



Vorlesung PC II - Übersicht 7

Kinetik und Quantenchemie

Postulate der Quantenmechanik:

1) Der Zustand eines qm Systems wird durch die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ vollständig beschrieben.

Normierung der Wellenfunktion: $\int \Psi^* \cdot \Psi dv = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

2) Jede physikalische Eigenschaft wird durch einen Operator \hat{Q} beschrieben; zu jedem dieser Operatoren existiert ein orthonormierter vollständiger Satz von Basisfunktionen Ψ_o^i .

einige Operatoren :

$$\hat{x} \equiv x \cdot$$

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \begin{pmatrix} d/dx \\ d/dy \\ d/dz \end{pmatrix}$$

$$\hat{E}_{kin} \equiv -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left(d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2 \right)$$

$$\text{Orthonormalbedingung: } \int \Psi_o^{m*} \cdot \Psi_o^n dv = \langle \Psi_o^m | \Psi_o^n \rangle = \mathbf{d}_{mn}$$

Darstellung der Wellenfunktion
in dieser Basis

$$\Psi = \sum_n c_n \cdot \Psi_o^n = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \end{pmatrix}$$