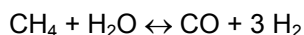


Zusatzübungsblatt Statistische Thermodynamik

Zusatzaufgabe (Gleichgewichtskonstante)

Die Herstellung von Synthesegas ist für eine Vielzahl von großtechnisch bedeutsamen Reaktionen (z.B. für die Ammoniaksynthese) essentiell:

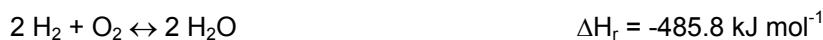


- Berechnen Sie mit statistischen Methoden die Gleichgewichtskonstante K_p der Reaktion bei 400 und 1000K.
- Welche Temperatur schlagen Sie im Hinblick auf die Gleichgewichtskonstante für einen solchen Prozess vor?
- Muss man für den Reaktor bei 400 K eine Heizung oder eine Kühlung vorsehen?
- Sollte man bei hohem oder niedrigem Druck arbeiten?
- Welche möglichen Nebenreaktionen erwarten Sie?

Die statistischen Berechnungen können in der Näherung des starren Rotators bzw. des harmonischen Oszillators durchgeführt werden, wobei die folgenden spektroskopischen Daten verwandt werden sollen:

	σ	θ_{rot} [K]	$\tilde{\nu}_0$ [cm^{-1}]	$g_{e,0}$
H ₂	2	85.36	4400.4	1
CO	1	2.766	2163.5	1
CH ₄	12	$\theta_A = \theta_B = \theta_C = 7.6$	2917 1534 (2-fach entartet.) 3019 (3-fach entartet.) 1306 (3-fach entartet.)	1
H ₂ O	2	$\theta_A = 39.6$ $\theta_B = 21.1$ $\theta_C = 13.7$	3657 1595 3756	1

Die Verbrennungswärmen der folgenden Reaktionen sind bombenkalorimetrisch bei 400 K bestimmt worden:



Hieraus erhalten Sie ΔH_r^0 (400 K) für die obige Reaktion. Für jede beteiligte Komponente gilt nun:

$$H^0(T) - U^0(T=0) = \frac{3}{2} RT + RT + \sum_{j=1}^{3N-5} \frac{R\theta_j}{e^{\theta_j/T} - 1} + RT \quad \text{für ein lineares Molekül}$$

$$H^0(T) - U^0(T=0) = \frac{3}{2} RT + \frac{3}{2} RT + \sum_{j=1}^{3N-6} \frac{R\theta_j}{e^{\theta_j/T} - 1} + RT \quad \text{für ein nicht lineares Molekül}$$

Hieraus kann die Innere Energie der Reaktion $\Delta_r U^0$ bei 0 K ausgerechnet werden.