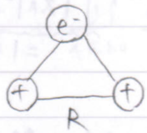
4.8 二原子分子の振動

▷ 復習

Born-Oppenheimer 近似

原子核の核間距離Rを固定して
電子の波動関数を考える。

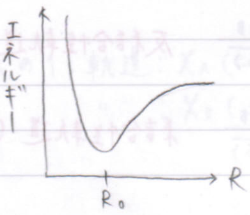


↕

実際にはRは変化する

モース
Morse ポテンシャル ⟶

$V(R) = D\left(1 - e^{-\beta(R-R_0)}\right)^2$



問4-2. 振幅の小さい運動を考えたとき $x \equiv R - R_0$ とおいたら $V(x) \propto x^2$ となることを示せ。

古典的な調和振動子
cf. $V(x) \propto x^2$

▷ ハミルトニアン

○ ポテンシャルエネルギーを $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ とおくと

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

注 mは、二原子分子の場合
換算質量 μ

▷ Schrödinger 方程式は

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi = E\psi$$ ⇐ エルミート多項式の解がψだが
今回はそんなことは知らなくてよいそうです
(数学っぽいなぁ)

↓ 天下り的に…

$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu$ のときのみ有限な解をもつ。

ただし $\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$, $n = 0, 1, 2, \cdots$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}}\right)\underbrace{H_n(t)}_{\text{Hermite多項式}}\exp\left(-\frac{1}{2}t^2\right) \quad \left(\begin{array}{l}\alpha = 4\pi^2 m\frac{\nu}{h}\\ t = \alpha x\end{array}\right)$$

問4-3 基底状態 ($n=0$) について Δx と Δp の積を計算し、Heisenberg の不確定性の式と比べよ。

"最小に不確定"になる