

Vorlesung PC II - Übersicht 10

Kinetik und Quantenchemie

Amwendungen:

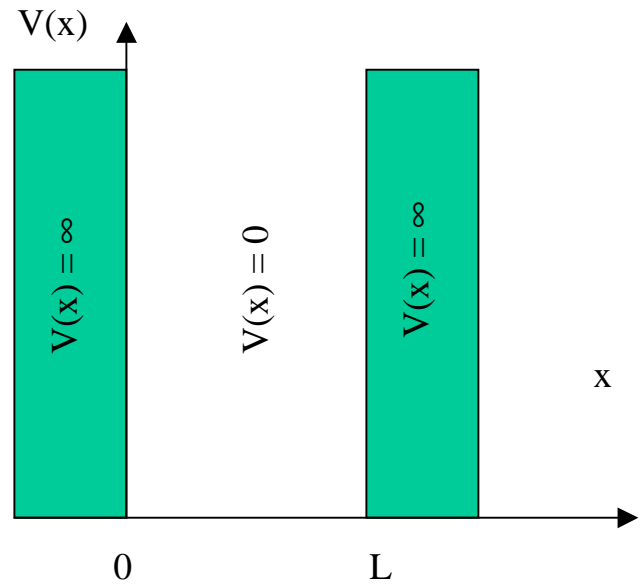
1) Teilchen in einem Potentialkasten:

1 dimensional:

Lösung der Schrödinger-Gleichung
(stationäre Zustände):

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 \cdot h^2}{8mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty)$$



2) Harmonischer Oszillator (Molekülschwingung):

Lösung der Schrödinger-Gleichung
(stationäre Zustände):

$$\Psi_n(x) = N_v \cdot H_v\left(x\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}\right) \cdot e^{-\frac{x^2\sqrt{mk}}{2\hbar}}$$

H_v : Hermit'sche Polynome

$$E_v = (v + \frac{1}{2}) \cdot \hbar \cdot \omega_{vib} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty)$$

$$\omega_{vib} = \sqrt{\frac{k}{m}} : \text{Schwingungsfrequenz}$$

