Kleine PC-Formelsammlung

Allgemeines
p=m.v=h.λ^{-1}
E=0,5 m v^2=0,5 p^2 m^{-1}

allgemeine Rechentechniken
Polarkoordinaten

$$x = r \sin q \cos j$$

$$y = r \sin q \sin s j$$

$$z = r \cos q$$

Kommutator

$$\left[\hat{x}, \hat{y}\right] = \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x}$$ gemeinsame Wellenfunktion wenn gilt $\left[\hat{x}, \hat{y}\right] = 0$

Unschärferelation

$$\Delta x . \Delta p \geq \hbar \quad \hbar = \frac{h}{2p}$$

schwarzer Strahler

$$dU(l) = \frac{8p}{l^4} kT . dl$$

Compton Streuung

$$\Delta l = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos b)$$

Wellenzahl (Spektrallinien)

$$\tilde{n}[cm^{-1}] = \frac{1}{l} = R.(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})$$ n=m+1,m+2... R=Rydberg- Konstante=109677,578 cm^{-1}

Bohrsches Atommodell
Energie: $E = -\frac{e^2}{8pe_0 r}$ $\quad r = \frac{n^2 h^2 e_0^2}{pe^2 m}$ $\rightarrow$ $E = -\frac{1}{n^2}\frac{m_e e^4}{8e_0 h^2} = -\frac{1}{n^2} E_A$;E_A=13,6 eV

Schrödingergleichung

$y^* y = |y(x)|^2$ ... Wahrscheinlichkeit

$\int |y(x)|^2 dx = 1$ ... Normierung

allgemeine Rechenmethoden
Operatoren

$$x \rightarrow \hat{x} = x$$

$$p \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z})$$

Energie $\rightarrow$ $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(x)$

Eigenwertgleichung

$\hat{o}y = oy$, wobei $\hat{o}$ ... Operator und o... Eigenwert

Orthogonalität

$\int y_i^* y_j dx = 0$ falls i≠j und $\int y_i^* y_j dx = 1$ für i=j

Teilchen im 1D-Kasten

$$E = -\frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$y = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{np}{L} x)$$

Teilchen im 3D-Kasten

$E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\frac{h^2}{8mL^2}$ n...QZ

$$y(x, y, z) = y(x)y(y)y(z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin(\frac{n_x p}{L} x) \sin(\frac{n_y p}{L} y) \sin(\frac{n_z p}{L} z)$$

Tunneleffekt

$$P = \frac{1}{1+G} \quad G = \frac{(e^{\frac{L}{D}} - e^{-\frac{L}{D}})^2}{4e(1-e)} \quad e = \frac{E}{V} \quad D = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$$

harmonischer Oszillator

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar v$ QZ:v=0,1,2...

$$N_v = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{p}\,2^v v!}} \quad y = \frac{x}{a} \quad a^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$$

anharmonischer Oszillator

$x_e = \frac{\tilde{n}}{4D_e}$ Dissoziationsenergie: $D_0 = D_e - \frac{1}{2}\hbar v_0$

$$\tilde{n}_0 = \frac{2p}{c}\sqrt{\frac{k}{m}} \quad w_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\Delta\tilde{n} = \tilde{n}_0[1 - 2x_e(v+1)]$$

raumfester Rotator

$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^{\,2}}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial}{\partial j^{\,2}}$ $\quad E = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$ $\quad I = mr^2$ Wellenfunktion: $\Phi(j) = \sqrt{\frac{1}{2p}}e^{im_e j}$

$m_l = \pm(1,2,3...)$

starrer Rotator

$\Upsilon(j, q) = S(q).\Phi(j)$

$S(q) = \left[\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|!)}{(l+|m|!)}\right]^{\frac{1}{2}}$ m= ± (1,2,3...) ; l=0,1,2,3

H-Atom

Energie: wie Bohr’sches Atommodell

$y_{n,l,m_l} = R(r).\Upsilon(q, j)$

$R_{1,0} = 2.(\frac{z}{a})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{2r}{a}}$ ansonsten siehe Atkins S 357, für Y Atkins S 344

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$|y|^2 dt = |R(r)|^2 |Y(q, j)|^2 r^2 \sin q dr dq dj$