Atom- und Quantenmechanik

V: (Mi + Do) $10 - 11^{30}$

Ü: 4 Gruppen 0.85 | 3.3.1 | 0.15 | 01.252-128

Fr $10^{15} - 11^{45}$, Start 28.10.

Mitschrift + Skript + Übungsaufgaben

www.chemistry.nat.fau.eu/ccc/groups/zahn-group

↳ Vorlesung

Einordnung: klassische und Quantenmechanik

mm	↑ makroskopische Welt:	klassische Mechanik
μm	↕ mesoskopische Welt:	weitgehend klassisch
nm 0,1 nm	↑ mikroskopische Welt:	quantenmechanische Phänomene

Quantenmechanik

- Quantelung von Meßwerten in diskrete Niveaus

  z.B. Energie -> Photoabsorption, Spektren, Farben

- Grundlegendes Verständnis vom Aufbau der Atome, Wechselwirkung / Bindung von Atomen

  -> Zusammenhalt von Molekülen und Kristallen

1. Klassische Mechanik

Galilei, Newton : Bewegung von Massen, Massenpunkten

- Kraft bewirkt Beschleunigung
- Beschleunigung bewirkt Gegenkraft (Trägheitskraft)

$$m \cdot a = k$$

Masse — Beschleunigung — Kraft

Beschleunigung

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

2.te Ableitung des Ortes nach der Zeit t

außerdem: Kraft $k = k(x)$: ortsabhängig

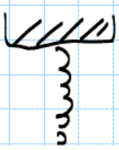
$$k(x) = -\frac{d}{dx} V(x)$$

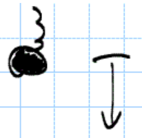
– erste Ableitung der potentiellen Energie nach dem Ort x

-> $m \cdot \ddot{x}(t) = k(x) = -\frac{d}{dx} V(x)$

=> Differentialgleichung 2. Ordnung

Bsp.: Der harmonische Oszillator





x : Auslenkung aus der Gleichgewichtslage

Rückstellkraft bei Auslenkung x einer Feder

$$K(x) = -k \cdot x \quad (k: \text{Materialkonstante der Feder})$$

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

$$m \cdot \ddot{x}(t) = K(x)$$

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

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

Lösungsansatz:

$$x(t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t + \delta)$$

$$\dot{x}(t) = A \cdot \cos(\omega \cdot t + \delta) \cdot \omega$$

$$\ddot{x}(t) = -A \cdot \sin(\omega \cdot t + \delta) \cdot \omega^2$$

Einsetzen:

$$-\cancel{A}\,\omega^2 \,\cancel{\sin(\omega t} + \delta) = -\frac{k}{m}\cdot \cancel{A}\cdot \cancel{\sin(\omega t} + \delta)$$

Eigenschaften: 1. muß für alle Zeiten t gelten (sin($\omega t+\delta$) kann heraus-gekürzt werden)

2. gilt für beliebige δ, A (kürzen sich heraus)

$$\Rightarrow \quad -\omega^2 = -\frac{k}{m}$$

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

: Schwingungsfrequenz ω ist <u>nicht</u> frei wählbar! Hängt von der Federkonstanten k und der Masse m ab.

Beispiel mit Anfangsbedingung:

für $t=0$ sei $x = 1\,\text{cm}$ und $\dot{x} = 0$

Einsetzen in $x(t) = A \sin(\omega t + \delta)$

$$\dot{x}(t) = A\omega \cos(\omega t + \delta)$$

$$\dot{x}(t=0) \overset{!}{=} 0 \quad \rightarrow \quad 0 = A\omega \cos(\omega \cdot 0 + \delta)$$

$$\hookrightarrow \quad \delta = \pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{3}{2}\pi, \dots$$

$$\Rightarrow \quad x(t) = A \cdot \sin\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) = A \cos(\omega t) \quad \text{für } \delta = \frac{\pi}{2}$$

$$x(t=0) \overset{!}{=} 1\,\text{cm} \quad \rightarrow \quad 1\,\text{cm} = A \cdot \cos(\omega \cdot 0)$$

$$\hookrightarrow \quad A = 1\,\text{cm}$$

$$\Rightarrow \quad x(t) = 1\,\text{cm} \cdot \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}} \cdot t\right) \qquad \left(\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}\right)$$