

Übung 1. *Henry Gesetz*

In der Vorlesung wurde das Henry Gesetz hergeleitet. Es besagt, dass bei fester Temperatur T die Konzentration eines in einem Lösungsmittel gelösten Gases c_s direkt proportional zum Gasdruck p ist

$$c_s(T, p) = f(T)p.$$

Nun löst sich Wasserstoff H_2 in gewissen Metallen nur in atomarer Form. Das heisst $-H_2 + 2H = 0$. Zeige, dass für diesen Prozess das Henry Gesetz folgendermassen modifiziert werden muss:

$$c_H(T, p) = f(T)\sqrt{p}.$$

Übung 2. *Optimierung einer chemischen Reaktion*

Betrachte eine chemische Reaktion

$$\sum_{i \in E \cup P} \nu_i A_i = 0$$

bei festen T, p mit stöchiometrischer Geraden

$$N_i = N_i^0 + \lambda \nu_i \quad \forall i, j \in E.$$

Am Anfang seien

- (i) die Produkte ($i \in P$ und $\{\nu_i\}_{i \in P} > 0$) abwesend: $N_i^0 = 0 \quad \forall i \in P$, und
- (ii) die Molzahlen $\{N_i^0\}_{i \in E}$ der Edukte ($i \in E$ und $\{\nu_i\}_{i \in E} < 0$) frei wählbar bis auf die Nebenbedingung

$$\sum_{i \in E} N_i^0 = \text{const.}$$

Ziel ist es die Molzahlen der Edukte so zu wählen, dass der im Gleichgewicht erreichte Umsatz λ maximal ist. Zeige, dass das Maximum erreicht wird wenn sie proportional zu den stöchiometrischen Koeffizienten sind, i.e.,

$$\frac{N_i^0}{N_j^0} = \frac{\nu_i}{\nu_j} \quad \forall i, j \in E$$

erfüllen.

Hinweis: Suche den Punkt, wo der Gleichgewichtsumsatz λ stationär ist bzgl. den zulässigen Variationen der $\{N_i^0\}_{i \in E}$. Dies kann mit Hilfe eines Lagrangeschen Multiplikators geschehen. Verifiziere einfachheitshalber *nicht*, dass dieser stationäre Punkt ein Maximum ist.

Übung 3. *Maxwell-Boltzmann Verteilung und Gauss'sche Integrale*

Die Maxwell-Boltzmann Verteilung ist die stationäre Lösung der Boltzmann Transportgleichung in der Abwesenheit eines äusseren Treibers ($\vec{a} = 0$):

$$f_0 = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-m \frac{(\vec{v} - \vec{v}_0)^2}{2k_B T} \right).$$

Das Ziel dieser Aufgabe ist es, mit der Maxwell-Boltzmann Verteilung vertraut zu werden, die in der kinetischen Gastheorie eine wichtige Rolle spielt. Ausserdem soll der Umgang mit Gauss'schen Integralen geübt werden.

(a) **Gauss'sche Integrale** (mathematische Vorbereitung):

(i) Zeige, dass die Lösung des Gauss'schen Integrals gegeben ist durch

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} = \sqrt{2\pi}.$$

Tipp: Vergleiche die Integration in zwei Dimensionen in kartesischen Koordinaten mit derjenigen in Polarkoordinaten:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-(x^2+y^2)/c^2} = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} d\theta r e^{-r^2/c^2}.$$

(ii) Berechne anschliessend die allgemeine Lösung für Integrale der Form

$$\int_0^{\infty} dx x^{2n} e^{-\alpha x^2} \quad \text{oder} \quad \int_0^{\infty} dx x^{2n+1} e^{-\alpha x^2}.$$

Tipp: Man leite nach α ab, bzw. substituiere $y = x^2$.

(b) **Resultierende Eigenschaften:**

Der Mittelwert einer von \vec{v} abhängigen Grösse $g(\vec{v})$ ist definiert als

$$\langle g \rangle := \frac{1}{n} \int d^3v g(\vec{v}) f_0(\vec{v}). \quad (1)$$

Verifiziere die im Folgenden angegebenen mittleren Werte für vektorielle Geschwindigkeit, Energie und skalare Geschwindigkeit (setze $\vec{v}_0 = \vec{0}$ bei \bar{E} und \bar{v}):

$$\langle \vec{v} \rangle = \vec{v}_0, \quad \bar{E} := \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad \bar{v} := \langle |\vec{v}| \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}.$$