1 Rechnen mit Einheiten

1.1 Informationen

In allen Naturwissenschaften werden Rechnungen auf eine spezielle Art und Weise durchgeführt: Von der Formel bis zum Ergebnis werden bestimmte Schritte unerbittlich eingehalten.

1. Formel aufschreiben (evtl. erst umstellen)
2. Werte einsetzen
3. Einheiten anpassen
4. Ergebnis berechnen
5. evtl. sinnvoll runden (dazu hört Ihr etwas von Euren Gruppenmitgliedern, die sich mit Fehlerrechnung beschäftigen)

Beispiel:

$$\begin{aligned} n &= c \cdot V \\ &= 0{,}815\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}} \cdot 4711\,\mathrm{mL} \\ &= 0{,}815\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}} \cdot 4{,}711\,\mathrm{L} \\ &= 3{,}839465\,\mathrm{mol} \\ &= 3{,}84\,\mathrm{mol} \end{aligned}$$

Warum soll dieser scheinbar beschwerliche, umständliche und langwierige Weg in genau dieser Reihenfolge beschritten werden? Nun, zum einen existieren Formeln, die sehr viel länger und komplexer sind; wenn hier Werte eingesetzt werden, wird es schnell unübersichtlich. Hier ein noch einfaches Beispiel aus der Wellenmechanik (Physik, Jgst. 11):

$$\psi_{n_1,n_2} = \sqrt{\frac{4}{L_1 L_2}} \cdot \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L_1}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L_1}\right)$$

Diese Vorgehensweise ist dann eine große Hilfe, dass sich keine Flüchtigkeitsfehler einschleichen und es gehört „zum guten Stil“, sich penibel daran zu halten. Aus dem gleichen Grund isst man - anders als im Mittelalter - in der Regel mit Messer und Gabel und wirft Essensreste nicht auf den Boden: Es ist guter Stil und hilfreich. Ein angenehmer Nebeneffekt ist, dass auffällt, wenn eine Formel nicht stimmen kann: Dann ergeben die Einheiten beim Ausrechnen nicht die Einheit, die das Ergebnis eigentlich haben sollte.

Für die molare Masse M gilt beispielsweise *nicht*:

$$M = \frac{n}{m} = \frac{123\,\mathrm{mol}}{321\,\mathrm{g}} = 0{,}383\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{g}}$$

weil die Einheit der molaren Masse eben *nicht* mol/g ist.

1.2 Fragen

1. Worin besteht der Unterschied zwischen einer einfachen Zahl und einem Wert?
2. Berechne die molare Masse M für $n = 123\,\mathrm{mol}$ und $m = 321\,\mathrm{g}$. Welche Einheit hat die molare Masse?
3. Was bedeutet „Einheiten anpassen„?
4. Kannst Du die 5 Schritte naturwissenschaftlichen Rechnens ohne nachzugucken aufzählen?

1.3 Übungen ① mit Lösungen

Die Konzentration einer Probelösung c_P ist gegeben durch $c_\mathrm{P} = \frac{c_0 \cdot V_1}{z \cdot V_\mathrm{Probe}}$. Berechne die in der Tabelle fehlenden Werte, indem Du die gegebenen Werte in die Formel einsetzt. (Kläre die Formel mit dem Material aus den letzten Stunden!) Eventuell musst Du zunächst die Formel entsprechend umformen.

c_P	c_0	V_1	z	V_Probe
?	$1{,}1\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$	3,3 mL	1	15 mL
$0{,}2625\,\frac{\mathrm{mmol}}{\mathrm{mL}}$	?	5 mL	2	0,01 L
$150\,\frac{\mathrm{mmol}}{\mathrm{L}}$	$1\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$	9 mL	?	20 mL

Lösungen: $0{,}242\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$, $1{,}05\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$, 3

2 Fehlerrechnung

2.1 Informationen

Wenn in eine Rechnung gemessene Größen eingehen, dann ist das Ergebnis hinterher logischerweise nur so gut wie die vorangegangene Messung. Wenn man bespielsweise den durchmesser dieses Kreises: ○ mit einem Zollstock (!) misst, kann man nicht erwarten, dass die Kreisfläche daraus auf den Quadratnanometer genau berechenbar ist. Wie genau ist aber eine solche Angabe dann?
Wenn Du ein Geo-Dreieck zur Hand nimmst und diesen Kreis ausmisst, wirst Du auf einen Durchmesser zwischen 1 und 2 Millimetern kommen. Man könnte also sagen: Der Durchmesser beträgt etwa 1,5 Millimeter, und die Unsicherheit oder der Messfehler ist etwa einen halben Millimeter groß. Das wird so aufgeschrieben:

$$d = 1{,}5\,\mathrm{mm} \pm 0{,}5\,\mathrm{mm}$$

Dieser Fehler, der mit ± angegeben wird, wird in der Mathematik häufig mit Δ bezeichnet, dem griechischen „D“. Dieses „D“ steht für „Differenz“, nämlich der anzunehmenden maximalen Differenz zwischen dem Messwert und dem wahren Wert. Diese Differenz des Durchmessers d wollen wir Δd nennen.
Wie wirkt sich nun die Messunsicherheit auf die Unsicherheit des Ergebnisses aus? Ganz einfach: Die Kreisfläche A ist zunächst

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot d^2 \\ &= \frac{1}{4} \cdot 3{,}141592 \cdots \cdot (1{,}5\,\mathrm{mm})^2 \\ &= 1{,}767145 \cdots \mathrm{mm}^2 \end{aligned}$$

Über die Anzahl an Stellen, die das Ergebnis schließlich haben soll, werden wir uns später Gedanken machen. Der Fehler der Fläche berechnet sich nun analog, also: genau nach dem gleichen Muster:

$$\begin{aligned} \Delta A &= \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot \Delta d^2 \\ &= \frac{1}{4} \cdot 3{,}141592 \cdots \cdot (0{,}5\,\mathrm{mm})^2 \\ &= 0{,}196349 \cdots \mathrm{mm}^2 \end{aligned}$$

Der Fehler der Fläche beträgt also ungefähr $\Delta d = 0{,}2\,\mathrm{mm}^2$. Wenn aber das Ergebnis der Rechnung (A=1,767 mm^2) schon auf der Stelle hinter dem Komma schwankt, dann ist es wohl nicht sinnvoll, 13 oder mehr Nachkommastellen anzugeben. Man rundet dann das Ergebnis sinnvollerweise auf die die Nachkommastelle, die der Fehler diktiert:

$$A = 1{,}8\,\mathrm{mm}^2 \pm 0{,}2\,\mathrm{mm}^2$$

Wie ist es nun, wenn nicht nur eine Größe nicht genau bekannt ist, sondern mehrere? Zeichne auf Kästchenpapier ein Rechteck mit $l = 3$ Kästchen und $b = 2$ Kästchen. Die Fläche beträgt offensichtlich 6 Kästchen:

$$\begin{aligned} A &= l \cdot b \\ &= 3 \cdot 2 \\ &= 6 \end{aligned}$$

Nun ist Dein Chemielehrer extrem kurzsichtig; ohne seine Brille wird er sagen: l ist ungefähr 3 Kästchen, plusminus ein Kästchen - und b ist ungefähr 2 Kästchen, plusminus 1 Kästchen. Dann ist die maximale Fläche $4 \cdot 3 = 12$ Kästchen und die minimale Fläche $2 \cdot 1 = 2$ Kästchen (klar!?). Die Differenz zwischen dem wahren Wert und den fehlerhaften Werten wäre dann einmal 6 Kästchen, im anderen Falle 4 Kästchen (nachrechnen!). Im Mittel ist der Fehler also 5 Kästchen groß. (Am besten: aufzeichnen und ausprobieren!)
Klar, oder? Dann weiter: Dieser Fehler wird nun einfach dadurch berechnet, dass die *Einzelfehler addiert* werden:

$$\begin{aligned} \Delta A &= \underbrace{l \cdot \Delta b}_{\text{Fehler Breite}} + \underbrace{\Delta l \cdot b}_{\text{Fehler Länge}} \\ &= 3 \cdot 1 + 1 \cdot 2 \\ &= 5 \\ \longrightarrow A &= 6 \pm 5 \end{aligned}$$

2.2 Übung ① mit Lösung

Die Konzentration einer Probelösung c_P ist gegeben durch

$$c_\mathrm{P} = \frac{c_0 \cdot V_1}{z \cdot V_\mathrm{Probe}}.$$

Die folgenden Werte sind bekannt: $c_0 = 1{,}05\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$, $V_1 = 5{,}2\,\mathrm{mL}$, $z = 2$ und $V_\mathrm{Probe} = 25\,\mathrm{mL}$. Die Bürette lässt sich auf 0,1 mL genau ablesen (Fehler: ΔV_1 =0,05 mL) und die Maßlösung hat einen Fehler $\Delta c_0 = 0{,}01\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$. Berechne c_P und den Fehler!

Lösung: $c_\mathrm{P} = (0{,}109 \pm 0{,}002)\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$

3 Rechnen mit Genauigkeiten

3.1 Informationen

Ein Speicher- oder Prozessorchip, wie er in Computern, Mobiltelefonen und MP3-Playern eingesetzt wird, besteht chemisch gesehen aus einem kleinen Stück hochreinem Siliziums. Legt man einen solchen Chip auf unsere Balkenwaagen, so kann man das Gewicht wahrscheinlich gerade noch bestimmen, es mögen etwa $m = 0{,}1\,\mathrm{g}$ sein. Sehr einfach lässt sich die Stoffmenge an Silizium ausrechnen:

$$\begin{aligned} n &= \frac{m}{M_{\mathrm{Si}}} \\ &= \frac{0{,}1\,\mathrm{g}}{28{,}0855\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}} \\ &= 0{,}0035605561588720158088693\,\mathrm{mol} \\ &= 3{,}5605561588720158088693\,\mathrm{mmol} \end{aligned}$$

Es ist ganz offensichtlich, dass die Angabe von mehr als 10 Nachkommastellen hier niemanden wirklich interessiert. Wir wollen uns aber mit der Frage beschäftigen, wie viele der angegebenen Stellen in der Tat als gesichert gelten können, und welche Ziffern die Zahl zwar länger aber nicht „wahrer“ machen.
Ausgangspunkt unserer Überlegungen zur Genauigkeit sei die Balkenwaage, die wir im Unterricht einsetzen. Dieses Präzisionsinstrument kann eine Masse in Gramm bis auf die zweite Nachkommastelle genau bestimmen – vorausgesetzt, der Bediener hat die entsprechende Geduld. ;-)
Das Ergebnis der Wägung unseres Chips würde man entsprechend

$$m = 0{,}10\,\mathrm{g}$$

nennen, wobei die letzte Ziffer möglicherweise einen auf- oder abgerundeten Wert darstellt. In der Praxis bedeutet das: Ein Wert von 0,10 g kann in Wahrheit in dem Messbereich

$$0{,}095\,\mathrm{g} < 0{,}10\,\mathrm{g} < 0{,}104\,\mathrm{g}$$

liegen: Ein Gewicht von 0,095 g würde gerade noch zu 0,10 g aufgerundet werden, und ein Gewicht von 1,04 g würde noch gerade zu 1,0 g abgerundet werden.
Wie aber wirkt sich die Tatsache nun auf das Ergebnis der Rechnung aus? Setzt man den unteren und den oberen Wert des Intervalls in die Rechnung ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} n_{\mathrm{min}} &= \frac{0{,}095\,\mathrm{g}}{28{,}0855\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}} = 3{,}382\cdots\,\mathrm{mmol} \\ n_{\mathrm{max}} &= \frac{0{,}095\,\mathrm{g}}{28{,}0855\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}} = 3{,}702\cdots\,\mathrm{mmol} \end{aligned}$$

Bei Lichte betrachtet stellt sich also heraus, dass bereits die erste Stelle hinter dem Komma eine Sicherheit besitzt, die dem Standard chinesischer Kleinwagen entspricht.
Aus diesem Grunde haben sich die Naturwissenschaftler darauf geeinigt, nur solche Stellen anzugeben, über die ein noch vertretbares Maß an Sicherheit besteht; in diesem Falle wäre das höchstens eine Nachkommastelle, auf die das Ergebnis gerundet würde:

$$\begin{aligned} n &= \frac{0{,}10\,\mathrm{g}}{28{,}0855\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}} \\ &= 3{,}6\,\mathrm{mmol} \end{aligned}$$

Die wesentlich größere Genauigkeit der molaren Masse des Siliziums erlaubt es übrigens, diesen Fehler zu vernachlässigen (dazu folgt gleich eine Übung). Diejenige Größe mit den wenigsten Stellen bestimmt also die Genauigkeit des Ergebnisses!
Um sich nun komplizierte Fehlerrechnungen ersparen zu können, gibt es eine einfache Faustregel: Das Ergebnis einer Rechnung hat immer so viele Stellen, wie die Rechengröße mit der geringsten Anzahl an *signifikanten Stellen*. Die folgende Tabelle gibt Aufschluss darüber, wie man die Anzahl signifikanter Stellen zählt:

Zahl	Stellen	gezählt wird
0,1	1	0,**1**
0,123	3	0,**123**
1,234	4	**1,234**
0,012	2	0,0**12**
0,010	2	0,0**10**

Es gilt also:

$$\begin{aligned} 0{,}815 \cdot 0{,}4711 &= 0{,}3839465 \quad \mathit{falsch}! \\ 0{,}815 \cdot 0{,}4711 &= 0{,}384 \quad \mathit{richtig}! \end{aligned}$$

3.2 Übung ① mit Lösung

Berechne die Stoffmenge an Si in einem 0,10000000 g schweren Silizium-Chip. Wodurch wird die Genauigkeit bestimmt?

Die Genauigkeit wird durch die molare Masse bestimmt. $n = 3{,}56056\,\mathrm{mol}$

4 Rechnen mit dem Taschenrechner

4.1 Informationen

In der folgenden Aufgabe soll gezeigt werden, dass es verhängnisvoll ist, die Zwischenergebnisse von Rechnungen acht- und lieblos zu behandeln.

Für eine Synthese werden $n = 0{,}01\,\mathrm{mol}$ Kochsalz in Wasser gelöst benötigt. Dazu werden zunächst 0,335 mol Kochsalz in 15 mL Wasser gelöst. Berechne die Konzentration $c = n/V$ dieser Lösung.

Von dieser Lösung kann mit einer 10 mL-Pipette ein Volumen abgenommen werden, wobei man mit dieser Pipette auf höchstens 0,1 mL genau messen kann.

Welches Volumen würdest Du abpipettieren ($V = n/c$)? Je nach Rechnung bzw. je nach Runden sind das wahrscheinlich 0,4 mL oder 0,5 mL. Beide Volumina und beide Ergebnisse unterscheiden sich um rund ein Virtel und es sind sicherlich Fälle denkbar, in denen das Gelingen eines Experiments von einem solchen Unterschied abhängen kann.

Es gibt eine Vorgehensweise, wie mit Zwischenergebnissen verfahren werden sollte, damit sich Rundungsfehler nicht zu verhängnisvollen größeren Fehlern anhäufen.

Es ist nämlich sehr *verführerisch*, Zwischenergebnisse zu notieren, um sie für spätere Rechnungen leichter verfügbar zu haben. Diese Zwischenergebnisse müssen nämlich gelegentlich gerundet werden, will man sich nicht die Finger an Dezimalstellen wund schreiben. Rundet man aber konsequent, so geschieht folgendes (bitte mit- und nachrechnen!):

Die Konzentration c der Lösung in oberem Beispiel beträgt:

$$\begin{aligned} c &= \frac{n}{V} \\ &= \frac{0{,}335\,\mathrm{mol}}{15\,\mathrm{mL}} \\ &= 0{,}022\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}} \end{aligned}$$

Von dieser Lösung wird folgendes Volumen benötigt:

$$\begin{aligned} V &= \frac{n}{c} \\ &= \frac{0{,}01\,\mathrm{mol}}{0{,}022\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}} \\ &= 0{,}45\,\mathrm{mL} \end{aligned}$$

Da sich mit der Pipette nur 0,4 mL oder 0,5 mL abmessen lassen, muss auf die Stelle hinter dem Komma gerundet werden, man würde also 0,5 mL abpipettieren.

Daher sollte man bei der Berechnung anders vorgehen: Zwischenergebnisse werden zwar (prinzipiell völlig beliebig gerundet) notiert, aber für weitere Berechnungen *im Speicher des Taschenrechners belassen.* Obwohl also für c der Wert $c = 0{,}022\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}$ ausgeschrieben wird, wird mit einem Wert von $c = 0{,}022333\cdots\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}$ weitergerechnet:

Von dieser Lösung wird folgendes Volumen benötigt:

$$\begin{aligned} V &= \frac{n}{c} \\ &= \frac{0{,}01\,\mathrm{mol}}{0{,}022333333\cdots\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}} \\ &= 0{,}4477\cdots\,\mathrm{mL} \end{aligned}$$

Und hier würde eindeutig abgerundet, es würden also 0,4 mL pipettiert.

4.2 Übung ① mit Lösung

Nach der bekannten Gleichung

$$c = \frac{n_{\mathrm{Alc}}}{V_{\mathrm{Getr}}}$$

soll die Konzentration von Alkohol in einem „geistigen Getränk“ berechnet werden. Dazu wird aus einer Probe des Getränks der Masse m_{Getr} der Alkohol abdestilliert und gewogen (m_{Alc}). Die Stoffmenge berechnet sich dann durch

$$n_{\mathrm{Alc}} = \frac{m_{\mathrm{Alc}}}{M_{\mathrm{Alc}}} \qquad | \quad M_{\mathrm{Alc}} = 46{,}07\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}$$

und das Volumen aus der Masse des Getränks und seiner Dichte:

$$V_{\mathrm{Getr}} = \frac{m_{\mathrm{Getr}}}{\rho_{\mathrm{Getr}}}$$

Berechne jeweils, indem Du bei jedem Zwischenschritt auf 2 Nachkommastellen rundest, bzw. dadurch, dass Du Teilergebnisse im Speicher des Taschenrechner belässt.

	m_{Alc}		m_{Getr}	ρ_{Getr}
Wein	(Flasche) :	150 g	1000 g	0,987 $\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mL}}$
Bier	(Flasche) :	25 g	500 g	0,990 $\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mL}}$
Korn	(Flachmann):	100 g	250 g	0,980 $\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mL}}$

Lösungen:

3,23 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$ bzw. 3,21 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$.
1,08 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$ und 1,08 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$.
8,35 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$ bzw. 8,51 $\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$.