2.

a) $\hookrightarrow$ EW: $E_{n0} = -V_0 + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

b) $\underline{l=0}$

Grundzustand des harmonischen Oszillators

$$u_{n0}(r') = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2} \quad , r' = r - r_b$$

mit charakteristischer Breite

$$\Delta r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

Entwicklung zur 3. Ordnung

$$V(r) = -V_0 + a(r-r_b)^2 + b(r-r_b)^2$$
$$= -V_0 + a\Delta r^2 + b\Delta r^3$$

es muss gelten $b < 0$ damit:

$V \to \infty$, $r \to 0$
$V \to 0$, $r \to \infty$

quadratische Näherung

$$|a|\Delta r^2 \gg -|b|\Delta r^3 \Rightarrow -\left|\frac{a}{b}\right| \gg \Delta r$$

c) $\underline{l \neq 0}$

$$V_c(r) \hat{=} V_c(r_b) \quad \text{d.h.} \quad V_c(r_b) \ll E_{n+1, r_b} - E_{n, r_b}$$

$$V_c(r_b) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_b^2}$$

Betrachte Änderung von ΔE für
$r = r_b \longrightarrow r = r_b + \varepsilon$; $\Delta V \simeq \left|\frac{\partial V}{\partial r}\right| \Delta r$

- „reines" Molekülpotential

$$\Delta V \text{ 3a} \cdot \Delta r^2 = \frac{\mu\omega^2}{2} \Delta r^2 = \frac{\mu}{2} \omega^2 \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\Delta r^2}{\Delta r_b^2}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\Delta r^2}{\Delta r_b^2}$$

- Zentrifugalpotential

$$\Delta V_c \simeq \frac{\partial}{\partial r}(V_c)\, \Delta r = \frac{2l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_b^2} \Delta r$$

$$= \frac{2V_c(r_b)}{r_b} \Delta r \ll 2\hbar\omega \frac{\Delta r}{r_b}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\Delta V_c}{\Delta V} << \frac{4\Delta r}{r_b \Delta r^2} \Delta r_0^2 \underset{\Delta r \leq \Delta r_b}{<} \frac{4\Delta r_b}{r_b} \underset{\Delta r_0 << r_0}{<<} 1$$

$\Rightarrow$ ΔV_c viel kleiner als ΔV $\rightarrow V_c(r) \approx V_c(r_b)$

d) $V_c(r) \approx V_c(r_b)$

$\Rightarrow$ Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_r^2 + V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r_b^2}\right)u_{n\ell}(r) = E_{n\ell}u_{n\ell}(r)$$

$$\overset{\Delta r = r - r_b}{\underset{\partial_r^2 \to \partial_{\Delta r}^2}{\Longleftrightarrow}} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_{\Delta r}^2 + a\Delta r^2\right)u_{n\ell}(\Delta r + r_b)$$

$$= \left(E_{n\ell} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r_b^2} + V_0\right)u_{n\ell}(\Delta r + r_b)$$

$\Rightarrow$ harmonischer Oszillator: EW

$$E_{n\ell} = \underbrace{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}_{\text{Vibrationsenergie}} + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r_b^2}}_{\text{Rotationsenergie}} - \underbrace{V_0}_{\text{Bindungsenergie}}$$