

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

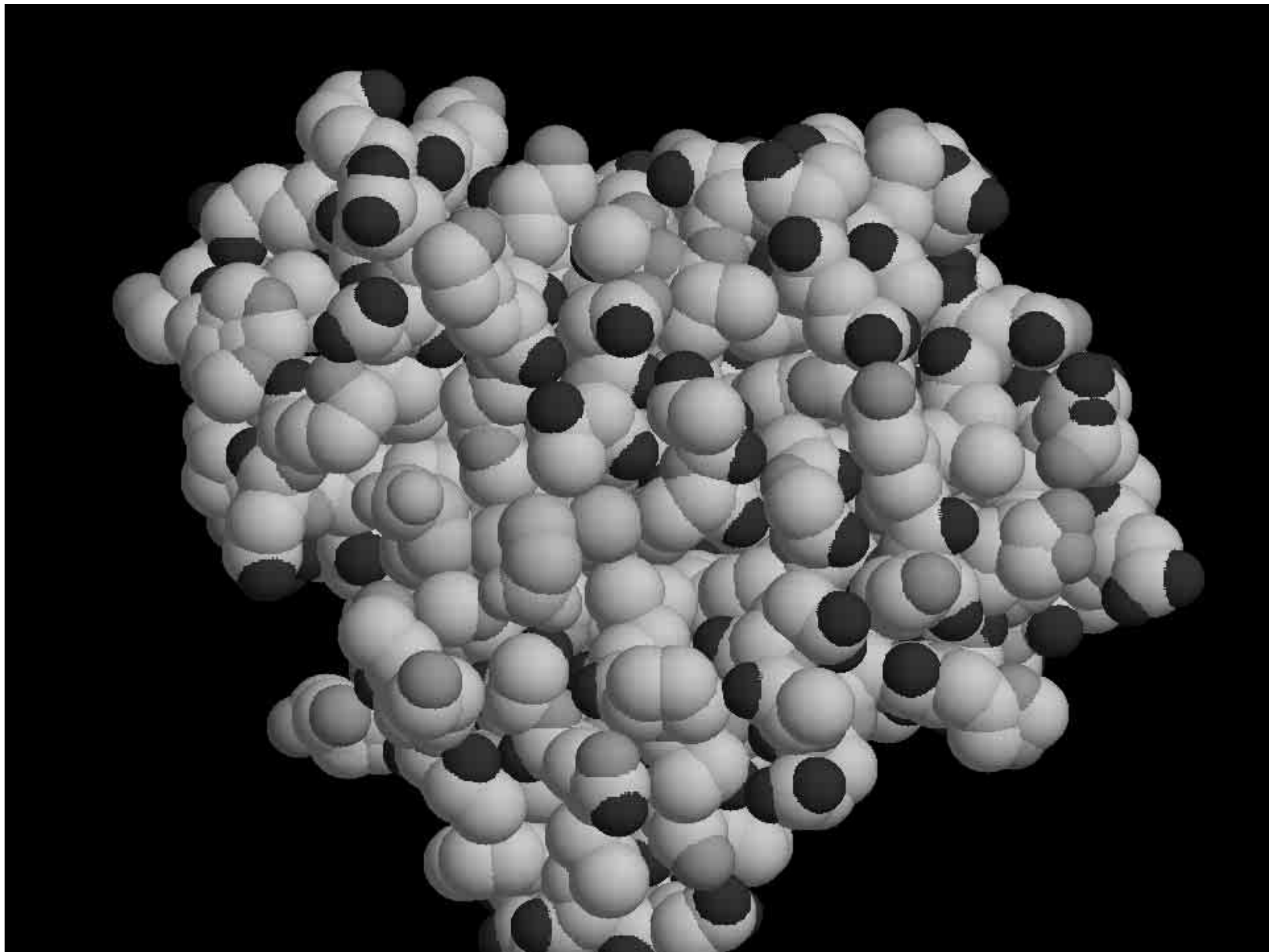
Τι είναι ;

Μέθοδος υπολογιστικής προσομοίωσης της χρονικής εξέλιξης ενός συστήματος αλληλεπιδρόντων σωματιδίων ΔΗΛΑΔΗ η προσομοίωση της κίνησης των ατόμων ή μορίων ενός συστήματος με σκοπό να κατανοήσουμε φυσικά φαινόμενα που οφείλονται σε μοριακές αλληλεπιδράσεις π.χ. κίνηση ρευστών, εσωτερική κίνηση βιομορίων, μηχανισμός χημικής αντίδρασης.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι μας χρειάζονται ;

Πώς η γνώση της εσωτερικής κίνησης ενός βιομορίου μπορεί να βοηθήσει στην καλύτερη κατανόηση της λειτουργίας του ;



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι σημαίνει «παρακολουθώ την κίνηση μιας πρωτεΐνης» ;

1. Παρακολουθώ την κίνηση όλων των ατόμων της πρωτεΐνης.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι σημαίνει «παρακολουθώ την κίνηση μιας πρωτεΐνης» ;

1. Παρακολουθώ την κίνηση όλων των ατόμων της πρωτεΐνης.

2. $t=0$
 $r_i(0)$
 $u_i(0)$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι σημαίνει «παρακολουθώ την κίνηση μιας πρωτεΐνης» ;

1. Παρακολουθώ την κίνηση όλων των ατόμων της πρωτεΐνης.

2. $t=0$

$r_i(0)$

$u_i(0)$


$F_i(0)$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι σημαίνει «παρακολουθώ την κίνηση μιας πρωτεΐνης» ;

1. Παρακολουθώ την κίνηση όλων των ατόμων της πρωτεΐνης.

2. $t=0$ Δt
 $r_i(0)$ $r_i(\Delta t)$
 $u_i(0)$ $u_i(\Delta t)$
 $F_i(0)$ $F_i(\Delta t)$



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Τι σημαίνει «παρακολουθώ την κίνηση μιας πρωτεΐνης» ;

1. Παρακολουθώ την κίνηση όλων των ατόμων της πρωτεΐνης.

2. $t=0$ Δt $2\Delta t$...

$r_i(0)$	$r_i(\Delta t)$	$r_i(2\Delta t)$	
$u_i(0)$	$u_i(\Delta t)$	$u_i(2\Delta t)$	
$F_i(0)$	$F_i(\Delta t)$	$F_i(2\Delta t)$	

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Πώς πραγματοποιούνται ;
Λύνοντας για κάθε σωματίδιο τις εξισώσεις κίνησης
σε τακτά χρονικά διαστήματα.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

ΔΥΝΑΜΕΙΣ **↔** **ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ**
↔ **ΔΥΝΑΜΙΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ**

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής :

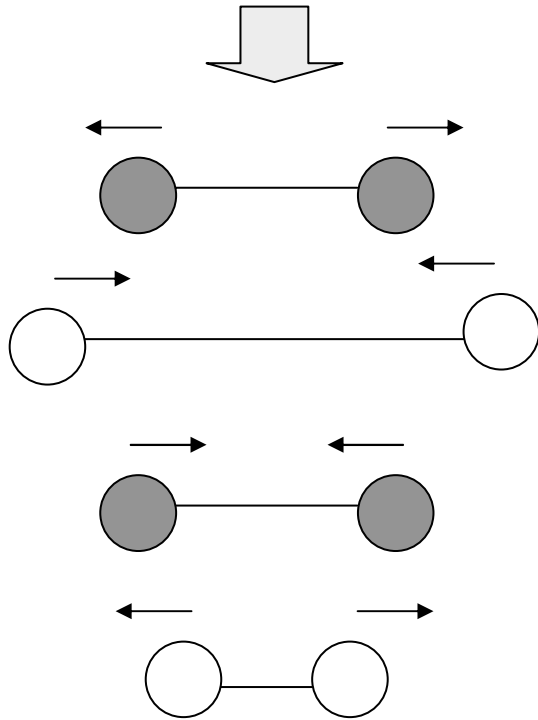
Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(r) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

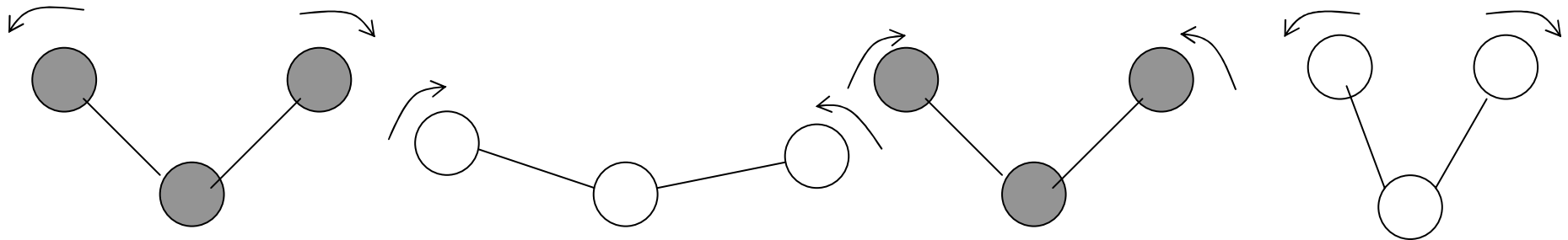
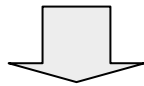
$$V(r) = E_{\text{έκταση}}$$



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

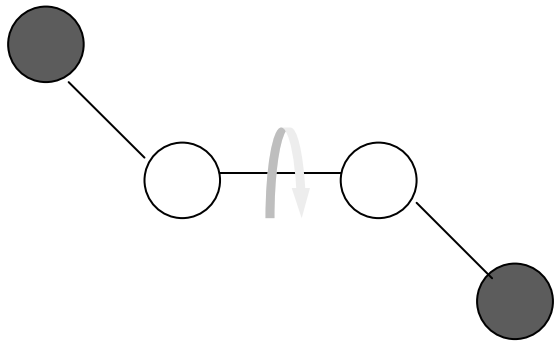
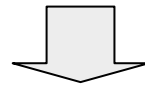
$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

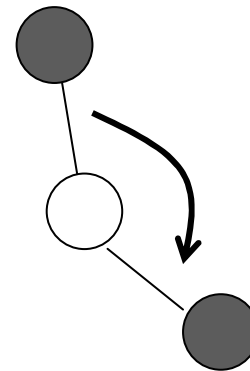
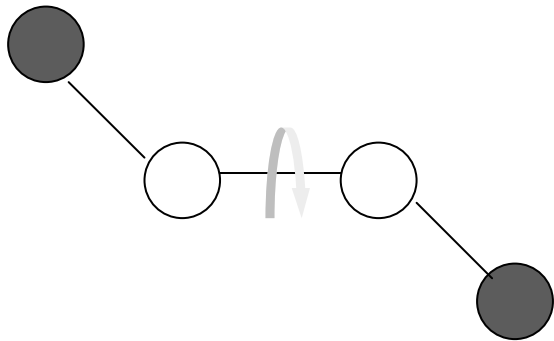
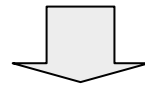
$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

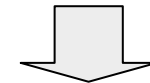
$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$



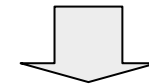
$$\sum (q_i q_k) / (r_{ik} D)$$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής :

Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{δεσμική}} + E_{\text{μη-δεσμική}}$$

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$



$$\sum [(A_{ik} / r_{ik}^{12}) - (B_{ik} / r_{ik}^6)]$$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής :

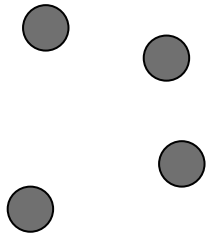
Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας

$$V(\mathbf{r}) = E_{\text{έκταση}} + E_{\text{κάμψη}} + E_{\text{περιστροφή}} + E_{\text{ηλεκτρ.}} + E_{\text{van der Waals}}$$

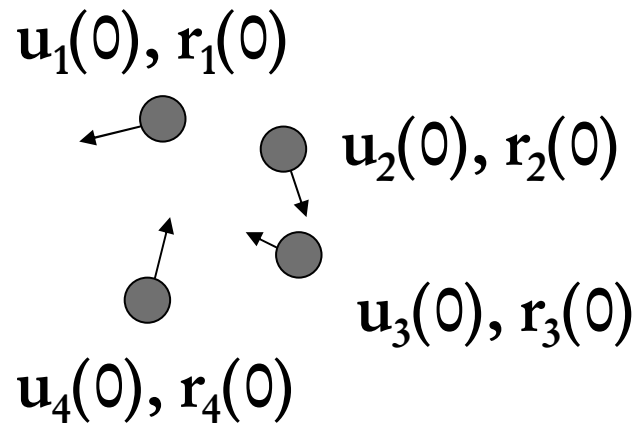
$$F(\mathbf{r}) = - dV(\mathbf{r}) / dr$$

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η πορεία των υπολογισμών

Το σύστημα

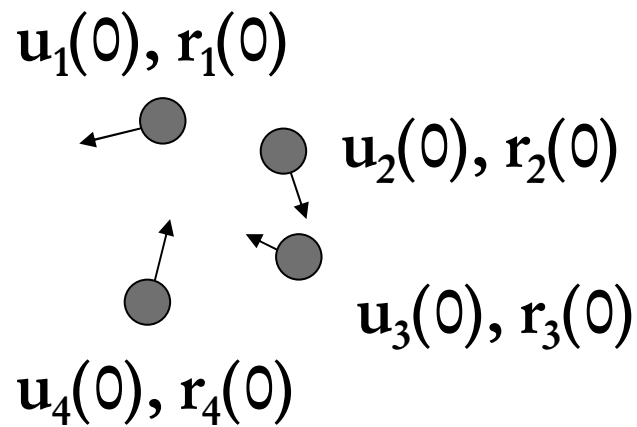


Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η πορεία των υπολογισμών



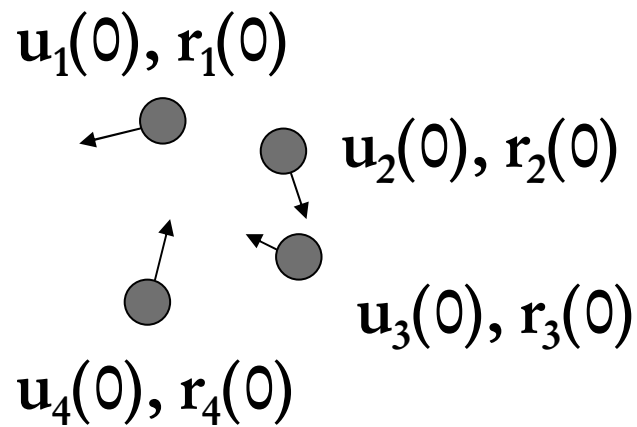
Οι αρχικές θέσεις και ταχύτητες κάθε σωματιδίου είναι γνωστές.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η πορεία των υπολογισμών



Κάθε φυσικό σύστημα N σωματιδίων περιγράφεται με τη βοήθεια μιας συνάρτησης δυναμικού που αντιπροσωπεύει τη δυναμική ενέργεια του συστήματος λόγω της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων. Είναι $V = \bar{V}(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_N)$. Έστω F_i είναι η δύναμη που δέχεται το σωματίδιο i λόγω της αλληλεπίδρασης του με τα άλλα σωματίδια του συστήματος.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Η πορεία των υπολογισμών



Τότε $F_i = m_i a_i \Leftrightarrow a_i = \dots$

Η ταχύτητα του κάθε σωματιδίου τη χρονική στιγμή $t + \Delta t$ είναι:

$$u_i(t + \Delta t) = u_i(t) + a_i(t) \Delta t$$

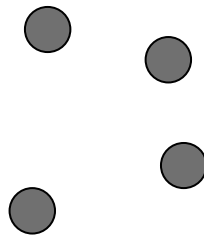
ενώ η θέση του δίνεται από τον τύπο:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + u_i(t + \Delta t) \Delta t$$

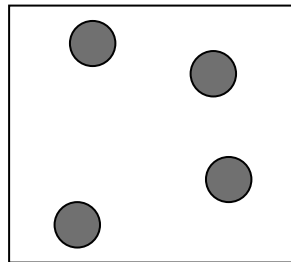
Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : periodic boundary conditions

Το σύστημα που προσομοιώνεται περικλείεται σε μία κυψελίδα και η κυψελίδα αυτή επαναλαμβάνεται στις τρεις διαστάσεις.

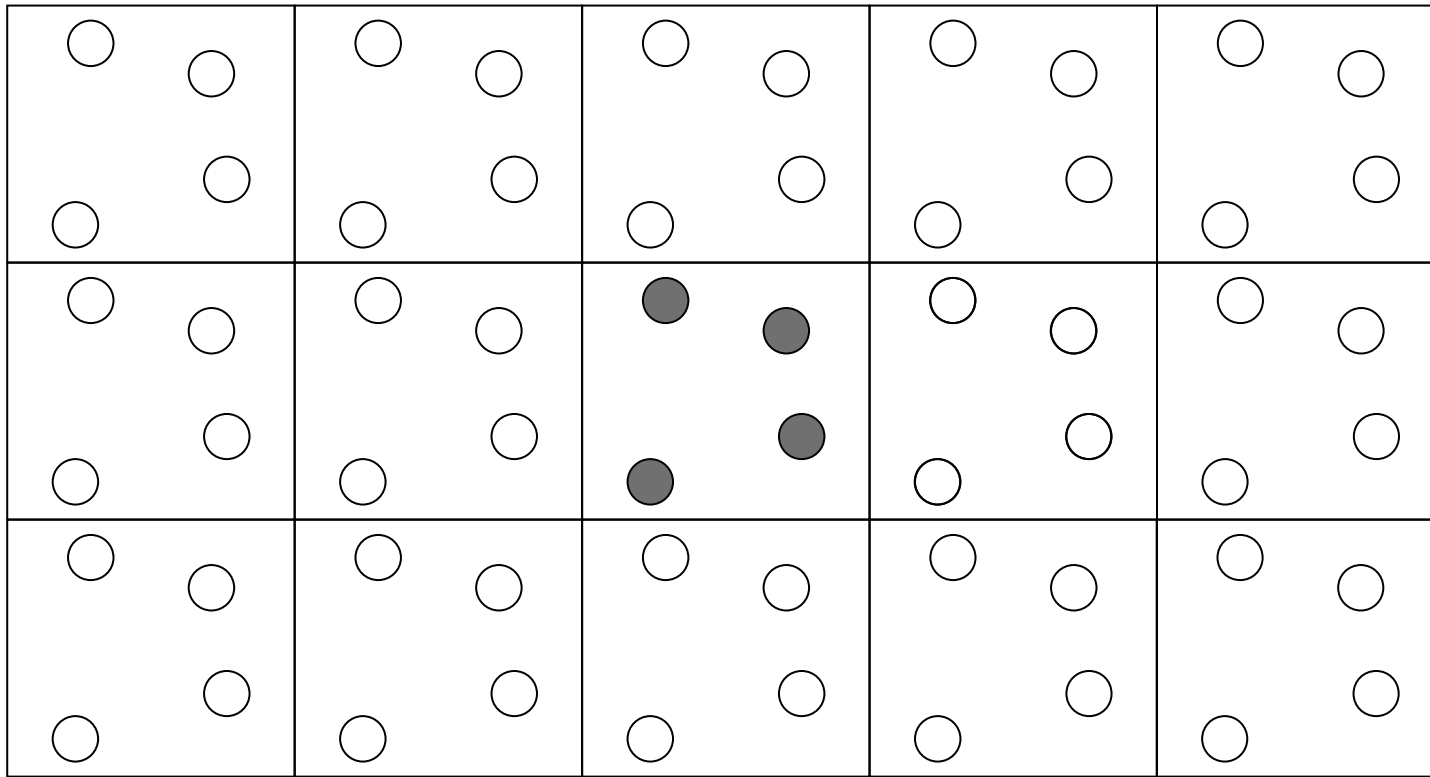
Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : periodic boundary conditions



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : periodic boundary conditions



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : periodic boundary conditions



Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής : Τα βιολογικά ερωτήματα

Σταθερότητα πρωτεϊνών, ευελιξία, διακυμάνσεις διαμόρφωσης και ταχύτητες διακύμανσης – τοπικές κινήσεις που σχετίζονται με τη δημιουργία/διάσπαση υδρογονοδεσμών και τις αλληλεπιδράσεις διαλύτη ή ιόντων με το βιομόριο – μοριακή αναγνώριση - αλληλεπιδράσεις μεταξύ πρωτεϊνών ή μεταξύ πρωτεΐνης-DNA - πρόσδεση ενζύμου-υποστρώματος – μελέτη της πορείας αναδίπλωσης πρωτεϊνών - Δυναμική μεμβρανών – μεταφορά ιόντων σε βιολογικά συστήματα

ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ

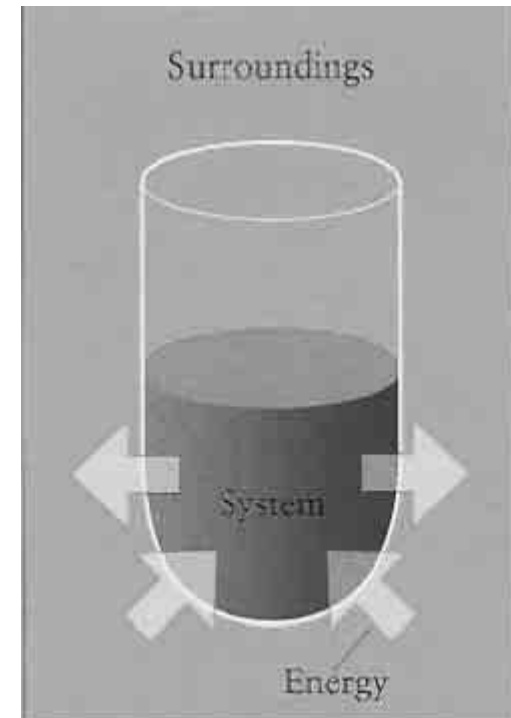
ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ - ΟΡΟΛΟΓΙΑ

Σύστημα και Περιβάλλον

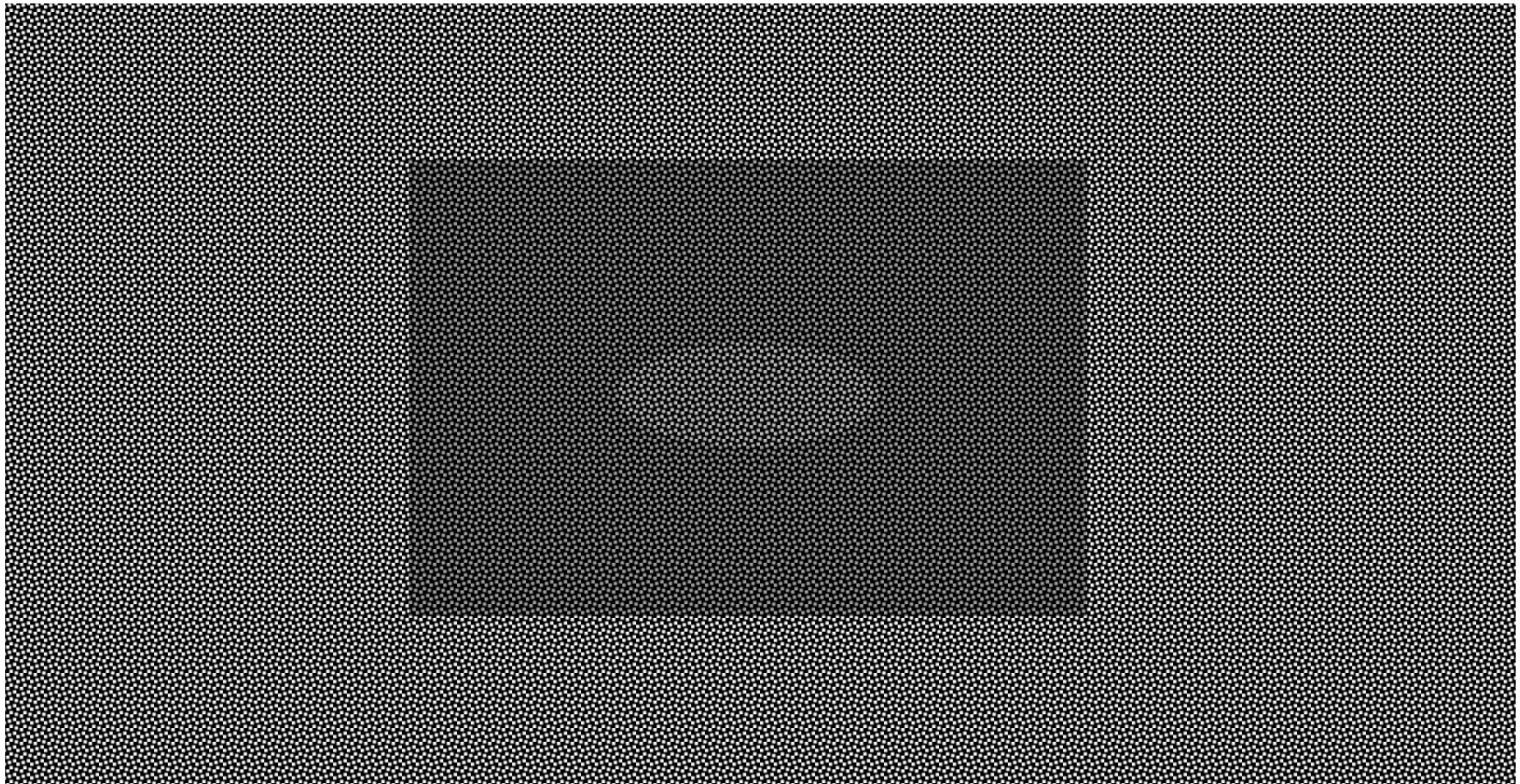
Σύστημα: Ορισμένη ποσότητα μίας ή περισσότερων ουσιών υπό καθορισμένη διεύθυνση.

Περιβάλλον

Σύμπαν

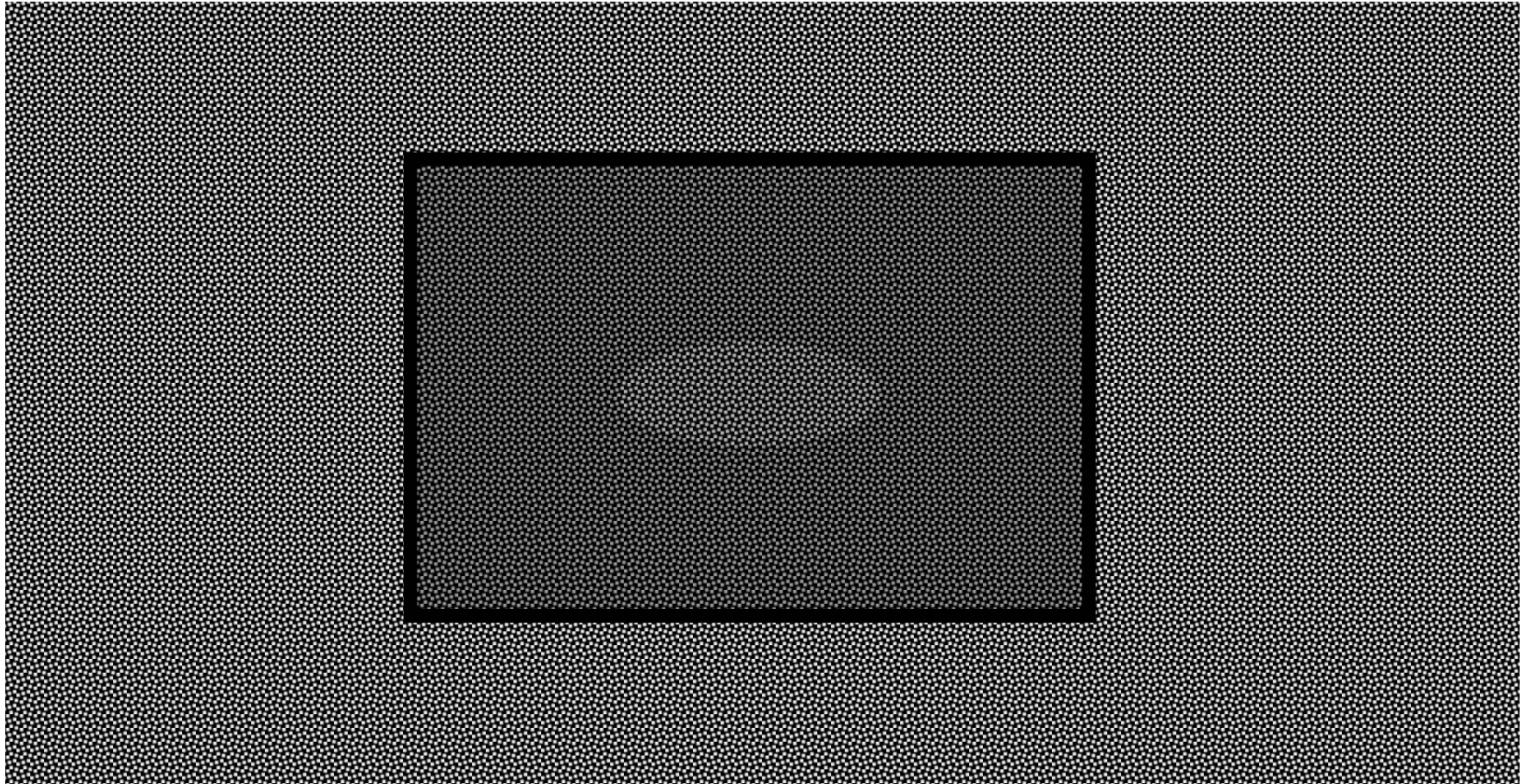


Σύστημα

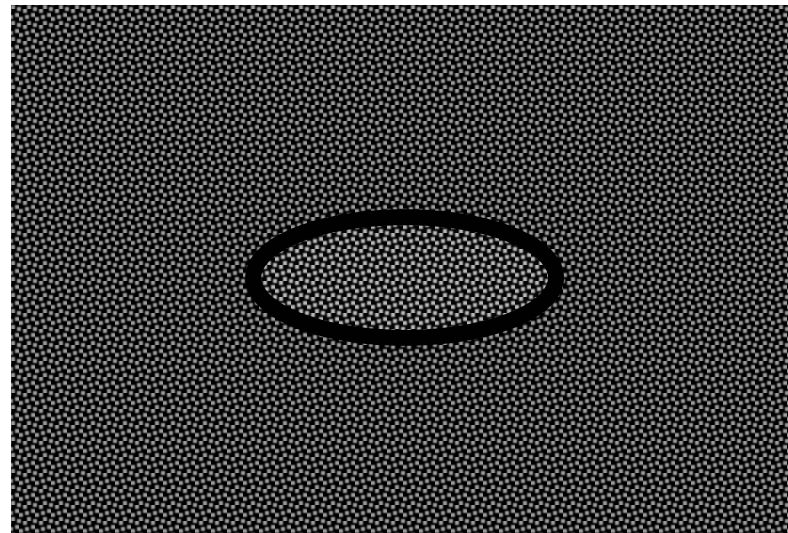


16/4/2008

Σύστημα



Σύστημα



Τοιχώματα: Τα όρια που διαχωρίζουν το σύστημα από το περιβάλλον του.

Διαθερμικά: επιτρέπουν τη ροή θερμότητας.

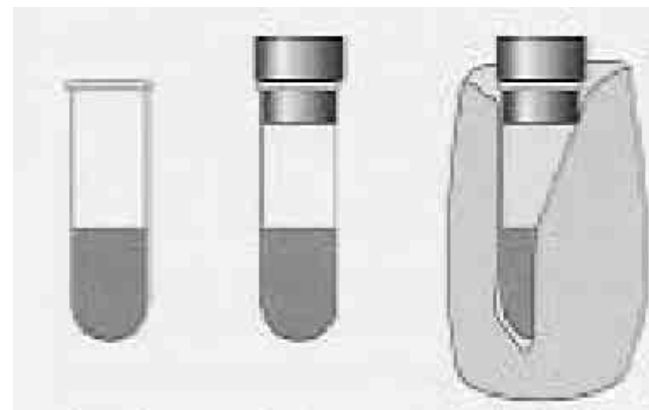
Αδιαβατικά: δεν επιτρέπουν τη ροή θερμότητας.

Σύστημα

Ανοιχτό: ανταλλάσσει ύλη και ενέργεια με το περιβάλλον.

Κλειστό: ανταλλάσσει ενέργεια αλλά δεν ανταλλάσσει ύλη με το περιβάλλον.

Απομονωμένο: δεν ανταλλάσσει ούτε ύλη ούτε ενέργεια με το περιβάλλον.



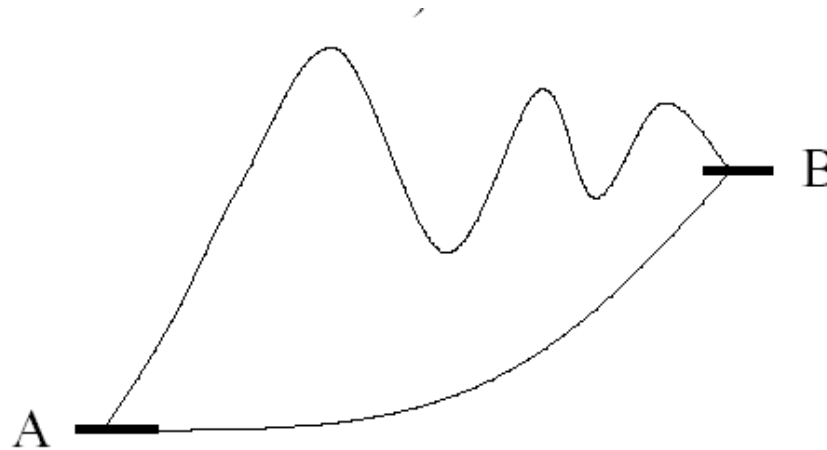
Κατάσταση συστήματος

Κατάσταση ισορροπίας: ειδική κατάσταση του συστήματος, που μακροσκοπικά περιγράφεται πλήρως από μικρό αριθμό μεταβλητών : U, V, n .

Εξίσωση κατάστασης: σύνολο ιδιοτήτων που περιγράφουν ένα σύστημα και σχετίζονται μέσω μιας αλγεβρικής σχέσης π.χ. $pV = nRT$.

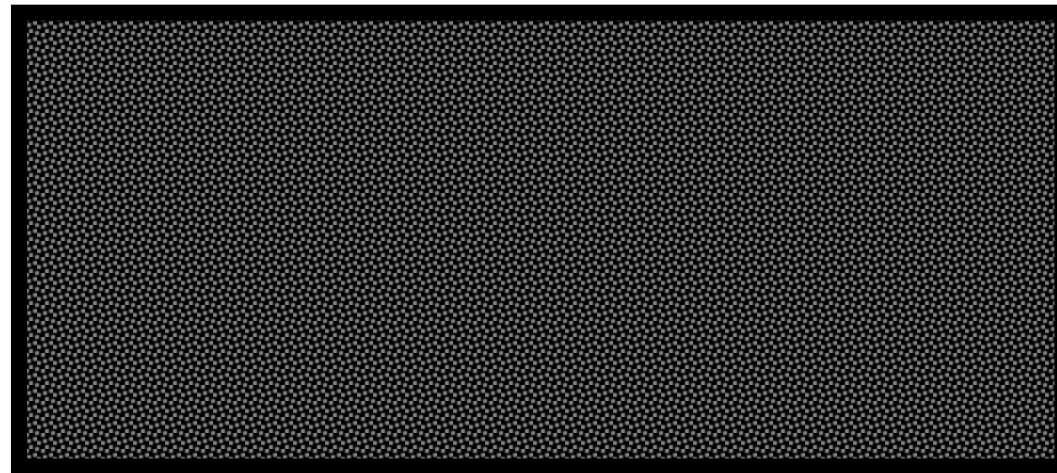
Θερμοδυναμικές παράμετροι

Ιδιότητα κατάστασης: ιδιότητα που περιγράφει ένα σύστημα και η τιμή της εξαρτάται μόνο από την κατάσταση και όχι από τον τρόπο με τον οποίο το σύστημα έφτασε σε αυτή την κατάσταση.

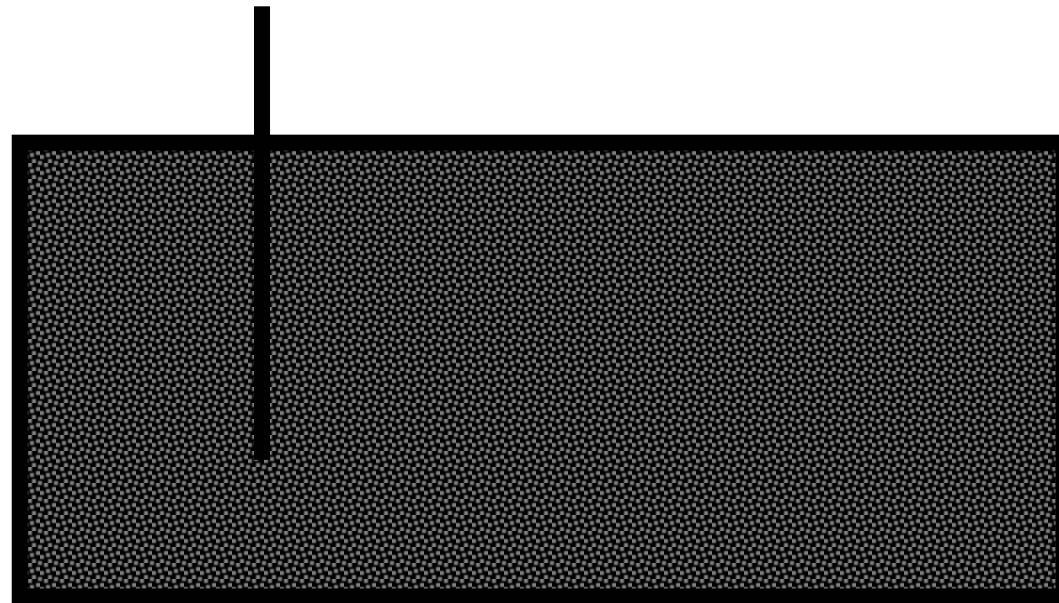


Εντατικές-Εντατικές ιδιότητες

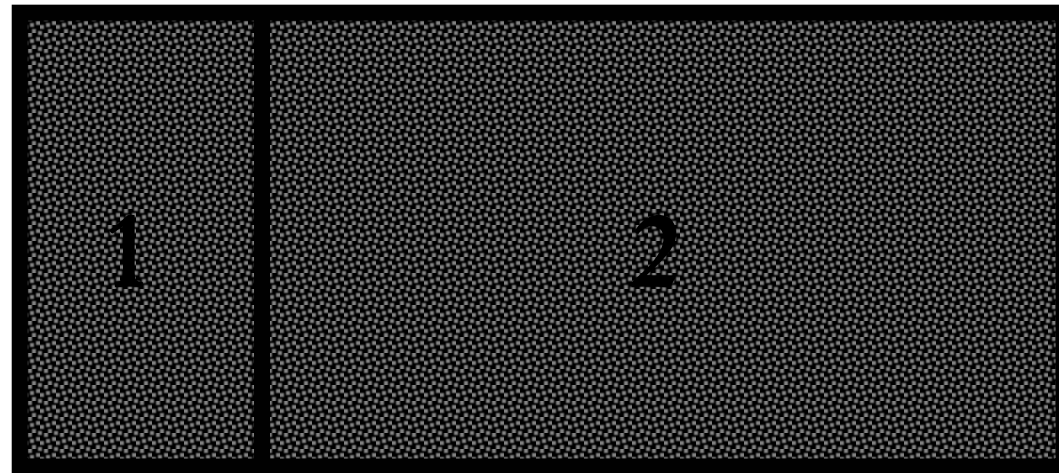
U_S, V_S, n_S



Εντατικές-Εντατικές ιδιότητες



Εντατικές-Εντατικές ιδιότητες

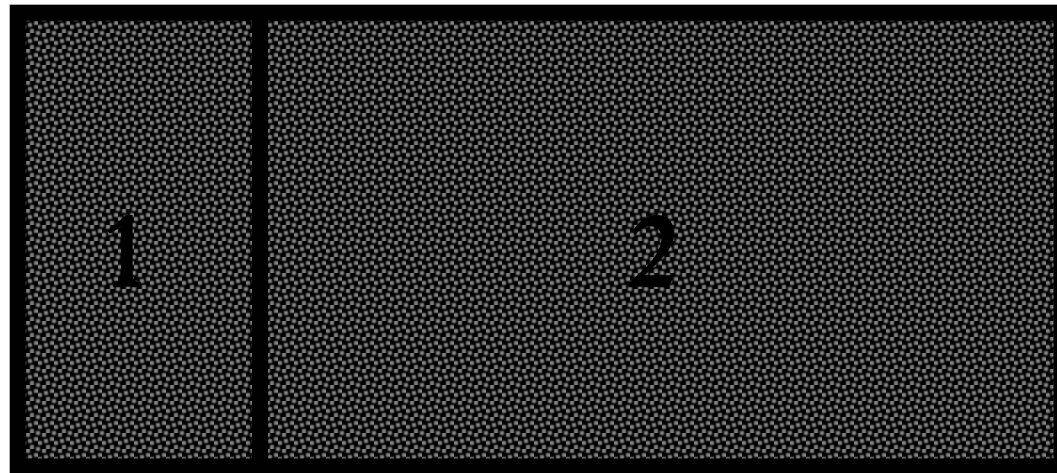


U_1, V_1, n_1

U_2, V_2, n_2

Εντατικές-Εντατικές ιδιότητες

$$\begin{aligned}U_s &= U_1 + U_2 \\V_s &= V_1 + V_2 \\n_s &= n_1 + n_2\end{aligned}$$

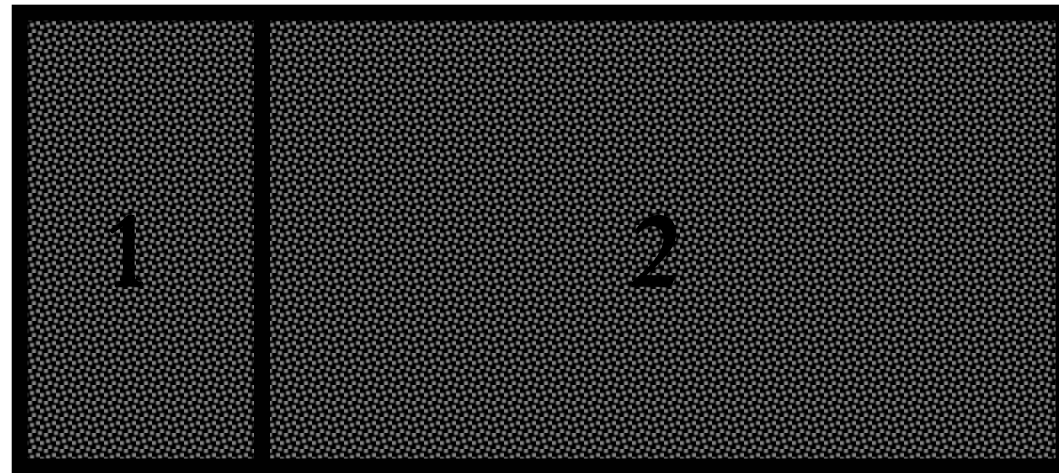


U_1, V_1, n_1

U_2, V_2, n_2

Εντατικές-Εντατικές ιδιότητες

$$\left. \begin{aligned} U_s &= U_1 + U_2 \\ V_s &= V_1 + V_2 \\ n_s &= n_1 + n_2 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Εντατικές} \\ \text{ιδιότητες} \end{array}$$



$$U_1, V_1, n_1$$

$$U_2, V_2, n_2$$

Εκτατικές ιδιότητες: ιδιότητες του συστήματος που εξαρτώνται από το μέγεθος του συστήματος και έχουν αθροιστικό χαρακτήρα όπως οι U , V , n_1 , n_2 .

Εντατικές ιδιότητες: ιδιότητες του συστήματος των οποίων οι τιμές είναι ανεξάρτητες από το μέγεθος και τη μάζα του συστήματος όπως οι p , T .

Τρόποι με τους οποίους ένα σύστημα μεταβάλλεται:

Ισόθερμη \rightarrow σταθερή θερμοκρασία.

Ισοβαρής \rightarrow σταθερή πίεση.

Ισόχωρη \rightarrow σταθερός όγκος.

Αδιαβατική \rightarrow χωρίς ανταλλαγή θερμότητας.

Κυκλική

Απειροστή

Αντιστρεπτή \rightarrow Μεταβολή η οποία πραγματοποιείται διαμέσου διαδοχικών καταστάσεων ισορροπίας

(ή καταστάσεων που ελάχιστα διαφέρουν από καταστάσεις ισορροπίας).

Αντιστρεπτή εκτόνωση/συμπίεση

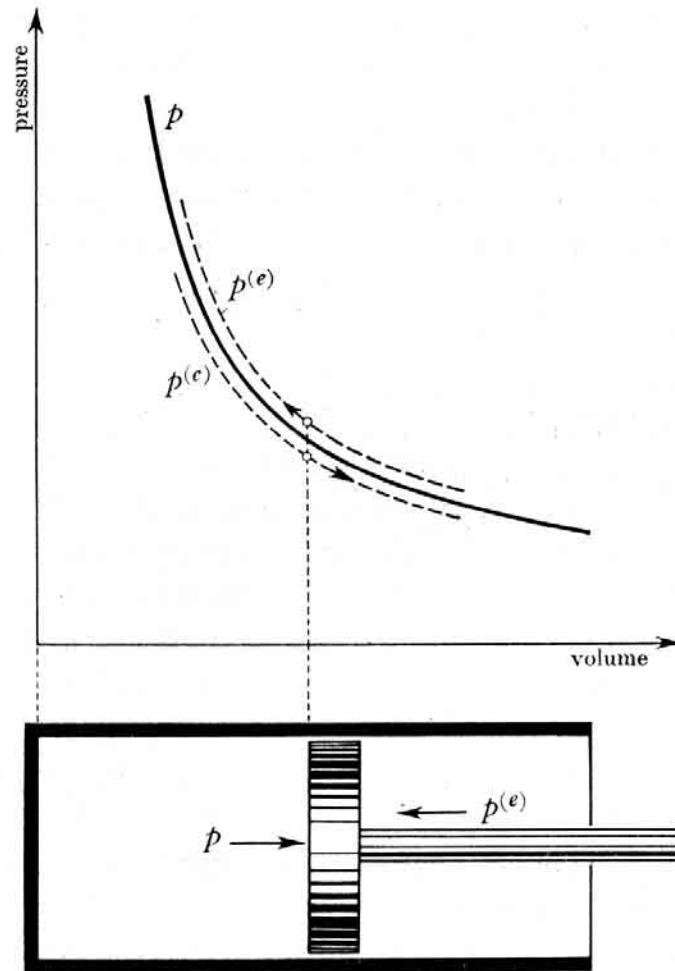


Fig. 1.1.

Εσωτερική ενέργεια συστήματος (U):

Είναι το ενεργειακό περιεχόμενο του συστήματος που αυξομειώνεται με την ανταλλαγή έργου και θερμότητας.

Ενέργεια ανταλλάσσεται μεταξύ συστήματος και περιβάλλοντος με δύο τρόπους:

1. Ροή θερμότητας
2. Έργο

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής...

...για ένα κλειστό σύστημα :

$$\Delta U = q + w$$

(πεπερασμένη μεταβολή)

$$dU = dq + dw$$

(απειροστή μεταβολή)

Η ενέργεια ούτε δημιουργείται ούτε καταστρέφεται, αλλά ανταλλάσσεται και μετατρέπεται.

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

$$\Delta U = U_{\tau} - U_{\alpha} = q + w$$

Μόνο οι διαφορές της εσωτερικής ενέργειας έχουν φυσική σημασία.

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

$$\Delta U = U_{\tau} - U_{\alpha} = q + w$$

Η εσωτερική ενέργεια είναι
συνάρτηση κατάστασης.

Μόνο οι διαφορές της
εσωτερικής ενέργειας
έχουν φυσική σημασία.

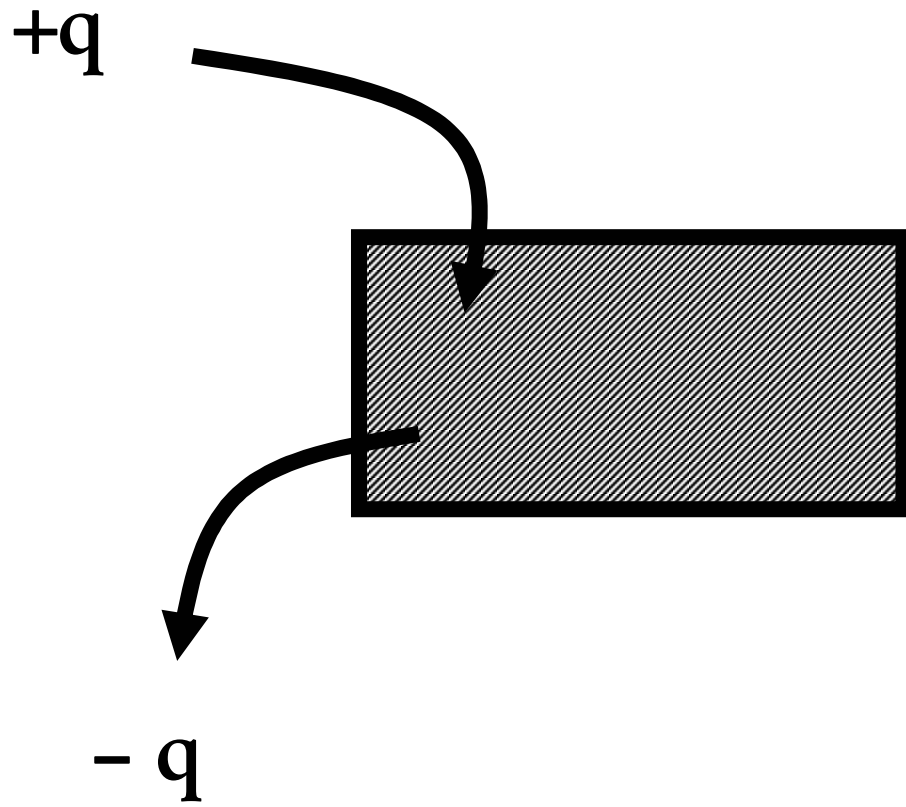
Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

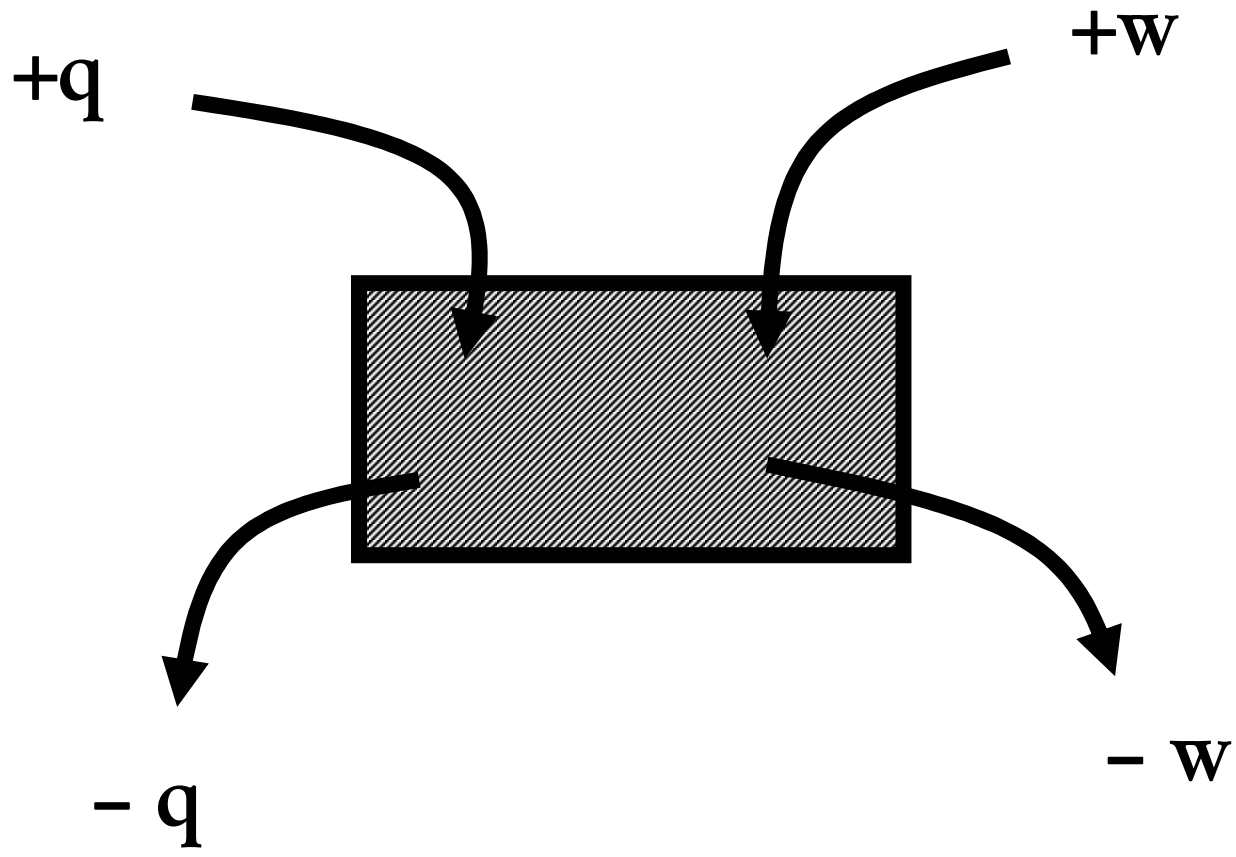
$$\Delta U = U_{\tau} - U_{\alpha} = q + w$$

Η θερμότητα και το έργο
αθροίζονται αλγεβρικά.

Μόνο οι διαφορές της
εσωτερικής ενέργειας
έχουν φυσική σημασία.

Η εσωτερική ενέργεια είναι
ιδιότητα κατάστασης.





Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

$$\Delta U = U_{\tau} - U_{\alpha} = q + w$$

Η θερμότητα και το έργο
είναι ιδιότητες διαδρομής.

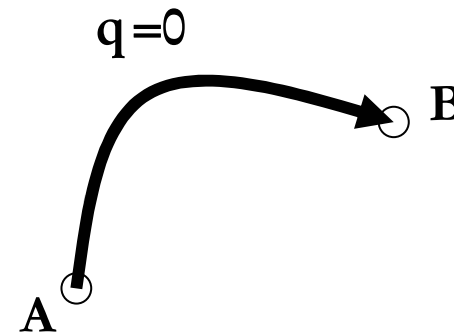
Η θερμότητα και το έργο
αθροίζονται αλγεβρικά.

Μόνο οι διαφορές της
εσωτερικής ενέργειας
έχουν φυσική σημασία.

Η εσωτερική ενέργεια είναι
ιδιότητα κατάστασης.

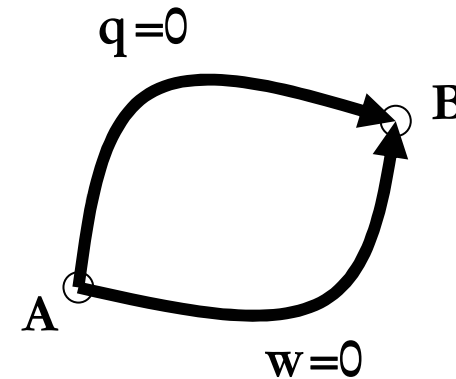
Η θερμότητα και το έργο είναι ιδιότητες διαδρομής

Αδιαβατική μεταβολή ($q=0$)
από το A στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = w$



Η θερμότητα και το έργο είναι ιδιότητες διαδρομής

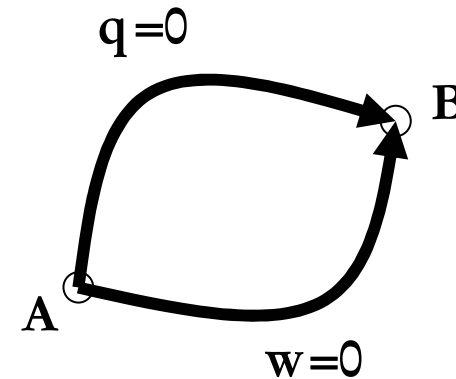
Αδιαβατική μεταβολή ($q=0$)
από το A στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = w$



Μεταβολή με $w=0$ από το A
στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = q$

Η θερμότητα και το έργο είναι ιδιότητες διαδρομής

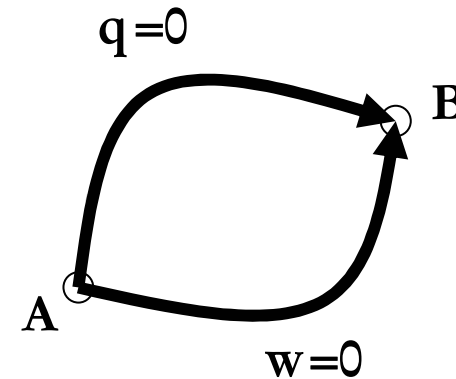
Αδιαβατική μεταβολή ($q=0$)
από το A στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = w$



Μεταβολή με $w=0$ από το A
στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = q$

Η θερμότητα και το έργο είναι ιδιότητες διαδρομής

Αδιαβατική μεταβολή ($q=0$)
από το A στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = w$



Μεταβολή με $w=0$ από το A
στο B,
 $\Delta U = q + w \Leftrightarrow \Delta U = q$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

1. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός απομονωμένου συστήματος κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

1. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός απομονωμένου συστήματος κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

1. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός απομονωμένου συστήματος κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

$$q=0$$

$$w=0$$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

1. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός απομονωμένου συστήματος κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

$$q=0$$

$$w=0$$

$$\Delta U=q+w\leftrightarrow$$

$$\Delta U=0$$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

2. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός συστήματος κατά τη διάρκεια μιας κυκλικής διεργασίας;

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

2. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός συστήματος κατά τη διάρκεια μιας κυκλικής διεργασίας;

Η αρχική κατάσταση ταυτίζεται με την τελική κατάσταση.

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

2. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός συστήματος κατά τη διάρκεια μιας κυκλικής διεργασίας;

Η αρχική κατάσταση ταυτίζεται με την τελική κατάσταση.

$$\Delta U = U_T - U_A = 0$$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

2. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός συστήματος κατά τη διάρκεια μιας κυκλικής διεργασίας;

Η αρχική κατάσταση ταυτίζεται με την τελική κατάσταση.

$$\Delta U = U_T - U_A = 0$$

$$\Delta U = q + w \Leftrightarrow 0 = q + w \Leftrightarrow$$

$$q = -w$$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

3. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός κλειστού συστήματος κατά τη διάρκεια μιας αδιαβατικής διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

3. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός κλειστού συστήματος κατά τη διάρκεια μιας αδιαβατικής διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

$$q=0$$

Ο πρώτος νόμος της θερμοδυναμικής

3. Ποιά είναι η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός κλειστού συστήματος κατά τη διάρκεια μιας αδιαβατικής διεργασίας από την αρχική κατάσταση 1 στην τελική κατάσταση 2;

$$q=0$$

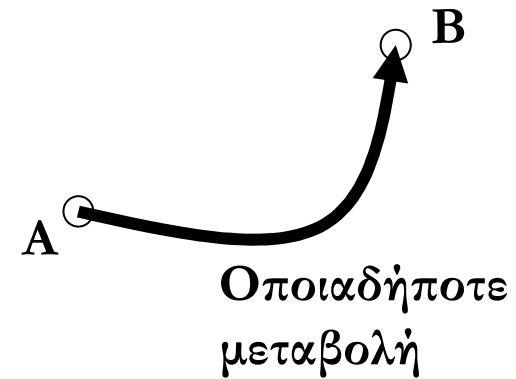
$$\Delta U = q + w \Leftrightarrow$$

$$\Delta U = w$$

Μέτρηση της εσωτερικής ενέργειας

Οποιαδήποτε μεταβολή από το
Α στο Β,

$$\Delta U_{A,B}$$



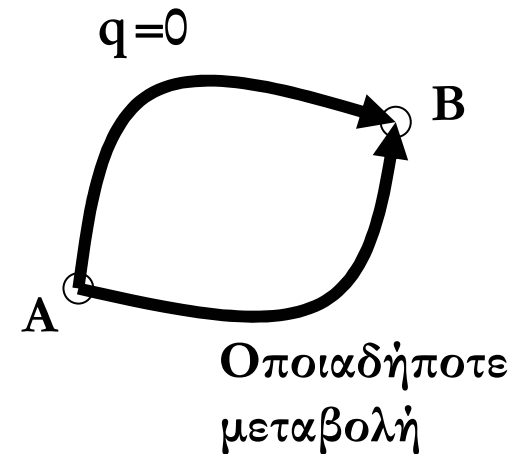
Μέτρηση της εσωτερικής ενέργειας

Οποιαδήποτε μεταβολή από το
Α στο Β,

$$\Delta U_{A,B} = q + w$$

Αδιαβατική μεταβολή ($q=0$)
από το Α στο Β,

$$\Delta U_{A,B} = q + w \Leftrightarrow \Delta U_{A,B} = w$$



Μέτρηση της εσωτερικής ενέργειας

Η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας από την αρχική κατάσταση A στην τελική κατάσταση B μπορεί να μετρηθεί θεωρώντας μια αδιαβατική μεταβολή μεταξύ των ίδιων καταστάσεων A, B . Τότε η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ανάγεται σε μέτρηση του ανταλλασσόμενου έργου.

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Μη αντιστρεπτές μεταβολές

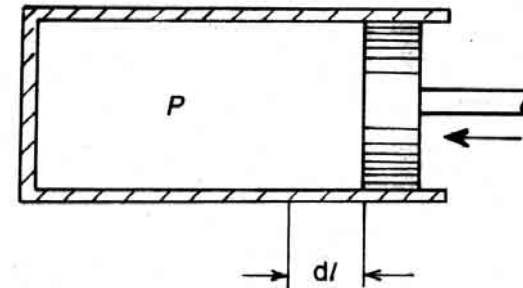
Δύναμη που ασκεί το αέριο στο έμβολο : $F = pA$

Δύναμη που ασκεί το περιβάλλον στο έμβολο : $F^{(e)} = -p^{(e)}A$

$$dw = F^{(e)} dl$$

$$= -p^{(e)} A dl$$

$$= -p^{(e)} dV$$



Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Μη αντιστρεπτές μεταβολές

Δύναμη που ασκεί το αέριο στο έμβολο : $F = pA$

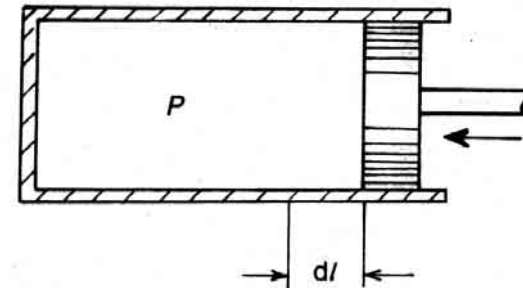
Δύναμη που ασκεί το περιβάλλον στο έμβολο : $F^{(e)} = -p^{(e)}A$

$$dw = F^{(e)} dl$$

$$= -p^{(e)} A dl$$

$$= -p^{(e)} dV$$

$$w = -\int p^{(e)} dV$$



Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

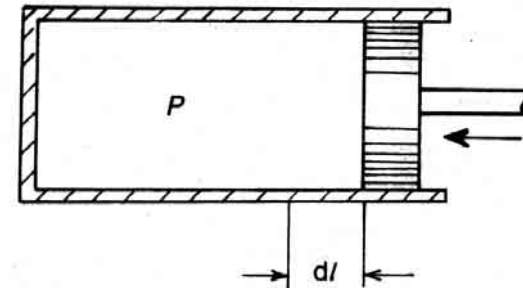
Μη αντιστρεπτές μεταβολές

Δύναμη που ασκεί το αέριο στο έμβολο : $F = pA$

Δύναμη που ασκεί το περιβάλλον στο έμβολο : $F^{(e)} = -p^{(e)}A$

$$\begin{aligned}dw &= F^{(e)} dl \\ &= -p^{(e)} A dl \\ &= -p^{(e)} dV\end{aligned}$$

$$w = -\int p^{(e)} dV$$



Και το έργο εκτόνωσης καθορίζεται από την εξωτερική πίεση.

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Μη αντιστρεπτές μεταβολές-ελεύθερη εκτόνωση

$$p^{(e)} = 0$$

$$w = -\int p^{(e)} dV = 0$$

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Αντιστρεπτές μεταβολές

$$p^{(e)} = p$$

$$dw = -p dV \quad \dot{\eta}$$

$$w = -\int p dV$$

(1)

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Αντιστρεπτές μεταβολές

$$p^{(e)} = p$$

$$dw = -p dV \quad \dot{\eta} \quad \boxed{w = -\int p dV} \quad (1)$$

Ιδανικό αέριο: $pV = nRT \Leftrightarrow p = nRT/V$

$$(1) \Leftrightarrow w = - \int (nRT/V) dV \Leftrightarrow w = - nR \int (T/V) dV \quad (2)$$

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Αντιστρεπτές μεταβολές

$$p^{(e)} = p$$
$$dw = -p dV \quad \text{ή} \quad \boxed{w = -\int p dV} \quad (1)$$

Ιδανικό αέριο: $pV = nRT \Leftrightarrow p = nRT/V$

$$(1) \Leftrightarrow w = - \int (nRT/V) dV \Leftrightarrow w = - nR \int (T/V) dV \quad (2)$$

... για ισόθερμη συμπίεση/εκτόνωση

$$(2) \Leftrightarrow w = -nRT \int (1/V) dV \Leftrightarrow w = -nRT \ln(V_T/V_A)$$

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Αντιστρεπτές μεταβολές

$$p^{(e)} = p$$

$$dw = -p dV \quad \dot{\eta} \quad \boxed{w = -\int p dV} \quad (1)$$

Ισοβαρής μεταβολή: $p = \text{σταθερή}$

$$(1) \quad w = -p \int dV \Leftrightarrow w = -p (V_T - V_A)$$

Έργο συμπίεσης/εκτόνωσης

Αντιστρεπτές μεταβολές

$$p^{(e)} = p$$

$$dw = -p dV \quad \dot{\eta} \quad \boxed{w = -\int p dV} \quad (1)$$

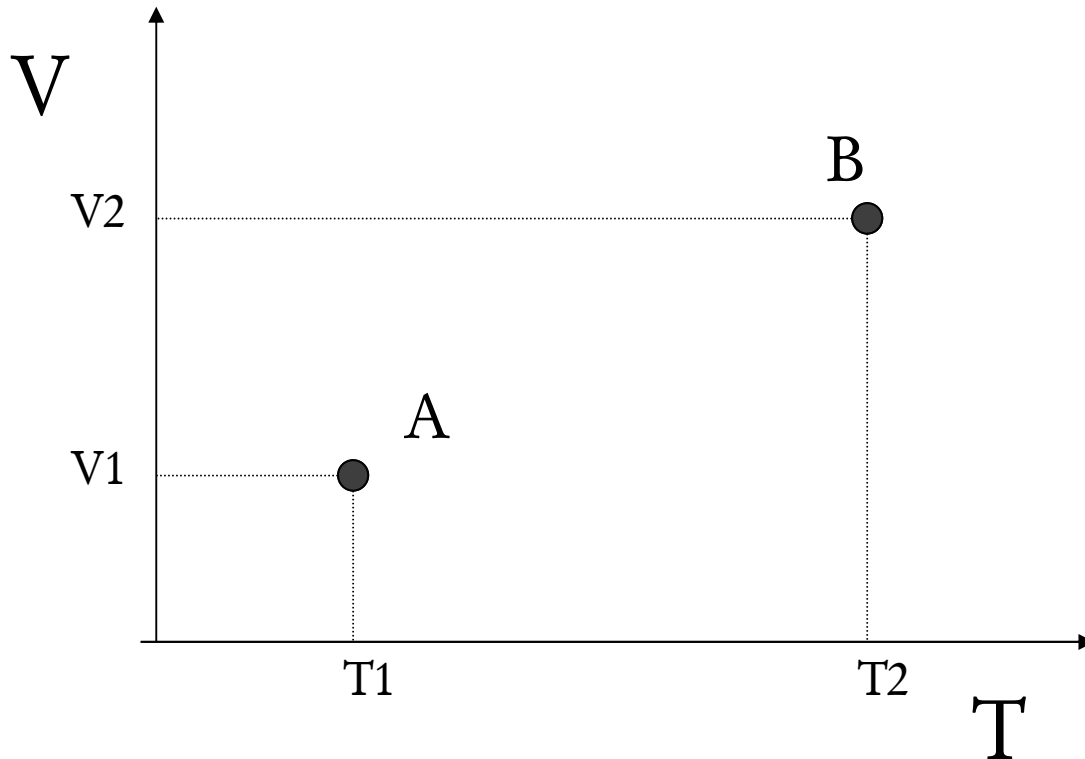
Ισόχωρη μεταβολή: $V = \text{σταθερή}$

$$(1) \quad w = 0$$

Το έργο είναι ιδιότητα διαδρομής, ακόμη ένα παράδειγμα

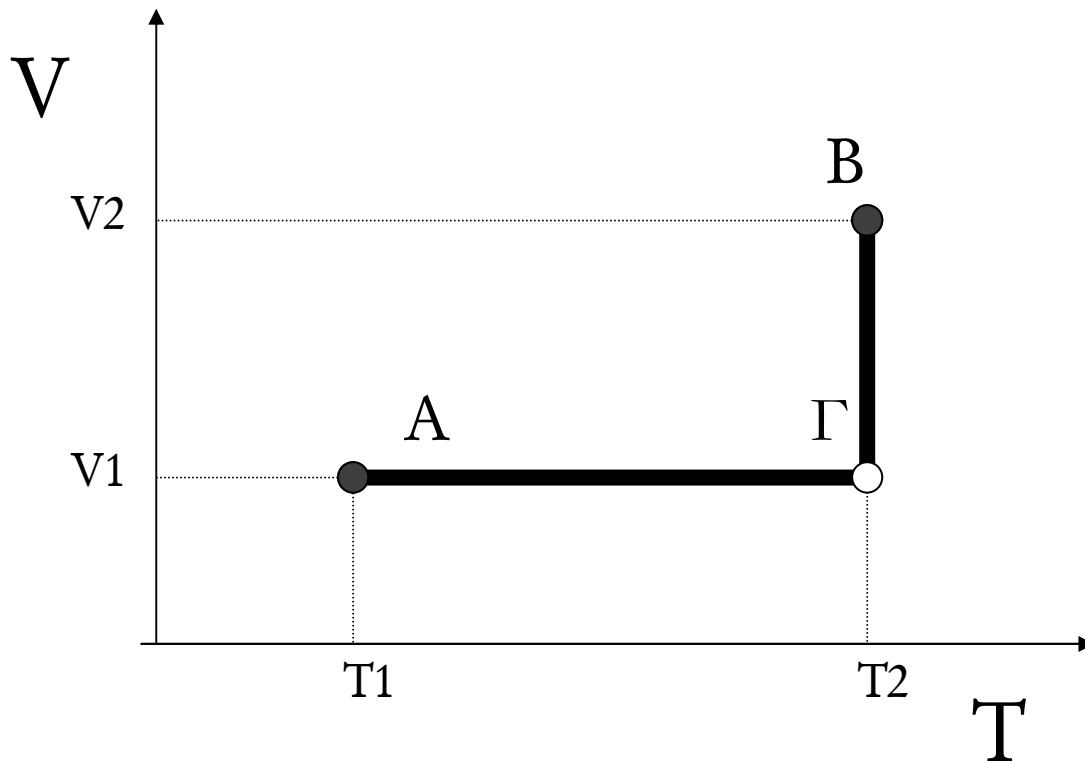
Μεταβολή ιδανικού αερίου από την αρχική κατάσταση A
στην τελική κατάσταση B με δύο διαφορετικούς τρόπους :
 $A - \Gamma - B$ και $A - \Delta - B$

Το έργο είναι ιδιότητα διαδρομής, ακόμη ένα παράδειγμα



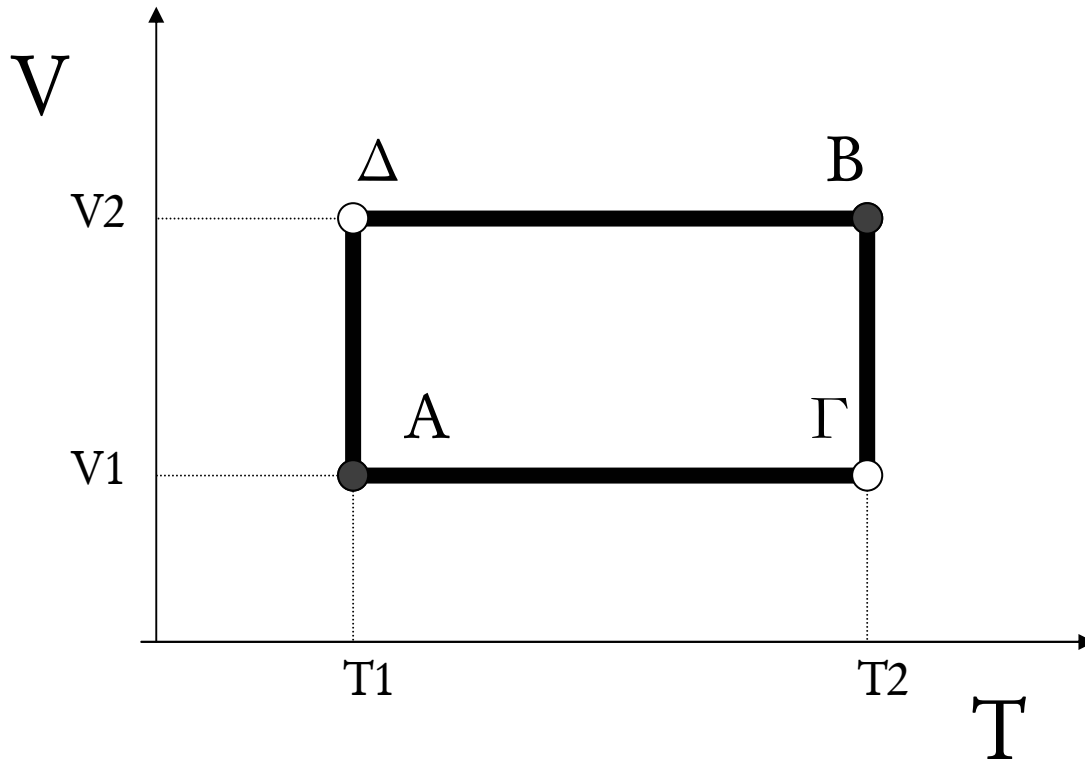
Μεταβολή ιδανικού αερίου από την αρχική κατάσταση A στην τελική κατάσταση B με δύο διαφορετικούς τρόπους :
A - Γ - B και A - Δ - B

Το έργο είναι ιδιότητα διαδρομής, ακόμη ένα παράδειγμα



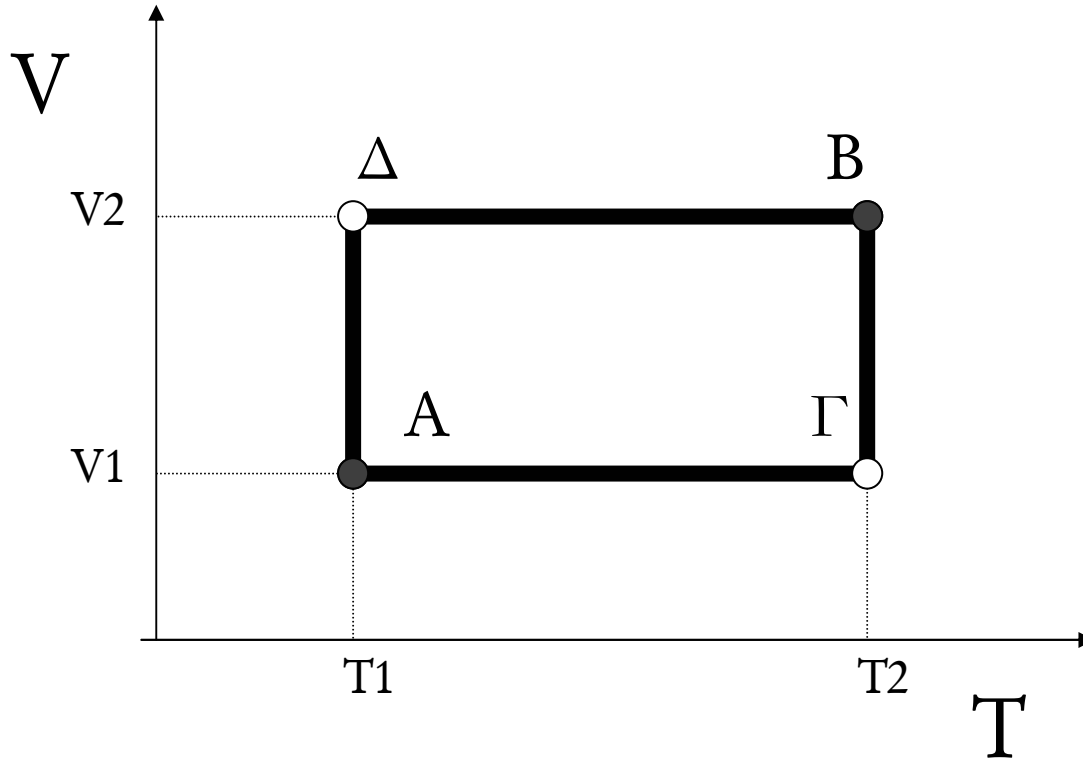
Μεταβολή ιδανικού αερίου από την αρχική κατάσταση A στην τελική κατάσταση B με δύο διαφορετικούς τρόπους :
A - Γ - B και A - Δ - B

Το έργο είναι ιδιότητα διαδρομής, ακόμη ένα παράδειγμα

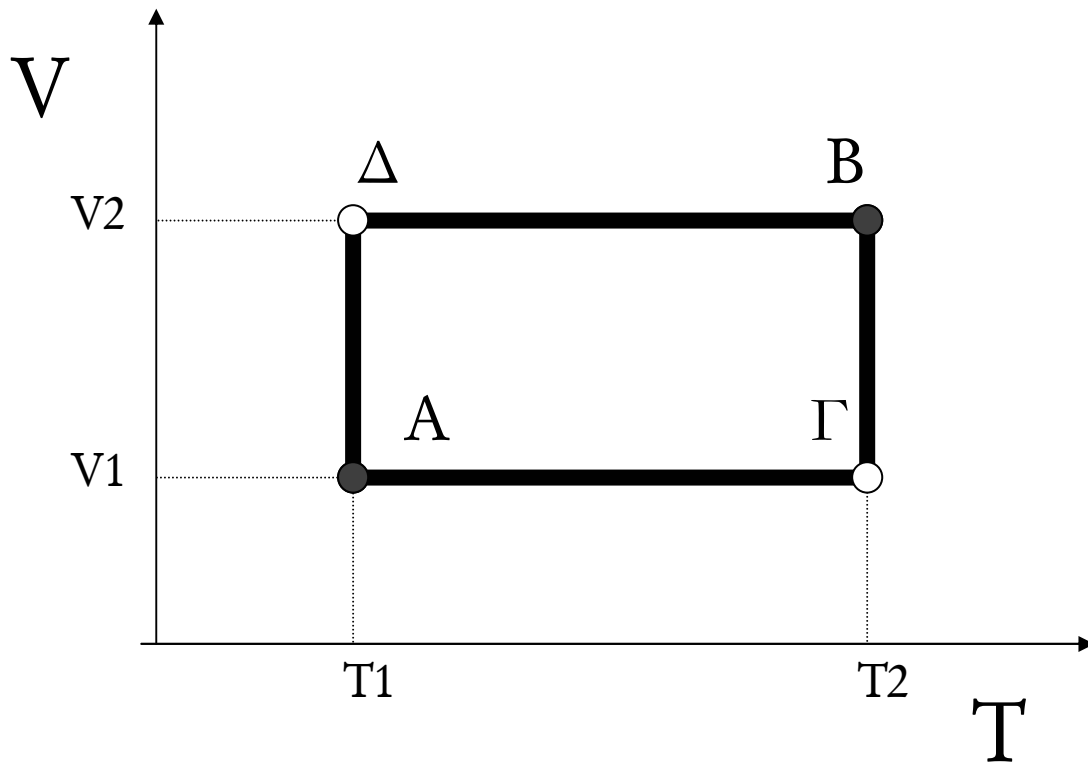


Μεταβολή ιδανικού αερίου από την αρχική κατάσταση A στην τελική κατάσταση B με δύο διαφορετικούς τρόπους :
A - Γ - B και A - Δ - B

Η εσωτερική ενέργεια είναι συνάρτηση κατάστασης



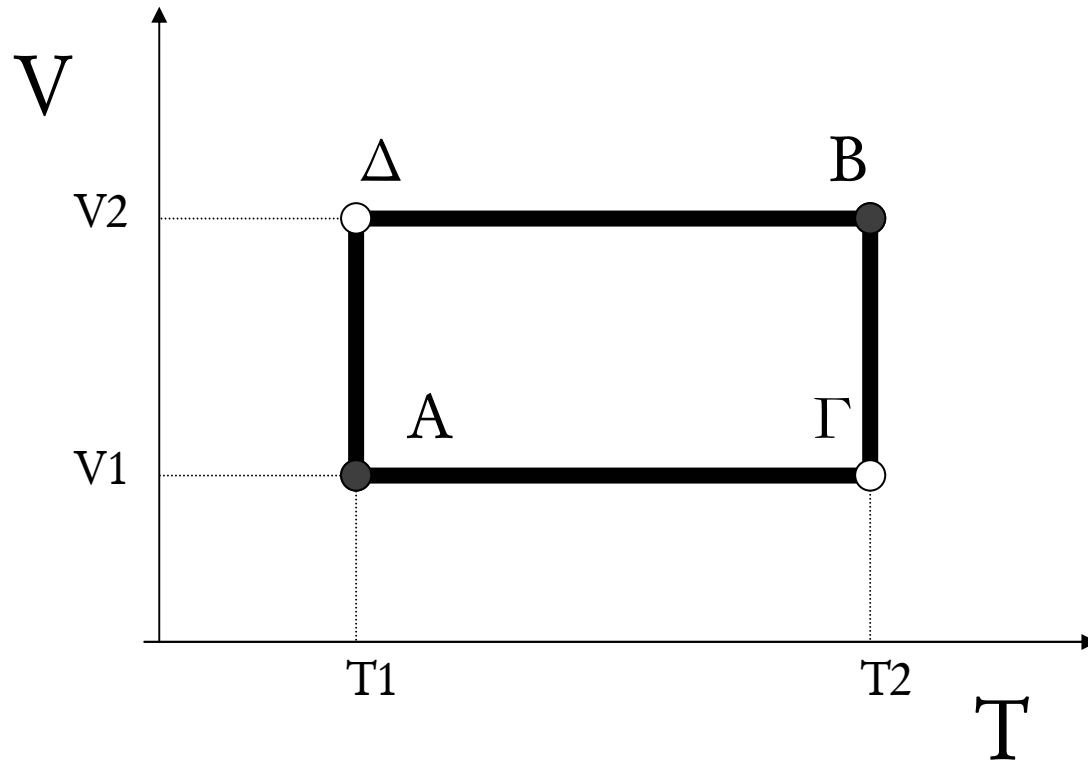
$$\Delta U_{A \rightarrow \Gamma \rightarrow B} = \Delta U_{A \rightarrow \Delta \rightarrow B}$$



$$\Delta U_{A \rightarrow \Gamma \rightarrow B} = \Delta U_{A \rightarrow \Delta \rightarrow B}$$

$$W_{A \rightarrow \Gamma \rightarrow B} \quad ? \quad W_{A \rightarrow \Delta \rightarrow B}$$

Το έργο είναι ιδιότητα διαδρομής



$$\Delta U_{A \rightarrow \Gamma \rightarrow B} = \Delta U_{A \rightarrow \Delta \rightarrow B}$$

$$W_{A \rightarrow \Gamma \rightarrow B} \neq W_{A \rightarrow \Delta \rightarrow B}$$

Μια ιδιότητα κατάστασης εξαρτάται μόνο από την παρούσα κατάσταση του συστήματος. Οι μεταβολές μιας ιδιότητας κατάστασης εξαρτώνται μόνο από την αρχική και τελική κατάσταση του συστήματος και όχι από τον τρόπο που έγινε η μεταβολή.

Η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας είναι ανεξάρτητη του τρόπου που γίνεται η μεταβολή. Εξαρτάται μόνο από την αρχική και τελική κατάσταση. Αντίθετα, το έργο και η θερμότητα εξαρτώνται από τον τρόπο που γίνεται η μεταβολή.

Η εσωτερική ενέργεια είναι μια ιδιότητα κατάστασης ενώ η θερμότητα και το έργο είναι ιδιότητες διαδρομής.

Έργο και θερμότητα δεν αποτελούν παρά μόνο τρόπους μεταφοράς ενέργειας.

Από τη στιγμή που μεταφερθεί ενέργεια στο σύστημα με τον έναν τρόπο δεν μπορεί να διακριθεί από την ενέργεια που μεταφέρθηκε με τον άλλο τρόπο.

Μέσα στο σύστημα δεν υπάρχουν δύο χωριστά είδη ενέργειας w και q . Μόνο το άθροισμά τους ΔU έχει φυσική σημασία.