Lösungsvorschläge zur 5.Übung

Aufgabe 5.1: (je Teilaufgabe 2 Punkte)

$$
\begin{aligned}
(i) \qquad N'(t) &= N_0(1+a)\frac{ake^{-kt}}{(1+ae^{-kt})^2} = N(t)\frac{ake^{-kt}}{1+ae^{-kt}} \\
(ii) \qquad N'(t) &= N_0 e^{-ae^{-kt}}\, ake^{-kt} \\
&= N(t)ake^{-kt} \\
(iii) \qquad N'(t) &= N_0 ake^{-kt}
\end{aligned}
$$

Aufgabe 5.2: (je Teilaufgabe 3 Punkte)
(a) Es gilt $p(0) = -\alpha \leq 0$ und

$$p(1+\alpha) = (1+\alpha)^n - \alpha \geq (1+\alpha) - \alpha = 1$$

Nach dem Zwischenwertsatz besitzt p damit eine Nullstelle im Intervall $[0, 1+\alpha]$.

(b) Wir betrachten die stetige Funktion $g(x) = f(x) - x$. Nullstellen von g entsprechen gerade den Fixpunkten von f. Nun gilt aber wegen $f(a) \geq a$ und $f(b) \leq b$:

$$
\begin{aligned}
g(a) &= f(a) - a \geq 0 \\
g(b) &= f(b) - b \leq 0\,.
\end{aligned}
$$

Wieder folgt nach dem Zwischenwertsatz die Existenz einer Nullstelle von g.

Aufgabe 5.3: (Teil (i) 1 Punkt, Teil (ii) 3 Punkte)
(i) Die Ableitung ergibt sich zu:

$$
\begin{aligned}
k'(T) &= A\beta T^{\beta-1}\exp\left(\frac{-E}{RT}\right) - k(T)\frac{-E}{RT^2} \\
&= k(T)T^{-1}\left(\beta + \frac{E}{RT}\right)
\end{aligned}
$$

(ii) Unter Berücksichtigung der Form für die Gleichgewichtskonstante k_{equi} ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
k_{back}(T) &= \frac{k(T)}{k_{equi}(T)} \\
&= AT^{\beta}\exp\left(\frac{-E}{RT}\right)\left(A_e T^{\beta_e}\exp\left(\frac{-g(T)}{RT}\right)\right)^{-1} \\
&= \frac{A}{A_e}T^{\beta-\beta_e}\exp\left(\frac{g(T)-E}{RT}\right)
\end{aligned}
$$

Ist $g(T)$ konstant, so ist dies wieder von Arrhenius Form. Aber selbst wenn g von der Form

$$g(T) = a_0 + a_1 T + a_2 T \ln T$$

ist, so erhalten wir eine Arrhenius Form, denn dann gilt:

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{g(T)-E}{RT}\right) &= \exp\left(\frac{a_0 + a_1 T + a_2 T \ln T - E}{RT}\right) \\
&= \exp\left(\frac{a_0 - E}{RT}\right) \exp\left(\frac{a_1}{R}\right) \exp\left(\frac{a_2}{R} \ln T\right) \\
&= c_1 T^{c_2} \exp\left(\frac{a_0 - E}{RT}\right)
\end{aligned}$$

mit $c_1 = \exp(a_1/R)$ und $c_2 = a_2/R$. Insgesamt erhält man dann das Arrhenius Gesetz:

$$\begin{aligned}
k_{back}(T) &= A_{back} T^{\beta_{back}} \exp\left(\frac{E_{back}}{RT}\right) \\
A_{back} &= \exp(a_1/R) \frac{A}{A_e} \\
\beta_{back} &= \beta - \beta_e + a_2/R \\
E_{back} &= E - a_0
\end{aligned}$$