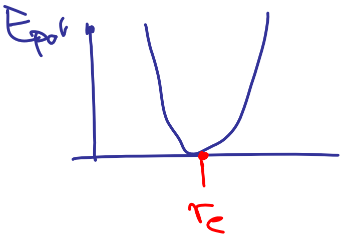
V5

Note Title

3. Schwingungsspektroskopie

1. Harmon. Oszillator



$$E_{pot} = \frac{1}{2}(r-r_e)^2 \cdot k \longrightarrow F = -\frac{\partial E}{\partial r} = -k(r-r_e)$$

$$[k] = N/m$$

$$\hookrightarrow \mu \cdot \frac{\partial^2 r(t)}{\partial t^2} = -k(r-r_e) \Longrightarrow r(t) = r_e + A \cdot \cos\sqrt{\frac{k}{\mu}} \cdot t$$

$\Rightarrow$ mit QM:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{1}{2}kx^2 \psi}_{V(x)} = E\psi \qquad \Big| \; x = r$$

$\hookrightarrow$ (1) Eigenwerte: $E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$

harm. Oszillator

- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$
- $\Delta E = \hbar\omega_0$

$(v = 0, 1 \dots)$

$\hookrightarrow$ (2) Auswahlregeln: $\Delta v = \pm 1$ und $\partial\mu/\partial t \neq 0$ (allg.)

$\hookrightarrow$ (3) $\psi_v(\gamma) = N_v \cdot H_v(\gamma) \cdot e^{-\gamma^2/2}$

$$\gamma = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \cdot x$$

$\hookrightarrow$ reduzierte Koordinate

Hermite'sche Polynome

$$\boxed{H_v(\gamma) = (-1)^v \cdot e^{\gamma^2} \cdot \frac{\partial^v}{\partial \gamma^v}\left(e^{-\gamma^2}\right)}$$

Zur Auswahlregel $\Delta v = \pm 1$

$$\psi_{v_i} \longrightarrow \psi_{v_f}, \quad |\vec{\mu}_{i \to f}| = \langle \psi_f | \hat{\mu} | \psi_i \rangle \neq 0$$

$$\mu(x) = \mu_{0\,(r=r_e)} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_0 \cdot x + \dots$$

$$\Leftrightarrow \quad \mu_{i\to f} = \underbrace{\mu_0 \langle \psi_f | \psi_i \rangle}_{=0} + \underbrace{\left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_0}_{\neq 0} \boxed{\langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle}$$

Wann ist dieser Term $\neq 0$?

$\psi_i \to H_{v_i}$

$$\Rightarrow \langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle \boxed{\cong} \langle \psi_f | x \cdot H_{v_i}(\gamma) \rangle$$

Rekursion: $H_v = \frac{1}{2\gamma}\left(H_{v+1} + 2v H_{v-1}\right)$

$$= \langle \psi_f | x \cdot \frac{1}{2\gamma} \cdot \left(H_{v_i+1} + 2v_i H_{v_i-1}\right) \rangle$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \langle \psi_f | \left(H_{v_i+1} + 2v_i H_{v_i-1}\right) \rangle$$

$$\boxed{\cong} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \cdot \left(\underbrace{\langle \psi_f | \psi_{i+1} \rangle}_{} + 2v_i \underbrace{\langle \psi_f | \psi_{i-1} \rangle}_{} \right)$$

$\neq 0$, wenn $v_f = v_{i+1}$

$\neq 0$, wenn $v_f = v_i - 1$

$$\boxed{v_f = v_i \pm 1 \Leftrightarrow \Delta v = \pm 1}$$

Anmerkungen zu ψ_v

- für große $v \longrightarrow |\psi_v|^2$ maximal am Rand der Potentials $\Rightarrow$ Korrespondenzprinzip
- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, $\Delta E = \hbar\omega_0$
- $r_{eq} = \text{const}$
- $|\psi_v|^2 \neq 0$ außerhalb von $V(x)$ $\Rightarrow$ Tunneleffekt