

Übung 1, PC-2, WS 2019/20

Hb, 11.10.2019

- 1.) Berechnen Sie die Standardentropie S° in J/mol K von 1 mol Sauerstoff bei 298 K und 1 bar von 0 K bis 298 K mit den gegebenen molaren Wärmekapazitäten $C_{p,m}$ sowie Modifikations- und Phasenumwandlungsenthalpien $\Delta_U H$ bei den jeweiligen Temperaturen T (1. Modifikationsumwandlung bei 23,6 K; 2. Modifikationsumwandlung bei 43,7 K; Gefrierpunkt T_G bei 54,4 K und Siedepunkt T_S bei 90,2 K).

Hinweis: der Entropiebeitrag von 0 bis 12 K beträgt 1,342 J/mol K. Ansonsten werden alle Entropiebeiträge (insgesamt 10) summiert, an den Umwandelungspunkten werden die jeweiligen $\Delta_U H$ durch die entsprechenden T_U dividiert zu ΔS_U . (Ergebnis: $S^\circ(O_2) = 204,8$ J/molK)

T (K)	0 bis 12,0	12,0 bis 23,6	23,6 bis 43,7	43,7 bis 54,4	54,4 bis 90,2	90,2 bis 298
$C_{p,m}$ (J/mol K)	siehe Hinweis	10,50	31,65	45,80	53,56	29,30
$\Delta_U H$ (J/mol)	-	-	93,6 (23,6 K)	741,8(43,7 K)	444,8(54,4 K)	6818 (90,2 K)

- 2.) a) Berechnen Sie $\Delta_R S^\circ$ der Reaktion $N_2(g) + 3 H_2(g) \rightleftharpoons 2 NH_3(g)$ bei 298 K. (- 198,76 J/molK)

b) Wie groß ist $\Delta_R S^\circ$, wenn nur 2 $H_2(g)$ reagieren? (- 132,51 J/molK)

Tabellenwerte S_i° in J/molK für H_2 , N_2 , NH_3 alles (g), nicht gerundet: 130,68; 191,61; 192,45.

- 3.) Betrachtet werden soll folgende Reaktion: $2 H_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2 H_2O(l)$ im Standardzustand.

a) Berechnen Sie $\Delta_R S^\circ$ der Reaktion mit den S_i° in J/molK für H_2 ; O_2 ; H_2O : 131; 205; 70. (- 327)

b) Wie groß ist $\Delta_R H^\circ$ mit $\Delta_B H^\circ(H_2O,l) = -286$ kJ/mol und $\Delta_R S^\circ_{Um} = (- 572$ kJ/mol, + 1920 J/molK)

c) Berechnen Sie $\Delta_R S^\circ_{Ges}$ und $\Delta_R G^\circ$. Zeigen Sie, dass das Spontanitätskriterium $\Delta_R S^\circ_{Ges} > 0$ dem systembezogenen $\Delta_R G^\circ < 0$ entspricht gemäß: $\Delta_R G^\circ = - T \Delta_R S^\circ_{Ges}$. Überprüfen Sie $\Delta_R G^\circ$ mit $\Delta_B G^\circ(H_2O,l) = - 237$ kJ/mol und $\Delta_B G^\circ(\text{Elem.}) = 0$ mit $\Delta_R G^\circ = \sum_i \nu_i \cdot \Delta_B G_i^\circ$. ($\Delta_R S^\circ_{Ges} = 1593$ J/molK,

$\Delta_R G^\circ$ ca. - 475 kJ/mol)

d) Formulieren und erklären Sie den 1. Schritt zur Herleitung des chemischen Potentials

$\mu = \mu^\circ + RT \ln \frac{p}{p^\circ}$ und wie wird im 2. Schritt auf eine Reaktionsmischung übergeleitet?

e) Was bedeutet $\sum_i \mu_i \nu_i = 0$, $\sum_i \mu_i^\circ \nu_i$ und $\left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p,T}$? Auf welchen Standardzustand bezieht sich

μ_i° und wie ist in der Gleichung $\mu_i = \mu_i^\circ + RT \ln a_i$ die Aktivität a_i zusammengesetzt?

- 4.) a) Berechnen Sie $\Delta_R G^\circ$ folgender Gasreaktion (*): $NH_3(g) + 5/4 O_2(g) \rightleftharpoons NO(g) + 3/2 H_2O(g)$

mit den Tabellenwerten $\Delta_B G_i^\circ$ in kJ/mol, i gemäß Reaktion: -16,45; 0; 86,55; -228,57. (- 239,86)

b) Wie groß ist die thermodynamische Gleichgewichtskonstante K_a bei 298 K? Auf welchen Quotienten inklusive Exponenten ν_i bezieht sich K_a ? ($1,1 \times 10^{42}$)

c) Wie groß ist jeweils K_p (*) mit p_i und p_o in kPa sowie K_x (*) bei $p = 250$ kPa? ($K_p = 3,487 \times 10^{42}$ kPa; $K_x = 8,77 \times 10^{41}$)