

전산 평형열역학 강의계획

1. 개론 (1-2주)

2. Ch 3. (3-4주): 엔트로피

3. Ch 5. (5주): 깁스에너지

4. Ch 6. (6-7주): 상태방정식

5. Ch 9. (9-12주): 순수물질의 상평형

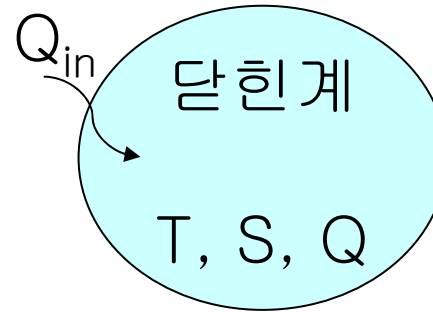
6. Ch 10. (13-14주): 혼합물질의 상평형

CH. 3

엔탈피 그리고 엔트로피

Entropy

- definition
 $dS=dQ/T$

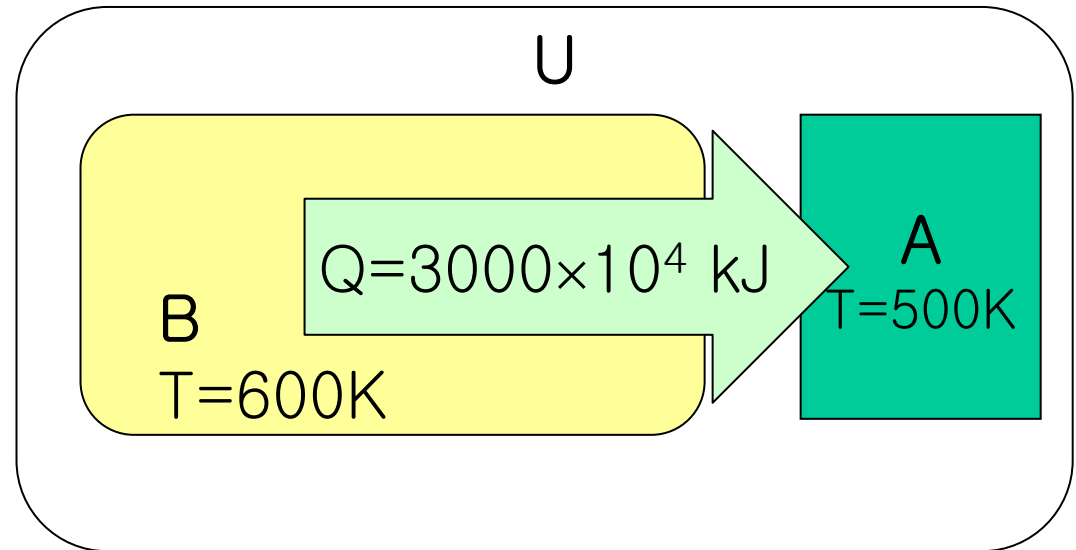


Ex:

$$A: \Delta S_A = + \Delta Q / T_A$$

$$B: \Delta S_B = - \Delta Q / T_B$$

$$U: \Delta S_U = \Delta S_A + \Delta S_B$$

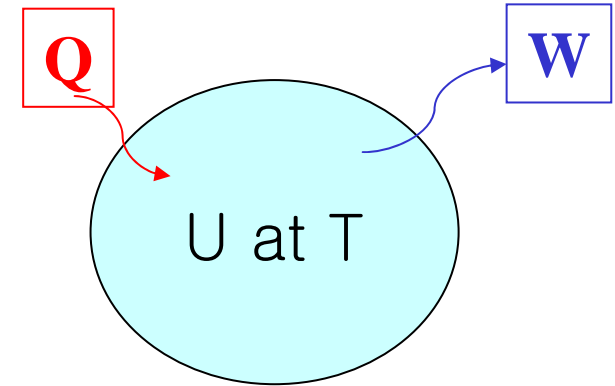


Internal energy, Entropy

- **definition**

$$dU = dQ - dW$$

$$dW_s = FdL = PAdV = PdV$$



$$dU = dQ - PdV$$

$$dS = dQ/T$$

$$dU = TdS - PdV$$

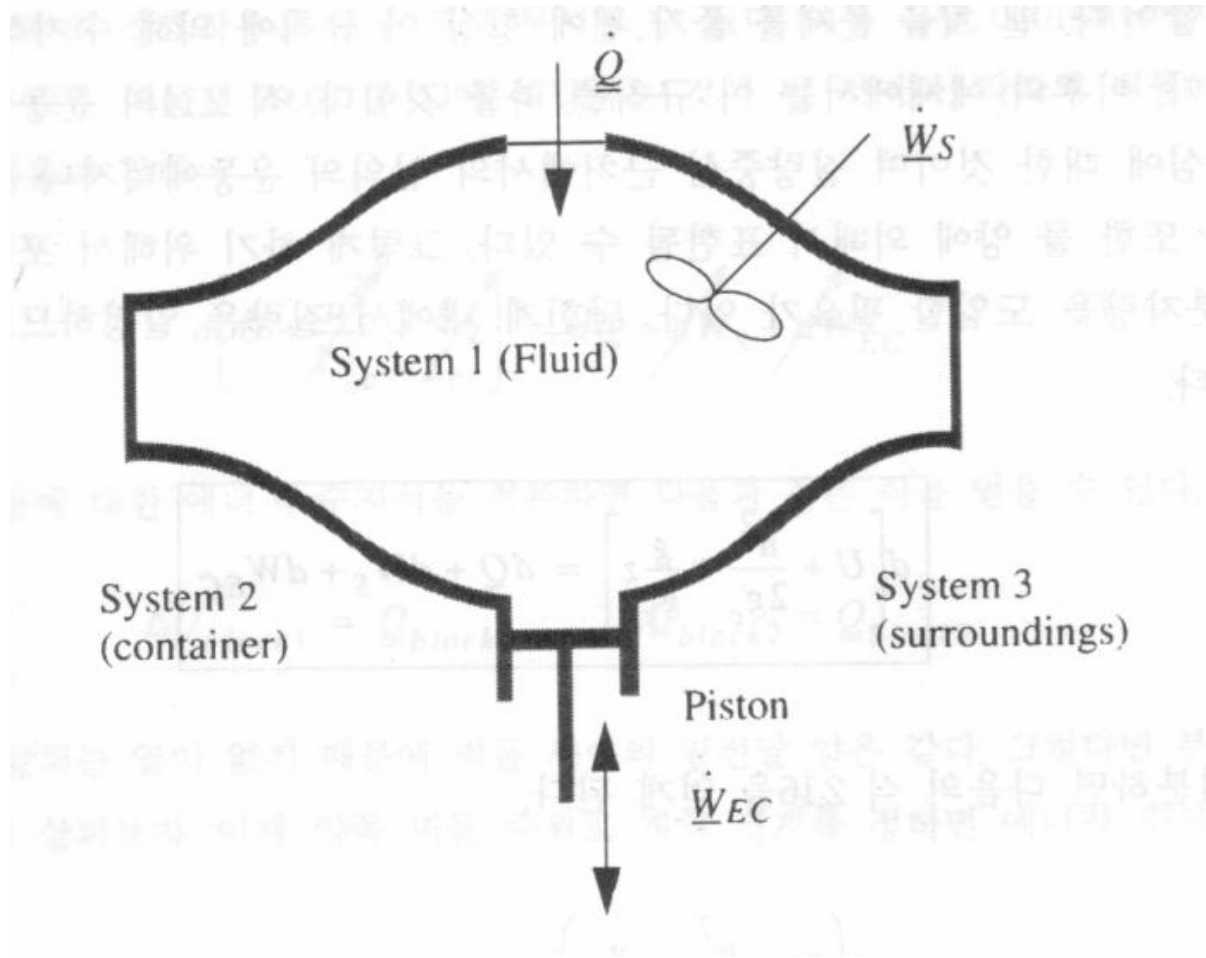
물리적 의미는?

엔트로피 (S) 변화량 계산

$$\Delta S \text{ [J/K]}$$

1. 내부에너지 (U) 란?
2. 엔탈피 (H) 란?
3. 내부에너지와 엔탈피의 계산
4. 엔트로피 계산

닫힌계의 에너지 수지



달힌계의 에너지 수지

$$mU + mgh + \frac{1}{2}mv^2 = Q - W$$

$$mU + \frac{mg}{g_c}h + \frac{1}{2}\frac{m}{g_c}v^2 = Q - W$$


$$W = W_s + W_{EC} + W_{\text{flow}}$$

$$d\left[U + gh + \frac{1}{2}v^2\right] = d[Q - \bar{W}]$$

$$d\left[U + \frac{g}{g_c}h + \frac{1}{2}\frac{v^2}{g_c}\right] = d[Q - W]$$

달힌계의 에너지 수지

$$d\left[U + gh + \frac{1}{2}v^2\right] = d[Q - W]$$

위치에너지와 운동에너지가 없다고 하면

$$U = Q - W$$

$$dU = dQ - dW$$

$$\text{where } dW = dW_s + dW_{EC}$$

닫힌계의 에너지 수지

$$dU = dQ - dW_S - dW_{EC}$$

$$\text{if } dW_S = 0, dW_{EC} = PdV$$

$$dU = dQ - PdV$$

$$H = U + PV$$

흐름계를 고려할 때 자연스럽게 나타나는 항

3. 내부에너지와 엔탈피의 계산

정적 열용량: $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$

$$dU = C_V dT$$

$$\int_{U_1}^{U_2} dU = \int_{T_1}^{T_2} C_V dT$$

$$U_2 - U_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_V dT$$

$$\Delta U = \int_{T_1}^{T_2} C_V dT$$

정압 열용량: $C_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P$

$$dH = C_P dT$$

$$\int_{H_1}^{H_2} dH = \int_{T_1}^{T_2} C_P dT$$

$$H_2 - H_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_P dT$$

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_P dT$$

3. 내부에너지와 엔탈피의 계산

이상기체에서의 엔탈피

정압 열용량: $C_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P$

$$H = U + PV$$
$$PV = RT$$

$$\begin{aligned} C_P &= \left(\frac{\partial(U + PV)}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial(U + RT)}{\partial T} \right)_P \\ &= \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_P + R \left(\frac{\partial T}{\partial T} \right)_P \\ &\approx C_V + R \end{aligned}$$

엔트로피 (S) 변화량 계산

$$\Delta S \text{ [J/K]}$$

1. 내부에너지 (U) 란?
2. 엔탈피 (H) 란?
3. 내부에너지와 엔탈피의 계산
4. 엔트로피 계산

4. 엔트로피 계산

- isotherm, $dT = 0 \rightarrow dU = 0$
 $dQ = PdV \rightarrow dQ/T = PdV/T$
Ideal gas ($P=nRT/V$) ?
 $VdP = -PdV$?

$$dS = dQ/T$$

$$dU = TdS - PdV$$

- Isobaric, $dP = 0$
 $H=U+PV \rightarrow dH = dQ$
 $dS = dH/T = C_p dT/T$

$$H = U + PV$$

$$dH = dU + PdV + VdP$$

- Isometric, $dV=0$
 $dU = dQ$
 $dS = dU/T = C_v dT/T$

$$dH = C_p \cdot dT$$

$$dU = C_v \cdot dT$$

- Adiabatic, $dQ=0$
 $dS = 0$

이상기체방정식

이상기체의 상태방정식

$$PV = nRT$$

$$R=0.082 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{kmol}/\text{K}$$

일정온도에서, $P=nRT/V$

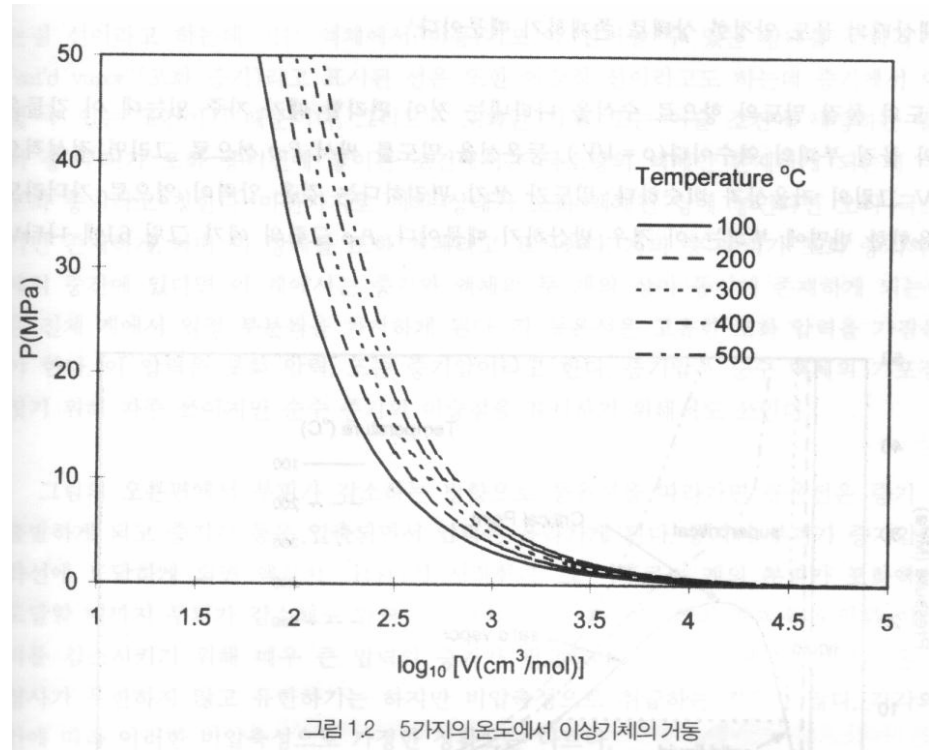


그림 1-2. 다른 온도에서의 이상기체의 거동 (15쪽)

물에 대한 PVT 선도

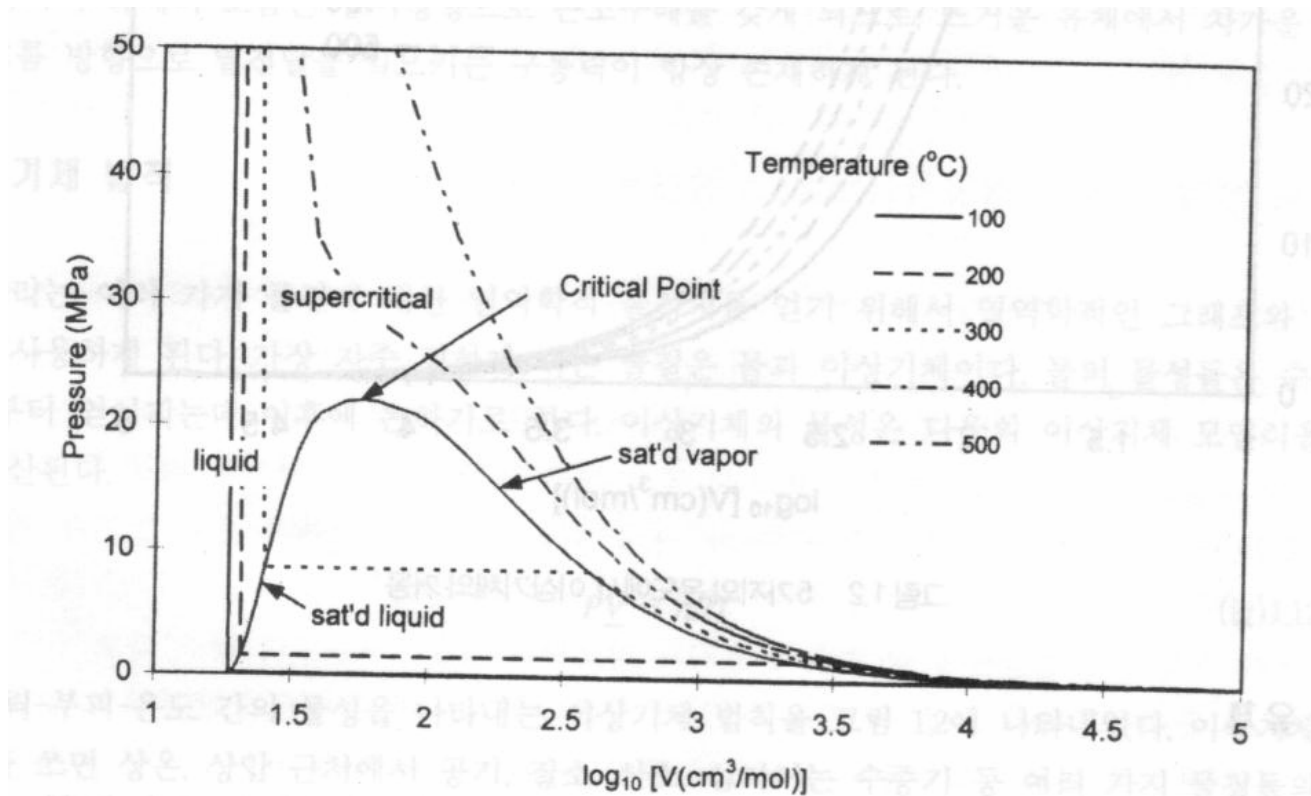


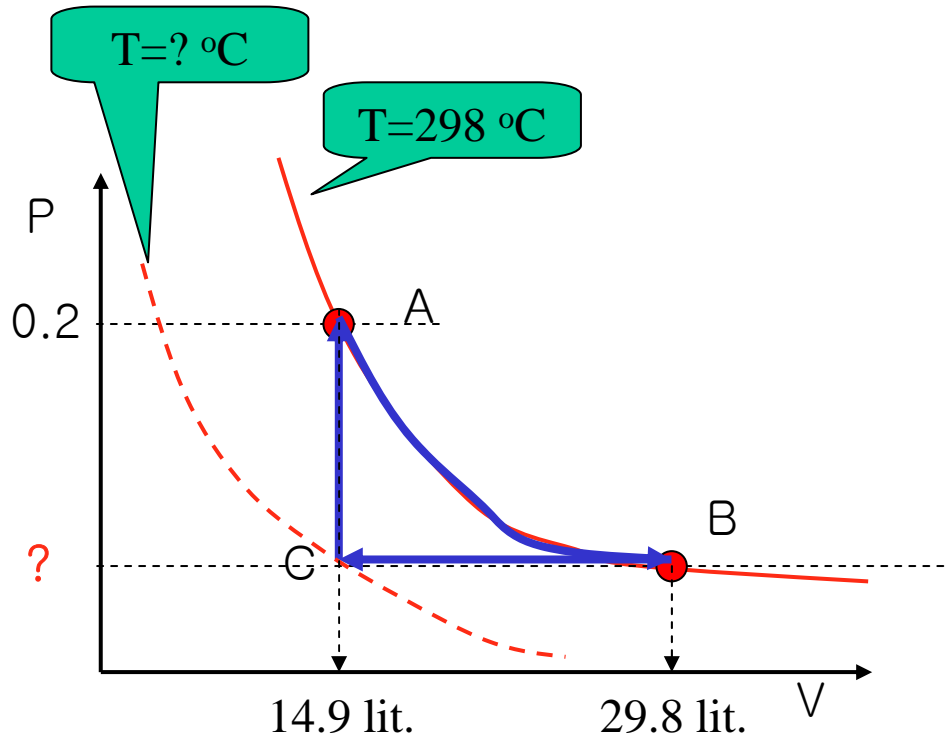
그림 1.3 그림 1.2.에서와 같은 온도에서 물의 P-V-T 거동. 부록 E에 나타난 수증기표로부터 작성한 그래프이다.

그림 1-3. 다른 온도에서의 물의 PVT 거동 (16쪽)

경로성질과 상태성질

- 경로성질: 경로에 의존하는 것, 예로서 열과 일 (W)
- 상태성질: 경로에 무관하게 어떤 상태 (예로서 압력, 부피, 온도등) 가 주어지면 항상 같은 값들을 유지하는 것. 예로서 내부에너지, 엔탈피, 엔트로피등

예제 2.2



$$PV = nRT$$

온도 T 가 일정하므로 ,

$$P_1V_1 = P_2V_2$$

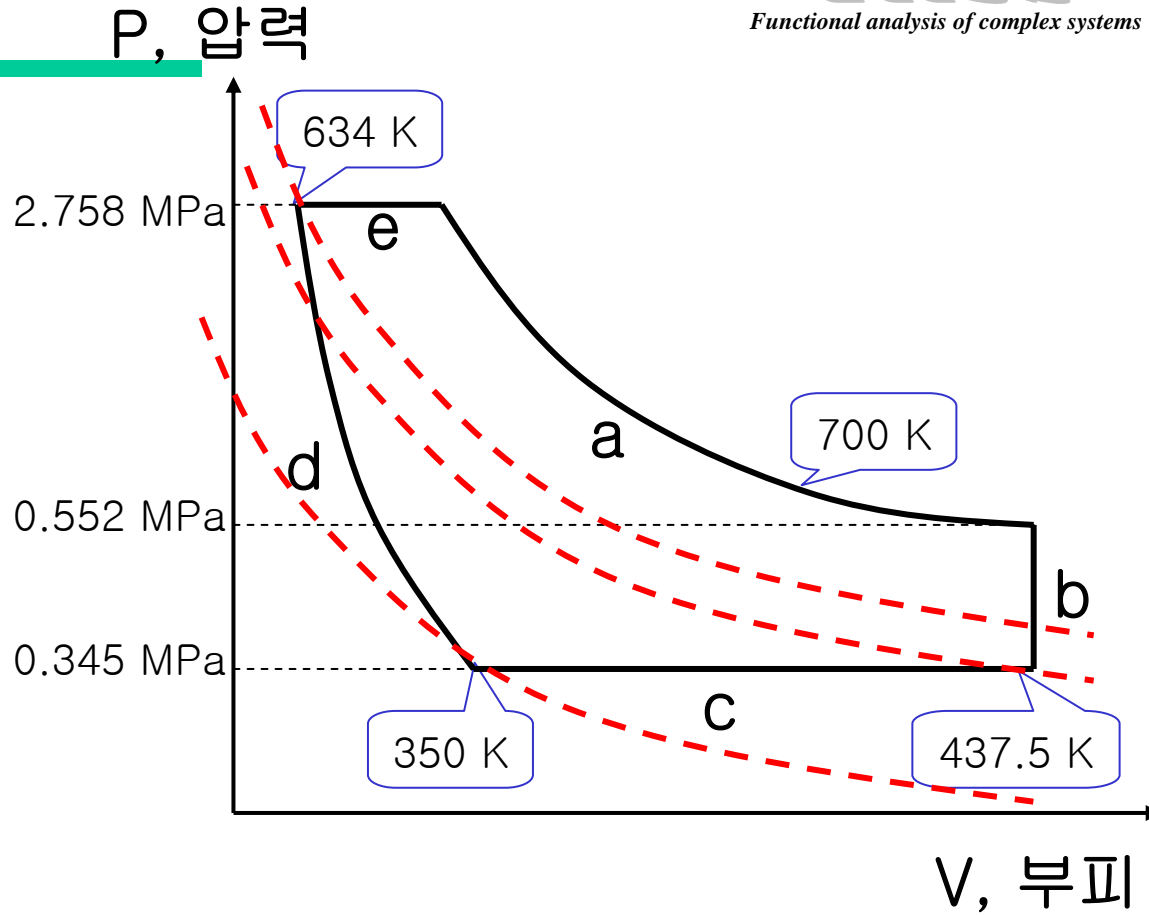
$$P_2 = P_1 \frac{V_1}{V_2} = \frac{P_1}{2}$$

$$PV = nRT$$

$$T = \frac{PV}{nR} = \frac{0.1 \times 14865}{1.2 \times 8.314} = 149 \text{ K}$$

Examples

이상기체로 간주되는 기체가 어떤 닫힌계에서 $T=700\text{K}$, $P=2.76\text{ MPa}$ 에서 등온팽창 (a) 후 정적 감압 (b), 정압 부피감소 (c), 단열압축 (d) 그리고 정압 부피증가 (e) 과정 등 5가지 과정을 거쳐 원래상태로 되었을때, 엔트로피를 구하시오.



$C_v = 21.0\text{ kJ/kmol/K}$
 $C_p = 29.3\text{ kJ/kmol/K}$
 $R = 8.314\text{ kJ/kmol/K}$
 $n = 1\text{ kmol}$

Examples

a) isotherm, $dT=0$

$$\Delta S = n R \ln(P_1/P_2)$$

b) Isometric, $dV=0$

$$\Delta S = n C_v \ln(T_2/T_1)$$

c) Isobaric, $dP=0$

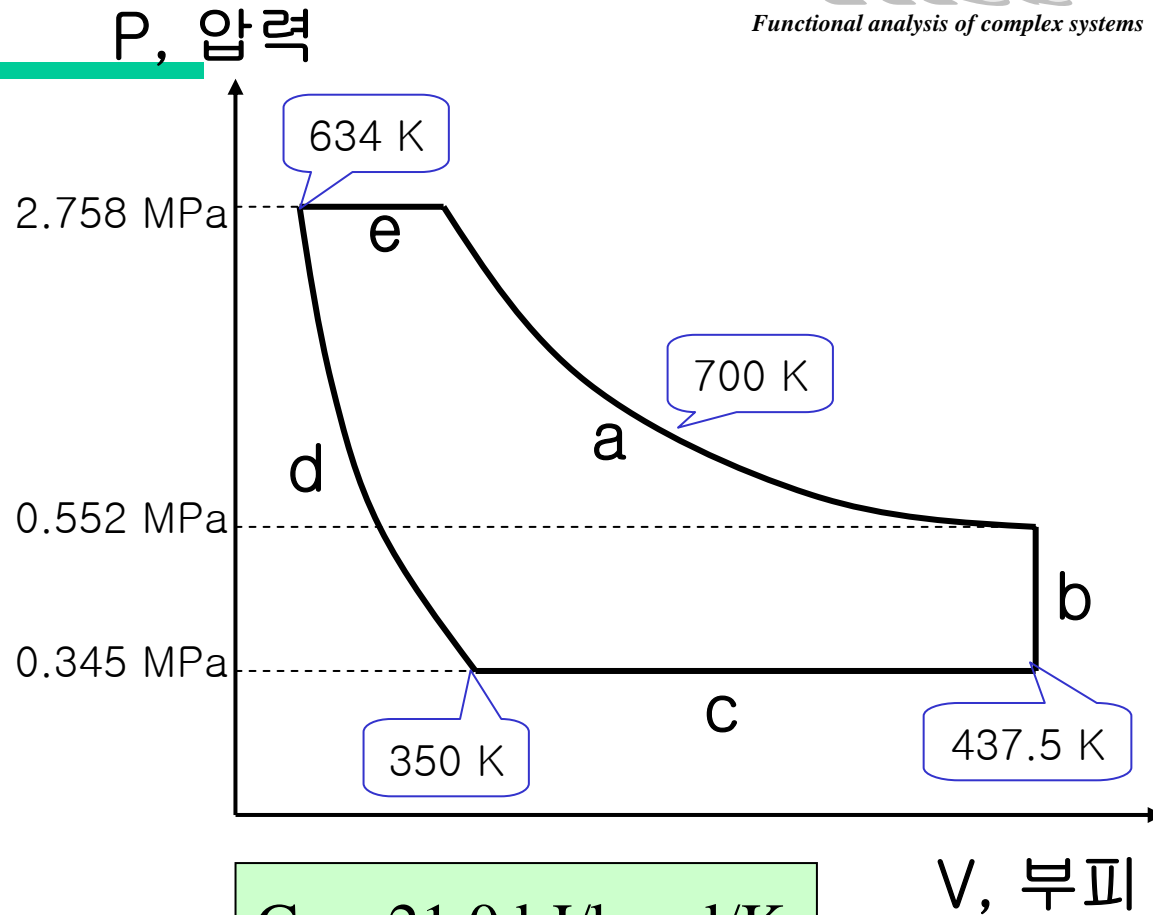
$$\Delta S = n C_p \ln(T_2/T_1)$$

d) adiabatic, $dQ=0$

$$\Delta Q = 0 \rightarrow \Delta S = 0$$

e) Isobaric, $dP=0$

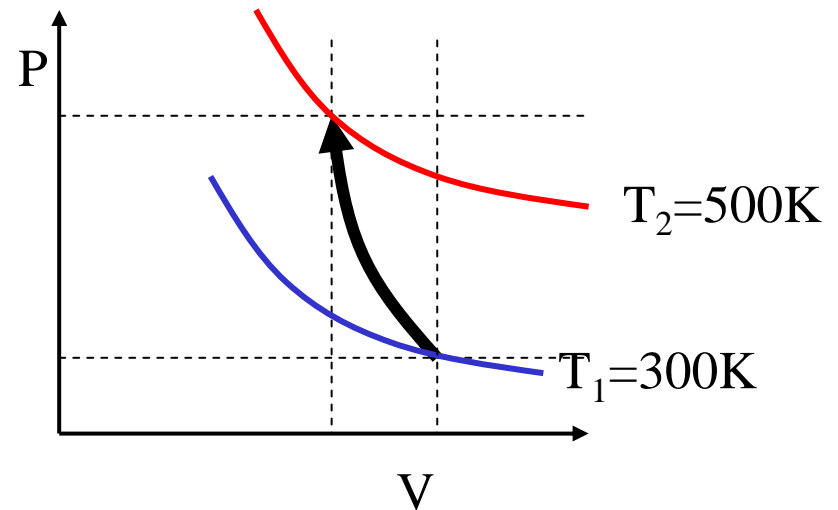
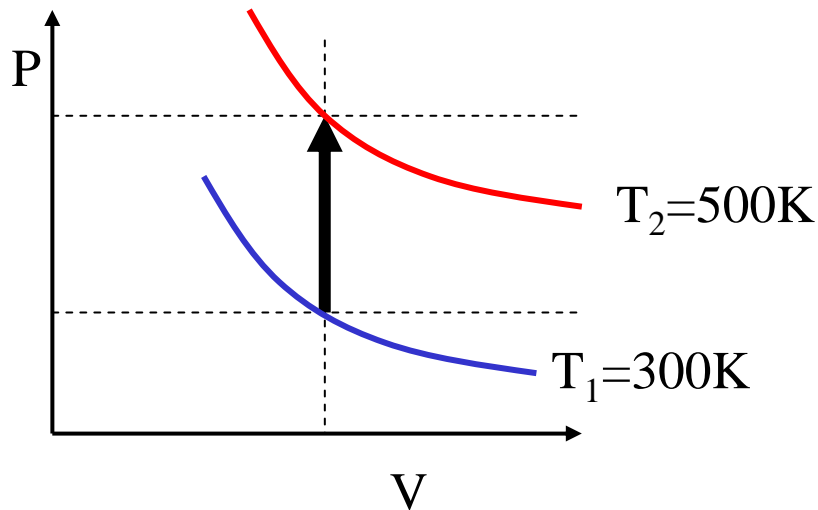
$$\Delta S = n C_p \ln(T_2/T_1)$$



$C_v = 21.0 \text{ kJ/kmol/K}$
 $C_p = 29.3 \text{ kJ/kmol/K}$
 $R = 8.314 \text{ kJ/kmol/K}$
 $n = 1 \text{ kmol}$

Ex. 2

- 어떤 계가 단열상태, 일정부피에서 축일을 받아서 내부에너지가 증가 ($300\text{K} \rightarrow 500\text{K}$) 하였다면 엔트로피변화는 있는가?
- 어떤 계가 축일이 없고, 단열상태에서 압축에 의해 내부에너지가 증가 ($300\text{K} \rightarrow 500\text{K}$) 하였다면 엔트로피변화가 있는가?



과제 1 (3장)

- 3.1
- 3.3: e) 는 제외
- 3.4:
 - a) 저장탱크가 대기에게 준 일은? (75-76쪽 참조)
- 3.6