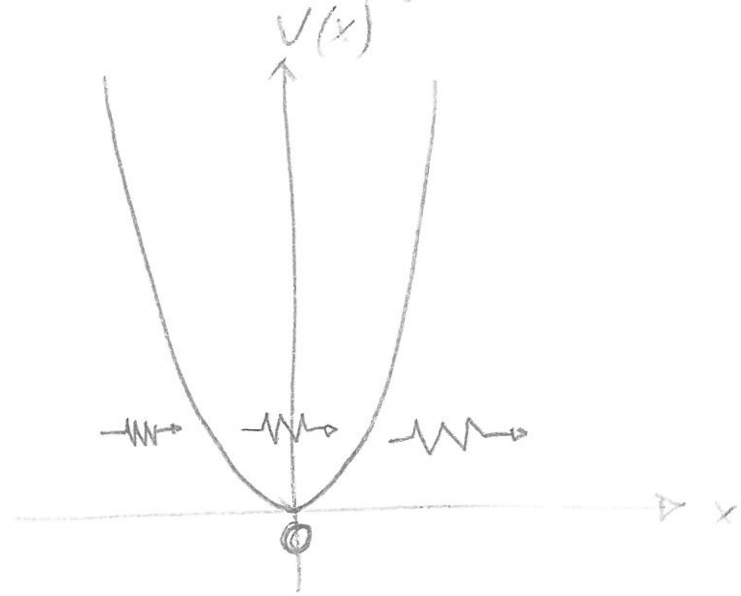
Schwingung: Der harmonische Oszillator (ungedämpft)

"Translation, die durch eine Feder begrenzt wird, die dem Hooke'schen Gesetz gehorcht"

$F(x) = -D \cdot x$ Rückstellkraft, prop zur Auslenkung

$\Rightarrow V(x) = \frac{1}{2} D x^2$ Potentielle Energie eines Teilchens auf das solche Kraft wirkt



Auslenkung
Ruhelage = 0

Schrödinger Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} D x^2 \psi = E\psi$$

Lösung:

$\psi = N \cdot (\text{Polynom in } x) \cdot (\text{Glockenförmige Gauss-Fkt})$

$$\psi_v = N_v H_v(y) e^{-y^2/2} \qquad y = x \underbrace{\left(\frac{mD}{\hbar^2}\right)^{1/4}}_{\text{konstanter Faktor}}$$

$H_\nu(y)$: Hermitisches Polynom (Differentialgleichungen)

ν	$H_\nu(y)$
0	1
1	$2y$
2	$4y^2 - 2$

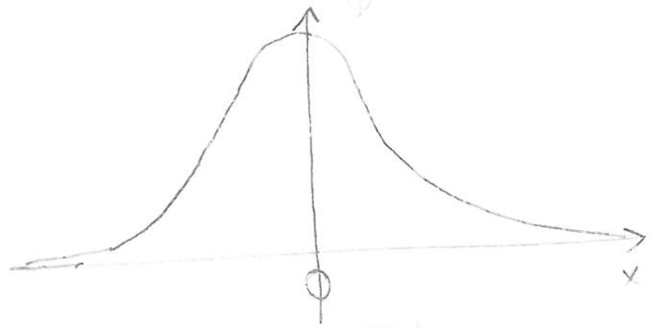
} durch Rekursion bestimmbar
(Verfahren, wo man eine Funktion auf einfacher Fkt. zurückführt, vgl. Reihenentwicklung)

$$N_\nu = \frac{1}{(\alpha \pi^{1/2} 2^\nu \nu!)^{1/2}} \quad \text{mit } \alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mD}\right)^{1/2}$$

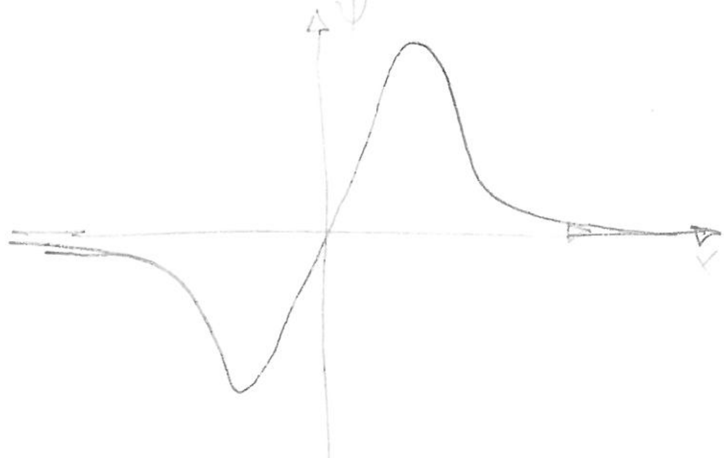
$\Longrightarrow$ Normierungskonstante von der Wellenfkt abhängig

$$N_0 = \frac{1}{\alpha^{1/2} \pi^{1/4}}$$

$$\Psi_0 = N_0 \cdot 1 \cdot e^{-y^2/2} \qquad \Psi_1 = N_1 \, 2y \, e^{-y^2/2}$$

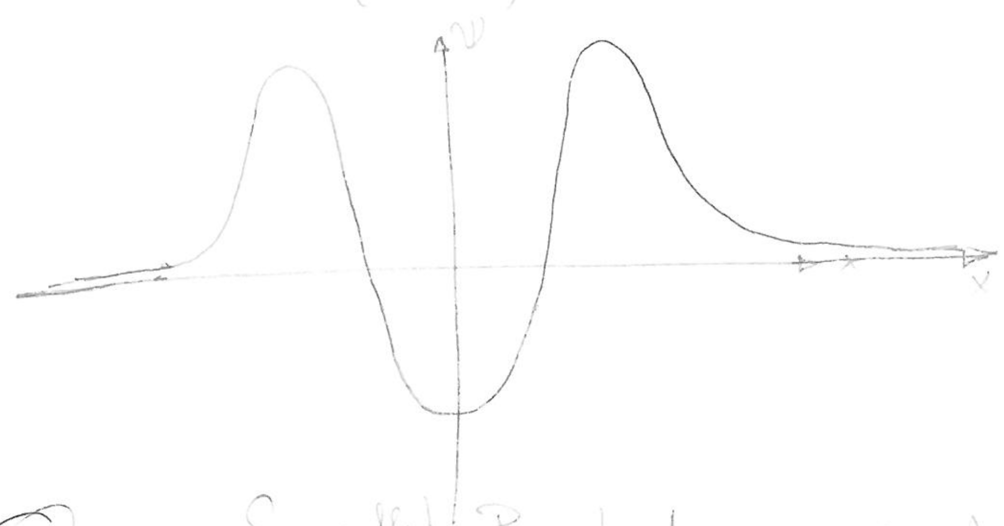


Gauss-Fkt



Gaussfkt Gerade

$$\Psi_2 = N_2 \left(4y^2 - 2\right) e^{-y^2/2}$$



Gaussfkt Parabel $\Longrightarrow$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit Ψ^2

→ Einsetzen der Wellenfkt liefert erlaubte Energiezustände

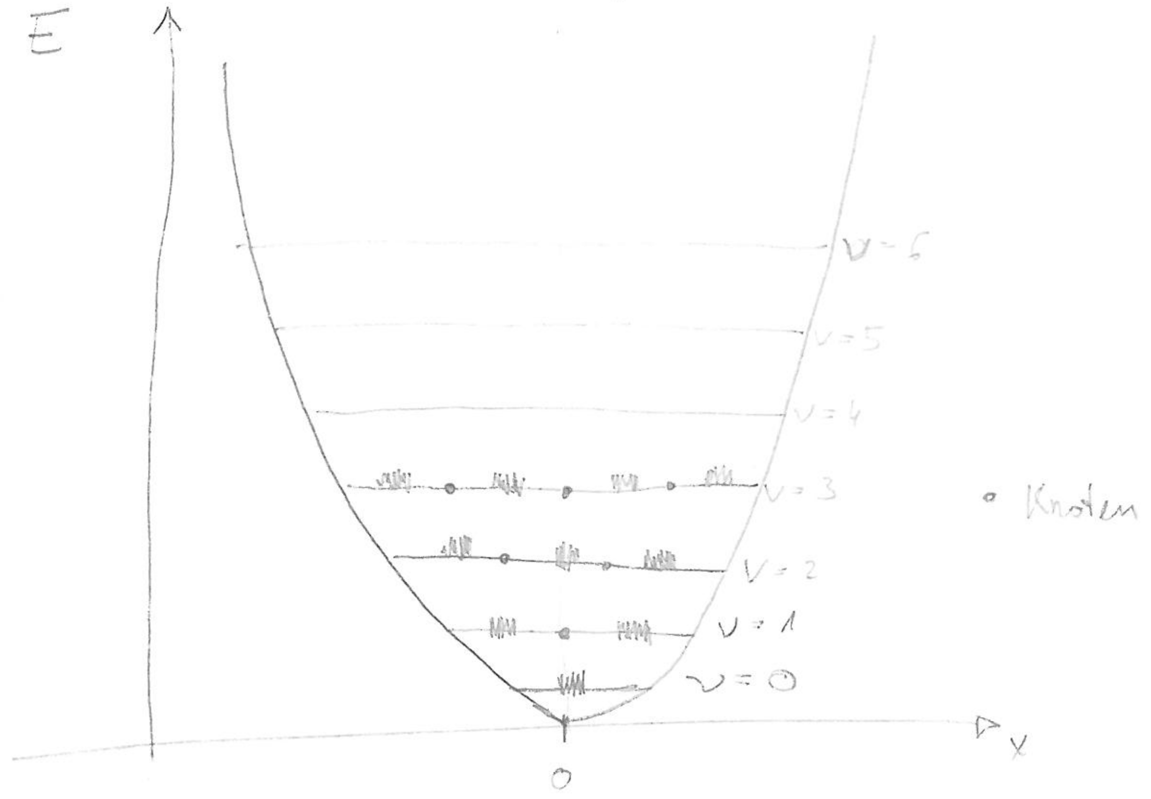
$$E_v = h\nu\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad \text{mit } v = 0, 1, 2, \ldots$$

↳ Schwingungsquantenzahl

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{D}{m}\right)^{1/2}$$

Frequenz

↳ Niveaus äquidistant mit $\Delta E = h \cdot \nu$



Für große Massen und weiche Federn werden die Abstände klein → klassische Mechanik

Mit steigendem v verschiebt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte in Richtung der klassischen Umkehrpunkte der Schwingung

<u>Bsp:</u> HCl Gas (Cl sei stationär) $D = 516\ \text{N m}^{-1}$

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{D}{m}\right)^{1/2} = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{516\ \text{N m}^{-1}}{1.67 \cdot 10^{-27}\ \text{kg}}\right) = 8.85 \cdot 10^{13}\ 1/\text{s}$$

$$E = h \cdot \nu = 5.86 \cdot 10^{-20}\ \text{J} = 0.366\ \text{eV}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 3.36 \cdot 10^{-6}\ \text{m} \quad (\text{IR})$$