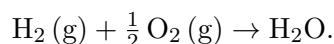


Übungen 2 zur Modellierung und Simulation IV (SS 2013)

<http://www.uni-ulm.de/mawi/mawi-numerik/lehre/sommersemester-2013/vorlesung-modellierung-und-simulation-4.html>

Aufgabe 2.1 (Gibbs-Energie)

Wir betrachten die Verbrennung von Wasserstoff als Gesamtreaktion



Berechnen Sie die freie Reaktionsenthalpie (Gibbs-Energie) ΔG_{298}° für die Bildung von einem Mol Wasser. Nutzen Sie die Daten aus Tabelle 1.

Tabelle 1: Thermodynamische Eigenschaften einiger Substanzen beim Standardzustand $p = 1$ bar, $T = 298$ K.

Substanz	$\Delta H_f^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$	$S^\circ / \text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	$\Delta G_f^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$
H ₂ (g)	0.0	130.68	0.0
O ₂ (g)	0.0	205.14	0.0
H ₂ O (l)	-285.83	69.91	-237.13
H ₂ O (g)	-241.82	188.83	-228.57

Läuft die Reaktion unter Standardbedingungen von selbst ab?

Aufgabe 2.2 (Ozon-Mechanismus)

In Tabelle 2 ist ein Ozon-Zersetzungs-Mechanismus aufgelistet. Stellen Sie die zugehörige ODE in den Konzentrationen $\dot{c} = f(c)$ auf.

Tabelle 2: Ozon-Zersetzungs-Mechanismus nach U. Maas und J. Warnatz, Zeitschr. für Phys. Chem., vol. 161, p. 61, 1989. doi: 10.1524/zpch.1989.161.Part_1_2.061. Kollisionseffizienzen für M: $\alpha_{\text{O}} = 1.14$, $\alpha_{\text{O}_2} = 0.40$, $\alpha_{\text{O}_3} = 0.92$.

Reaktion	$A / (\text{cm}, \text{mol}, \text{s})$	b	$E_a / \text{kJ mol}^{-1}$
$\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	2.90×10^{17}	-1.0	0.0
$\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$	6.81×10^{18}	-1.0	496.4
$\text{O}_3 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O}_2 + \text{M}$	9.50×10^{14}	0.0	95.0
$\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$	3.32×10^{13}	0.0	-4.9
$\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$	5.20×10^{12}	0.0	17.4
$\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_3$	4.27×10^{12}	0.0	413.9