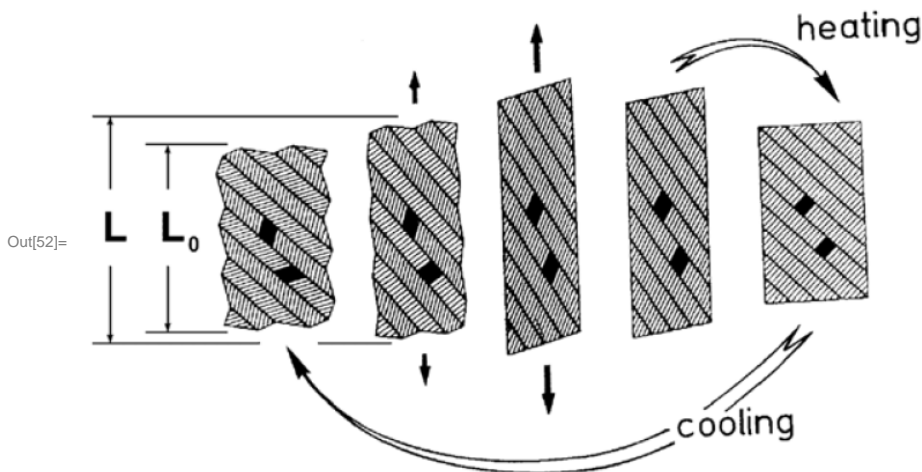


Proyecto de Innovación Educativa del Laboratorio de Termodinámica (PIE2104LT)

El objetivo principal de este PIE es el fomento del aprendizaje autónomo y colaborativo de los estudiantes mediante la puesta a su disposición de experiencias virtuales interactivas con las que puedan desarrollar, tanto antes como después de su trabajo presencial en el Laboratorio de Termodinámica, su capacidad de elaborar argumentos basados en sus observaciones e interpretar correctamente los fenómenos físicos estudiados.

Anexo 1: Aleaciones con memoria de forma (Experiencia virtual 3)

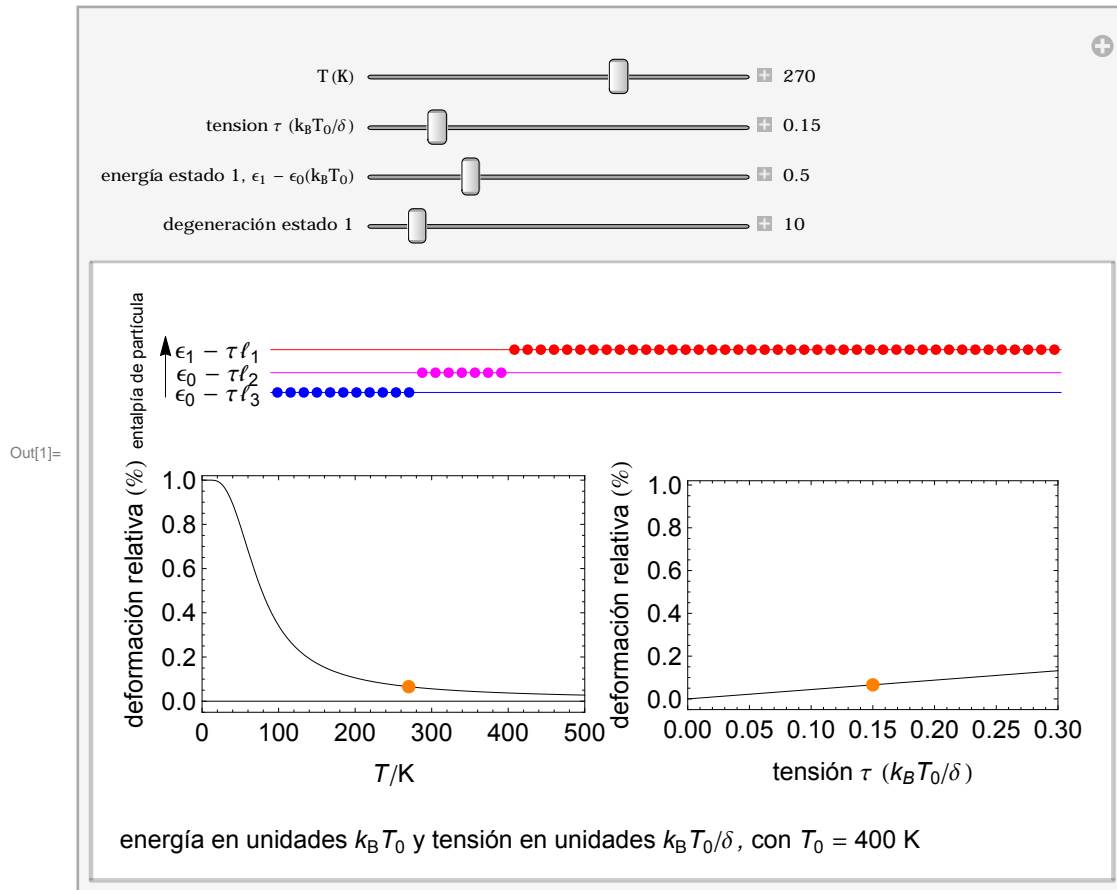


Esta experiencia virtual complementa las demostraciones reales sobre aleaciones metálicas con memoria de forma (como el NiTiNOL). Estas aleaciones sufren una transición alomórfica, es decir, entre dos estructuras cristalinas, muy similar a la del hierro. Concretamente, al aumentar la temperatura pasan de la estructura de martensita (menos simétrica) a la estructura de austenita (más simétrica). La otra característica esencial de estas aleaciones es la formación de dos gemelos en la fase martensítica. En ausencia de tensión aplicada, las proporciones de estos dos gemelos son idénticas, pero la aplicación de una tensión externa τ hace que aumente la proporción de uno de los gemelos. Al aumentar la temperatura T , se produce la transición de fase a la estructura cristalina de austenita. Las "partículas del sistema" (microcristales) tienen mayor energía y mayor entropía si adoptan la estructura de austenita, y por ello esta transición requiere un aporte de energía. El hecho de que al calentar la muestra se produzca la transición a la estructura de austenita es crucial para entender el efecto de memoria de forma, pues la forma que "recuerda" el material es la que se le ha dado previamente en este estado. Al enfriar la muestra, vuelve a la estructura de martensita, con una proporción entre los dos gemelos que preserva la forma exterior del material.

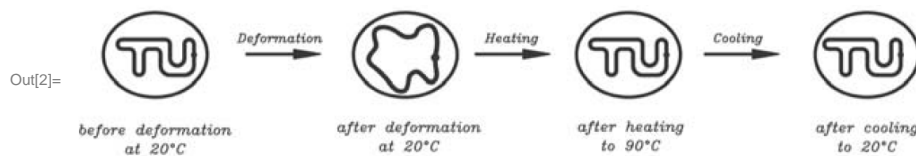
El material elaborado en este Proyecto de Innovación Pedagógica explota la comparación entre la observación de fenómenos a escala macroscópica y su modelización a escala microscópica. Proponemos aquí un modelo en que las “partículas” de la aleación pueden estar en estados con tres valores de entalpía. La entalpía en sistemas elásticos es $\epsilon_j - \tau \ell_j$. Por un lado tenemos la forma austenita que denotaremos con un índice 1. La mayor energía de la aleación cuando adopta la estructura cristalina de austenita está asociada a que las partículas de la aleación tienen una energía ϵ_1 mayor que en el estado de martensita ($\epsilon_0 < \epsilon_1$). Asimismo, la mayor entropía de la aleación cuando adopta la estructura de austenita está asociada al hecho de que existen un número $g > 1$ de estados de partícula con la misma entalpía, es decir, que este valor de entalpía de partícula es degenerado; g se conoce como la degeneración del valor de entalpía $\epsilon_1 - \tau \ell_1$. Por otro lado tenemos los dos estados gemelos de martensita, ambos con la misma energía $\epsilon_0 < \epsilon_1$, y denotados con los índices 2 y 3. La diferencia entre ellos es que sus contribuciones a la longitud observable de la aleación son distinta. Concretamente, consideraremos que $\ell_2 = \ell_1 - \delta$ y $\ell_3 = \ell_1 + \delta$, donde $\delta > 0$ está relacionada con la máxima deformación de la muestra que puede provocar una tensión externa.

A continuación debes trabajar con los gráficos interactivos. Para ello selecciona “Evaluate Initialization Cells” en el menú Evaluation.

Primera Parte : Comprensión de la relación entre las magnitudes observables macroscópicamente (deformación, tensión, temperatura) y la ocupación de los niveles energéticos a nivel microscópico



Segunda Parte : Comprensión del efecto de memoria de forma



Fija los valores de energía y degeneración del estado 1 en los valores 2 y 100, respectivamente. Considera un estado inicial con temperatura de 270 K y tensión 0.001. Aumenta la tensión hasta el valor 1. Después aumenta la temperatura hasta los 400 K. A continuación reduce la tensión hasta 0.001. Por último disminuye la temperatura hasta 270 K. Anota los cambios en la deformación en cada una de estas etapas y discute el resultado en relación al ciclo mostrado en la figura superior. Discute también si un modelo microscópico como el aquí empleado, de ocupación de niveles de entalpía en función de la temperatura, puede reproducir la histéresis que muestran las aleaciones con memoria de forma o si, por el contrario, sólo permiten entender estados de equilibrio en los que las magnitudes observables macroscópicamente no dependen de la historia previa del sistema.

Este Proyecto de Innovación Docente ha sido financiado por el Vicerectorat de Polítiques de Formació i Qualitat Educativa de la Universitat de València (UV - SFPIE_FO14 - 222454).

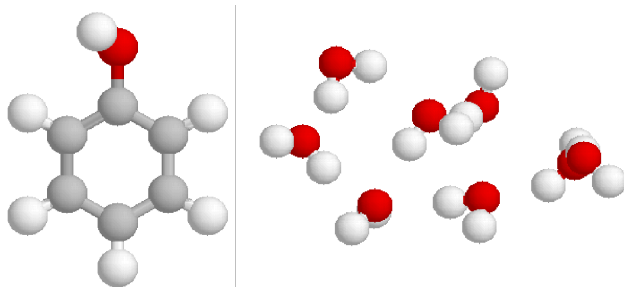
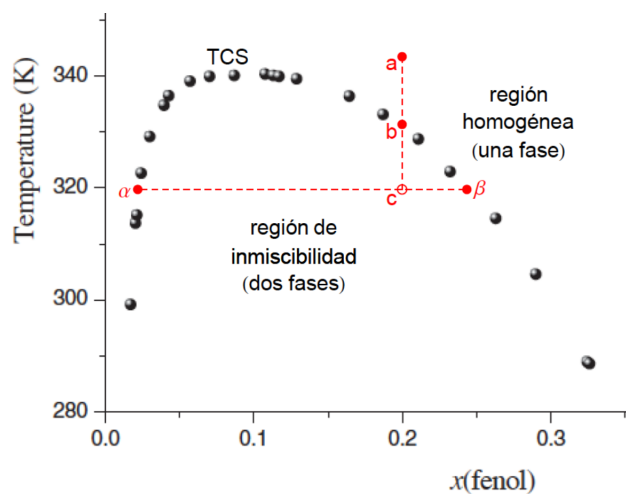


Autores: M.A. Gilabert, J.A. Manzanares, S. Mafé, J. Garrido, M.I. Aguilera, B. Martínez.
Se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivar 4.0
Internacional.

Proyecto de Innovación Educativa del Laboratorio de Termodinámica (PIE2104LT)

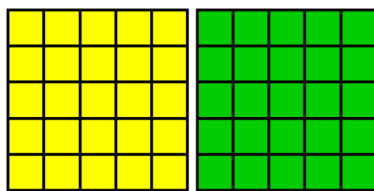
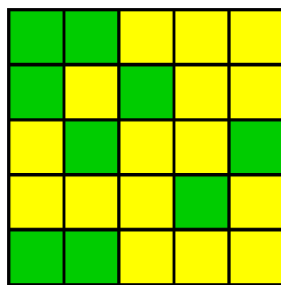
El objetivo principal de este PIE es el fomento del aprendizaje autónomo y colaborativo de los estudiantes mediante la puesta a su disposición de experiencias virtuales interactivas con las que puedan desarrollar, tanto antes como después de su trabajo presencial en el Laboratorio de Termodinámica, su capacidad de elaborar argumentos basados en sus observaciones e interpretar correctamente los fenómenos físicos estudiados.

Anexo II: Diagramas de fase líquido-líquido (Experiencia virtual 4)

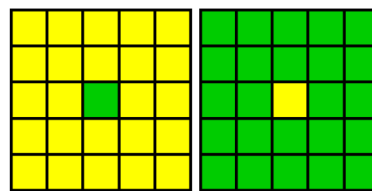


Esta experiencia virtual complementa la experiencia (real) de laboratorio sobre líquidos parcialmente miscibles (como el sistema agua-fenol). El diagrama de fases temperatura-composición nos dice en qué condiciones de equilibrio existe una o dos fases (a 100 kPa). En la figura superior, el punto a está en la región homogénea, indicando que una mezcla agua-fenol con $x \approx 0.2$ a 70°C es miscible y muestra una fase. Si descendemos la temperatura T hasta llegar al punto b, se observa la

formación de una nueva fase líquida, lo cual se evidencia porque la mezcla cambia de transparente a turbia. Al seguir disminuyendo T y llegar al punto c (a $46\text{ }^{\circ}\text{C}$), la mezcla vuelve a ser transparente pero con dos fases separadas que tienen las composiciones marcadas por los puntos α y β . Ambas fases contienen los dos componentes, pero la concentración de fenol en la fase β es mayor que la media y en la fase α es menor que la concentración media. La unión de puntos como α y β a distintas temperaturas define la curva de coexistencia de fases. Dicha curva muestra un máximo que se conoce como punto consolutivo superior (TCS) y a las correspondientes temperatura y composición se las conoce como temperatura y composición críticas. Por encima de la temperatura crítica T_c siempre se forma una fase homogénea sea cual sea la composición media. Por debajo de T_c existe un rango de concentraciones en que la mezcla presenta dos fases. Este rango se conoce como la región de inmiscibilidad y su anchura aumenta al descender la temperatura.



inicial



final

proceso de intercambio

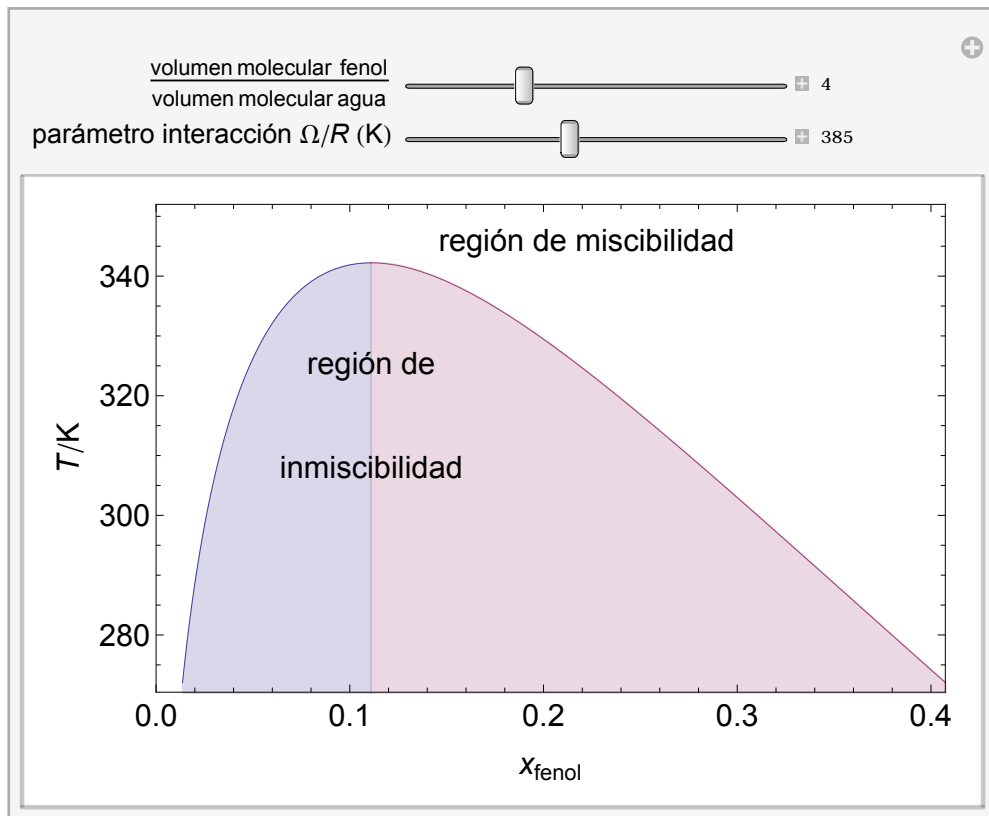
El material elaborado en este Proyecto de Innovación Pedagógica explota la comparación entre la observación de fenómenos a escala macroscópica y su modelización a escala microscópica. Proponemos aquí un modelo de red en que las moléculas de agua y de fenol ocupan posiciones en una red. La razón principal por la que algunos sistemas binarios, como el agua-fenol, muestran una región de inmiscibilidad es que es energéticamente favorable que una molécula esté rodeada por otras del mismo tipo. El proceso de intercambio de una molécula de agua en el seno de una fase “agua pura” y una molécula de fenol en el seno de una fase “fenol puro” requiere un aporte de energía que es proporcional a la llamada energía de intercambio del sistema. Cuanto mayor es esta energía, más extensa es la región de inmiscibilidad y mayor es la temperatura crítica.

Otra característica esencial del sistema agua-fenol es que las moléculas de agua y las de fenol tienen tamaños distintos y, por tanto, la curva de coexistencia de fases es asimétrica. Una experiencia virtual como la aquí desarrollada nos permite considerar un cociente de volúmenes moleculares variable. Si ambas moléculas tuviesen el mismo volumen molecular, la curva de coexistencia de fases estaría centrada en una fracción molar de 0.5. Cuanto mayor es el volumen que asignamos a la molécula de fenol, más asimétrica es la curva de coexistencia de fases. Aquí hemos empleado la teoría de Flory-Huggins para evaluar la entropía de mezcla de la disolución incorporando los efectos de tamaño molecular.

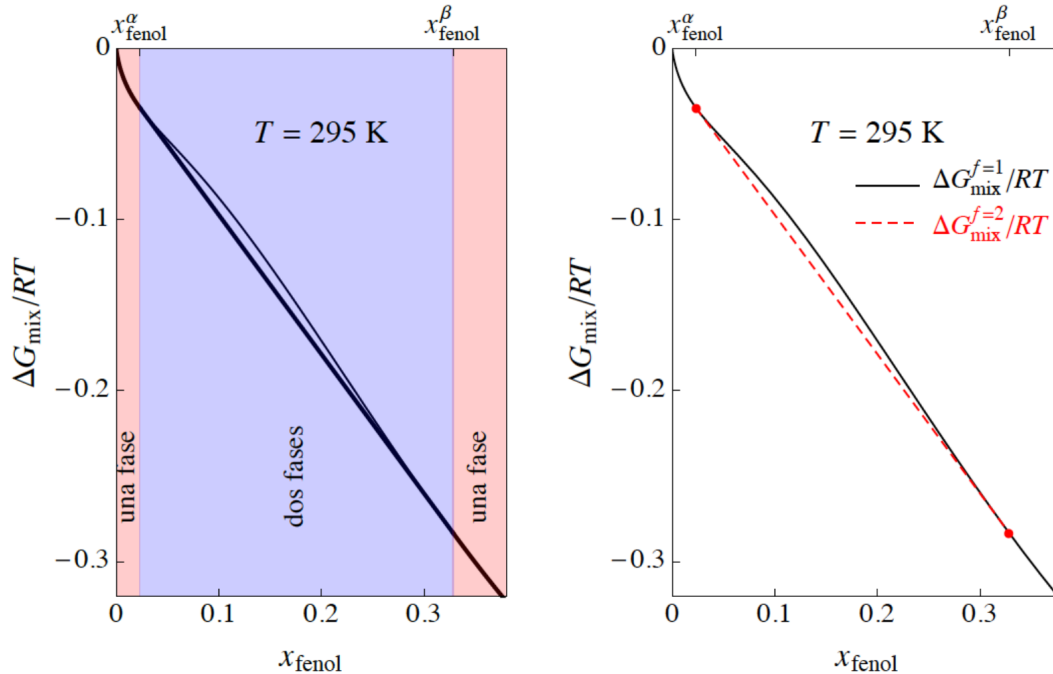
A continuación debes trabajar con el gráfico interactivo. **Para ello selecciona “Evaluate Initialization**

Cells" en el menú Evaluation.

Primera Parte : Comprensión del efecto de la relación de tamaños moleculares y el parámetro de interacción sobre la curva de coexistencia en el diagrama de fases temperatura-composición

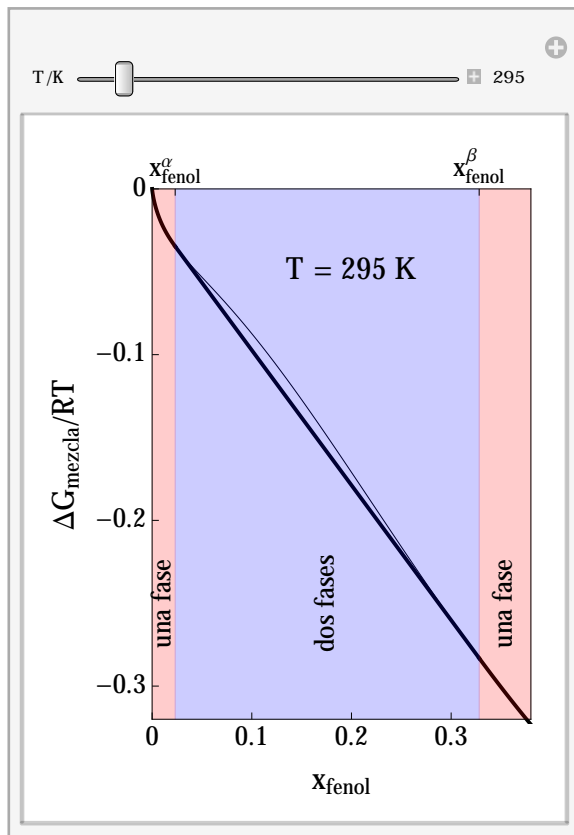


Segunda Parte : Comprensión de la diferencia entre la energía libre de Gibbs del sistema binario con una fase y con dos fases



Cuando fijamos su presión y temperatura, el segundo principio de la termodinámica establece que el estado estable del sistema bajo condiciones de equilibrio es aquel que minimiza su potencial de Gibbs. Aunque las cantidades totales de agua y fenol en el sistema no son variables, es decir, aunque la composición media está fijada, el sistema binario puede optar por tener una fase homogénea o dos fases homogéneas. La figura superior muestra la diferencia entre el valor del potencial de Gibbs, a p y T fijas, en función de la composición media en los casos en que el sistema adopte una o dos fases. Cuando dos fases es lo óptimo, es decir, cuando el potencial de Gibbs correspondiente a dos fases es menor que el correspondiente a una fase, podemos asegurar que dicha composición media y temperatura determinan un punto dentro de la región de inmiscibilidad.

A continuación tienes a tu disposición una gráfica interactiva en la que hemos fijado el cociente de volúmenes moleculares en 4 y el parámetro de interacción Ω en $385R$, pero en el que puedes variar la temperatura. Estudia cómo cambia la anchura de la región de inmiscibilidad con la temperatura, vinculando tus observaciones a las curvas del potencial de Gibbs de mezcla correspondientes a una y dos fases.



Este Proyecto de Innovación Docente ha sido financiado por el Vicerectorat de Polítiques de Formació i Qualitat Educativa de la Universitat de València (UV - SFPIE_FO14 - 222454).



Autores: M.A. Gilabert, J.A. Manzanares, S. Mafé, J. Garrido, M.I. Aguilera, B. Martínez.
Se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivar 4.0 Internacional.