Physikalische Chemie II 19. 10. 2018

Wiederholung von Donnerstag 18.10.18 Freitag

	1 dim.	3 dim.
→ Bewegungsfunktion	$x(t)$	$\vec{r}(t)$
Kraftfunktion	F_x	$\vec{F}$
Kinetische Energie	$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$	$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$
Potentielle Energie	$W = \int_{x_0}^{x} F dx \equiv V(x) - V(x_0)$	$V(x,y,z)$

Konservative Systeme : (idealisierte Systeme)

$\rightarrow$ 1. Def : $E_{ges} = \overbrace{T + V}^{const.}$

2. Def : $\vec{F} = -\text{grad } V$

} Äqu. ?

Äquivalenz ? (1 dim)

$F_x = -\frac{dV}{dx}$

F_x wird durch die Newtonsche Bewegungsgleichung ersetzt.

$m\ddot{x} = m \frac{d\dot{x}}{dt} = -\frac{dV}{dx}$

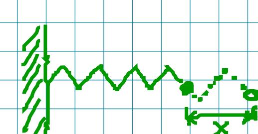
$-\int \frac{dV}{dx} = m \underbrace{\int \frac{dx}{dt}}_{\dot{x}} d\dot{x}$

$-V(x) + C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$

$\text{const} = C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x)$

Beispiel:

→ Dehnung einer Feder (ideale Feder ~ konservatives System)



$F = m\ddot{x}$

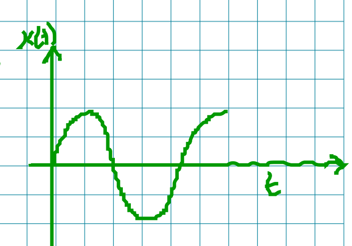
$-kx = m\ddot{x}$

Lösung $\boxed{x(t) = A \sin \sqrt{\frac{k}{m}}\, t = A \sin \omega t}$

Amplitude

Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$

$\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega$



Physikalische Chemie II 19.10.2018

Freitag

<u>Wiederholung von Donnerstag 18.10.18</u>

	1 dim	3 dim.
→ Bewegungsfunktion	$x(t)$	$\vec{r}(t)$
Kraftfunktion	F_x	$\vec{F}$
Kinetische Energie	$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$	$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$
Potentielle Energie	$W = \int_{x_0}^{x} F dx \cong V(x) - V(x_0)$	$V(x,y,z)$

Konservative Systeme: (idealisierte Systeme)

→ 1. Def.: $E_{ges} = \overbrace{T + V}^{const.}$

2. Def.: $\vec{F} = -\text{grad } V$

} Äqu ?

Äquivalenz ? (1 dim)

$$F_x = -\frac{dV}{dx}$$

F_x wird durch die Newtonsche Bewegungsgleichung ersetzt.

$$m\ddot{x} = m \frac{d\dot{x}}{dt} = -\frac{dV}{dx}$$

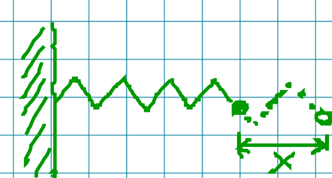
$$-\int \frac{dV}{dx} = m \underbrace{\int \frac{dx}{dt}}_{\dot{x}} d\dot{x}$$

$$-V(x) + C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

$$const. = C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x)$$

Beispiel

→ Dehnung einer Feder (ideale Feder ~ konservatives System)



$F = m\ddot{x}$

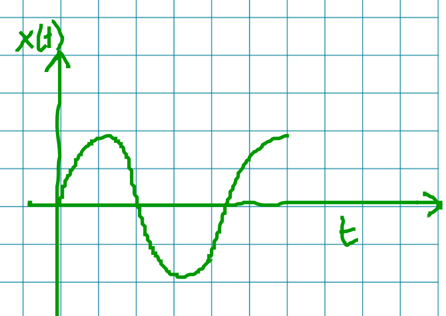
$-kx = m\ddot{x}$

Lösung $\boxed{x(t) = A \sin \sqrt{\frac{k}{m}}\, t = A \sin \omega t}$

Amplitude

Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$

$\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega$



Potentielle Energie?

Ideale Feder: $F_x = -\frac{dV(x)}{dx}$

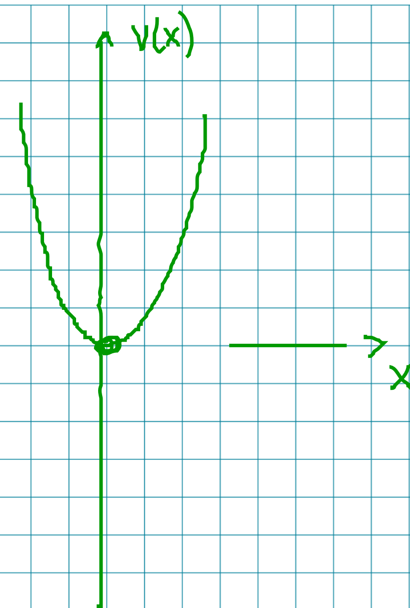
$$-k \cdot x = -\frac{dV(x)}{dx}$$

$$\int dV(x) = k \int x \, dx$$

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 + C$$

für $V(0) = 0 \longrightarrow C = 0$

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2} k x^2}$$



Gesamtenergie?

$E_{ges} = T + V$ (zeitunabhängig!)

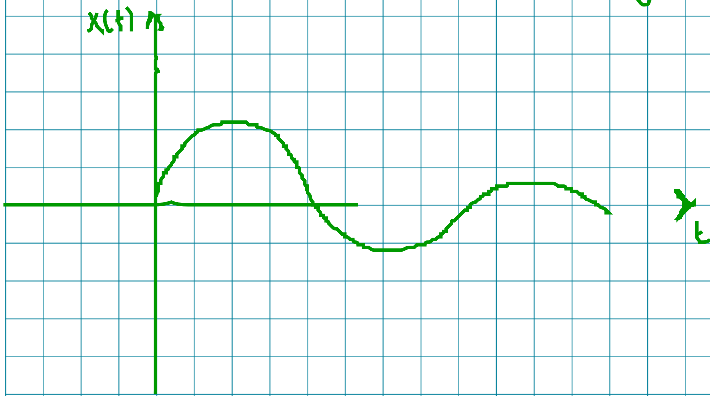
$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 = \frac{1}{2} m A^2 \frac{k}{m} \cos^2 \sqrt{\frac{k}{m}}\, t$ (kinetische Energie)

$V = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} k A^2 \sin^2 \sqrt{\frac{k}{m}}\, t$ (Potentielle Energie)

$$T + V = \frac{1}{2} k A^2 \underbrace{\left(\cos^2 \sqrt{\frac{k}{m}}\, t + \sin^2 \sqrt{\frac{k}{m}}\, t \right)}_{1}$$

$$\boxed{E_{ges} = T + V = \frac{1}{2} k A^2}$$

Reale Feder (nicht konservatives System)



$F = -Rx$ (Dämpfungskraft)

R = Dämpfungskoeffizient

$m\ddot{x} = -kx - R\dot{x} \rightarrow E_{ges} = T + V + Q$

1.4 Allgemeine Koordinaten (generalisiert)

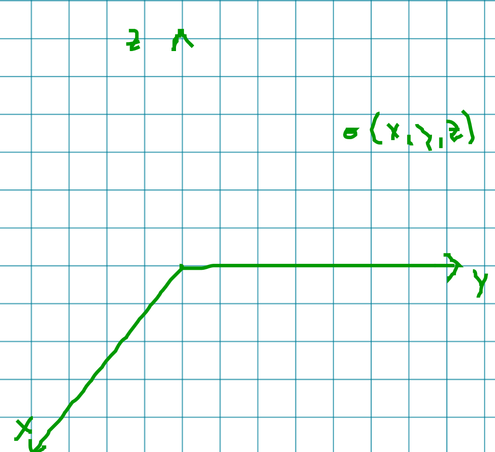
Vollständige Beschreibung System N Teilchen
zur Zeit t_0 in kartes. Koordinaten

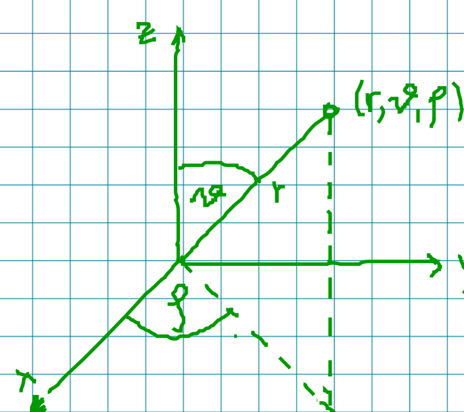
3N Ortskoord.: $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n$

3N Geschwind: $\dot{x}_1, \dot{y}_1, \dot{z}_1, \dot{x}_2, \dot{y}_2, \dot{z}_2, \dots, \dot{x}_n, \dot{y}_n, \dot{z}_n$

$\left.\begin{array}{l}\text{6N Angaben} \\ + \\ \text{Bewegungsgleichung}\end{array}\right\}$ Zustand zur Zeit t

3N allg. Koord.: $q_1, q_2, \dots, q_{3N}$





3N allg. Geschw: $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_{3N}$ $\left(\dot{q} \equiv \frac{dq}{dt}\right)$

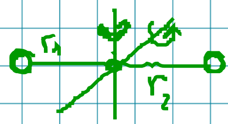
m Bedingungen $\rightarrow$ 3N − m allg Koord

3N − m " Geschw

zu 1.4. Allgemeine Koordinaten

Beispiel 2 atomiges Molekül (H_2, O_2 ...)

Rotation, Bindungsachse starr



$r_1 = r_2 =$ const.

$3N - 2 = 4$ allgemeine Koordinaten: ϑ_1, φ_1; ϑ_2, φ_2

$3N - 2 = 4$ allgemeine Geschw.: $\dot\vartheta_1, \dot\varphi_1$; $\dot\vartheta_2, \dot\varphi_2$

Übungsaufgabe:

3 Teilchen auf einer Kugeloberfläche. Anzahl Koord.?

a) 18 b) 15 $\boxed{\text{c) } 12}$

1.5 Hamilton-Funktion und Hamilton-Bewegungsgleichung (konservative Systeme)

$$\boxed{H \equiv E_{ges}}$$

$$\boxed{H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \overbrace{\frac{1}{2} k q^2}^{V(q)}}$$

$$T(p) = \frac{p^2}{2m} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$$

Bewegungsgleichung

$$\boxed{\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot q_i \quad ; \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot p_i}$$

zu 1 5 Hamilton-Funktion und Hamilton-Bewegungsgleichung

Beispiel Harmonische Schwingung (1. dim.)

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$V = \frac{1}{2} k x^2$$

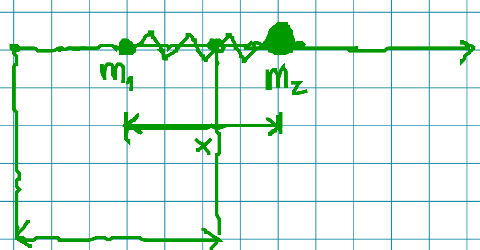
$$H = T + V = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k x^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m} = \dot{x} \qquad p = m\dot{x} \quad \dot{p} = m\ddot{x}$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = kx = -F_x = -\dot{p}_x = -m\ddot{x}$$

$$\boxed{m\ddot{x} = -kx}$$

1 6 Bew. Massenzentrums u. innere Bewegung



X = koord. Massenzentrum

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \qquad x = x_2 - x_1$$

$$Y = \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2} \qquad y = y_2 - y_1$$

$$Z = \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2} \qquad z = z_2 - z_1$$

Kinetische Energie: $T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}_{\text{reduzierte Masse } \mu} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$