Übung 3

Ausgabe:	Freitag, 28.09.2012
Rückgabe:	Freitag, 05.10.2012, vor der Vorlesung (bis 7:45 Uhr)
Besprechung:	Mi/Fr/Mo, 10./12./15.10.2012(in den Übungsgruppen)
Verantwortlich:	1. Eduard Miloglyadov 2. Ľuboš Horný

3.1 Lesen Sie Kapitel 1 und 2 des Skriptes Kinetik sowie Kapitel 0 zu PC0 (Allgemeine Chemie) soweit verteilt und stellen Sie Fragen (schriftlich), wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

3.2 Nach dem Bericht der Internationalen Energie Agentur (http://www.iea.org/newsroomandevents/news/2012/may/name,27216,en.html vom 24.5.2012) war der Weltausstoss an CO_2 im Jahr 2011 31.6 Gt (31.6 Pg).

3.2.1 Berechnen Sie die Umsatzgeschwindigkeit $\mathrm{d}\xi/\mathrm{d}t$ mit der vereinfachenden Annahme, dass das gesamte CO_2 aus der Verbrennung von Methan herrührt: $CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$ (in SI Einheiten für die Umsatzgeschwindigkeit).

3.2.2 Berechnen Sie die entsprechende Energieerzeugung im Jahr 2011.

3.2.3 Berechnen Sie den Massendefekt Δm für $\Delta\xi = 1$ mol für die Verbrennung von Methan und den entsprechenden Massendefekt ΔM für den Jahresumsatz (*Anmerkung* : Sie dürfen die nötigen Daten dem verteilten Skript zu PC0 Kapitel 0 entnehmen).

3.2.4 (freiwillig) Führen Sie dieselben Rechnungen durch wie unter 3.2.1 bis 3.2.3 erwähnt, aber mit der Verbrennung von Kohlenstoff $C + O_2 = CO_2$.

3.3 Aufgabe 4 auf Seite 66 im Skript zu PC0 Kap.0 (Graphik zum exponentiellen Zerfall).

3.4 Aufgabe 5 auf Seite 66 im Skript zu PC0 Kap.0. Berechnen Sie e auf 100 Stellen. Formulieren Sie einen Algorithmus hierfür. Berechnen Sie die relative Häufigkeit von geraden und ungeraden Ziffern. Was fällt Ihnen auf?

3.5* Das radioaktive Isotop des Wasserstoffs, Tritium ($T = {}^3H$) hat eine Halbwertszeit $t_{1/2} = 12$ a (informieren Sie sich z.B. anhand des "Handbook of Chemistry and Physics" oder anderer Quellen über die Natur des Zerfallsprozesses und die Eigenschaften und Anwendungen von Tritium). Tritium wird z.B. in der Biochemie zur Markierung verwendet. Die Radioaktivität solcher Substanzen wird oft in Curie (Ci) angegeben. 1 Ci entspricht

$3.7 \cdot 10^{10}$ Zerfällen pro Sekunde. Die hierzu gehörende SI Einheit ist Becquerel (Bq). 1 Bq entspricht einem Zerfall pro Sekunde.

3.5.1 Berechnen Sie die Geschwindigkeitskonstante k und die Lebensdauer τ für diesen Zerfall.

3.5.2 Was ist die Aktivität von 1 mol Tritium (T)? Geben Sie den Wert in Bq und Ci an.

3.5.3 Berechnen Sie die spezifische Aktivität (in Ci/mol, Ci/g, Bq/mol, Bq/g) von Thymin, welches an der Methylgruppe einfach mit einem Atom Tritium und zwei Atomen Deuterium markiert ist (also -CD_2T). Zeichnen Sie die Strukturformel unter Angabe der markierten Methylgruppe und die Summenformel.

3.5.4 Welcher Bruchteil der Moleküle ist markiert, wenn man für eine typische Thyminprobe eine spezifische Aktivität von 80 GBq/mol annimmt?

3.5.5 Laborabfall mit markiertem Thymin habe eine Aktivität von 0.8 Ci. Nach welcher Zeit ist diese auf 10^{-5} Ci abgeklungen?

3.5.6 Äussern Sie sich zur Verwendung von Thymin, das am NH mit T markiert ist.

3.6* Diskutieren Sie in Gleichung (1.29) im Skript die Geschwindigkeitsgesetze und Reaktionsordnungen in den beiden Grenzfällen mit

(a) $[\mathrm{Br_2}] \gg k_\mathrm{b}[\mathrm{HBr}]$

(b) $k_\mathrm{b}[\mathrm{HBr}] \gg [\mathrm{Br_2}]$

3.7 Berechnung von Mittelwerten

Der Mittelwert einer Grösse A ist allgemein definiert durch:

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^{N} P_i \cdot A_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} Z_i \cdot A_i. \tag{1}$$

Dabei ist

$$P_i = \frac{Z_i}{N} \tag{2}$$

die "Wahrscheinlichkeit" oder relative Häufigkeit des Wertes A_i der Grösse A und Z_i die Häufigkeit des Wertes A_i in einer Probe (z.B. Zahl der Messergebnisse mit dem Wert A_i). N ist die Gesamtzahl der Werte in der Probe (z.B. Zahl der Messwerte).

Für eine kontinuierliche Verteilung von Messwerten der Grösse A hat man analog

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} P(A) A \, \mathrm{d}A. \tag{3}$$

Hier ist $P(A)$ die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Grösse A mit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(A)\,\mathrm{d}A = 1. \tag{4}$$

Die Wahrscheinlichkeit, die Grösse A im Intervall zwischen A und $A + \mathrm{d}A$ zu finden, ist:

$$W(A) = P(A)\mathrm{d}A. \tag{5}$$

3.7.1 Zeigen Sie für den exponentiellen Zerfall, dass die "Lebensdauer" $\tau = 1/k$ gleich der mittleren Lebensdauer

$$\langle t \rangle = X \int_0^\infty \exp{(-kt)}\, t\, \mathrm{d}t \tag{6}$$

ist (Normierungsfaktor X). Bestimmen Sie zunächst den Normierungsfaktor X aus der Bedingung in Gl. (4).

3.7.2 (freiwillig) Ermitteln Sie $P(t)$ und die mittlere Lebensdauer $\langle t \rangle$ der Moleküle A bei der bimolekularen Reaktion

$$\mathrm{A} + \mathrm{A} \xrightarrow{k} \text{Produkte}. \tag{7}$$

Diskutieren Sie Ihr Ergebnis, vor allem in Unterschied zur Lösung von Übung 3.7.1

3.7.3 (freiwillig) Ermitteln Sie $P(t)$ und die mittlere Lebensdauer $\langle t \rangle$ für die allgemeine Reaktion n-ter Ordnung mit der stöchiometrischen Gleichung

$$n\mathrm{A} = \text{Produkte} \tag{8}$$

und dem als gültig angenommenem empirischen Geschwindigkeitsgesetz mit c=[A]:

$$v_c = -\frac{1}{n}\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} = kc^n. \tag{9}$$

Betrachten sie die Spezialfälle $n = 1$, 2, 3 sowie 1.5.

3.7.4 Äussern Sie sich kritisch zu der Frage, ob der Mittelwert einer Grösse auch als repräsentativ für eine Gesamtheit von Werten betrachtet werden kann. Geben Sie Beispiele, wo dies der Fall ist, und solche, wo dies nicht der Fall ist (sogenannter "flaw of averages" statt "law of averages").

3.7.5 Ermitteln Sie die Häufigkeiten p_N der Ziffern N (N=0,1,2,..9) und den Mittelwert des "Ziffernwertes"

$$W_\mathrm{e} = \sum_{N=0}^{9} p_N N \tag{10}$$

für die ersten hundert Ziffern der Zahl e aus dem Ergebnis in Aufgabe 3.4. Stellen Sie eine Vermutung auch für den Mittelwert (für die Zahl e) für unendliche Reihe Ziffern.

(27. September 2012)