

Simulation eines idealen Gases und einer Carnot Maschine

Aufgaben

18–20.01.2021

Ziel dieser Lehrveranstaltung ist es, Simulationen eines idealen Gases durchzuführen und damit eine physikalische Verbindung zwischen der mikroskopischen Bewegung und den makroskopischen (beobachtbaren) thermodynamischen Zustandsgrößen herzustellen. Sie verwenden für die Simulationen Ihren eigenen Laptop Computer mit Windows, MacOS oder Linux Betriebssystem.

Die Lehrveranstaltung beinhaltet folgende Teile:

- Vorlesung: Mikroskopische Bewegung—makroskopische Thermodynamik
- Aufgaben 1–2: Theoretische Grundlagen (für Aufgaben 5–6)
- Vorlesung: Einführung in die Simulationssoftware CARNOT
- Aufgaben 3–4: Installation und Test der Simulationssoftware
- Aufgabe 5: Simulation eines idealen Gases
- Aufgabe 6: Simulation einer Carnot Maschine

Inhaltsverzeichnis

1	Theorie eines idealen Gases	2
1.1	Expansion ins Vakuum	2
1.2	Adiabatische Expansion	2
1.3	Isotherme Expansion	2
1.4	Wärmekapazität	2
2	Theorie der Carnot-Maschine	2
2.1	Aufbau des Carnot-Kreisprozesses	3
2.2	Analyse und Optimierung des Carnot-Kreisprozesses	3
3	Download und Installation der CARNOT Simulationssoftware	4
4	Testsimulation mit CARNOT	4
5	Simulation eines idealen Gases	5
5.1	Simulation bei konstanter innerer Energie U und konstantem Volumen V	5
5.2	Expansion ins Vakuum	5
5.3	Adiabatische Expansion	5
5.4	Isotherme Expansion	6
5.5	Wärmekapazität	6
6	Simulation einer Carnot-Maschine	6
6.1	Aufbau des Carnot-Kreisprozesses	7
6.2	Analyse und Optimierung des Carnot-Kreisprozesses	7

Aufgaben

1 Theorie eines idealen Gases

1.1 Expansion ins Vakuum

Es sei ein isolierter Zylinder mit einem Kolben gegeben, in dem sich 1 Mol eines einatomigen idealen Gases bei einer Temperatur von 300 K in einem Volumen von 0.25 m^3 befinden. Welche Änderungen von Temperatur, innerer Energie und Druck erwarten Sie, wenn Sie das Volumen schlagartig verdoppeln?

1.2 Adiabatische Expansion

Anstatt das Gas schlagartig expandieren zu lassen, können Sie es sich langsam ausdehnen lassen, indem Sie den Kolben beweglich machen. Wir nehmen an, dass das Gas keine Wärme mit der Umgebung austauschen kann.

- Wie müssen Sie den externen Druck auf den Kolben wählen, damit das System auf das doppelte Volumen expandiert?
- Wie viel Arbeit leistet das System während der adiabatischen Expansion? Leiten Sie dazu eine Beziehung $W = f(\frac{V_2}{V_1})U$ zwischen der inneren Energie $U = \frac{3}{2}Nk_B T$ eines einatomigen idealen Gases und der Arbeit, die bei adiabatischer Volumenänderung $V_1 \rightarrow V_2$ geleistet wird, her.

1.3 Isotherme Expansion

Betrachten Sie jetzt an Stelle einer adiabatischen Expansion eine isotherme Expansion. Dazu platzieren Sie das System in ein Wärmebad mit der gleichen Temperatur (300 K).

- Wie müssen Sie jetzt den externen Druck auf den Kolben wählen, damit das System auf das doppelte Volumen expandiert?
- Wie viel Arbeit leistet das System während der isothermen Expansion? Leiten Sie dazu eine Beziehung $W = f(\frac{V_2}{V_1})U$ zwischen der inneren Energie $U = \frac{3}{2}Nk_B T$ eines einatomigen idealen Gases und der Arbeit, die bei isothermer Volumenänderung $V_1 \rightarrow V_2$ geleistet wird, her.

1.4 Wärmekapazität

- Was sind die theoretischen Werte für die molare Wärmekapazität eines einatomigen idealen Gases bei konstantem Volumen C_V bzw. konstantem Druck C_p ?
- Betrachten Sie einen Zylinder mit 1 Mol eines idealen Gases bei einer Temperatur T . Wenn Sie das System in ein Wärmebad mit einer höheren Temperatur $T + \Delta T$ stellen, wärmt sich das Gas auf und nimmt dabei eine Wärmemenge ΔQ auf. Wie groß ist die molare Wärmekapazität des Gases?

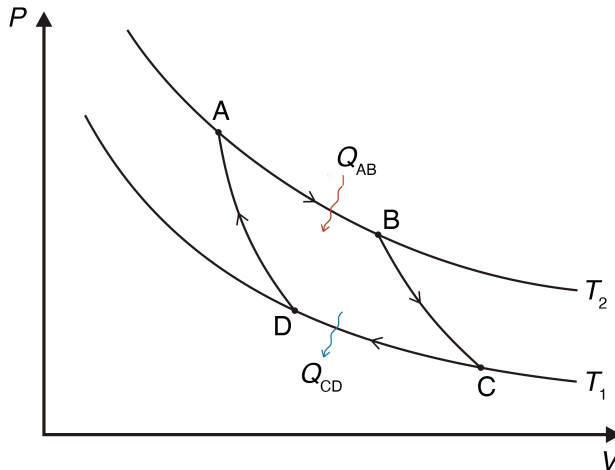
2 Theorie der Carnot-Maschine

Ein Carnot-Zyklus verbindet vier thermodynamische Zustände A, B, C, D und besteht aus vier Schritten, $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A$:

- Schritt 1: Isotherme Expansion $A \rightarrow B$. Das System ist von einem heißen Wärmebad der Temperatur T_2 umgeben, nimmt eine Wärmemenge $Q_{AB} > 0$ auf und leistet Arbeit $W_{AB} > 0$, indem es den Kolben nach außen drückt.
- Schritt 2: Adiabatische Expansion $B \rightarrow C$. Das System tauscht keine Wärme mit der Umgebung aus und leistet Arbeit $W_{BC} > 0$.
- Schritt 3: Isotherme Kompression $C \rightarrow D$: Das System ist von einem kühlen Wärmebad der Temperatur T_1 umgeben, gibt eine Wärmemenge $Q_{CD} < 0$ ab und die Umgebung leistet Arbeit $W_{CD} < 0$, indem der Kolben nach innen gedrückt wird.

- Schritt 4: Adiabatische Kompression $D \rightarrow A$: Das System tauscht keine Wärme mit der Umgebung aus, die Umgebung leistet Arbeit $W_{DA} < 0$.

Es handelt sich um einen Kreisprozess. Es ist daher wichtig, dass die vier Schritte so durchgeführt werden, dass das System am Ende in seinen Anfangszustand A zurückkehrt, weil nur so die Maschine periodisch betrieben werden könnte.



P-V Diagramm eines Carnot-Zyklus

2.1 Aufbau des Carnot-Kreisprozesses

Da es beliebig viele Werte der thermodynamischen Parameter p, V, N, T gibt, für die ein Carnot-Zyklus ausgeführt werden kann, geben wir einige Parameter vor, die es Ihnen ermöglichen werden, den Zyklus in einer angemessenen Zeitspanne zu simulieren.

Im Rahmen der Simulation können Sie die Wärmebadtemperaturen und äußeren Drücke an jedem Punkt des Zyklus' vorgeben. Ein Carnot-Zyklus kann vollständig durch die Wärmebadtemperaturen $T_1 < T_2$ und die äußeren Drücke $p_A > p_B$ spezifiziert werden. Die weiteren äußeren Drücke p_C und p_D sind dann nicht mehr frei wählbar, sondern ergeben sich aus den Gleichungen für Isothermen und Adiabaten. Gehen Sie wie folgt vor, um einen Kreisprozess mit 1 Mol Teilchen zu simulieren, der mit einem Volumen $V_A = 0.25 \text{ m}^3$ und $p_A = 19954.7 \text{ Pa}$ startet und zwei Reservoirs mit den Temperaturen $T_1 = 400 \text{ K}$ und $T_2 = 600 \text{ K}$ verwendet. Berechnen Sie diese Werte des äußeren Drucks p_A, p_B, p_C, p_D unter der Annahme, dass quasistatische isotherme bzw. adiabatische Prozesse gefahren werden (vgl. Aufgaben 1.2 und 1.3 oben).

- Fügen Sie Schritt 1 (isotherme Expansion bei $T_2 = 600 \text{ K}$) hinzu und wählen Sie p_B so, dass sich das Volumen verdoppelt.
- Fügen Sie Schritt 2 (adiabatische Expansion) hinzu und wählen Sie p_C so, dass sich das System auf die Temperatur $T_1 = 400 \text{ K}$ abkühlt.
- Fügen Sie die Schritte 3 (isotherme Kompression bei $T_1 = 400 \text{ K}$) und 4 (adiabatische Kompression) hinzu und wählen Sie dabei p_D so, dass der Carnot-Zyklus geschlossen wird.

2.2 Analyse und Optimierung des Carnot-Kreisprozesses

Der Wirkungsgrad $\eta = W/Q_{AB}$ ist definiert als das Verhältnis zwischen der gesamten Arbeit in einem Kreisprozess und der „wertvollen“ Wärme, die dem heißen Wärmebad entnommen wird.

- Was ist der Wirkungsgrad η_{Carnot} eines Carnot-Kreisprozesses, der zwei Wärmebäder mit den Temperaturen $T_1 < T_2$ verwendet?
- Berechnen Sie für jeden der 4 Schritte eines Carnot-Kreisprozesses die übertragene Wärmemenge und die geleistete Arbeit. Verwenden Sie das Ergebnis, um den Wirkungsgrad $\eta = W/Q_{AB}$ zu bestimmen.

3 Download und Installation der CARNOT Simulationssoftware

Die aktuelle Software für die Simulation eines idealen Gases können Sie von der Kurswebsite herunterladen:

<http://www.bpc.uni-frankfurt.de/guentert/wiki/index.php/Teaching>

Speichern Sie die zip-Datei `carnot-2.1-win.zip` (für Windows), `carnot-2.1-mac.zip` (für Mac) oder `carnot-2.1-linux.zip` (für Linux) auf Ihrem Computer. Entpacken Sie die zip-Datei, indem Sie sie doppelklicken (oder einen Tastaturbefehl wie `unzip carnot-2.1-linux.zip` verwenden). Der Inhalt wird in einem Verzeichnis `carnot-2.1-win` (für Windows 10), `carnot-2.1-mac` (für Mac) oder `carnot-2.1-linux` (für Linux) gespeichert.

In Windows ist es möglich, dass die zip-Datei in ein temporäres Verzeichnis ausgepackt wird, das Sie an einen festen Ort kopieren müssen.

Damit ist die Installation abgeschlossen.

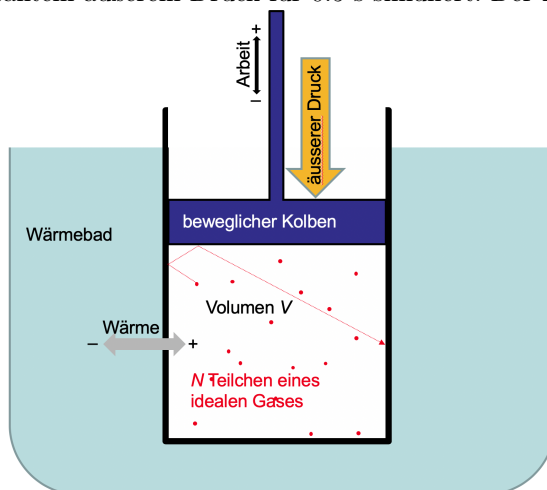
4 Testsimulation mit CARNOT

Führen Sie eine kurze Simulation durch, um die korrekte Installation zu testen und die Simulationssoftware kennenzulernen.

Um das Programm CARNOT zu starten, gehen Sie in das Verzeichnis `carnot-2.1-XXX` ($XXX = \text{win, mac}$ oder `linux`) und doppelklicken die Datei `carnot` (oder möglicherweise `carnot.bat` in Windows; in Linux muss das Programm möglicherweise in einem Terminalfenster gestartet werden).

[Nur für MacOS: Falls auf einem Mac das Programm aus Sicherheitsgründen nicht gestartet werden kann, öffnen Sie ein Terminal, wechseln darin mit dem `cd` Befehl ins `carnot-2.1-mac` Verzeichnis und führen den Befehl `xattr -r -d com.apple.quarantine .` (mit Punkt am Ende!) aus.]

Folgen Sie den Anweisungen. Laden Sie das Testexperiment im **New Experiment** Fenster unter **File** \rightarrow **Load** \rightarrow **Example: Isothermal Equilibrium**. Es setzt einige Parameter in einem sinnvollen Bereich für die Simulation von 1 Mol Teilchen (einatomig mit der Masse eines N_2 Moleküls) und hat nur einen Abschnitt (Stage), der ein Gas in Kontakt mit einem Wärmebad konstanter Temperatur und bei konstantem äußerem Druck für 0.5 s simuliert. Der Aufbau des Systems ist in der Abbildung gezeigt:



Bestätigen Sie die Eingabeparameter rechts unten mit **Accept** und starten Sie die Simulation. Den Fortschritt der Simulation können Sie an Hand der oben rechts angezeigten **Calculated frames** oder im Balken am unteren Rand verfolgen.

Während der Simulation werden in periodischen Zeitabständen ausgewählte thermodynamische Größen gespeichert, die Sie unter **Result analysis** \rightarrow **Report** in einer PDF Datei abspeichern können. Die Plots zeigen das Verhalten der thermodynamischen Größen als Funktion der Zeit, p - V , p - T und V - T Zustandsdiagramme und eine Liste der Simulationsparameter.

Stehen die angezeigten Werte der thermodynamischen Größen in Einklang mit der Zustandsgleichung eines idealen Gases?

5 Simulation eines idealen Gases

Führen Sie die folgenden einfachen Simulationen eines idealen Gases durch, um das Verhalten des Systems unter verschiedenen Bedingungen zu beobachten und ein „Gefühl“ für sinnvolle Werte der Simulationsparameter zu bekommen.

Greifen Sie auf die Ergebnisse von Aufgabe 1 zurück, um die Simulationsparameter zu setzen und beobachten Sie jeweils, ob die Simulation mit den theoretischen Werten in Einklang steht.

5.1 Simulation bei konstanter innerer Energie U und konstantem Volumen V

Das System ist von der Umgebung isoliert (kein Wärmebad) und alle Wände sind fest, d.h. der Kolben kann sich nicht bewegen. Um dies einzugeben, setzen sie `Piston movement` auf ein fixes Volumen von 0.25 m^3 und `Heaters mode` auf `Disable heat exchange`. Laden Sie dafür im `New Experiment` Fenster das Testexperiment `Example: Isothermal Equilibrium`, passen Sie den Namen des Stages entsprechend an, editieren Sie die Parameter und speichern Sie diese unter dem neuen Namen `ex1.txt` ab (rechts unten mit `Save and Accept`). Starten Sie das Experiment. Wenn die Simulation fertig ist, speichern sie den Report in einer PDF Datei `ex1.pdf` ab.

5.2 Expansion ins Vakuum

Lassen Sie das Gas plötzlich ins Vakuum expandieren, indem Sie der Simulation einen zweiten Abschnitt (Stage) hinzufügen, für den Sie die Boxgröße verdoppeln. Welche Änderungen von Temperatur, innerer Energie und Druck erwarten Sie? (vgl. Aufgabe 1.1)

Um die Simulation durchzuführen, laden Sie im `New Experiment` Fenster die Eingabedatei `ex1.txt` und fügen einen zweiten Stage mit dem Namen `Expansion into vacuum` an, in dem Sie `Modify piston properties` auswählen, `Piston movement` auf `Fixed volume` und das `Fixed box volume` auf 0.5 m^3 setzen.

Speichern Sie die geänderten Parameter in einem neuen File `ex2.txt`. Starten Sie das Experiment. Wenn die Simulation fertig ist, speichern sie den Report in einer PDF Datei `ex2.pdf` ab. In den Plots gegen die Zeit werden die Simulationsabschnitte durch vertikale Linien getrennt.

5.3 Adiabatische Expansion

Anstatt das Gas schlagartig expandieren zu lassen, können Sie es sich langsam ausdehnen lassen, in dem Sie den Kolben beweglich machen. Erstellen Sie ausgehend von `ex2.txt` eine Eingabedatei `ex3.txt`, in der der zweite Simulationsabschnitt durch eine `Slow adiabatic expansion` ersetzt ist. Dazu müssen Sie den Heater ausschalten und den externen Druck verändern.

- Wie müssen Sie den externen Druck wählen, damit das System auf das doppelte Volumen expandiert? (vgl. Aufgabe 1.2a)

Die Anpassung erfolgt gleitend, indem im Verlauf des zweiten Simulationsabschnitts der externe Druck linear vom Startwert (dem internen Druck zum Anfangszeitpunkt) auf den mit `pressex` spezifizierten neuen Wert geändert wird. Dies geschieht so, dass der externe Druck nach 75% der Dauer des Simulationsabschnitts den neuen Wert erreicht und dann konstant bleibt. Der innere Druck (die mittlere Kraft pro Fläche, die das Gas durch Stöße auf die Wände ausübt), folgt dem externen Druck (der Kraft pro Fläche, mit der der Kolben nach innen gedrückt wird) mit einer Verzögerung, bis im Gleichgewicht der innere und äußere Druck wieder gleich sind.

- Falls Sie periodische Oszillationen des Volumens sehen, was bedeuten diese?
- Wie viel Arbeit leistet das System während der adiabatischen Expansion und wovon hängt diese ab? (vgl. Aufgabe 1.2b)
- Verändern Sie Systemparameter und beobachten Sie, wie diese die Simulation beeinflussen.

Beachten Sie, dass im `CARNOT` Programm Arbeit, die das Gas *leistet*, positiv gezählt wird. Umgekehrt wird Wärme, die das Gas *aufnimmt*, positiv gezählt. Mit diesen Konventionen gilt: $\Delta U = \Delta Q - \Delta W$.

5.4 Isotherme Expansion

Führen Sie an Stelle einer adiabatischen Expansion eine isotherme Expansion durch. Dazu platzieren Sie das System in ein Wärmebad mit der gleichen Temperatur, die Sie zum Setzen der Anfangsgeschwindigkeiten der Teilchen verwenden (mit dem Parameter `Initial temperature`). Sie erreichen das, indem Sie in `ex4.txt` (ausgehend von `ex3.txt`) für den zweiten Simulationsabschnitt die `Heater properties` entsprechend setzen.

- Wie müssen Sie jetzt den externen Druck wählen, damit das System auf das doppelte Volumen expandiert? (vgl. **Aufgabe 1.3a**)
- Vergleichen Sie die geleistete Arbeit mit dem theoretischen Wert für ein ideales Gas, den Sie mit Hilfe der Beziehung $W = \int p dV$ für einen isothermen Prozess berechnen können. (vgl. **Aufgabe 1.3b**)
- Wie vergleicht sich die geleistete Arbeit mit derjenigen der vorherigen adiabatischen Expansion?

5.5 Wärmekapazität

Bestimmen Sie die molare Wärmekapazität eines idealen Gases bei konstanten Volumen bzw. bei konstantem Druck, indem Sie dafür mit dem Programm `CARNOT Simulationen` von 1 Mol Gas unter entsprechenden Bedingungen bei zwei unterschiedlichen Temperaturen durchführen. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit den theoretischen Werten für ein einatomiges ideales Gas.

- Was sind die theoretischen Werte für die molare Wärmekapazität eines einatomigen idealen Gases bei konstanten Volumen C_V bzw. konstantem Druck C_p ? (vgl. **Aufgabe 1.4a**)
- Führen Sie eine Simulation bei festem Volumen (Piston properties: `Fixed volume`) mit zwei Abschnitten durch, in denen Sie die Wärmebadtemperatur von T im ersten Abschnitt auf $T + \Delta T$ im zweiten Abschnitt erhöhen und dabei die Wärmeaufnahme messen, um die Wärmekapazität bei konstanten Volumen C_V zu bestimmen. (vgl. **Aufgabe 1.4b**) Wählen Sie den Temperaturunterschied ΔT so, dass er deutlich größer als die Temperaturfluktuation während eines Simulationsabschnitts bei konstanter Wärmebadtemperatur ist, damit die Wärmekapazität mit vernünftiger Genauigkeit bestimmt werden kann.
- Führen Sie eine analoge Simulation bei festem äußerem Druck (Piston properties: `Free movement`) durch, um die Wärmekapazität bei konstantem Druck C_p zu bestimmen.

6 Simulation einer Carnot-Maschine

In dieser Aufgabe simulieren Sie eine Wärmekraftmaschine, die (näherungsweise) dem Carnot-Zyklus folgt. Greifen Sie dazu auf die theoretischen Ergebnisse aus Aufgabe 2 zurück, um die Simulationsparameter zu setzen und beobachten Sie, ob die Simulation mit den theoretischen Werten in Einklang steht.

Wie in Aufgabe 2 dargestellt, verbindet ein Carnot-Zyklus vier thermodynamische Zustände A, B, C, D und besteht aus vier Schritten, $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A$:

- Schritt 1: Isotherme Expansion $A \rightarrow B$. Das System ist von einem heißen Wärmebad der Temperatur T_2 umgeben, nimmt eine Wärmemenge $Q_{AB} > 0$ auf und leistet Arbeit $W_{AB} > 0$, indem es den Kolben nach außen drückt.
- Schritt 2: Adiabatische Expansion $B \rightarrow C$. Das System tauscht keine Wärme mit der Umgebung aus und leistet Arbeit $W_{BC} > 0$.
- Schritt 3: Isotherme Kompression $C \rightarrow D$: Das System ist von einem kühlen Wärmebad der Temperatur T_1 umgeben, gibt eine Wärmemenge $Q_{CD} < 0$ ab und die Umgebung leistet Arbeit $W_{CD} < 0$, indem der Kolben nach innen gedrückt wird.
- Schritt 4: Adiabatische Kompression $D \rightarrow A$: Das System tauscht keine Wärme mit der Umgebung aus, die Umgebung leistet Arbeit $W_{DA} < 0$.

Der Carnot-Zyklus ist ein Kreisprozess. Um sinnvolle Ergebnisse aus der Simulation zu erhalten, ist wichtig, dass das System am Ende der Simulation möglichst genau in seinen thermodynamischen Anfangszustand A zurückkehrt, weil nur so die Maschine periodisch betrieben werden könnte. (Für die Simulation genügt es allerdings, den Zyklus einmal vollständig durchlaufen zu lassen.) Weil das simulierte System nach der adiabatischen Kompression in einem Zustand A' enden kann, der leicht(!) vom Ausgangszustand A abweicht, können, fügen Sie sowohl am Anfang als auch am Ende der vier Schritte aus Aufgabe 2 je einen weiteren Simulationsabschnitt hinzu, der ein Gleichgewicht des Systems im Ausgangszustand ermöglicht:

- Schritt 0 und 5: Gleichgewichts-Simulation unter Anfangsbedingungen, d.h. bei vorgegebener Temperatur T_2 und äußerem Druck p_A .

6.1 Aufbau des Carnot-Kreisprozesses

Da es beliebig viele Werte der thermodynamischen Parameter p, V, N, T gibt, für die ein Carnot-Zyklus ausgeführt werden kann, geben wir einige Parameter vor, die es Ihnen ermöglichen, den Zyklus in einer angemessenen Zeitspanne zu simulieren.

Im Rahmen der Simulation können Sie die Wärmebadtemperaturen und äußeren Drücke an jedem Punkt des Zyklus' vorgeben. Ein Carnot-Zyklus kann vollständig durch die Wärmebadtemperaturen $T_1 < T_2$ und die äußeren Drücke $p_A > p_B$ spezifiziert werden. Die weiteren äußeren Drücke p_C und p_D sind dann nicht mehr frei wählbar, sondern ergeben sich aus den Gleichungen für Isothermen und Adiabaten. Gehen Sie wie folgt vor, um einen Kreisprozess mit 1 Mol Teilchen zu simulieren, der mit einem Volumen $V_A = 0.25 \text{ m}^3$ startet und zwei Reservoirs mit den Temperaturen $T_1 = 400 \text{ K}$ und $T_2 = 600 \text{ K}$ verwendet. Berechnen Sie diese Werte des äußeren Drucks p_A, p_B, p_C, p_D unter der Annahme, dass quasistatische isotherme bzw. adiabatische Prozesse gefahren werden. (**vgl. Aufgabe 2.1**)

- Erstellen Sie ausgehend vom Testexperiment **Example: Isothermal Equilibrium** eine Eingabedatei (z.B. `cycle.txt`) mit einem Anfangsgleichgewicht (Schritt 0) bei $T_2 = 600 \text{ K}$ und $p_A = Nk_B T_2 / V = 19954.7 \text{ Pa}$.
- Fügen Sie Schritt 1 (isotherme Expansion bei $T_2 = 600 \text{ K}$) hinzu und wählen Sie p_B so, dass sich das Volumen verdoppelt. (**vgl. Aufgabe 2.1a**) Wählen Sie hier außerdem **Record heat** und **Record work** aus, um die Aufzeichnung der Wärme und Arbeit für die Berechnung des Wirkungsgrads zu starten (siehe Aufgabe 2.2 unten).
- Fügen Sie Schritt 2 (adiabatische Expansion) hinzu und wählen Sie p_C so, dass sich das System auf die Temperatur $T_1 = 400 \text{ K}$ abkühlt. (**vgl. Aufgabe 2.1b**) Wählen Sie hier **Record work** aber nicht **Record heat** aus, um die Aufzeichnung der Wärme zu stoppen (warum?).
- Fügen Sie die Schritte 3 (isotherme Kompression bei $T_1 = 400 \text{ K}$) und 4 (adiabatische Kompression) hinzu und wählen Sie dabei p_D so, dass der Carnot-Zyklus geschlossen wird. Um p_D zu berechnen, beachten Sie, dass die adiabatische Kompression in Schritt 4 auf die Anfangsbedingungen zurückführen muss. (**vgl. Aufgabe 2.1c**) Wählen Sie wiederum nur **Record work** aus.
- Fügen Sie am Ende Schritt 5 (= Schritt 0) an, um sicher zum Anfangszustand zurückzukehren. Wählen Sie hier **Record heat** und **Record work** aus, um die Aufzeichnung der Wärme wieder aufzunehmen:

Wenn jedoch der Zustand A' am Ende von Schritt 4 stark vom Anfangszustand A abweicht, waren sehr wahrscheinlich die Vorgaben für die Simulationsabschnitte 1–4 inkonsistent gewählt und Sie sollten diese korrigieren!

6.2 Analyse und Optimierung des Carnot-Kreisprozesses

Der Wirkungsgrad $\eta = W/Q_{AB}$ ist definiert als das Verhältnis zwischen der gesamten Arbeit und der „wertvollen“ Wärme, die dem heißen Wärmebad, d.h. in Schritt 1 und Schritt 0 am Ende der Simulation (Schritt 0 am Anfang der Simulation dient der Äquilibration und wird nicht zum Carnot-Zyklus gezählt) entnommen wird.

- Wie vergleicht sich der Wirkungsgrad η Ihres simulierten (näherungsweise) Carnot-Zyklus' mit dem theoretischen Wirkungsgrad η_{Carnot} einer idealen Carnot-Maschine (**vgl. Aufgabe 2.2a**)?

- b) Modifizieren Sie die Simulationsparameter, bis der Wirkungsgrad mehr als 90% des theoretischen Wirkungsgrads η_{Carnot} erreicht!
- c) Welcher Simulationsparameter hat (bei vorgegebenen Temperaturen und äußeren Drücken) den größten Einfluss auf den Wirkungsgrad und wie kann das erklärt werden?
- d) Vergleichen Sie die während der Simulation in jedem Schritt übertragene Wärmemengen und die Arbeit mit den entsprechenden Werten für einen entsprechenden idealen Carnot-Zyklus (**vgl. Aufgabe 2.2b**).