

Version 2017-05-06 – Abgabe am Montag 15. Mai in der Vorlesung

**Aufgabe 11.1.** *Physikalische Entropie einer Lösung*

[+]

Wir betrachten eine Lösung in der die dextro-, levo- und meso-Form von Weinsäure vorkommen. Die Gesamtzahl der dextro-, levo- und meso-Weinsäuremoleküle sei  $N$ . Ein Mikrozustand dieses Systems ist beschrieben durch die Anzahl an jeder der drei Weinsäureformen, also insgesamt 3 Parameter. Wir definieren einen Makrozustand durch die Zahl  $k$  der dextro-Weinsäuremoleküle (die wir z.B durch Titration bestimmen).

- (a) Erklären Sie die Bedeutung der Entropie  $S(k, N)$  dieses Makrozustandes?
- (b) Berechnen Sie die Entropie  $S(k, N)$  des Makrozustandes.
- (c) Bei welchem Wert von  $k$  ist die Entropie maximal? Bei welchem Wert von  $k$  ist sie minimal? Ist dies Sinnvoll?

**Aufgabe 11.2.** *Entropie im chemischen Gleichgewicht*

[+++]

Der Begriff der Entropie ermöglicht uns, das chemische Gleichgewicht zu verstehen. Wir können sogar qualitativ richtige Ergebnisse erhalten, ohne die kinetische Energie, die in chemischen Reaktionen von zentraler Bedeutung ist berücksichtigen zu müssen.

Wir betrachten  $N_A$  Atome der Sorte A und  $N_B$  Atome der Sorte B. Diese können zu einem Molekül AB reagieren. Die Zahl der AB-Produktmoleküle nennen wir  $n$ . Die Teilchen befinden sich in einem Volumen, das aus  $Z$  Zellen besteht. In jeder Zelle kann maximal ein Teilchen sein. Je grösser  $Z$ , desto grösser das Volumen.

Ein Mikrozustand dieses Systems ist beschrieben durch Angabe der Zahlen  $N_A, N_B, n$ , und der Information darüber, in welcher Zelle sich jedes Teilchen befindet.

Wir betrachten Makrozustände, die durch die Zahl  $n$  der Produktmoleküle AB beschrieben werden. Die Multiplizität dieser Makrozustände nennen wir  $\Omega(Z, N_A, N_B, n)$ . Für die Entropie schreiben wir  $S(Z, N_A, N_B, n)$ .

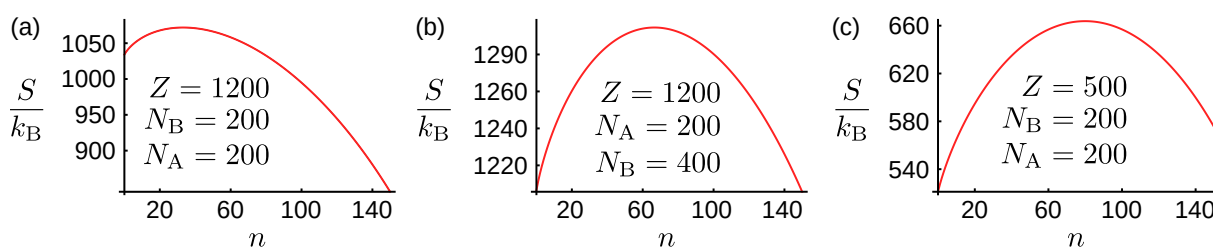
- (a) Erklären sie die Bedeutung der Entropie  $S(Z, N_A, N_B, n)$  des durch die Zahl  $n$  beschriebenen Makrozustandes?
- (b) Leiten Sie  $\Omega(Z, N_A, N_B, n)$  her. Sie können wie folgt vorgehen:
  - (i) Wie viele A- und B-Atome bleiben ungebunden, wenn sich  $n$  Produktmoleküle AB im Reaktionsvolumen befinden?
  - (ii) Wie viele Möglichkeiten gibt es, diese  $n$  Produktmoleküle auf die  $Z$  freien Zellen zu verteilen?
  - (iii) Die  $n$  AB-Moleküle seien verteilt. Wie viele Möglichkeiten gibt es, die ungebundenen A-Atome auf die noch nicht besetzten Zellen zu verteilen?
  - (iv) Nun seien alle AB-Moleküle und ungebundene A-Atome verteilt. Wie viele

Möglichkeiten gibt es, die ungebundene B-Atome auf die noch nicht besetzten Zellen zu verteilen?

(v) Welche Multiplizität ergibt sich insgesamt?

(c) Geben Sie  $S(Z, N_A, N_B, n)$  an.

(d) In Abbildung 11.1 sehen Sie drei Graphen von  $S(Z, N_A, N_B, n)$  als Funktion von  $n$ , für verschiedene Werte der Parameter  $N_A$ ,  $N_B$  und  $Z$ . Bei welchem Wert von  $n$  wird das chemische Gleichgewicht erreicht, und warum? Was lernen wir aus dem Vergleich von (a) mit (b)? Was lernen wir aus dem Vergleich von (b) mit (c)? Wie hängt das Reaktionsgleichgewicht von der Konzentration der Atome A und B ab?



**Abbildung 11.1:** Entropie  $S(Z, N_A, N_B, n)$  als Funktion der Zahl  $n$  der Produktmolekülen AB, für verschiedene Werte von  $Z$ ,  $N_A$  und  $N_B$ .

### Aufgabe 11.3. Informationsentropie einer Lösung

[++]

Wir betrachten eine Tocopherol-Lösung, in der alle vier Formen dieses Moleküls vorkommen ( $\alpha, \beta, \gamma$  und  $\delta$ -Tocopherol). Die Gesamtkonzentration von Tocopherol ist  $C = 40 \mu\text{mol l}^{-1}$ .

Angenommen wir isolieren ein Molekül dieser Lösung. Die Informationsentropie (Shannon-Entropie) der Lösung ist ein Maß für unsere Unsicherheit, von welcher Form dieses zufällig ausgewählte Molekül ist.

(a) Wir kennen die genaue Zusammensetzung.

- $C_\alpha = 30 \mu\text{mol l}^{-1}$   $\alpha$ -Tocopherol.
- $C_\beta = 5 \mu\text{mol l}^{-1}$   $\beta$ -Tocopherol.
- $C_\gamma = 4 \mu\text{mol l}^{-1}$   $\gamma$ -Tocopherol.
- $C_\delta = 1 \mu\text{mol l}^{-1}$   $\delta$ -Tocopherol.

Berechnen sie die Informationsentropie dieser Lösung.

*Hinweis.* Falls ihr Taschenrechner  $\log_2$  nicht unterstützt verwenden Sie die Formel  $\log_2(x) = \ln(x)/\ln(2)$ .

(b) Bei welcher Zusammensetzung ist die Informationsentropie **maximal**? Welchen Wert nimmt sie dann an?

- (c) Bei welcher Zusammensetzung ist die Informationsentropie **minimal**? Welchen Wert nimmt sie dann an?