

Formelsammlung

Wichtige Gleichungen der PC II

Elektrochemie

$$R = \sigma \frac{\ell}{A}$$

$$L = \kappa \frac{A}{\ell}$$

$$\Lambda = \frac{\kappa}{c}$$

$$\Lambda_0 = \nu_+ \Lambda_{0+} + \nu_- \Lambda_{0-}$$

$$\Lambda_0 = \nu_+ z_+ u_{0+} F + \nu_- z_- u_{0-} F$$

$$\Lambda = \Lambda_0 - k\sqrt{c}$$

$$\Lambda = \nu_+ \Lambda_+ + \nu_- \Lambda_-$$

$$\Lambda_+ = z_+ u_+ F$$

$$\Lambda_- = z_- u_- F$$

$$K = \frac{\Lambda^2}{\Lambda_0 (\Lambda_0 - \Lambda)} [\text{HA}]_0$$

$$\alpha = \frac{[\text{HA}]_{\text{zerfallen}}}{[\text{HA}]_0}$$

$$\alpha = \frac{\Lambda}{\Lambda_0}$$

$$Q = n_i z_i F$$

$$I_+ = N_+ z_+ e \nu_+ A \text{ bzw. } I_- = N_- z_- e \nu_- A$$

$$\rightarrow I = I_+ + I_-$$

$$\kappa = (N_+ z_+ u_+ + N_- z_- u_-) e$$

$$I = \frac{Q}{t}$$

$$R = \frac{U}{I}$$

$$W_{\text{el}} = Q(\phi_2 - \phi_1) = QU = UIt$$

$$\Delta G = -zFE = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta G^\ominus = -zFE^\ominus$$

$$\Delta G^\ominus = -RT \ln K$$

$$E = E^\ominus - \frac{RT}{zF} \ln \prod_i \{c_i\}^{\nu_i}$$

$$E = \frac{RT}{zF} \ln \frac{\{c_1\}_1}{\{c_2\}_2}$$

σ = spezifischer Widerstand

$\frac{1}{\sigma} = \kappa$ = spezifische Leitfähigkeit

Λ = molare Leitfähigkeit

1. Kohlrausch'sches Gesetz

2. Kohlrausch'sches Gesetz

Λ_0 = Grenzleitfähigkeit

u = Beweglichkeit

Oswald'sches Verdünnungsgesetz

Dissoziationsgrad

Faraday Gesetz

Ohm'sches Gesetz

elektrische Arbeit

Nernst'sche Gleichung

Konzentrationszelle

$$\{c_i\} = \frac{c_i}{c^\ominus}, \{a_i\} = \frac{a_i}{a^\ominus}, \{p_i\} = \frac{p_i}{p^\ominus}$$

$$\Delta\varphi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[]_1}{[]_2}$$

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2}$$

$$W = \int_{\infty}^r F dr = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{dr}{r^2} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$F(\text{Materie}) = \frac{F(\text{Vakuum})}{\epsilon_r}$$

$$\varphi = \frac{E_{\text{pot}}}{Q_1}$$

relative Konzentration/Aktivität/Partialdruck

Membranpotential

Coulomb'sches Gesetz

elektrisches Potential

Debye Hückel

$$a_i = f_i x_i$$

$$f_{\pm}^v = (f_+^{v+} f_-^{v-})$$

$$m_{\pm}^v = (m_+^{v+} m_-^{v-}) \quad v = v_+ + v_-$$

$$a_s = a_{\pm}^v = (m_{\pm} f_{\pm})^v = (v_+^{v+} v_-^{v-}) m_s^v f_{\pm}^v$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_i z_i^2 c_i$$

Aktivität

f_i = Aktivitätskoeffizient

$f_{\pm}$ = mittlerer Aktivitätskoeffizient

$m_{\pm}$ = mittlere Ionenkonzentration

$a_{\pm}$ = mittlere Aktivität

Ionenstärke

Quantenmechanik

Schwarzer Strahler

$$\rho = \frac{Q}{V}, \left(\frac{d\rho}{dv} \right) = \rho_v, \left(\frac{d\rho}{d\lambda} \right) = \rho_{\lambda}$$

$$\rho(v) = \frac{dZ}{V} \bar{\epsilon} = \frac{8\pi v^2}{c^3} kT$$

$$\rho(v) dv = \frac{8\pi v^2}{c^3} \frac{hv}{\exp\left(\frac{hv}{kT}\right) - 1} dv$$

$$Z = 8 \frac{V}{\lambda^3} \left(\frac{\pi}{3} \right)$$

$$c = v\lambda$$

$$\Phi = \frac{dQ}{dt} = \frac{\text{Energie}}{\text{Zeit}}$$

$$M = \frac{d\Phi}{dA}$$

$I \Rightarrow$ siehe Lambert Beer

$$M = \frac{1}{4} cbT^4 = \sigma T^4$$

ρ = Strahlungsdichte

ρ_v = spektrale Strahlungsdichte

Rayleigh Jeans Gesetz

Planck Gesetz

Φ = Strahlungsleistung [W]

M = spezifische Ausstrahlung $\left[\frac{W}{m^2} \right]$

Intensität bei gebündelten Strahlen
Stefan Boltzmann Gesetz

$$\lambda_{\max} T = \text{const}$$

$$n\lambda = 2d \sin \theta_n$$

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Wiensches Verschiebungsgesetz

Bragg-Gleichung, n = Beugungsordnung

Compton-Effekt

Lichtelektrischer Effekt

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + W_A$$

$$h\nu = eU_{\max} + W_A$$

W_A = Austrittsarbeit

Massendefekt

$$\Delta m = \sum_i M_i \Delta n_i$$

$$E = mc^2$$

Bohr'sches Atommodell

$$|\vec{\ell}| = m v r = n \hbar$$

$$F_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$F_z = \frac{m v^2}{r}$$

$$r = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m e^2}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2}$$

$$E_{\text{ges}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{e^4 m}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -R \frac{1}{n^2}$$

$$E_2 - E_1 = -R \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = \frac{\Delta E}{hc}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Bohr'sche Bedingung, Drehimpulsquantelung

Zentripetalkraft/Coulomb-Kraft

Zentrifugalkraft

Radius allgemein

Bohr'scher Radius (n=1)

Energie, R = 13.6 eV

De Broglie Wellenlänge

Lambert Beer

$$dI = -\alpha c I_0 dx, I = I_0 \exp(-\alpha c \ell), I = I_0 \cdot 10^{-\epsilon c \ell}$$

$$T = \frac{I}{I_0}$$

Transmission

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \epsilon c \ell, \quad \epsilon = \frac{\alpha}{2,303}$$

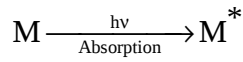
Absorbanz

$$I = \frac{E}{A t}, E = \sum \epsilon_i N_i = \sum h\nu_i N_i$$

Intensität

$$E = h\nu \sum N_i = h\nu N$$

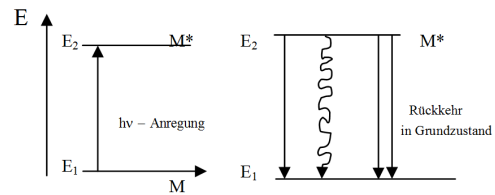
$$\varepsilon = h\nu, \quad c = \nu\lambda$$



$$E_2 - E_1 = h\nu$$

Wärme
Fluoreszenz
Photochemie
Energietransfer

für Laser



Quantenmechanik allgemein

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Schrödinger Gleichung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$$

V = Potentielle Energie

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + V$$

Δ = Laplace Operator

$$W = \int_0^V \psi^* \psi d\tau = 1$$

Normierungsbedingung

$$\frac{dW}{dr} = \psi^* \psi 4\pi r^2$$

radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\int_0^V \psi_1 \psi_2 d\tau = 0$$

Orthogonalitätsbedingung

$$\langle A \rangle = \int_0^V \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

Erwartungswert allgemein

$$\langle E \rangle = \int_0^V \psi^* \hat{H} \psi d\tau$$

Erwartungswert Energie

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = -i \hbar \frac{d}{dx}$$

Impulsoperator (eindimensional)

Teilchen im Kasten

Eindimensional:

$$\psi = D \sin(\alpha x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right)$$

Wellenfunktion

$$E = \frac{h^2}{8m\ell^2} n^2$$

Energie

Dreidimensional:

$$\psi = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Harmonischer Oszillator

$$F(\rho) = -f\rho$$

f = Kraftkonstante der Feder

ρ = Auslenkung

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

reduzierte Masse

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{f}{\mu}}$$

Kreisfrequenz

$$E = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

$$\Delta v = \pm 1$$

$$g_v = 1$$

v = Schwingungsquantenzahl

ν = Frequenz der Schwingung

Starrer Rotator

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

$$I = \sum_i r_i^2 \Delta m_i = \int r^2 dm$$

$$I = r_1^2 m_1 + r_2^2 m_2$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} I \omega^2$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

$$\Delta J = \pm 1$$

$$g_J = 2J+1$$

Schwerpunktsatz

Trägheitsmoment

bei 2-atomigem Molekül, r_1 und r_2 entsprechen den Abständen zum Schwerpunkt

kinetische Energie (klassisch)

J = Rotationsquantenzahl

Auswahlregel

Entartung

Wasserstoffatom

$$d\tau = dx dy dz = r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

$$E = -R \frac{1}{n^2}$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, +1, +2, \dots, +\ell$$

$$\ell_z = m_\ell \hbar$$

$$s = \frac{1}{2}$$

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$s_z = m_s \hbar$$

$$\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$$

$$j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|$$

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$$

Volumenelement in Kugelkoordinaten

mit $n = 1, 2, 3, \dots$ (Hauptquantenzahl)

Nebenquantenzahl (Drehimpulsquantenzahl)

Betrag des Bahndrehimpulses

magnetische Quantenzahl

z -Komponente des Bahndrehimpulses

Spinquantenzahl

Betrag des Eigendrehimpulses (Spin)

magnetische Spinquantenzahl

z -Komponente des Eigendrehimpulses

Gesamtdrehimpuls

Gesamtdrehimpulsquantenzahl

Betrag des Gesamtdrehimpulses

Mehrelektronensysteme

$$\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$$

$$\vec{S} = \sum \vec{s}_i$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$$

Gesamtbahndrehimpuls

Gesamteigendrehimpuls

Gesamtdrehimpuls

$$^{2S+1}L_J$$

$$M=2S+1$$

Termsymbol
Multiplizität

LCAO-Methode

$$\psi_{MO} = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i$$

$$\int \psi_A \hat{H} \psi_A d\tau \equiv H_{AA} \quad \int \psi_B \hat{H} \psi_B d\tau \equiv H_{BB}$$

$$\int \psi_A \hat{H} \psi_B d\tau \equiv H_{AB} \quad \int \psi_B \hat{H} \psi_A d\tau \equiv H_{BA}$$

$$\int \psi_A \psi_B d\tau = \int \psi_B \psi_A d\tau \equiv S$$

$$\langle E_+ \rangle = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}$$

$$\langle E_- \rangle = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

$$\langle E_+ \rangle = E_H^0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} + \frac{C + A}{1 + S}$$

$$\langle E_- \rangle = E_H^0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} + \frac{C - A}{1 - S}$$

Linearkombination von N Atomorbitalen

Überlappungsintegral

Ergebnis für homonukleares Molekül (H_2^+)

$$\alpha = H_{AA} = H_{BB}, \quad \beta = H_{AB} = H_{BA}$$

C = Energie durch Anziehung des Kerns auf das an Kern A lokalisierte Elektron

A = Zusätzlicher Beitrag zur elektrostatischen Wechselwirkung, wenn das Elektron zwischen den beiden Funktionen ψ_A und ψ_B austauschen kann

Unschärferelation

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$$