

Energieformen im thermodynamischen Gleichgewicht

Dipl.-Ing. Dr.techn. Thomas Wallek und ao. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hans Huemer, Institut für Grundlagen der Verfahrenstechnik und Anlagentechnik, Technische Universität Graz, Österreich

Modellierung von innerer Energie und Entropie eines Systems

Das Extremalprinzip im Sinne von Boltzmann ermöglicht die Berechnung von Verteilungen der Besetzung verschiedener Energieniveaus bei bekannten Systemmittelwerten.

Die Energie wird in der vorliegenden Arbeit als Mittelwert der Verteilung über diskrete Energiezustände verstanden, welche im Sinne einer Diskretisierung als Vielfache einer kleinsten Energieeinheit angesetzt werden.

Der zugehörige Entropieansatz entspricht der zur Beschreibung dieser Verteilung erforderlichen, mittleren Information.

Bei Kenntnis der kleinsten Energieeinheiten kann das Extremalprinzip für jede Energieform auch dimensionslos angesetzt werden.

Einfluss der Modellparameter auf Energieformen im Gleichgewicht

In dieser Arbeit wird zunächst der Einfluss der Größe dieser kleinsten Energieeinheiten durch Analyse der thermodynamischen Funktionen von Mittelwerten und Verteilungen für *eine* Energieform aufgezeigt. Im nächsten Schritt werden Gleichgewichte zwischen *mehreren* Energieformen angesetzt. Eine Untersuchung der energetischen Aufteilungsverhältnisse solcher Gleichgewichte, der kalorischen Zustandsgleichung sowie der daraus abgeleiteten Wärmekapazität zeigt eine hohe Flexibilität des Modells, insbesondere in Hinblick auf die geringe Zahl von Modellparametern.

Anwendbarkeit auf die Modellierung realer Zustände und Gleichgewichte

Ziel der Untersuchung ist das Aufzeigen der Möglichkeiten und Grenzen derartiger Ansätze zur Beschreibung verschiedener Energieformen im Gleichgewicht und damit zur Modellierung realer thermodynamischer Zustände sowie von Reaktions- und Phasengleichgewichten.