{1}{2}h(x - x_0)^2 + c$$

En estas ecuaciones, k, h, x_0 y c son todas independientes de x pero pueden depender de T. Asimismo $k > h$ y $c, x_0 > 0$ para todo valor de T.

a) Determinar la ecuación de estado $f \equiv$ tensión $= f(T, x)$ del resorte para longitudes pequeñas y grandes.

b) En forma similar, determinar los potenciales químicos

$$\mu = \left(\frac{\partial A}{\partial M}\right)_{T,L},$$

donde L es la longitud total del resorte.

c) Mostrar que

$$\mu = \frac{A}{M} - fx$$

d) Encontrar la fuerza que a una dada temperatura rompe el resorte.

e) Determinar el cambio discontínuo en x cuando el resorte se rompe.