Physikalische Chemie II — 18.10.2018

Aufbau der Materie — Donnerstag

Spektroskopie

1 Klassische Mechanik

1.1. Allgemeines

Bewegung von Körpern + verursachende Kräfte, makroskopische Systeme

→ Zugänge sind anschaulich und geben physikalische Einblicke
↳ oft weniger Rechenaufwand

Mikroskopische (molekularen) Systeme → makroskopische Systeme
↳ „Korrespondenzprinzip"

1.2 Begriffe

- Bewegungsfunktion: 1 dim

$$x = x(t)$$

$$v = \frac{dx(t)}{dt} = \dot{x}(t)$$

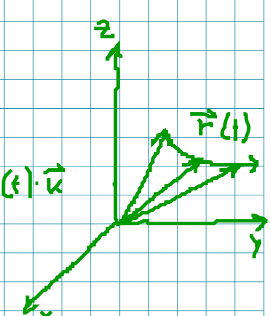
$$a = \frac{d^2x(t)}{dt^2} = \ddot{x}(t)$$

3 dim.

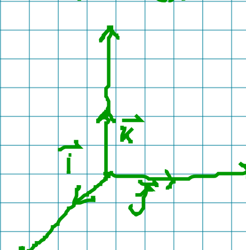
$$\vec{r}(t) = x(t)\,\vec{i} + y(t)\,\vec{j} + z(t)\cdot\vec{k}$$

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \dot{\vec{r}}(t)$$

$$\vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \ddot{\vec{r}}(t)$$



Einheitsvektoren



Physikalische Chemie II 18.10.2018

Aufbau der Materie Donnerstag

Spektroskopie

1 Klassische Mechanik

1.1. Allgemeines

Bewegung von Körpern + verursachende Kräfte, makroskopische Systeme

→ Zugänge sind anschaulich und geben physikalische Einblicke
↳ oft weniger Rechenaufwand

Mikroskopische (molekularen) Systeme → makroskopische Systeme
↳ „Korrespondenzprinzip"

1.2 Begriffe

- Bewegungsfunktion

1 dim

$$x = x(t)$$

$$v = \frac{dx(t)}{dt} = \dot{x}(t)$$

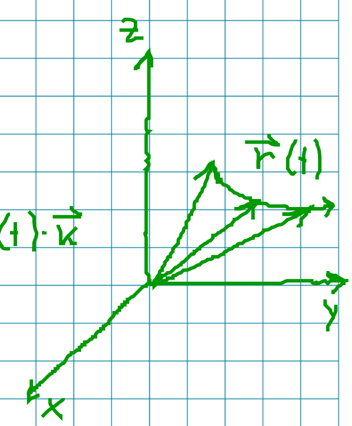
$$a = \frac{d^2x(t)}{dt^2} = \ddot{x}(t)$$

3 dim

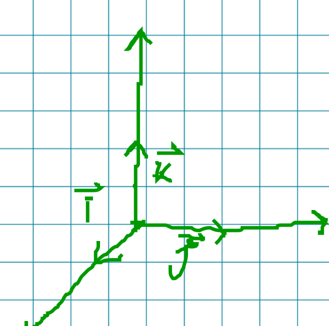
$$\vec{r}(t) = x(t)\,\vec{i} + y(t)\,\vec{j} + z(t)\cdot\vec{k}$$

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \dot{\vec{r}}(t)$$

$$\vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \ddot{\vec{r}}(t)$$



Einheitsvektoren



zu 1.2 Begriffe

- Kraftfunktion

1 dim. $F = F(x) = F_x$

3 dim $\vec{F} = F_x \vec{i} + F_y \vec{j} + F_z \vec{k}$

- Kinetische Energie

1 dim $T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) = \frac{1}{2} m v^2$

3 dim. $T = \frac{1}{2} m \left(\dot{x}^2(t) + \dot{y}^2(t) + \dot{z}^2(t) \right)$

- Potentielle Energie

1 dim $dW = F dx$ (W = Arbeit)

$$\boxed{W = \int_{x_0}^{x} F dx \equiv V(x) - V(x_0)}$$

3 dim $V = V(x, y, z)$

Konservative Systeme

1. Def.: Summe der kinetischen und potentiellen Energie ist zeitunabhängig

↳ Keine äußeren Kräfte, keine Dissipation)

$$\boxed{E_{ges} = T + V}$$

2. Def.: 1 dim. $F = -\frac{dV}{dx}$

3 dim. $\vec{F} = F_x \vec{i} + F_y \vec{j} + F_z \vec{k}$

$$= -\frac{\partial V}{\partial x} \cdot \vec{i} - \frac{\partial V}{\partial y} \cdot \vec{j} - \frac{\partial V}{\partial z} \cdot \vec{k}$$

$$\vec{F} = -\operatorname{grad} V = -\nabla V$$

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

grad = Gradient

→ Ableiten nach x, y, z

Nabla-Operator ∇

zu 1.2 Begriffe

→ Operator = Rechenvorschrift

z.B.: $\frac{d}{dx}$, $\sqrt{\ }$, ...

Symbol: ^

z.B. $\hat{p}$

1.3 Bewegungsgleichung von Newton

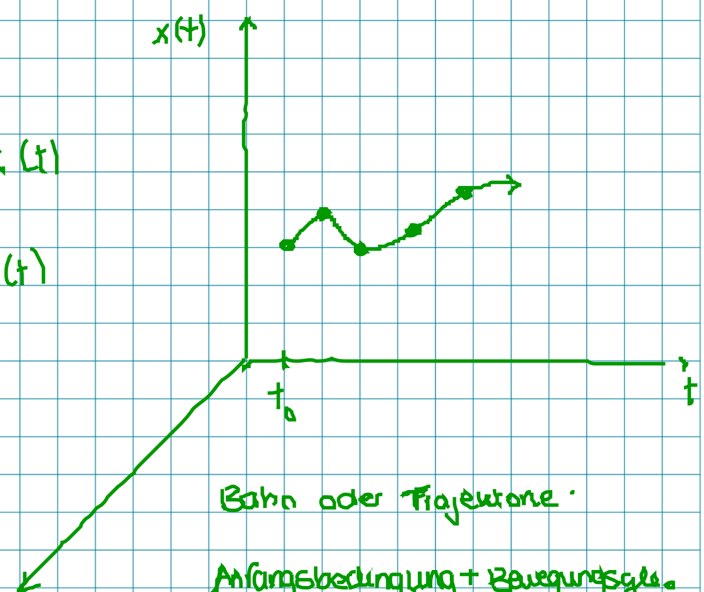
$$\boxed{\begin{array}{ll} 1\,\text{dim.} & F = m\,\dot{x}(t) = m\,a \\ 3\,\text{dim} & \vec{F} = m\cdot\ddot{\vec{r}}(t) = m\cdot\vec{a} \end{array}}$$

→ $x(t)$

→ $r(t)$

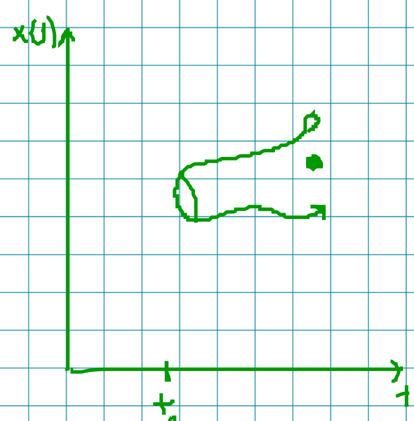
Genaue Anfangsbedingung → exakte Trajektorie

ungenaue " → statistische Aussage



Bahn oder Trajektorie.

Anfangsbedingung + Bewegungsgl.



Eigenschaften

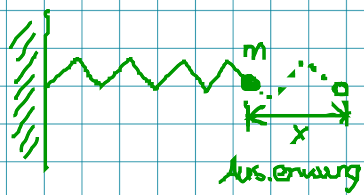
1) keine Einschränkung bzgl. der Genauigkeit, mit der versch. dynam. Variable (z.B.: Ort, Impuls) bestimmt werden können.

2) keine Einschränkung bzgl. der Werte, die dynam. Variable annehmen können.

zu 1.3 Bewegungsgleichung von Newton

→ Anwendungsbeispiel

Dehnung einer Feder



$$\boxed{F_x = -kx}$$

k = Kraftkonstante

Bewegungsfunktion. $x(t)$*

$-k\,x(t) = m\ddot{x}(t)$

$$\boxed{\ddot{x}(t) = -\frac{k}{m}\,x(t)}$$

$(\hat{P}f = bf) \rightarrow$ Eigenwertgleichung)

Lösung?

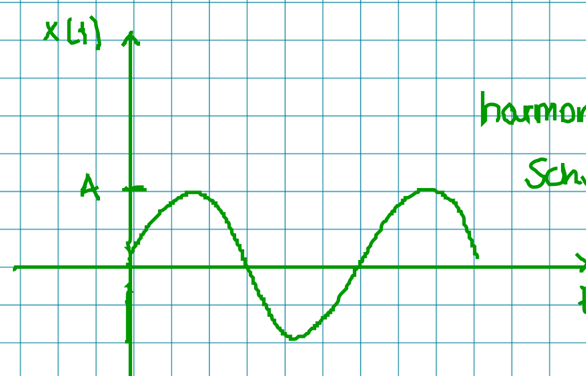
$x(t) = A\sin(\alpha t)$

$\dot{x}(t) = A\alpha\cos(\alpha t)$

$\ddot{x}(t) = -A\alpha^2\sin(\alpha t)$

$= -\frac{k}{m}A\sin(\alpha t)$

$\hookrightarrow\ \alpha^2 = \frac{k}{m}$ $\quad\hookrightarrow\ \alpha = \sqrt{\frac{k}{m}} = \omega$ (Kreisfrequenz)



harmonische Schwingung

Sprechstunde: Mi. 9-10 Uhr