



## Vorlesung PC II - Übersicht 9

### Kinetik und Quantenchemie

#### Postulate der Quantenmechanik (Fortsetzung):

5) Die Zeitentwicklung eines qm-Zustandes  $\Psi(t)$  wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung beschrieben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = \hat{H}(t) \Psi(t)$$

Hamilton-Operator  $\hat{H}(t) = \hat{E}_{kin}(t) + \hat{V}_{pot}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \equiv \text{Gesamt-Energieoperator}$

Eigenfunktionen zum Hamilton-Operator sind stationäre Zustände,

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:  $\hat{H}(t) \Psi_n(t) = E_n \cdot \Psi_n(t)$

#### **Heisenberg'sche Unschärfebeziehungen:**

Als Folge der Nichtvertauschbarkeit der Orts&Impulsoperatoren

(und genauso von Zeit&Energie-Operator) können Impuls und Ort eines qm-Systems nicht beliebig genau bestimmt werden:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\text{mit } \Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$