### MOLEKULINĖ FIZIKA IR TERMODINAMIKA

Nagrinėjant kūnų ir fizikinių reiškinių savybes naudojami du tyrimo metodai:

- 1. termodinaminis metodas nagrinėjantis sistemą energetiniu požiūriu;
- 2. molekulinis kinetinis metodas nagrinėjantis molekulinę struktūrą ir molekulių tarpusavio sąveiką.

### MOLEKULINĖ KINETINĖ TEORIJA (MKT)

Nagrinėja sistemų, kuriose yra labai daug dalelių, savybes, dalelių judėjimo pobūdį ir tarpusavio sąveiką

Aprašoma pagrindinėmis sąvokomis (dalelės masė, molinė masė, vidutinė energija, vidutinis kvadratinis greitis)

Nagrinėja tipiškus reiškinius (difuziją, šilumos laidumą, klampą)

Nagrinėja MKT taikymą

Aprašoma pagrindiniais MKT teiginiais (visi kūnai sudaryti iš dalelių, jos chaotiškai juda, dalelės tarpusavyje sąveikauja)

### TERMODINAMIKA

Nagrinėja makroskopinių kūnų savybes ir reiškinius energetiniu požiūriu

Aprašoma
pagrindinėmis
sąvokomis (slėgis, tūris,
temperatūra, darbas,
šilumos kiekis, vidinė
energija)

Nagrinėja tipinius reiškinius ( šiluminę pusiausvyrą, šiluminę talpą, medžiagos agregatinės būsenos kitimą)

Nagrinėja termodinamikos taikymą (energetiką, šiluminių mašinų veikimą ir kt.)

Aprašoma termodinamikos dėsniais

Termodinamine sistema vadiname fizikinę sistemą, sudarytą iš didelio kiekio dalelių (atomų, molekulių), kurios chaotiškai juda ir tarpusavy sąveikauja, apsikeisdamos energijomis.

Paprasčiausias termodinaminės sistemos pavyzdys – **dujos**.

# MOLEKULINĖ-KINETINĖ IDEALIŲ DUJŲ TEORIJA

### Pagrindiniai molekulinės-kinetinės teorijos teiginiai

 Medžiagos yra sudarytos iš didelio kiekio dalelių – molekulių.

\* Šios dalelės chaotiškai juda.

Dalelės tarpusavy sąveikauja.

## Pagrindinė molekulinės – kinetinės teorijos lygtis

Ši lygtis suriša makroskopinius (p) ir mikroskopinius ( $n_0$ , m,  $v_{vid.kv}$ ) dujų parametrus.

## Pagrindinė molekulinės – kinetinės teorijos lygtis

$$p = \frac{1}{3} \cdot n_0 \cdot m \cdot v_{vid.kv}^2$$

$$p = \frac{2}{3} \cdot n_0 \cdot \overline{E}_K$$

$$p = n_0 \cdot k \cdot T$$

### v<sub>vid.kvadr</sub>.— vidutinis kvadratinis dujų molekulės greitis

$$v_{vid.kv} = \sqrt{\frac{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}{n}}$$

$$v_{vid.kv} = \sqrt{\frac{3 \cdot R \cdot T}{\mu}}$$

### IDEALIOS DUJOS

Idealiomis vadiname dujas, kurių molekulės tarpusavyje nesąveikauja ir neužima jokio tūrio.

Molekulės - nesąveikaujantys materialūs taškai.

Dalelės sąveikauja tik susidurdamos viena su kita.

### **IZOPROCESAI**

#### Reikalavimai:

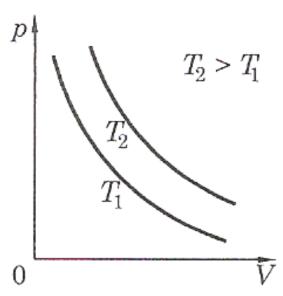
- •proceso metu dujų masė nekinta m=const;
- •vienas iš dujų būvio parametrų (T, p, V) yra pastovus;
- •kiti du dujų būvio parametrai kinta priklausomai vienas nuo kito.

### **IZOTERMINIS PROCESAS**

$$m=const$$
,  $T=const$ ,  $p=f(V)_T$ 

Izoterminį procesą aprašo Boilio ir Marioto dėsnis:

$$p \cdot V = const$$

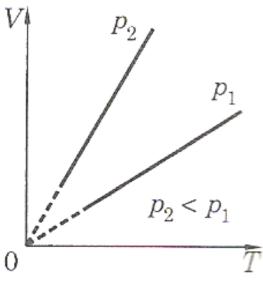


### **IZOBARINIS PROCESAS**

$$m = const$$
,  $p = const$ ,  $V = f(T)_p$ 

Izobarinį procesą aprašo Gei - Liusako dėsnis:

$$\frac{V}{T} = const$$

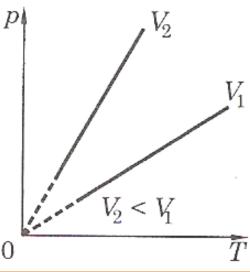


#### **IZOCHORINIS PROCESAS**

$$m = const$$
,  $V = const$ ,  $p = f(T)_V$ 

Izochorinį procesą aprašo Šarlio dėsnis:

$$\frac{p}{T} = const$$



### Idealių dujų būseną aprašo Klapeirono - Mendelejevo lygtis

$$p \cdot V = \frac{m}{-} \cdot R \cdot T$$

### LAISVĖS LAIPSNIŲ SKAIČIUS

Sistemos mikroskopinę būseną apibudinančių nepriklausomų kintamųjų skaičius vadinamas laisvės laipsnių skaičiumi i.

Laisvės laipsnių skaičius – tai galimų ir nepriklausomų molekulės judėjimo krypčių skaičius.

### Molekulės laisvės laipsnių skaičius

$$i = i_{slenk} + i_{suk} + i_{virp}$$

### Tolygaus energijos pasiskirstymo pagal laisvės laipsnius dėsnis

Termodinaminės pusiausvyros būsenoje slenkamojo, sukamojo ir virpamojo judėjimo vienam laisvės laipsniui tenka vidutiniškai vienodas kinetinės energijos kiekis lygus ½ kT.

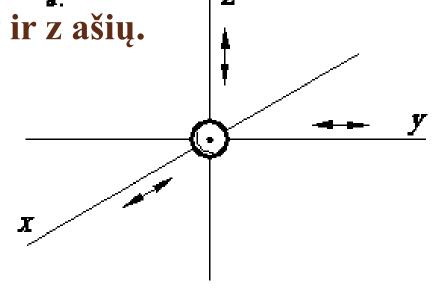
### Vienatomė molekulė

$$i = 3$$

Molekulė gali slinkti išilgai x, y ir z ašių.

#### Molekulės kinetinė energija:

$$E_k = \frac{i}{2} \cdot kT = \frac{3}{2} \cdot kT$$



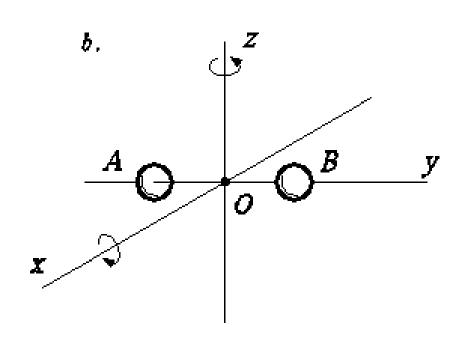
### Dviatomė molekulė su kietu ryšiu

$$i = 3 + 2 = 5$$

Molekulė gali slinkti išilgai x, y, z ašių, o suktis - apie x ir z ašis.

Molekulės kinetinė energija:

$$E_k = \frac{5}{2} \cdot kT$$



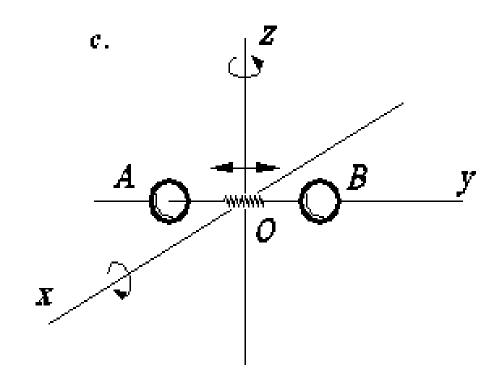
## Dviatomė molekulė su tampriu ryšiu

$$i = 3 + 2 + 1 = 6$$

Atomai molekulėje svyruoja (*virpa*) vienas kito atžvilgiu išilgai y ašies.

Molekulės kinetinė energija:

$$E_k = \frac{5}{2} \cdot kT + kT = \frac{7}{2} \cdot kT$$



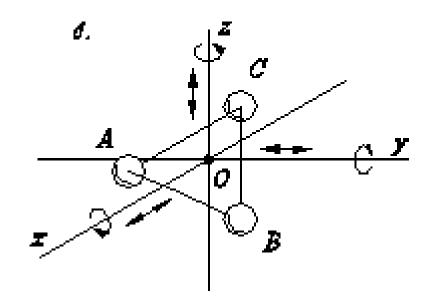
### Pastaba

Vienam virpamojo (svyruojamojo) judėjimo laisvės laipsniui be ½ kT kinetinės energijos dar tenka ir ½ kT potencinės energijos, nes atomai molekulėje vienas kito atžvilgiu keičia tarpusavio padėtį. Todėl viso tenka vienam virpamojo judėjimo laisvės laipsniui  $k\bar{T}$  energijos.

### Triatomė molekulė su kietu ryšiu

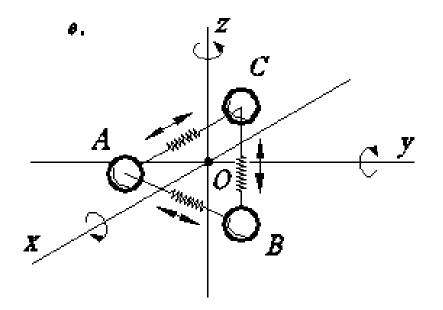
$$i = 3 + 3 = 6$$

$$E_k = 3kT$$



### Triatomė molekulė su tampriu ryšiu

$$i = 3 + 3 + 3 = 9$$



$$E_k = \frac{3}{2}kT + \frac{3}{2}kT + 3kT = 6kT$$

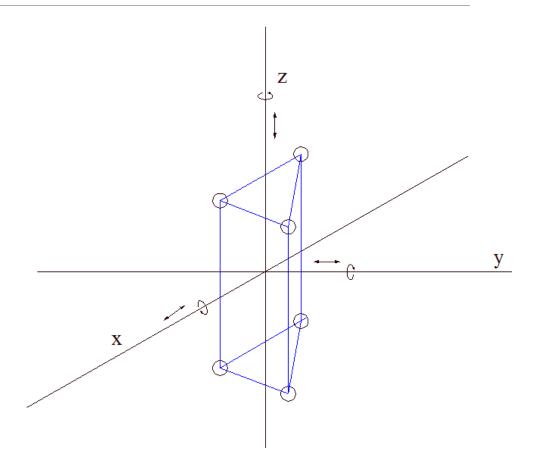
### Šešiatomė molekulė su kietu ryšiu

Laisvės laipsnių skaičius:

$$i = 3 + 3 = 6$$

Vidutinė kinetinė energija:

$$E_{K} = \frac{3}{2}kT + \frac{3}{2}kT = 3kT$$



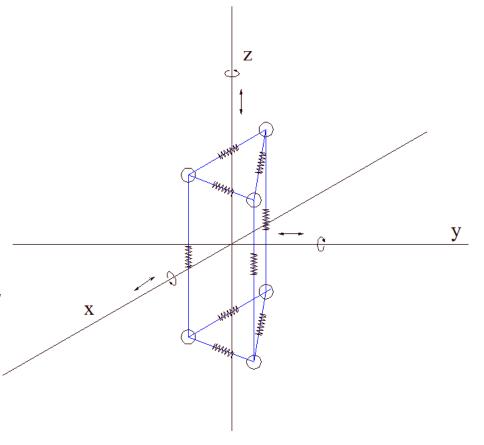
### Šešiatomė molekulė su tampriu ryšiu

Laisvės laipsnių skaičius:

$$i = 3 + 3 + 9 = 15$$

Vidutinė kinetinė energija:

$$E_{K} = \frac{3}{2}kT + \frac{3}{2}kT + 9kT = 12kT$$



### DARBAS, ŠILUMOS KIEKIS, VIDINĖ ENERGIJA

Kūnų sistemos būseną galima pakeisti trimis būdais:

- 1. atliekant mechaninį darbą;
- 2. sistemai suteikiant ar iš jos paimant šilumos kiekį;
- 3. keičiant sistemą sudarančių dalelių skaičių.

### Darbas dujoms plečiantis

$$A = \int_{V_1}^{V_2} p \cdot dV$$

$$dA = p \cdot dV$$

Jei dV > 0, tai dA > 0.

Jei dV < 0, tai dA < 0.

1. **Izochorinio** proceso metu (V=const, dV=0) sistema darbo neatlieka

$$A = 0$$

2. **Izobarinio** proceso metu (p = const) darbas priklauso nuo tūrio pokyčio

$$A = p \int_{V_1}^{V_2} dV = p(V_2 - V_1) = p \cdot \Delta V$$

3. **Izoterminio** proceso metu (T=const) darbas yra lygus

$$A = \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot T \cdot \ln \frac{V_2}{V_1}$$

Šilumos kiekis - tai energijos kiekis perduotas vieno kūno kitam šiluminių mainų procese.

Sistemai suteiktas šilumos kiekis Q>0, o jos atiduotas – Q<0.

Šilumos kiekis matuojamas : J (džiauliais).

1. Šilumos kiekis, reikalingas kūno temperatūrai pakeisti:

$$Q = c \cdot m \cdot (t_2 - t_1)$$
$$dQ = c \cdot m \cdot dT.$$

2. Šilumos kiekis reikalingas skysčiui išgarinti:

$$Q_{gar} = \lambda \cdot m$$
.

3. Šilumos kiekis reikalingas kietam kūnui išlydyti:

$$Q_{lyd} = L \cdot m$$
.

c – savitoji medžiagos šiluma. Ji lygi šilumos kiekiui, kurį reikia suteikti 1 kg masės kūnui, kad pakeisti jo temperatūrą vienu laipsniu:

$$c = \frac{1}{m} \cdot \frac{dQ}{dT}$$

C – šiluminė talpa. Ji lygi šilumos kiekiui, kurį reikia suteikti kūnui, kad pakeisti jo temperatūrą vienu laipsniu:

$$C = \frac{dQ}{dT} = c \cdot m$$

 $C_{\mu}$  – molinė šiluma. Tai vieno medžiagos molio šiluminė talpa:

$$C_{\mu} = \mu \cdot c = \frac{\mu}{m} \cdot \frac{dQ}{dT}$$

Jos matavimo vienetai: J/(mol·K)

#### Vidinė idealių dujų energija

$$U = E_{k_{sl}} + E_{k_{suk}} + E_{k_{virp}}$$

$$U = \frac{i}{2} \cdot \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot T$$

$$dU = \frac{i}{2} \cdot \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot dT$$

Vidinės energijos pokytis  $\Delta U$  priklauso nuo temperatūros pokyčio  $\Delta T$ :

$$\Delta U = \frac{i}{2} \cdot \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot \Delta T$$

## I-ASIS TERMODINAMIKOS DĖSNIS

Šiluminiams reiškiniams taikomas energijos tvermės dėsnis vadinamas pirmuoju termodinamikos dėsniu. I-asis termodinamikos dėsnis teigia:

sistemai suteiktas šilumos kiekis jos yra sunaudojamas savo vidinei energijai pakeisti ir darbui atlikti, nugalint išorines jėgas:

$$Q = \Delta U + A$$
$$dQ = dU + dA.$$

$$dQ = \frac{i}{2} \cdot \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot dT + p \cdot dV$$

# I-ojo termodinamikos dėsnio taikymas izoprocesams

#### Izochoriniam procesui

$$V = const$$
,  $(\Delta V = 0, A = 0)$ 

Izochorinio proceso metu visas sistemai suteiktas šilumos kiekis jos yra sunaudojamas savo vidinei energijai pakeisti:

$$Q = \Delta U$$
$$dQ = dU.$$

#### Izochorinė molinė šiluma ( $m=\mu$ )

$$C_V = \frac{dQ}{dT} = \frac{dU_{mol}}{dT} = \frac{i}{2} \cdot R$$

Vienatomės molekulės

$$C_V = \frac{3}{2} \cdot R$$

Dviatomės su kietu ryšiu

$$C_V = \frac{5}{2} \cdot R$$

Triatomės su kietu ryšiu

$$C_V = 3R$$

#### Izobariniam procesui

p = const

Izobarinio proceso metu sistemai suteiktas šilumos kiekis jos yra sunaudojamas savo vidinei energijai pakeisti ir darbui, nugalint išorines jėgas, atlikti:

$$Q = \Delta U + A$$
$$dQ = dU + dA.$$

#### Izobarinė molinė šiluma

$$C_p = \frac{dQ}{dT} = \frac{dA + dU_{mol}}{dT} = R + \frac{i}{2}R = \frac{i+2}{2} \cdot R$$

#### Mejerio lygtis

$$C_p - C_V = R$$

#### Izobarinė molinė šiluma

Vienatomės molekulės

$$C_p = \frac{5}{2}R$$

Dviatomės su kietu ryšiu

$$C_p = \frac{7}{2}R$$

Triatomės su kietu ryšiu

$$C_p = 4R$$

#### Izoterminiam procesui

$$T = const$$
,  $(\Delta T = 0, \Delta U = 0)$   
$$\Delta U = \frac{i}{2} \cdot \frac{m}{\mu} \cdot R \cdot \Delta T = 0$$

Izoterminio proceso metu visas sistemai suteiktas šilumos kiekis jos yra sunaudojamas tik darbui atlikti, nugalint išorines jėgas:

$$Q = A$$

$$dQ = dA = p \cdot dV.$$

## Izobarinės ir izochorinės molinių šilumų santykis

$$\gamma = \frac{C_p}{C_V} = \frac{i+2}{i}$$

#### Izobarinės ir izochorinės molinių šilumų santykis

Vienatomės molekulės

$$\gamma = \frac{5}{3} = 1,67$$

Dviatomės su kietu ryšiu

$$\gamma = \frac{7}{5} = 1,40$$

Triatomės su kietu ryšiu

$$\gamma = \frac{4}{3} = 1,33$$

#### ADIABATINIS PROCESAS

Tai toks procesas, kurio metu sistema neturi šiluminių mainų su aplinka, t.y. nei gauna, nei atiduoda aplinkai šilumos:

$$dQ = 0$$

$$Q = 0$$
.

### I-asis termodinamikos dėsnis adiabatiniam procesui

Adiabatinio proceso metu (dQ=0) sistema atlieka darbą savo mažėjančios vidinės energijos sąskaita:

$$dA = -dU$$

$$A = -\Delta U$$
.

Jei darbą atlieka pati sistema (A>0), tai jos energija mažėja, mažėjant dujų temperatūrai.

Jei darbas atliekamas sistemos atžvilgiu (A < 0), tai sistemos vidinė energija didėja, kylant dujų temperatūrai.

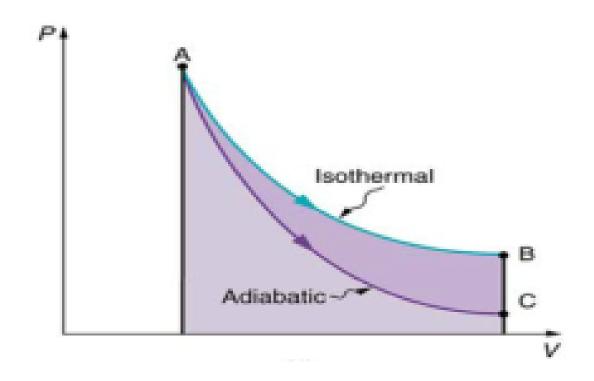
Idealių dujų adiabatės lygtis, išreikšta per kintamuosius T ir V:

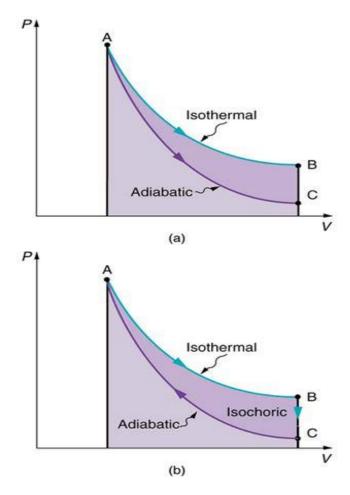
$$T \cdot V^{\gamma - 1} = const$$

Puasono lygtis (adiabatės lygtis su kintamaisiais p ir V):

$$p \cdot V^{\gamma} = const$$

### Adiabatiniais laikomi tik labai greitai vykstantys procesai.





# GRĮŽTAMIEJI IR NEGRĮŽTAMIEJI PROCESAI

Grįžtamuoju vadinamas toks procesas, kai įvykus tiesioginiam ir atvirkštiniam procesams, aplinkoje nelieka jokių pakitimų, t.y. atvirkštinis procesas vyksta per tas pačias tarpines būsenas, kaip ir tiesioginis procesas.

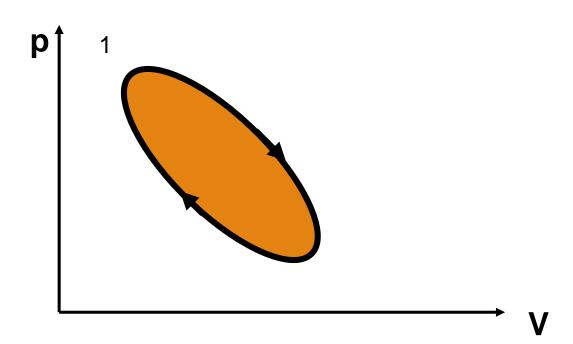
( "=" – grįžtamasis procesas)

Negrįžtamojo proceso atveju, įvykus tiesioginiam ir atvirkštiniam procesams, aplinkoje lieka pakitimai.

Visi gamtoje vykstantys natūralūs procesai yra negrįžtamieji.

(">" ar "<" – negrįžtamasis procesas)

Procesas, kai termodinaminė sistema išėjusi iš pradinės būsenos ir, praėjusi eilę tarpinių būsenų, grįžta vėl į pradinę būseną, vadinamas cikliniu arba ciklu.



Jei ciklas vyks ta pagal laikrodžio rodyklę, tai jis vadinamas tiesioginiu.

Šio ciklo metu sistema atlieka darbą (A>0) gauto šilumos kiekio sąskaita (Q>0).

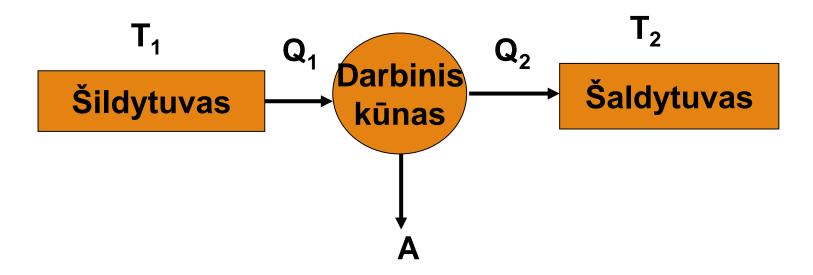
Tiesioginiu ciklu dirba šiluminis variklis.

Jei ciklas vyksta prieš laikrodžio rodyklę, tai jis vadinamas atvirkštiniu.

Šio ciklo metu atliekamas neigiamas darbas (A<0), atiduodant šilumą (Q<0).

Atvirkštiniu ciklu dirba šaldymo mašinos.

#### Reali šiluminė mašina

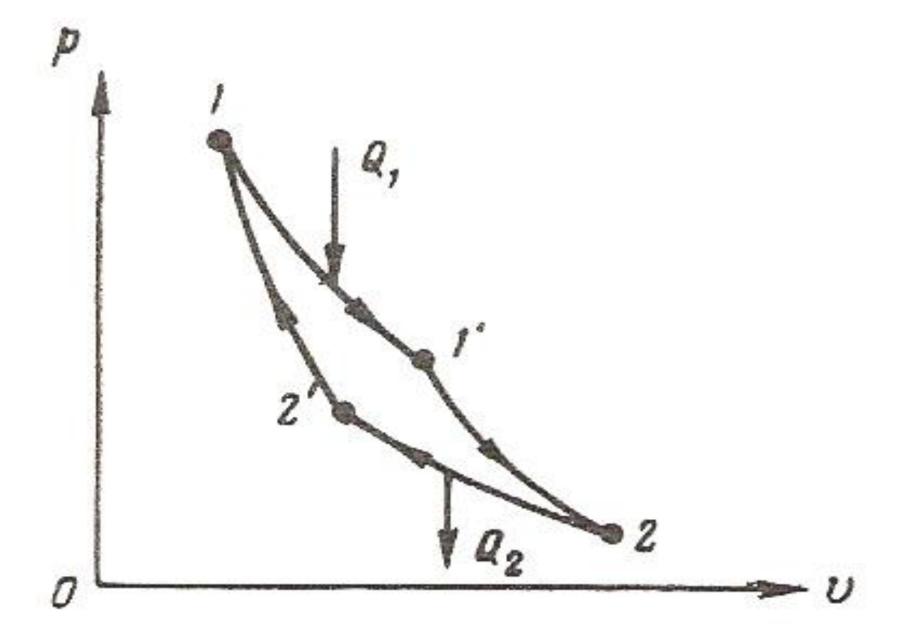


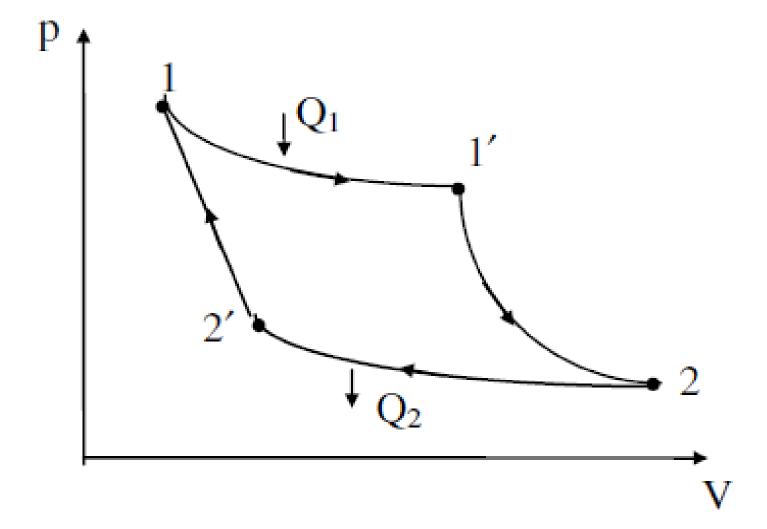
Realios šiluminės mašinos naudingumo koeficientas:

$$\eta = \frac{A}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1}$$

#### Karno ciklas

Didžiausią naudingumo koeficientą turi grįžtamasis ciklas sudarytas iš dviejų izotermių ir dviejų adiabačių - jis vadinamas Karno ciklu.





$$1 - p_1, V_1, T_1$$

$$1 \rightarrow 1' (T_1 = const)$$

1'-
$$p_2$$
,  $V_2$ ,  $T_1$ 

$$2 \rightarrow 2$$
,  $(T_2 = const)$ 

$$2 - p_3, V_3, T_2$$

izoterminiai procesai

$$2' - p_4 V_4 T_2$$

$$1 \rightarrow 2 \text{ ir } 2 \rightarrow 1$$

Adiabatiniai procesai

(dQ = 0)

### Rasime Karno ciklo naudingumo koeficientą $(m = \mu)$

Gautas šilumos kiekis  $Q_1$ :

$$Q_1 = A_{11'} = R \cdot T_1 \cdot \ln \frac{V_2}{V_1}$$
(1)

Atiduotas šilumos kiekis  $Q_2$ :

$$Q_2 = A_{22'} = R \cdot T_2 \cdot \ln \frac{V_3}{V_4}$$
 (2)

Adiabatiniams procesams aprašyti taikome adiabatės lygtį:

$$T_1 \cdot V_2^{\gamma - 1} = T_2 \cdot V_3^{\gamma - 1} \tag{3}$$

$$T_1 \cdot V_1^{\gamma - 1} = T_2 \cdot V_4^{\gamma - 1} \tag{4}$$

(3) padaliname iš (4) ir gauname

$$\frac{V_2}{V_1} = \frac{V_3}{V_4} \tag{5}$$

Pasinaudoję (1), (2) ir (5) lygtis rasime  $\eta_k$ :

$$\eta_K = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = \frac{T_1 \cdot \ln \frac{V_2}{V_1} - T_2 \cdot \ln \frac{V_3}{V_4}}{T_1 \cdot \ln \frac{V_2}{V_1}} = \frac{T_1 - T_2}{T_1}$$

#### Karno teorema

Realios šiluminės mašinos, kurios darbas lydimas energijos nuostolių, naudingumo koeficientas  $\eta$  yra mažesnis už naudingumo koeficientą  $\eta_K$  šiluminės mašinos, dirbančios Karno ciklu:

$$\frac{Q_{1}-Q_{2}}{Q_{1}} < \frac{T_{1}-T_{2}}{T_{1}}$$

## $\eta \leq \eta_K$

"="-grįžtamajam procesui;

"<" – negrįžtamajam procesui.