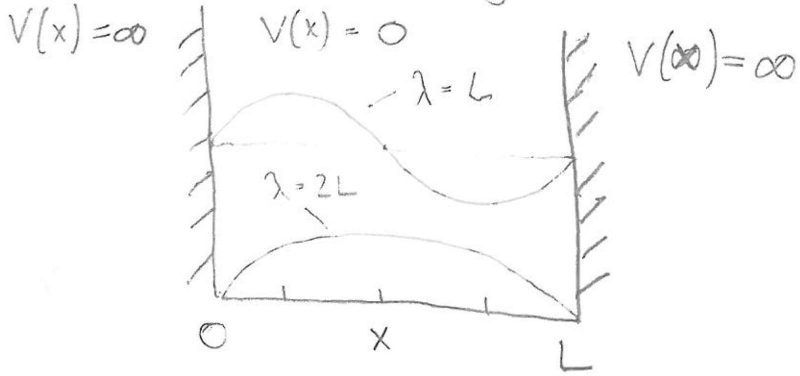
→ Moleküle können in den Freiheitsgraden Rotation, Translation und Schwingung speichern, diese Energie ist für die Eigenschaften der Moleküle von grundlegender Bedeutung!

Translation: Teilchen im Kasten

freie Bewegung: $V(x) = 0$ im Kasten von $x = 0$ bis $x = L$



$$\Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

(Gleichung im Kasten)

allgemeine Lösung

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Anwesenheit der Wände führt dazu, dass nur Lösungen möglich sind, deren Wellenlänge zwischen die Wände passt.
- Wellenfkt muss stetig sein und außerhalb des Kastens verschwinden

$\rightarrow \psi(x=0) = 0 \qquad \psi(x=L) = 0$

Lösungen, die den Randbedingungen gehorchen:

$\psi = N \cdot \sin kx \qquad$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\psi = N \sin \frac{2\pi}{\lambda} x$

Welche Wellenlängen sind erlaubt?

$\lambda = 2L, L, \frac{3}{2}L, \ldots$

$\lambda = \frac{2L}{n}$ mit $n \in \mathbb{N}$

$\Longrightarrow$ erlaubte Wellenfkt:

$$\psi = N \sin\left(\frac{n\,2\pi}{2L}x\right) = N \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Ermittlung der Normierungskonstante N:

Bornische Wahrscheinlichkeitsinterpretation
→ Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen im Kasten $0<x<L$ ist, ist 100%

$$\Rightarrow \int_0^L \psi^2 dx = 1$$

↳ nur 1D, nicht 3D, da wäre es dV

$$\Rightarrow N^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{\lambda}x\right) dx = 1$$

Auflösen nach N und das Integral lösen

Tip $\int \sin^2(ax)\,dx = \frac{1}{2}x - \frac{\sin(2ax)}{4a}$

$$1 = N^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{\lambda}\right) dx = N^2\left(\frac{1}{2}x - \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{4n\pi}L\right)\Bigg|_0^L$$

$$= N^2\left(\left(\frac{1}{2}L - L\,\overbrace{\frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}L\right)}{4n\pi}}^{=0}\right) - 0\right)$$

$$= \frac{1}{2}LN^2$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\Rightarrow \text{Wellenfkt: } \psi = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Energie durch Einsetzen in Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

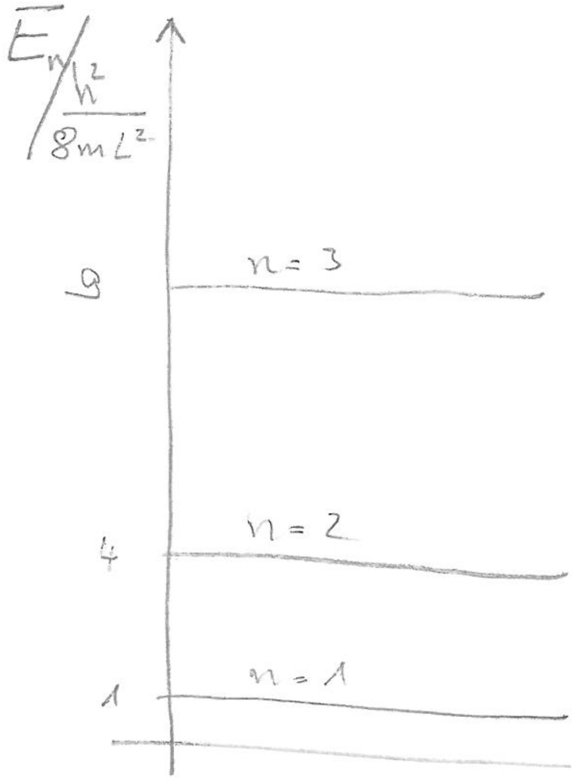
$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{n\pi}{L}\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

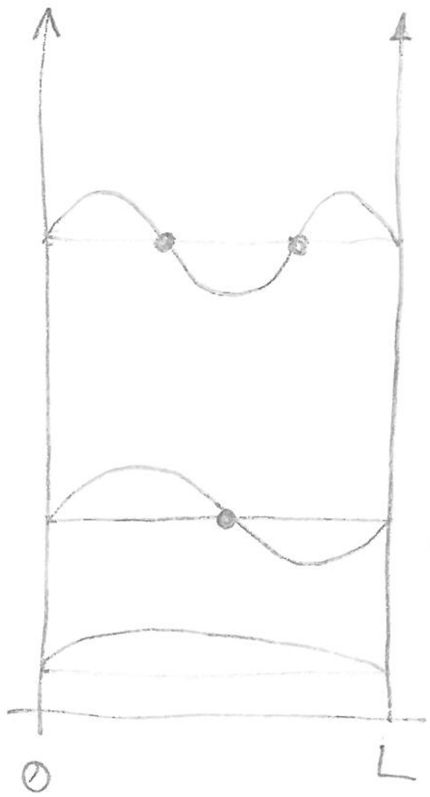
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\psi$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\cancel{\psi}\right) = E\cancel{\psi}$$

$$E = + \frac{h^2 n^2 \cancel{\pi}^2}{4\cancel{\pi}^2 \, 2 m L^2} = \frac{h^2 n^2}{8 m L^2}$$ mit $n \in \mathbb{N}$ als Quantenzahl

$\Longrightarrow$ Erlaubte Energieniveaus:





Knoten: Nulldurchgänge der Wellenfkt

Anzahl der Knoten: $n-1$

Besonderheit der Quantenmechanik im Vergleich zur klassischen Mechanik
Nullpunktsenergie (niedrigste Energie) $\neq 0$

$$E_{n=1} = \frac{h^2}{8 m L^2}$$

Energiedifferenz zwischen zwei Niveaus:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{(n+1)^2 h^2}{8mL^2} - \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

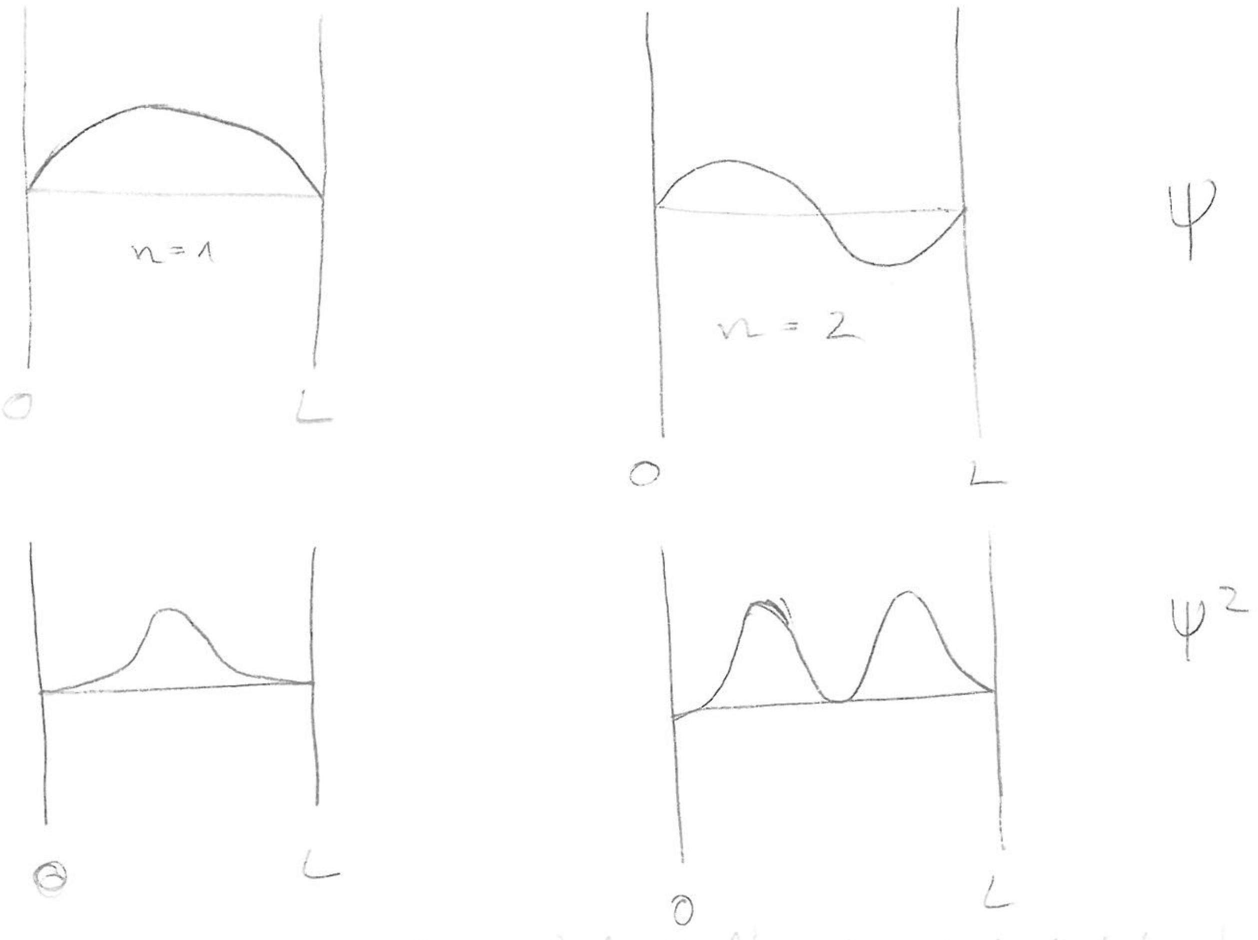
$$= \left(\cancel{n^2} + 2n + 1 - \cancel{n^2}\right) \cdot \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$= (2n+1)\,\frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\Delta E \sim \frac{1}{mL^2}$$

$\Longrightarrow$ Mit zunehmender Länge des Kastens bzw Masse des Teilchens wird ΔE geringer. Quantelung verschwindet für makroskopische Systeme

Wahrscheinlichkeitsdichte $\quad \psi^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$



Für $n \to \infty$ wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit kontinuös $\to$ Korrespondenzprinzip