

T. Wallek, H. Huemer

Thermodynamik-Kolloquium 2009, Berlin

Z
I
E
L

Untersuchung der Möglichkeit des Ansatzes von Entropie als Information zwecks modularer Modellierung von Zustandsgleichungen aus Fundamentalgleichungen

$$S = \underbrace{\frac{1}{T}}_{\lambda_1} \cdot U + \underbrace{\frac{P}{T}}_{\lambda_2} \cdot V + \underbrace{-\frac{\mu}{T}}_{\lambda_3} \cdot N \quad U = E^A + E^B + \dots \quad S = S^A + S^B + \dots$$

E
N
E
R
G
I
E
F
O
R
M

- Energie: \bar{E} Mittelwert der Verteilung über diskrete Energiezustände
- Entropie: \bar{H} die zur Beschreibung dieser Verteilung erforderliche, mittlere Information
- Abhängigkeit: $\bar{H} = \bar{H}(\bar{E})$ Lösung mittels Lagrange-Verfahren / Mathematik abhängiger Funktionen

$\bar{H} = -\sum_i x_i \ln(x_i)$ $\bar{E} = \sum_i x_i (i \cdot \Delta \varepsilon)$ $1 = \sum_i x_i$ $\Phi = \bar{H} - \lambda_1 \cdot \bar{E} - \lambda_3$	$\bar{H} = -\sum_i x_i \ln(x_i)$ $\bar{A} = \sum_i i \cdot x_i$ $1 = \sum_i x_i$ $\Phi = \bar{H} - \lambda_1 \cdot \bar{A} - \lambda_3$	$q = \exp(-\lambda_1)$ $\lambda_3 = \ln\left(\frac{1}{1-q}\right)$ $\bar{A} = \frac{q}{1-q}$ $\bar{H} = \lambda_1 \cdot \bar{A} + \lambda_3$	$q = \exp(-\lambda_1 \cdot \Delta \varepsilon)$ $\bar{E} = \Delta \varepsilon \cdot \bar{A}$ $\bar{H} = \lambda_1 \cdot \bar{E} + \lambda_3$
--	---	--	--

$i = 0 \dots \infty \quad \bar{A} \equiv \frac{\bar{E}}{\Delta \varepsilon}$ mittlerer energet. Assoziationsgrad

Z
W
E
I
G
L
E
N
E
I
C
H
G
I
E
F
O
R
M
E
N

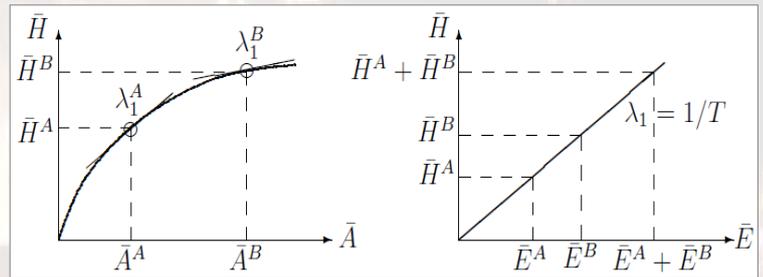
- Zwei Energieformen A, B im Gleichgewicht

-additiv sind die extensiven Größen:

$$\bar{H}^A, \bar{H}^B \text{ und } \bar{E}^A, \bar{E}^B$$

-nicht additiv: \bar{A}^A, \bar{A}^B

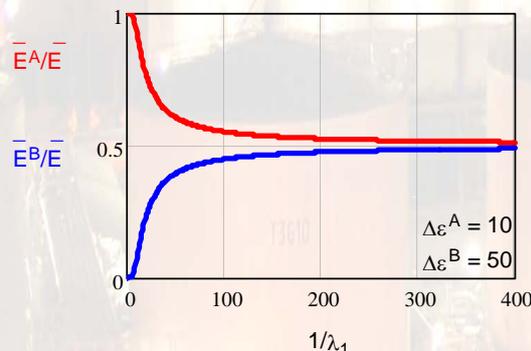
$$\bar{H}^A + \bar{H}^B = \lambda_1 \cdot (\bar{E}^A + \bar{E}^B) + (\lambda_3^A + \lambda_3^B)$$



- Modellrechnungen

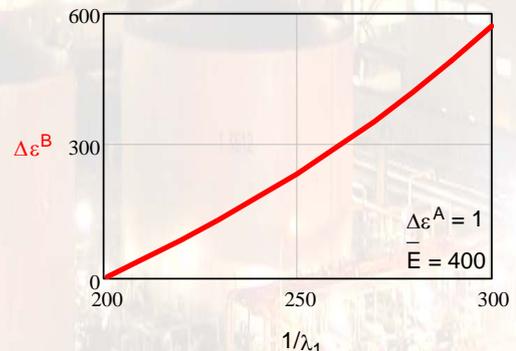
geg.: $\Delta \varepsilon^A, \Delta \varepsilon^B, \lambda_1$

ber.: $\bar{E}^A, \bar{E}^B, \bar{E} = \bar{E}^A + \bar{E}^B$



geg.: $\Delta \varepsilon^A, \lambda_1, \bar{E} = \bar{E}^A + \bar{E}^B$

ber.: $\bar{E}^B, \Delta \varepsilon^B$



B
A
L
U
S
C
K

- Beschreibung von Phasengleichgewichten
 - Gleichgewicht: kinetische + potenzielle Energie
 - Potenzielle Energie mittels Assoziationsmodell

- Beschreibung von Reaktionsgleichgewichten

