

χ -Oszillator

Dipl.- Ing. Björnsterne Zindler, M.Sc.

www.Zenithpoint.de

Erstellt: 01. August 2003 – Letzte Revision: 1. September 2020

Inhaltsverzeichnis

1	Was ist eine Konstante?	3
2	Die (In)Varianz des intrinsischen Faktors	7
3	Definition der Funktion als Potential	11
4	Definition des Potentials als Oszillator	17
5	Ein Abstecher zum Morsepotential (μ-Potential)	21
6	Die Anharmonizität χ	25
7	Einfluss der Werte q und p	31
8	Der Zusammenhang zwischen χ und einer Quantelung n	35
9	Schrödinger-Gleichung und Freies Teilchen	37
10	Schrödinger-Gleichung und Harmonisches Potential	43
10.1	Ermittlung der Verteilung $\phi(q)$	43
10.2	Ermittlung der Potentialstufen	45
10.3	Die H -Polynome	49
11	Schrödinger-Gleichung und μ-Potential	57
11.1	Ermittlung der Verteilung $\phi(p)$	57
11.2	Ermittlung der Potentialstufen	60
11.3	Die z -Polynome	66

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

1 Was ist eine Konstante?

Es sei vorweg genommen, hier soll nur die physikalische Konstante betrachtet werden. Konstanten, [001]ff. welche in mathematisch formulierten Naturgesetzen vorkommen und dort als Proportionalitätsfaktor verschiedene physikalische Größen synchronisieren, in Relation setzen.

Der Begriff des Naturgesetzes ist ein arg strapazierter Begriff, nicht nur Streitpunkt, ob oder wann es eines ist und wenn, gibt es denn überhaupt solche oder sind es nur Hilfskonstrukte.

Nun, geht man davon aus und es muss irgendwo ein Anfang geben, dass unsere Beobachtung der Natur eine Regelmäßigkeit erkennen lässt, die zufällig unter bestimmten Randbedingungen und zum betrachteten Zeitpunkt gültig ist, kann man diese als eine mathematische Funktion - Regel beschreiben. Die Regel, welche eine Aufforderung, Anweisung oder Anleitung darstellt, um gewisse Operationen durch zu führen. Dabei soll a ein intrinsischer Faktor einer wahrscheinlich regelmäßigen Erscheinung in der Natur sein. Dieser Faktor wird dazu genutzt, um die Entwicklung einer Erscheinung beschreiben zu können, er wird des weiteren als Hilfspunkt betrachtet, auf dessen Strahl weitergegangen wird und verschiedene Betrachtung durchgeführt werden. Solch ein Faktor kann die Zeit t sein aber auch andere Größen in einem betrachteten System. So soll gelten:

$$b = f(a)$$

Als b wird das Ergebnis beschrieben, was die Regel, der Operator f aus unserem intrinsischen Faktor a erzeugt. Eine willkürlich, für vorliegenden Fall interessante Regel wird gewählt:

$$x = e^{-t}$$

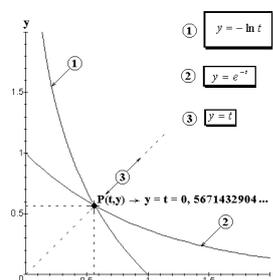
Die einfachste Form eines exponentiellen Wachstums.

Wahrlich kein grandioses Naturgesetz, ohne Konstanten. Der intrinsische Faktor ist t die Zeit. Es eine Wachstumsregel, lediglich eine von vielen. So soll für eine zweite gelten:

$$y = -\ln t$$

Wiederum, das einfachste logarithmische Wachstum. Beide Regeln sind subjektiv gewählt, gleichzeitig miteinander verwandt, ist das kein Schwachpunkt. Es soll lediglich gezeigt werden, Konstanten sind das Produkt des Arrangement spezieller Regeln.

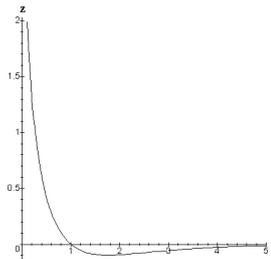
Beide Regeln werden grafisch dargestellt:



Kommt es nun zu einer Beobachtung, welche beide Regeln durch einen Operator verknüpft, erscheinen beide Wachstumsregeln als gemeinsam wirkend in Erscheinung. So soll hier multiplikativ verknüpft werden:

$$z = -e^{-t} \ln t$$

Dritte Regel als Abbild:



Die nun neue Eigenschaft dritter Regel ist es, dass diese konvergiert für ein fortschreitendes t , jedoch an der Stelle $t = 0$ einen unendlichen Wert besitzt.

Zwar kann man jetzt annehmen, dass die Beobachtung von z einen konstanten Wert für ein unendliches t angenommen hat und als Konstante sich dem Beobachter darstellt. Aber, solange in der Berechnungsgrundlage die Zeit t enthalten ist, ist z nicht von dieser unabhängig, also konstant.

Eine vierte Regel soll diesen Mangel beseitigen, diese, dass die Beobachtung nicht direkt z uns erkennen lässt, sondern die aufsummierte, integrierte Wirkung für ein sehr langes t , also:

$$\int_0^{+\infty} z dt = - \int_0^{+\infty} e^{-t} \ln t dt$$

⇒

$$\int_0^{+\infty} z dt = \gamma$$

Damit ist der intrinsische Faktor t verschwunden und das Ergebnis beinhaltet eine Konstante, hier γ , die Euler- Mascheroni- Konstante:

$$\gamma = 0,577215\dots$$

Konsequenz des Verlustes von t , dem intrinsischen Faktor ist es, dass die zu Grunde gelegten Regeln nicht mehr rekonstruierbar, erkennbar sind.

Kurzum:

- Eine Naturkonstante ist der Spezialfall eines Zusammenwirkens von Regeln, nachdem sich die Natur zufällig gerade verhält (eben zum betrachteten Zeitpunkt mit den wirkenden Randbedingungen).
- Eine Naturkonstante ist maskiert, es lässt nicht die zu Grunde gelegten Regeln wieder erkennen (elementare (Natur)Konstante, hier γ).
- Eine Naturkonstante ist doppelt maskiert, es kann auch andere Konstanten beinhalten (abgeleitete (Natur)Konstanten, z. B. p und q), welche durch die Regeln sich, ohne zu ändern, durchschleusen, jedoch gleichzeitig den Definitionsbereich festlegen können $\ln(p) \rightarrow p > 0$; $\ln(q) \rightarrow q > 0$, sind aber nicht direkt erkennbar.

$$x = pe^{-qt} \quad \leftrightarrow \quad y = -\frac{1}{q} \ln \frac{t}{p}$$

⇒

$$z = -\frac{p}{q} e^{-qt} \ln \frac{t}{p}$$

⇒

$$\int_0^{+\infty} z dt = -\frac{p}{q} \int_0^{+\infty} e^{-qt} \ln \frac{t}{p} dt$$

⇔

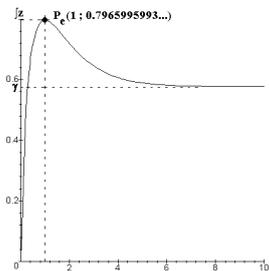
$$\int_0^{+\infty} z dt = -\frac{1}{q} (\ln q + \ln p + \gamma)$$

Weiterhin:

- Je nachdem, welche Größe der intrinsische Faktor darstellt, ist eine Konstante mehr oder weniger eben nicht konstant, so zum Beispiel, weil t noch recht weit vom Unendlichen entfernt ist.
- Die Konstante manifestiert sich, sie wird nicht mehr variabel, solange sich die Regeln und damit Verbundenes ändert.
- Die Konstante war ursprünglich, also kurz nach hier $t = 0$ nicht konstant sondern eine Variable:

$$\int_0^t z dt = - \int_0^t \ln t e^{-t} dt$$

⇒



- Zum Zeitpunkt $t = 0$ existiert die zukünftige Konstante mit dem Wert 0.
- Bildung zu einem Extrema, welches für einen kurzen Zeitpunkt konstant ist.
- Bildung zur eigentlichen Konstante.
- Vor dem Extrema und begrenzt nach dem Extrema ist die spätere Konstante variabel.

2 Die (In)Varianz des intrinsischen Faktors - Punkteigenschaften der Integrale und Differentiale

Nochmals sollen die beiden erstgewählten Regeln betrachtet werden, diesmal jedoch in der Form: [001]

$$y = e^{-(t+c)}$$

Und:

$$y = -(\ln t + c)$$

⇒

$$z = -e^{-(t+c)} (\ln t + c)$$

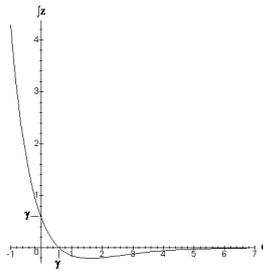
⇒

$$\int_0^{\infty} z dt = - \int_0^{\infty} e^{-(t+c)} (\ln t + c) dt$$

⇒

$$\int_0^{\infty} z dt = e^{-c} (\gamma - c)$$

Die erweiterte Regel z graphisch dargestellt:



Der intrinsische Faktor, hier die Zeit, ist nicht variant gegenüber einer Verschiebung, hier vertreten durch c . Für negative Werte von c steigt das Ergebnis der Mascheroni-Konstante in unendliche Größen, bei Verschiebungen in positive Richtungen geht diese gegen den Wert 0.

Das Integral der Funktion besitzt einige interessante Punkteigenschaften, so gilt:

$$c = 0 \rightarrow \int z dt = \gamma \quad c = \gamma \rightarrow \int z dt = 0$$

Für die n -te-Ableitung mit $n \in \mathbb{N}_0$:

$$z^{(n)} = e^{-c} (n + \gamma - c) (-1)^n$$

Der Wert für c für den Fall $z^{(n)} = 0$:

$$0 = e^{-c} (n + \gamma - c) (-1)^n$$

⇒

$$c_n = \gamma + n$$

Der dazugehörige Funktionswert:

$$\int_0^{\infty} z_n dt = e^{-(\gamma+n)} (-n)$$

Für spezielle n gilt somit:

n	c_n	$\int z_n dt$	Typ
0	$\gamma + 0 \approx 0,577215\dots$	$-0 \cdot e^{-(\gamma+0)} \approx -0,000000\dots$	Nullstelle
1	$\gamma + 1 \approx 1,577215\dots$	$-1 \cdot e^{-(\gamma+1)} \approx -0,206549\dots$	Extremstelle
2	$\gamma + 2 \approx 2,577215\dots$	$-2 \cdot e^{-(\gamma+2)} \approx -0,151970\dots$	Wendestelle

Die Lösung des Integrals von z_n ist eine Modifikation der Lambertschen W- Funktion.

Interessant ist der Fakt, dass der Wert c_n gequantelt ist, ein Wert n weiter induziert einen anderen Typ von $\int z_n dt$.

Zusammengefasst:

- Die Konstante ist nicht invariant gegenüber der Verschiebung des intrinsischen Faktors.
- Verschiebt sich der intrinsische Faktor mehrmals mit gleicher Schrittlänge ergeben sich verschiedene Typen und Werte von Konstanten obwohl diese gleichen Ursprungs sind.

Was für die Ableitung gilt, ist auch für das Integral exakt, für $n \in \mathbb{N}$:

$$\int_{c_n}^{\infty} \dots \int_{c_3}^{\infty} \int_{c_2}^{\infty} \int_{c_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = e^{-c_n} (\gamma - c_n - n)$$

Für den hier relevanten Fall gilt dann:

$$\int_{0_n}^{\infty} \dots \int_{0_3}^{\infty} \int_{0_2}^{\infty} \int_{0_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = (\gamma - n)$$

Die Nullstelle:

$$0 = e^{-c_n} (\gamma - c_n - n)$$

⇒

$$c_n = \gamma - n$$

Schnittpunkt mit der y -Achse → $c_n = 0$:

$$\gamma - n$$

Das erste Integral von $\int z dt$:

n	c_n	$\int z_n dt$	Typ
1	$\gamma - 1 \approx -0,422786\dots$	$\gamma - 1 \approx -0,422786\dots$	Flächenintegral

Die Quantelung von c_n setzt sich somit kontinuierlich fort.

In Bezug zu c_n , der Nullstelle:

Differential	$c_n = \gamma + n$	$n \in \mathbb{N}$
Grundfunktion	$c_n = \gamma$	
Integral	$c_n = \gamma - n$	$n \in \mathbb{N}$

Beachtet man noch die Werte q und p :

Differential	$c_n = \frac{1}{q} (\ln p + \ln q + \gamma + n)$	$n \in \mathbb{N}$
Grundfunktion	$c_n = \frac{1}{q} (\ln p + \ln q + \gamma)$	
Integral	$c_n = \frac{1}{q} (\ln p + \ln q + \gamma - n)$	$n \in \mathbb{N}$

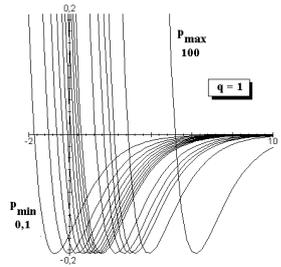
Für keinen Wert von $p > 0$ und/oder $q > 0$ kann die Quantelung aufgehoben werden:

$$c_{n+1} - c_n = 0$$

Es soll zusammengefasst werden.

$$\int_0^{\infty} z dt = \frac{pe^{-qc}}{q^2} (\ln p + \ln q + \gamma - qc)$$

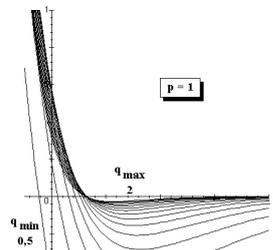
Der Einfluss von p soll graphisch dargestellt werden:



Dabei ist in der Graphik dargestellt:

$$p = \left\{ \begin{array}{l} 0, 1; 0, 2; 0, 3; 0, 4; 0, 5; 0, 6; 0, 7; 0, 8; 0, 9 \\ 1; 2; 3; 4; 5 \\ 10; 100 \end{array} \right\}$$

Der Einfluss von q soll graphisch dargestellt werden:



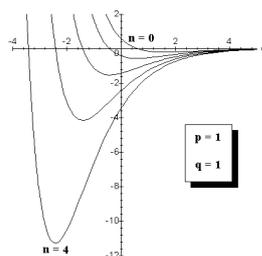
Dabei ist in der Graphik dargestellt:

$$q = \{0, 5; 0, 6; 0, 7; 0, 8; 0, 9; 1, 0; 1, 1; 1, 2; 1, 3; 1, 4; 1, 5\}$$

Wird die Integration verallgemeinert im Intervall Nullstelle - c_n nach $+\infty$:

$$\int_{c_n}^{\infty} \dots \int_{c_3}^{\infty} \int_{c_2}^{\infty} \int_{c_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = \frac{p}{q^{n+2}} e^{-q \cdot c_n} (\ln p + \ln q + \gamma - qc_n - n)$$

Der Einfluss von n soll graphisch dargestellt werden:



Zusammenfassung:

- Nullstellen:

$${}_0c_n = \gamma - n$$

- Schnittpunkt y- Achse:

$${}_y c_n = \gamma - n$$

- Minimum:

$$P_E \left(\gamma - n + 1; (-1) e^{-(\gamma - n + 1)} \right) \rightarrow P_E \left(c_n + 1; (-1) e^{-(c_n + 1)} \right)$$

- Wendestelle:

$$P_W \left(\gamma - n + 2; (-2) e^{-(\gamma - n + 2)} \right) \rightarrow P_W \left(c_n + 2; (-2) e^{-(c_n + 2)} \right)$$

- Flächenintegral:

$$\int_{0_n}^{\infty} \dots \int_{0_3}^{\infty} \int_{0_2}^{\infty} \int_{0_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = (\gamma - n - 1) = (c_n - 1)$$

- Folgendes Integral:

$$\int_{0_{n+1}}^{\infty} \int_{0_n}^{\infty} \dots \int_{0_3}^{\infty} \int_{0_2}^{\infty} \int_{0_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n d_{n+1} = (\gamma - n - 2) = (c_n - 2)$$

3 Definition der $\int_{c_n}^{\infty} \dots \int_{c_3}^{\infty} \int_{c_2}^{\infty} \int_{c_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n$ -Funktion als Potential - Ermittlung der Eigenfrequenzen eines Harmonischen Oszillator

Was liegt näher, gegebene Funktion als Potential zu erklären. Dazu wird zuerst die einfache Form mit $q = 1$ und $p = 1$ betrachtet: [001]

$$\int_{c_n}^{\infty} \dots \int_{c_3}^{\infty} \int_{c_2}^{\infty} \int_{c_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = \Psi(c_n, n) = e^{-c_n} (\gamma - c_n - n)$$

Nachteil dieser (jetzt) Potentiale ist es, dass das Minimum nicht durch den Koordinatenursprung verläuft und somit eine inhomogene Bewegungsgleichung erzwingt. Da jedoch das Minimum selbst einer starken Regelmäßigkeit folgt, lässt sich Ψ leicht (hier) auf den Punkt (0;0) zentrieren, so gilt:

$$P_E(\gamma - n + 1; (-1) e^{-(\gamma - n + 1)}) \leftrightarrow P_E(x; (-1) e^{-x})$$

⇒

$$P_E : y = -e^{-x}$$

⇒

$$c_n = \gamma - n + 1$$

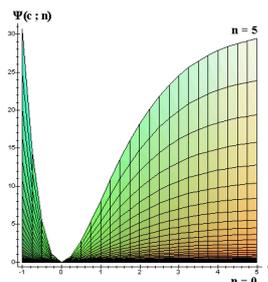
⇒

$$\Psi(c, n) = e^{-(c + \gamma - n + 1)} (\gamma - (c + \gamma - n + 1) - n) + e^{-(\gamma - n + 1)}$$

⇔

$$\Psi(c, n) = e^{n - \gamma - 1} (1 - e^{-c} (c + 1))$$

Graphisch dargestellt, die nun zentrierten Potentiale für den Bereich $0 \leq n \leq 5$, wobei $n \in N_0$:



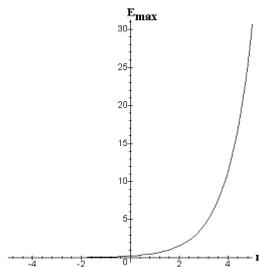
Aus der Berechnungsgrundlage von Ψ lässt sich die Maximalenergie des Oszillators für $c \rightarrow +\infty$ ablesen:

$$E_{\max}(n) = e^{n - \gamma - 1} \rightarrow \bar{E}_{\max}(n) = \frac{E_{\max}(n)}{E_{\max}(0)} = e^n \rightarrow \bar{\bar{E}}_{\max} = \frac{E_{\max}(n)}{E_{\max}(n-1)} = e^1$$

⇒

n	0	1	2	3	4	5
E_{max}	0,206...	0,561...	1,526...	4,148...	11,277...	30,654...

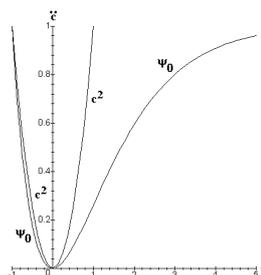
⇒



Wird E_{max} vernachlässigt, bleibt das Rumpfpotential übrig, wieder eine modifizierte Lambert- W-Funktion.

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} (c + 1)$$

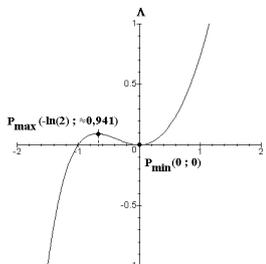
⇒



In der Graphik ist die Funktion c^2 mit dargestellt. Es ist das einfachste Potential eines harmonischen Oszillators, einem Feder-Masse-System. Die Differenz beider Potentiale zeigt das nächste Abbild.

$$\Delta = c^2 - \Psi_0(c)$$

⇒



Interpretation:

- Versagen des Systems für $c \rightarrow +\infty$ zum Beispiel durch Bindungsbruch, Endanschlag der Feder.
- Überproportionale Zunahme des Potentials für $c \rightarrow -\infty$.

Damit entspricht sich das hier gefundene Potential vielen Vorgänge in der Natur.

Bevor die weiteren Betrachtungen am Potential fortgeführt werden, wird zuerst das des Feder-Masse- Schwingers untersucht und dessen Eigenfrequenzen ermittelt.

Die weiteren Berechnungen gelten für kleine Änderungen von c . So ist die Grundschiwingung f_0 ermittelbar, wenn das Potential definiert wird als:

$$\Psi^\bullet(c, n) = \frac{1}{2} \cdot c^2 \cdot e^{n-\gamma-1}$$

⇒

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi^\bullet(c, n) = c \cdot e^{n-\gamma-1}$$

Die Bewegungsdifferentialgleichung:

$$c'' = -\frac{\partial}{\partial c} \Psi^\bullet(c, n)$$

⇒

$$c'' = -c \cdot e^{n-\gamma-1}$$

Für diesen Fall gilt:

$$c'' + c \cdot e^{n-\gamma-1} = 0$$

Die charakteristische Gleichung liefert die Lösung dieser homogenen, linearen Differentialgleichung 2. Ordnung:

$$\lambda^2 + e^{n-\gamma-1} = 0$$

⇒

$$\lambda_{1;2} = 0 \pm \sqrt{-e^{n-\gamma-1}} = 0 \pm \sqrt{-1} \sqrt{e^{n-\gamma-1}} \equiv a \pm ib$$

Das System ist dann schwingungsfähig, wenn gilt:

$$-e^{n-\gamma-1} < 0$$

⇔

$$e^{n-\gamma-1} > 0$$

Dieses System ist für alle Bedingungen schwingungsfähig. Es wurde ermittelt:

$$\begin{array}{ll} a = 0 & \rightarrow \text{ungedämpft} \\ b = \sqrt{e^{n-\gamma-1}} & \rightarrow \text{Kreisfrequenz} \end{array}$$

Die Grundfrequenz ist definiert durch:

$$c = e^{ax} \cdot \sin(bt) = e^0 \cdot \sin(\omega_0 t) = \sin\left(t \sqrt{e^{n-\gamma-1}}\right)$$

⇒

$$\omega_0 = 2\pi f = \sqrt{e^{n-\gamma-1}}$$

⇒

$$f_0 = \frac{1}{T_0} = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{e^{n-\gamma-1}}$$

⇒

$$T_0 = 2\pi \cdot \sqrt{e^{-n+\gamma+1}}$$

Im Allgemeinen wird in den Naturwissenschaften die Wellenzahl ν_0 genutzt:

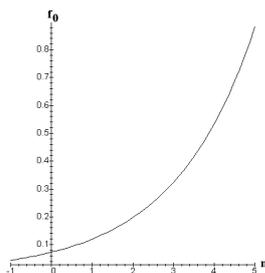
$$\nu_0 = \frac{c_L}{f_0}$$

⇒

$$\nu_0 = 2\pi \cdot c_L \cdot \sqrt{e^{n-\gamma-1}}$$

Wobei c_L hier die Phasengeschwindigkeit, respektive die Lichtgeschwindigkeit darstellt.

Die Frequenz f_0 graphisch dargestellt:



⇒

n	0	1	2	3	4	5
f_0	0,072...	0,119...	0,196...	0,324...	0,534...	0,881...

Wobei stillschweigend die Masse des Ersatzschwingsystems mit 1 angesetzt wurde, was für die spätere Berechnung der Eigenfrequenzen invariant ist.

Weiterhin gilt:

$$\bar{f}_0(n) = \frac{f_0(n)}{f_0(0)} = \sqrt{e^n} \rightarrow \bar{f}_0 = \frac{f_0(n)}{f_0(n-1)} = \sqrt{e^1}$$

Es wurde ermittelt:

$$\omega_0^2 = e^{n-\gamma-1}$$

Damit ergibt sich für die Bewegungsdifferentialgleichung des Ersatzsystems:

$$\Psi^\bullet(c, n) = \frac{1}{2} (\omega_0 \cdot c)^2$$

⇒

$$c'' + \omega_0^2 \cdot c = 0$$

Um die Eigenwerte und Eigenfrequenzen berechnet zu können wird ein geeignetes Störglied eingeführt:

$$c'' + \omega_0^2 \cdot c = \varepsilon \cdot \sin(\nu t)$$

Dabei gilt für ε :

$$0 < \varepsilon < 1$$

Es liegt nun eine inhomogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten vor. Nachteil, im Störglied kommt die physikalische Leitgröße Zeit t vor. Da sämtliche Betrachtungen bis zum jetzigen Zeitpunkt ein beliebiger intrinsischer Faktor c war, wird dieser wieder eingeführt, indem t dimensionslos gemacht wird. So soll gelten:

$$\tau = \nu t$$

⇒

$$\frac{dq}{dt} = \frac{dq}{dt} \frac{d\tau}{d\tau} = \frac{dq}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \frac{dq}{d\tau} \nu = q' \nu$$

... und:

$$\frac{d^2q}{dt^2} = \frac{d^2q}{dt^2} \frac{d\tau^2}{d\tau^2} = \frac{d^2q}{d\tau^2} \frac{d\tau^2}{dt^2} = \left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 \frac{d\tau^2}{dt^2} = \nu^2 \frac{d\tau^2}{dt^2} = \nu^2 q''$$

⇒

$$\nu^2 \cdot c'' + \omega_0^2 \cdot c = \varepsilon \cdot \sin(\tau)$$

⇔

$$c'' + \left(\frac{\omega_0}{\nu}\right)^2 \cdot c = \frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \sin(\tau)$$

Die Lösung der linken Seite ist bekannt und oben bereits gezeigt, so dass nur noch die Lösung der Störung berechnet werden muss. Die Summe beider Ergebnisse ist die Lösung.

Homogene Lösung:

$$c_H = \sin\left(\frac{\omega_0}{\nu} t\right)$$

Störglied:

$$r(\tau) = \frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \sin(\tau)$$

⇒

$$r(x) = a \cdot \cos(mx) + b \cdot \sin(mx)$$

⇒

$$r(x) = C_1(x) y_1(x) + C_2(x) y_2(x)$$

⇒

$$\begin{aligned}
 C_1(\tau) &= 0 \\
 C_2(\tau) &= \frac{\varepsilon}{\nu^2} = \varepsilon \cdot \frac{t^2}{\tau^2} \\
 y_1(\tau) &= 0 \\
 y_2(\tau) &= \sin(\tau)
 \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned}
 C'_1(\tau) &= 0 \\
 C'_2(\tau) &= -2\varepsilon \cdot \frac{t^2}{\tau^3} = -\frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \frac{2}{\tau} \\
 y'_1(\tau) &= 0 \\
 y'_2(\tau) &= \cos(\tau)
 \end{aligned}$$

⇒

$$C'_1(\tau) y_1(\tau) + C'_2(\tau) y_2(\tau) = 0$$

$$C'_1(\tau) y'_1(\tau) + C'_2(\tau) y'_2(\tau) = r(\tau)$$

⇒

$$-\frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \frac{2}{\tau} \cdot \sin(\tau) = 0 \qquad -\frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \frac{2}{\tau} \cdot \cos(\tau) = \frac{\varepsilon}{\nu^2} \cdot \sin(\tau)$$

Nichttrivial sind die Lösungen:

$$y_2(\tau) = \sin(\tau) = 0 \qquad y'_2(\tau) = \cos(\tau) = 0$$

⇒

$$y_2(\tau) = c_{S_1} = c_{S_2} = \sin(\tau) = \sin(\nu t)$$

Gesamtlösung wird demnach sein:

$$c(t) = \sin\left(\frac{\omega_0}{\nu} t\right) + \sin(\nu t)$$

Randbedingungen für die Eigenwerte innerhalb der Konventionen eines Potentials

$$c(0) = c(2\pi) = 0$$

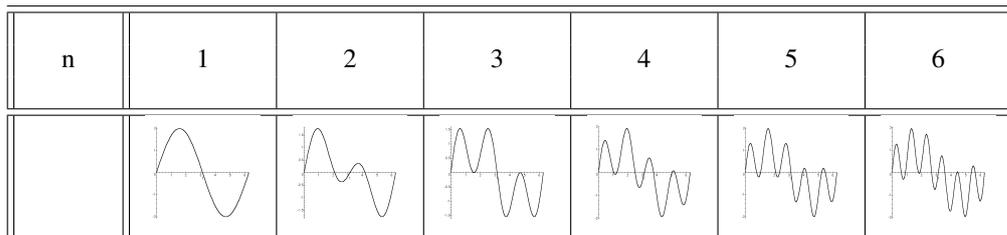
Diese Randbedingung ist erfüllt. Da außerdem eine weitere Bedingung die Periode $2n\pi$ für Eigenwerte gefordert ist, sind ganzzahlige Vielfache von ω_0 gültig:

$$\omega_0 = n\nu$$

⇒

$$c = \sin(nt) + \sin(\nu t)$$

Alle Randbedingungen bleiben erhalten für $n \in \mathbb{N}$. Womit die oben beschriebene Quantelung über n in der Energie wieder gefunden ist und die Eigenfrequenzen bestimmt (bei $\nu = \pi$).



Gefundene Ergebnisse gelten, wie festgelegt, nur für das Feder- Masse- Potential.

4 Definition des Potentials als Oszillator - Einführung der Anharmonizität

Wie sieht die ganze Sache für den Anharmonischen Oszillator aus?

[001]

$$\Psi(c, n) = e^{n-\gamma-1} (1 - e^{-c} (c + 1))$$

⇒

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} (c + 1)$$

Die erwartete Differentialgleichung ist nichtlinear. Abhilfe schafft es, $\Psi_0(c)$ mittels Taylor-Entwicklung zu polynomisieren:

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} (c + 1)$$

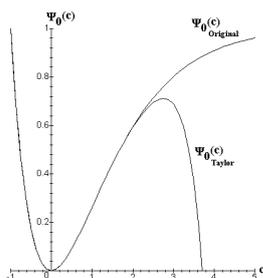
⇒

$$\Psi_0(c) = \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{3}c^3 + \frac{1}{8}c^4 - \frac{1}{30}c^5 + \frac{1}{144}c^6 - \frac{1}{840}c^7 + \frac{1}{5760}c^8 - \frac{1}{40320}c^9 + \dots$$

⇒

$$\Psi_0(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left(\frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{3}c^3 + \frac{1}{8}c^4 - \frac{1}{30}c^5 + \frac{1}{144}c^6 - \frac{1}{840}c^7 + \frac{1}{5760}c^8 - \frac{1}{40320}c^9 + \dots \right)$$

Vorerst wird mit bis c^9 weiter gerechnet. Im weiteren Verlauf wird dieser Mangel wieder beseitigt. Ein Vergleich für $\Psi_0(c)$ als Polynom und im Original graphisch dargestellt. Mann beachte die Potenz von c^2 . Es entspricht die des Harmonischen Oszillators:



Für das c^9 -Polynom sind zwischen $-1 < c < 2$ gute Ergebnisse zu erwarten. Die Bewegungsdifferentialgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left(c - c^2 + \frac{1}{2}c^3 - \frac{1}{6}c^4 + \frac{1}{24}c^5 - \frac{1}{120}c^6 + \frac{1}{720}c^7 - \frac{1}{5040}c^8 \right)$$

⇒

$$c'' = -\frac{\partial}{\partial c} \Psi^*(c, n)$$

⇒

$$c'' + e^{n-\gamma-1} \left(c - c^2 + \frac{1}{2}c^3 - \frac{1}{6}c^4 + \frac{1}{24}c^5 - \frac{1}{120}c^6 + \frac{1}{720}c^7 - \frac{1}{5040}c^8 \right) = 0$$

⇒

$$c'' + f(c, n) c = 0$$

mit:

$$f(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left(1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \right)$$

Die charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + f(c, n) = 0$$

⇔

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{-1} \sqrt{f(c, n)}$$

⇒

$$a = 0$$

$$b = \omega_0 = \sqrt{f(c, n)}$$

Das System ist dann schwingungsfähig, wenn gilt:

$$f(c, n) > 0$$

Für das vollständige Taylor- Polynom ist bekannt, dass für $c \neq 0$ diese Bedingung erfüllt ist. Die Schwingfähigkeit ist gegeben. Die Lösung der Differentialgleichung:

$$c = \sin(\omega_0 t) = \sin\left(t\sqrt{f(c, n)}\right)$$

Die Bewegungsdifferentialgleichung jetzt:

$$\omega_0^2 = f(c, n)$$

⇒

$$c'' + \omega_0^2 c = 0$$

Damit ist dies die gleiche Bewegungsdifferentialgleichung, wie bei einem Harmonischen Oszillator. Deshalb ergibt die Störungsrechnung das gleiche Ergebnis:

$$c(t) = \sin\left(\frac{\omega_0}{\nu}t\right) + \sin(\nu t)$$

Da außerdem eine weitere Bedingung die Periode 2π für Eigenwerte gefordert ist, sind nur ganzzahlige Vielfache von ω_0 gültig:

$$\omega_0 = n\nu$$

Es war und ist gegeben:

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \left(1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7\right) \end{aligned}$$

Ob die Quantelung über n weiterhin gegeben ist, soll überprüft werden:

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}} = 1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7$$

⇔

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}} = e^{\bar{x}} = \frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7$$

Der Wert $e^{\bar{x}}$ ist die globale, exponentielle Anharmonizität, im Bereich von $-1 < c < 2$ (c^9 -Polynom!) gilt:

c	-1	0	1	2	3
$e^{\bar{x}}$	2,718...	1,000...	0,367...	0,132...	-0,023...

Für $c = 0$ liegt keine Verzerrung des Ersatzsystemes, des Feder-Masse-Schwingsystems vor. Die globale, lineare Anharmonizität lässt sich berechnen über:

$$\bar{x} = \ln\left(\frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7\right)$$

⇒

c	-1	0	1	2	3
\bar{x}	1	0	-1	-2	-

Der Wert für $c = 3$ konnte nicht berechnet werden, welches daran liegt, dass die Polynomisierung bis c^9 über Taylor nicht mehr scharf genug ist.

Dieser schon angedeutete Mangel soll beseitigt werden. Es ist erkennbar, dass für die Anharmonizität über alles gilt:

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \dots \right)$$

⇒

$$\bar{\chi} = \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{c^n}{n!} \right)$$

⇔

$$\bar{\chi} = \ln e^{-c}$$

⇔

$$\bar{\chi} = -c$$

Damit ist gezeigt, dass das vorliegende Potential ideal in seiner Anharmonizität ist. Die Teilanharmonizitäten können somit definiert werden:

$$\chi_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

Es wurde berechnet:

$$(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} = e^{n-\gamma-1}$$

$$(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} = e^{n-\gamma-1} \left(1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \right)$$

⇒

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{\bar{\chi}} \cdot e^{n-\gamma-1} \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1+\bar{\chi}} \end{aligned}$$

Damit alle Bedingungen der Eigenfrequenzen erfüllt sind, muss gelten:

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}} = n = \frac{e^{n-\gamma-1}}{e^{n-\gamma-1+\bar{\chi}}}$$

Mit:

$$n \in \mathbb{N}$$

⇒

$$n = e^{-\bar{\chi}} = e^c$$

⇔

$$c = \ln n$$

Damit ist gezeigt, dass nur der rechte aufsteigende Zweig für die Quantelung verantwortlich ist. Nun ist berechenbar, an welcher Stelle von c die Eigenfrequenz des Wertes n liegt, es folgt:

n	1	2	3	4	5	6
c	0	0,693...	1,098...	1,386...	1,609...	1,791...

Die Potentialstufen, an der die Eigenfrequenzen liegen:

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c}(c + 1)$$

⇒

$${}_n\Psi_0(n) = 1 - e^{-\ln n}(\ln n + 1)$$

⇔

$${}_n\Psi_0(n) = 1 - \frac{\ln n + 1}{n}$$

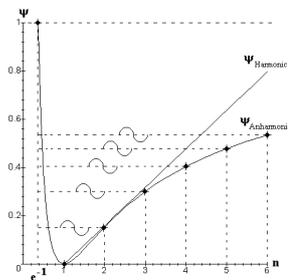
⇒

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} {}_n\Psi_0(n) = 1$$

⇒

n	1	2	3	4	5	6	7
${}_n\Psi_0(n)$	0	0,153...	0,300...	0,403...	0,478...	0,534...	0,579...

Diese Tatsache graphisch dargestellt:



5 Zusammenfassung der gewonnenen Erkenntnisse - Ein Abstecher zum Morsepotential

Es interessiert die Entwicklung der Differenz der Potentialstufen, worauf die Eigenfrequenzen liegen. So wird angesetzt:

[001]

$${}_{n-1}\bar{\Psi}_0(n) = {}_n\Psi_0(n) - {}_{n-1}\Psi_0(n) = \frac{\ln \frac{(n-1)^n}{n^{(n-1)}} + 1}{(n-1)n}$$

Die Differenz zwischen den einzelnen Potentialebenen der Eigenfrequenzen werden somit mit zunehmenden n -Werten immer geringer.

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} {}_{n-1}\bar{\Psi}_0(n) = 0$$

Zusammenfassung:

Was wurde auf den etwa letzten Seiten dargestellt.

- Das im ersten Abschnitt entwickelte mehrfache Flächenintegral einer modifizierten Lambert-W- Funktion mit besonderen Punkteigenschaften wurde zum Potential erklärt:

$$\int_{c_n}^{\infty} \dots \int_{c_3}^{\infty} \int_{c_2}^{\infty} \int_{c_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = \Psi(c_n, n) = e^{-c_n} \cdot (\gamma - c_n - n)$$

- Damit dieses Potential als Anharmonischen Oszillator angesehen werden kann, muss dieses auf den Koordinatenursprung $P(0; 0)$ zentriert werden:

$$\Psi(c, n) = e^{n-\gamma-1} \cdot (1 - e^{-c} \cdot (c + 1))$$

- Das Rumpf-, das Nullpotential mit $n = \gamma + 1$ wurde extrahiert, um es mit dem Potential eines Harmonischen Oszillators weiter betrachten zu können:

$$\Psi_0(c)_{\text{Anharmonic}} = 1 - e^{-c} \cdot (c + 1) \quad \leftrightarrow \quad \Psi_0(c)_{\text{Harmonic}} = \frac{1}{2}c^2$$

- Die Grundschiwingung ω_0 beider Oszillatoren wird berechnet, wobei der Wert $e^{\bar{x}}$ als die globale, exponentielle Anharmonizität erklärt wurde:

$$(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} = e^{\bar{x}} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} \quad \leftrightarrow \quad (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} = e^{n-\gamma-1}$$

- Die Eigenfrequenzen beider Oszillatoren werden über die Störungsrechnung definiert:

$$c_{\text{Anharmonic}} = c_{\text{Harmonic}} = \sin(nt) + \sin(\nu t) \quad \leftrightarrow \quad n \in N \quad \leftrightarrow \quad \nu = \text{const.}$$

- Konsequenz der zwingend gleichen Randbedingung aller Eigenfrequenzen beider Oszillatoren ist es, dass die Eigenfrequenzen gleichen Wertes n ein unterschiedliches Potential, die Potentialebenen besitzen:

$${}_n\Psi_0(n)_{\text{Anharmonic}} = 1 - \frac{\ln n + 1}{n} \quad \leftrightarrow \quad {}_n\Psi_0(n)_{\text{Harmonic}} = \frac{1}{2\pi} (n - 1) \quad \leftrightarrow \quad n \in N$$

\Rightarrow

$${}_n\Psi_0(1)_{\text{Anharmonic}} = 0 \quad = \quad {}_n\Psi_0(1)_{\text{Harmonic}} = 0$$

\Rightarrow

$${}_n\Psi_0(2)_{\text{Anharmonic}} = 0, 153\dots \quad \approx \quad {}_n\Psi_0(2)_{\text{Harmonic}} = 0, 159\dots$$

\Rightarrow

$${}_n\Psi_0(3)_{\text{Anharmonic}} = 0, 300\dots \quad < \quad {}_n\Psi_0(3)_{\text{Harmonic}} = 0, 318\dots$$

- Die oben genannte globale, exponentielle Anharmonizität wurde zum Schluss weiter entwickelt und festgestellt, dass gilt:

$$e^{\bar{\chi}}(c) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{c^n}{n!} = e^{-c}$$

- Die globale, lineare Anharmonizität lässt sich für vorliegendes Potential leicht berechnen und festgestellt, dass das Potential ideal ist, weil $\bar{\chi}$ die einfachste lineare Funktion von c darstellt:

$$\bar{\chi} = -c \quad \rightarrow \quad \bar{\chi} = \ln \frac{1}{n}$$

- Aus der Berechnungsgrundlage der globalen, exponentiellen Anharmonizität lassen sich die Teilanharmonizitäten berechnen, so gilt:

$$\chi_n = \frac{(-1)^n}{n!} \quad \leftrightarrow \quad n \in N_0$$

$$\Rightarrow \quad \chi_0 = +\frac{1}{1} \quad \chi_1 = -\frac{1}{1} \quad \chi_2 = +\frac{1}{2}$$

Ein Vergleich zum Morsepotential. Dieses ist definiert als:

$$\Psi_{\text{Morse}} = E_{\text{max}} \cdot (1 - e^{-c})^2$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = (1 - e^{-c})^2$$

Taylorzerlegt:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = c^2 - c^3 + \frac{7}{12}c^4 - \frac{1}{4}c^5 + \frac{31}{360}c^6 - \frac{1}{40}c^7 + \frac{127}{20160}c^8 - \frac{17}{12096}c^9 + \dots$$

Die erste Ableitung:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} \frac{\partial}{\partial c} = 2c - 3c^2 + \frac{7}{3}c^3 - \frac{5}{4}c^4 + \frac{31}{60}c^5 - \frac{7}{40}c^6 + \frac{127}{2520}c^7 - \frac{17}{1344}c^8 + \dots$$

Durch c dividiert:

$$\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} = 2c^0 - 3c^1 + \frac{7}{3}c^2 - \frac{5}{4}c^3 + \frac{31}{60}c^4 - \frac{7}{40}c^5 + \frac{127}{2520}c^6 - \frac{17}{1344}c^7 + \dots$$

Logarithmiert ergibt es die globale, lineare Anharmonizität angezeigt als Polynom der Teilanharmonizitäten:

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} \right) = \ln \left(\frac{2}{1}c^0 - \frac{3}{1}c^1 + \frac{7}{3}c^2 - \frac{5}{4}c^3 + \frac{31}{60}c^4 - \frac{7}{40}c^5 + \frac{127}{2520}c^6 - \frac{17}{1344}c^7 + \dots \right)$$

Es sind die Teilanharmonizitäten vergleichbar:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
$\chi_{n;\text{Ideal}}$	$+\frac{1}{1}$	$-\frac{1}{1}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{6}$	$+\frac{1}{24}$	$-\frac{1}{120}$	$+\frac{1}{720}$	$-\frac{1}{5040}$
$\chi_{n;\text{Morse}}$	$+\frac{2}{1}$	$-\frac{3}{1}$	$+\frac{7}{3}$	$-\frac{5}{4}$	$+\frac{31}{60}$	$-\frac{7}{40}$	$+\frac{127}{2520}$	$-\frac{17}{1344}$

Bleibt die globale, lineare Anharmonizität als nichtunendliches Polynom zu berechnen, dies ist möglich, wenn eine Expandierung auf das Ende verlegt wird und die nichtlinearen Glieder größer c^1 gestrichen werden. Ergebnis ist eine Näherung:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = (1 - e^{-c})^2$$

\Rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c} {}_0\Psi_{\text{Morse}} = 2e^{-c} \cdot (1 - e^{-c})$$

\Rightarrow

$$\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} = 2 \cdot \frac{e^{-c}}{c} \cdot (1 - e^{-c})$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} \right) = \ln \left[2 \cdot \frac{e^{-c}}{c} \cdot (1 - e^{-c}) \right]$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln(2) c^0 - c^1 - \ln(c^1) + \ln \left(1 - \frac{1}{e^c} \right)$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln 2 - c$$

Die Globale, lineare Anharmonizität besitzt ein Offset.

6 Die Anharmonizität χ

Es sollen die Erkenntnisse über die charakteristische Potentialeigenschaft Anharmonizität zusammengefasst werden. [001]

Es sei gegeben ein Potential der Form:

$$\Psi(c) = E_{\text{Max}} \Psi_0(c)$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$$\Psi_0(c)$$

Die Ableitung nach dem intrinsischen Faktor:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = \left[\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) \right]_{(c)}$$

Die erste Potenz des intrinsischen Faktors wird ausgeklammert:

$$c \cdot \left[\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) \right]_{(c-1)} = c \cdot e^{\chi}$$

Damit ist die Globale, exponentielle Anharmonizität definiert:

$$e^{\chi} = \left[\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) \right]_{(c-1)}$$

Die Globale, lineare Anharmonizität demzufolge:

$$\chi = \ln \left[\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) \right]_{(c-1)}$$

Diese Eigenschaft sei jedoch nur definiert für ein schwingungsfähiges Potential, für einen allgemeinen Oszillator.

Beispiel:

Gegeben sei das einfachste Potential eines Feder- Masse- Schwingers:

$$\Psi(c) = \frac{1}{2} kc^2$$

Dabei ist der Wert k die Federkonstante:

$$\Psi_0(c) = \frac{1}{2} c^2$$

\Leftrightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = c$$

\Leftrightarrow

$$c \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = c \cdot (1)$$

\Leftrightarrow

$$e^{\chi} = 1$$

\Leftrightarrow

$$\chi = 0$$

Es liegt ein Harmonischer Oszillator vor!

Der Nachweis der Schwingungsfähigkeit erfolgt über die Bewegungs-differentialgleichung aus dem Energieerhaltungssatz:

$$E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = E$$

\Rightarrow

$$\frac{1}{2} kc^2 + \frac{1}{2} mc'^2 = E$$

Die erste Ableitung:

$$kc + mc'' = 0$$

\Rightarrow

$$c'' + \frac{k}{m}c = 0$$

Die charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + \frac{k}{m} = 0$$

\Leftrightarrow

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{-\frac{k}{m}}$$

In komplexer Form:

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$$

Die Schwingungsfähigkeit kann nun nachgewiesen werden über die Forderung:

$$\frac{k}{m} > 0$$

Da die Masse m und Federkonstante k des Oszillators immer positive Werte annehmen, ist die Schwingungsfähigkeit nachgewiesen.

Als weiteres besteht die Möglichkeit zur Charakterisierung eines Potentials die Teilanharmonizitäten zu berechnen. So sei gegeben ein Potential der Form:

$$\Psi(c) = E_{\text{Max}} \cdot \Psi_0(c)$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$$\Psi_0(c)$$

Die Ableitung nach dem intrinsischen Faktor:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = \left[\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) \right]_{(c)}$$

Es schliesst sich eine Polynomisierung an:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = \sum_{i=1}^{\infty} a_{i-1} c^i$$

Die erste Potenz des intrinsischen Faktors wird ausgeklammert:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = c \sum_{i=i}^{\infty} a_{i-1} c^{i-1}$$

Die Teilanharmonizitäten sind ablesbar:

$$\chi_n = a_n$$

Beispiel:

Vom oben gewählten Potential des Feder- Masse- Oszillators ist bekannt:

$$c \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = c \cdot (1)$$

Die Polynomisierung:

$$c \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c) = c \cdot (1c^0)$$

Es ist daher nur eine Teilanharmonizität existent, was bei einem Harmonischen Oszillator zu erwarten war:

$$\chi_0 = 1$$

Beispiel:

Das Morsepotential. Dieses ist definiert als:

$$\Psi_{\text{Morse}} = E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-c})^2$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = (1 - e^{-c})^2$$

Taylorzerlegt:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = c^2 - c^3 + \frac{7}{12}c^4 - \frac{1}{4}c^5 + \frac{31}{360}c^6 - \frac{1}{40}c^7 + \frac{127}{20160}c^8 - \frac{17}{12096}c^9 + \dots$$

Die erste Ableitung:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} \frac{\partial}{\partial c} = 2c - 3c^2 + \frac{7}{3}c^3 - \frac{5}{4}c^4 + \frac{31}{60}c^5 - \frac{7}{40}c^6 + \frac{127}{2520}c^7 - \frac{17}{1344}c^8 + \dots$$

Durch c dividiert:

$$\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} = 2c^0 - 3c^1 + \frac{7}{3}c^2 - \frac{5}{4}c^3 + \frac{31}{60}c^4 - \frac{7}{40}c^5 + \frac{127}{2520}c^6 - \frac{17}{1344}c^7 + \dots$$

Logarithmiert ergibt es die globale, lineare Anharmonizität angezeigt als Polynom der Teilanharmonizitäten:

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} \right)$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{2}{1}c^0 - \frac{3}{1}c^1 + \frac{7}{3}c^2 - \frac{5}{4}c^3 + \frac{31}{60}c^4 - \frac{7}{40}c^5 + \frac{127}{2520}c^6 - \frac{17}{1344}c^7 + \dots \right)$$

Es sind die Teilanharmonizitäten ablesbar:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
$\chi_{n;\text{Morse}}$	$+\frac{2}{1}$	$-\frac{3}{1}$	$+\frac{7}{3}$	$-\frac{5}{4}$	$+\frac{31}{60}$	$-\frac{7}{40}$	$+\frac{127}{2520}$	$-\frac{17}{1344}$

Bleibt die globale, lineare Anharmonizität als nichtunendliches Polynom zu berechnen, dies ist möglich, wenn eine Expandierung auf das Ende gelegt wird und die nichtlinearen Glieder gestrichen werden. Ergebnis ist eine Näherung:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}} = (1 - e^{-c})^2$$

\Rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c} {}_0\Psi_{\text{Morse}} = 2 \cdot e^{-c} \cdot (1 - e^{-c})$$

\Rightarrow

$$\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} = 2 \cdot \frac{e^{-c}}{c} \cdot (1 - e^{-c})$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{{}_0\Psi_{\text{Morse}}}{c} \frac{\partial}{\partial c} \right) = \ln \left[2 \cdot \frac{e^{-c}}{c} \cdot (1 - e^{-c}) \right]$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln(2) \cdot c^0 - c^1 - \ln(c^1) + \ln \left(1 - \frac{1}{e^c} \right)$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln 2 - c$$

Die Schwingungsfähigkeit des Morsepotentials für alle Werte von c ist in entsprechender Literatur nachgewiesen worden und wird hier übernommen.

Beispiel:

Gegeben sei ein schwingungsfähiges Potential der Form:

$$\Psi(c) = E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-c} \cdot (c + 1))$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} \cdot (c + 1)$$

Die Polynom- Entwicklung für das Potential:

$$\Psi_0(c) = \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{3}c^3 + \frac{1}{8}c^4 - \frac{1}{30}c^5 + \frac{1}{144}c^6 - \frac{1}{840}c^7 + \frac{1}{5760}c^8 - \frac{1}{45360}c^9 + \dots$$

\Rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c}\Psi(c) = \frac{1}{1}c - \frac{1}{1}c^2 + \frac{1}{2}c^3 - \frac{1}{6}c^4 + \frac{1}{24}c^5 - \frac{1}{120}c^6 + \frac{1}{720}c^7 - \frac{1}{5040}c^8 + \dots$$

\Rightarrow

$$\bar{e}^x = \frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7$$

Die Teilanharmonizitäten:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
χ_n	$+\frac{1}{1}$	$-\frac{1}{1}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{6}$	$+\frac{1}{24}$	$-\frac{1}{120}$	$+\frac{1}{720}$	$-\frac{1}{5040}$

Die Globale, lineare Anharmonizität wird ermittelt

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \dots \right)$$

\Rightarrow

$$\bar{\chi} = \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{c^n}{n!} \right)$$

\Leftrightarrow

$$\bar{\chi} = -c$$

Damit ist gezeigt, dass das vorliegende Potential ideal in seiner Anharmonizität ist. Die Teilanharmonizitäten können somit definiert werden:

$$\chi_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

Ein Potential, das die Eigenschaften des obigen aufzeigt, wird Einfaches- χ -Potential genannt.

Da dieses Potential schwingungsfähig ist, ist dieses ein Einfacher- χ -Oszillator.

Die Schwingungsfähigkeit ist nachgewiesen.

Beispiel:

Gegeben ist ein erweitertes χ -Potential der Form:

$$\Psi(c, q) = E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1))$$

Mit:

$$q > 0$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(c, q) = 1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)$$

Dabei ist der intrinsische Faktor weiterhin c und q ein mit Randbedingungen frei wählbarer Koeffizient. Die Schwingungsfähigkeit ist dennoch nachgewiesen, so dass gilt:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c, q) = q^2 c \cdot e^{-qc}$$

\Leftrightarrow

$$qc \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c, q) = q \cdot e^{-qc}$$

\Rightarrow

$$e^x = q \cdot e^{-qc}$$

\Leftrightarrow

$$\chi = \ln q - qc$$

Zu beachten ist das Ausmultiplizieren von qc !

Die Teilanharmonizitäten sind von Interesse:

$$\Psi_0(c, q) = \frac{1}{2}(qc)^2 - \frac{1}{3}(qc)^3 + \frac{1}{8}(qc)^4 - \frac{1}{30}(qc)^5 + \frac{1}{144}(qc)^6 - \frac{1}{840}(qc)^7 + \frac{1}{5760}(qc)^8 + \dots$$

\Rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c, q) = \frac{1}{1}q^2c^1 - \frac{1}{1}q^3c^2 + \frac{1}{2}q^4c^3 - \frac{1}{6}q^5c^4 + \frac{1}{24}q^6c^5 - \frac{1}{120}q^7c^6 + \frac{1}{720}q^8c^7 + \dots$$

\Rightarrow

$$qc \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c, q) = \frac{1}{1}q^1c^0 - \frac{1}{1}q^2c^1 + \frac{1}{2}q^3c^2 - \frac{1}{6}q^4c^3 + \frac{1}{24}q^5c^4 - \frac{1}{120}q^6c^5 + \frac{1}{720}q^7c^6 + \dots$$

\Leftrightarrow

$$qc \cdot \frac{\partial}{\partial c} \Psi_0(c, q) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{q^{n+1}}{n!} c^n$$

\Rightarrow

$$\chi_n = \frac{(-1)^n}{n!} q^{n+1}$$

Ein Potential, das die Eigenschaften des obigen aufzeigt, wird χ -Potential genannt.

Da dieses Potential schwingungsfähig ist, ist dieses ein χ -Oszillator.

Die Schwingungsfähigkeit kann nachgewiesen werden über des Ansatz:

$$\Psi(c, q) < \lim_{c \rightarrow +\infty} \Psi(c, q)$$

\Rightarrow

$$E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)) < \lim_{c \rightarrow +\infty} E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1))$$

\Leftrightarrow

$$E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)) < E_{\text{Max}}$$

\Leftrightarrow

$$e^{-qc} \cdot (qc + 1) > 0$$

\Rightarrow

$$e^{-qc} \stackrel{!}{>} 0$$

$$qc + 1 > 0$$

\Rightarrow

$$q \stackrel{!}{>} 0$$

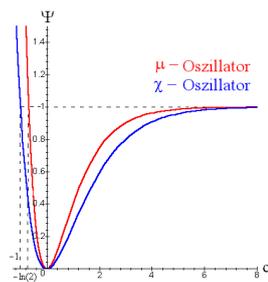
$$qc > -1$$

\Rightarrow

$$c > -\frac{1}{q}$$

Die Schwingungsfähigkeit ist ab obigen Wert nachgewiesen.

Morsepotential und χ -Potential graphisch dargestellt für $q = 1$:



Es existiert folgender Zusammenhang für das χ -Potential:

$$-\infty < c_{\text{Min}} < 0$$

\Leftrightarrow

$$+\infty > q = -\frac{1}{c_{\text{Min}}} > 0$$

\Leftrightarrow

$$\ln q = -\ln(-c_{\text{Min}})$$

Es existiert folgender Zusammenhang für das μ -(Morse-)Potential:

$$-\infty < c_{\text{Min}} < 0$$

\Leftrightarrow

$$+\infty > q = -\frac{\ln 2}{c_{\text{Min}}} > 0$$

Für die Annahme:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}}(c, q) = (1 - e^{-qc})^2$$

Und:

$$\chi = \ln 2 - qc$$

Sowie:

$$\bar{\chi} = \ln \left(\frac{2}{1} q^1 c^0 - \frac{3}{1} q^2 c^1 + \frac{7}{3} q^3 c^2 - \frac{5}{4} q^4 c^3 + \frac{31}{60} q^5 c^4 - \frac{7}{40} q^6 c^5 + \frac{127}{2520} q^7 c^6 - \frac{17}{1344} q^8 c^7 + \dots \right)$$

Ein Potential, das die Eigenschaften des obigen aufzeigt, wird μ -Potential genannt.

Da dieses Potential schwingungsfähig ist, ist dieses ein μ -Oszillator.

7 Einfluss der Werte q und p - Eine kleine Zusammenfassung

Was bleibt zu tun? Es muss noch geklärt werden, welchen Einfluss die Werte p und q , die bis jetzt als 1 angenommen wurden, auf einige vorliegende, berechnete Werte haben. So wird das Potential erweitert von:

$$\Psi(c_n, n) = e^{-c_n} \cdot (\gamma - c_n - n) \quad [001]$$

Auf:

$$\Psi(c_n, n, p, q) = \frac{p}{q^{n+2}} \cdot e^{-qc_n} \cdot (\ln p + \ln q + \gamma - qc_n - n)$$

Die charakteristischen Werte:

Nullstellen:

$${}_0c_n = \frac{\ln p + \ln q + \gamma - n}{q}$$

Schnittpunkt y- Achse:

$${}_y c_n = \frac{\ln p + \ln q + \gamma - n}{q^{n+2}}$$

Minimum:

$$P_E \left(\frac{\ln p + \ln q + \gamma - n + 1}{q}; -\frac{p}{q^{n+2}} \cdot e^{-(\ln p + \ln q + \gamma - n + 1)} \right)$$

Wendestelle:

$$P_W \left(\frac{\ln p + \ln q + \gamma - n + 2}{q}; -\frac{2p}{q^{n+2}} \cdot e^{-(\ln p + \ln q + \gamma - n + 2)} \right)$$

Flächenintegral:

$$\int_{0_n}^{\infty} \dots \int_{0_3}^{\infty} \int_{0_2}^{\infty} \int_{0_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = \frac{p}{q^{n+3}} \cdot (\ln p + \ln q + \gamma - n - 1)$$

Folgendes Integral:

$$\int_{0_{n+1}}^{\infty} \int_{0_n}^{\infty} \dots \int_{0_3}^{\infty} \int_{0_2}^{\infty} \int_{0_1}^{\infty} \int_0^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n d_{n+1} = \frac{p}{q^{n+4}} \cdot (\ln p + \ln q + \gamma - n - 2)$$

Die notwendige Zentrierung erfolgt durch:

$$\Psi(c, n, p, q) = \frac{p}{q^{n+2}} \cdot e^{-qc_n} \cdot (\ln p + \ln q + \gamma - qc_n - n) + e^{-\frac{\ln p + \ln q + \gamma - n + 1}{q}}$$

mit:

$$c_n = c + \frac{\ln p + \ln q + \gamma - n + 1}{q}$$

Die anfänglich umfangreiche Berechnungsgrundlage ergibt nach der Vereinfachung eine überraschend einfache Lösung:

$$\Psi(c, n, q) = q^{-(n+3)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1))$$

Bemerkenswert ist das Wegfallen des Wertes p . Das ist möglich über drei Fälle:

- $p = 1$: Für diesen Fall der Konstantierung des Wertes p ist p zwar noch vorhanden, erscheint jedoch formal nicht in der Berechnungsgrundlage. Der an p angekoppelte Term bleibt unverändert erhalten.
- $p = 0$: Für diesen Fall der Konstantierung des Wertes p ist p samt angeschlossenem Term völlig aus der Berechnungsgrundlage eliminiert.
- $p = -1$: Für diesen Fall der Konstantierung des Wertes p ist p noch vorhanden, erscheint jedoch formal nicht in der Berechnungsgrundlage. Der an p angekoppelte Term bleibt unverändert, jedoch negativiert erhalten.

Die Taylor- Entwicklung des zentrierten Rumpfpotentials wird durchgeführt:

$$\Psi(c, n, q) = q^{-(n+3)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1))$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(c, q) = 1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(c, q) = \frac{1}{2}(qc)^2 - \frac{1}{3}(qc)^3 + \frac{1}{8}(qc)^4 - \frac{1}{30}(qc)^5 + \frac{1}{144}(qc)^6 - \frac{1}{840}(qc)^7 + \frac{1}{5760}(qc)^8 + \dots$$

Damit steht das Ersatzsystem des Feder- Masse- Schwingers fest:

$$\Psi^\bullet(c, n, q) = q^{-(n+3)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot \frac{1}{2}(qc)^2 = q^{-(n+1)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot \frac{c^2}{2}$$

\Rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi^\bullet(c, n, q) = q^{-(n+1)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot c$$

\Rightarrow

$$\omega_0 = \sqrt{q^{-(n+1)} \cdot e^{n-\gamma-1}}$$

\Rightarrow

$$\bar{f}_0(n) = \frac{f_0(n)}{f_0(0)} = \sqrt{(q^{-1}e^1)^n} = (q^{-1}e^1)^{\frac{n}{2}} \rightarrow \bar{f}_0 = \frac{f_0(n)}{f_0(n-1)} = \sqrt{q^{-1}e^1}$$

Für die Bewegungsdifferentialgleichung gilt somit:

$$c'' + \omega_0^2 c = 0$$

Konsequenz der Bewegungsdifferentialgleichung ist es, dass sämtliche Erkenntnisse der Eigenfrequenzen und der Konsequenzen für n weiterhin gültig sind, der Wert q lediglich die Grundfrequenz ω_0 des Systems ändert.

Bleibt die Anharmonizität zu überprüfen:

$$e^{\bar{x}} = \frac{1}{1}q^1c^0 - \frac{1}{1}q^2c^1 + \frac{1}{2}q^3c^2 - \frac{1}{6}q^4c^3 + \frac{1}{24}q^5c^4 - \frac{1}{120}q^6c^5 + \frac{1}{720}q^7c^6 + \dots$$

\Rightarrow

$$e^{\bar{x}}(c; q) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{q^{n+1}c^n}{n!}$$

\Rightarrow

$$e^{\bar{x}}(c; q) = qe^{-qc}$$

\Rightarrow

$$\bar{x}(c; q) = \ln q - qc$$

Die Teilanharmonizitäten:

$$\bar{x}_n = \frac{(-1)^n}{n!} \cdot q^{n+1}$$

Die Quantelung von n soll wieder gefunden werden:

$$n = e^{-\bar{x}} = e^{qc - \ln q} = \frac{1}{q} \cdot e^{qc}$$

\Rightarrow

$$c = \frac{1}{q} \cdot \ln(qn)$$

Bleibt die Untersuchung der Potentialstufenentwicklung, damit die Festlegungen der Eigenfrequenzen gültig werden. Die Potentialstufen, an der die Eigenfrequenzen liegen:

$$\Psi_0(c, q) = 1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(n, q) = 1 - e^{-\ln(qn)} \cdot (\ln(qn) + 1)$$

\Leftrightarrow

$$\Psi_0(n, q) = 1 - \frac{\ln(qn) + 1}{qn}$$

\Rightarrow

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \Psi_0(n, q) = 1$$

Die Differenz der Potentialstufen:

$${}_{n-1}\bar{\Psi}_0(n, q) = {}_n\Psi_0(n) - {}_{n-1}\Psi_0(n) = \frac{\ln \frac{q^n (n-1)^n}{q^{(n-1)} n^{(n-1)}} + 1}{q(n-1)n}$$

\Rightarrow

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} {}_{n-1}\bar{\Psi}_0(n, q) = 0$$

Die Untersuchung der maximalen Energie des Potentials:

$$\Psi(c, n, q) = q^{-(n+3)} \cdot e^{n-\gamma-1} \cdot (1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1))$$

\Rightarrow

$$E_{\text{Max}}(n, q) = q^{-(n+3)} \cdot e^{n-\gamma-1} = q^{-(n+3)} \cdot E_{\text{Max}}(n)$$

\Rightarrow

$$\overline{\overline{E_{\text{Max}}}}(n, q) = \frac{E_{\text{Max}}(n, q)}{E_{\text{Max}}(0, q)} = q^{-n} e^n = \left(\frac{e^1}{q}\right)^n = \frac{\overline{\overline{E_{\text{Max}}}}(n)}{q^n}$$

\Rightarrow

$$\overline{\overline{\overline{E_{\text{Max}}}}}(q) = \frac{E_{\text{Max}}(n, q)}{E_{\text{Max}}(n-1, q)} = q^{-1} e^1 = \frac{e^1}{q} = \frac{\overline{\overline{\overline{E_{\text{Max}}}}}}{q}$$

8 Der Zusammenhang zwischen χ und einer Quantelung - Zur Vorbereitung auf die Schrödinger-Gleichung

Gegeben aus vorangegangenen Kapiteln ist die Berechnung der Anharmonizitätskonstante χ für den [001] betreffenden Oszillator:

μ -Oszillator:

$$\chi = \ln 2 - qc$$

χ -Oszillator:

$$\chi = \ln q - qc$$

Aus der zwingend gleichen Eigenfrequenz des Rumpfpotentials ist ein Zusammenhang zwischen einer Quantelung n und χ ermittelt worden:

μ -Oszillator:

$$n = e^{-\chi}$$

\Rightarrow

$$n = e^{qc - \ln 2} = \frac{1}{2} \cdot e^{qc}$$

\Rightarrow

$$c = \frac{1}{q} \cdot \ln(2n)$$

χ -Oszillator:

$$n = e^{-\chi}$$

\Rightarrow

$$n = e^{qc - \ln q} = \frac{1}{q} \cdot e^{qc}$$

\Rightarrow

$$c = \frac{1}{q} \cdot \ln(qn)$$

Die Rumpfpotentiale können nun so modifiziert werden, dass nicht mehr c maßgebend ist als intrinsischer Faktor, sondern n :

μ -Oszillator:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}}(c, q) = (1 - e^{-qc})^2$$

\Rightarrow

$${}_0\Psi_{\text{Morse}}(n) = \left(1 - \frac{1}{2n}\right)^2$$

χ -Oszillator:

$$\Psi_0(c, q) = 1 - e^{-qc} \cdot (qc + 1)$$

\Rightarrow

$$\Psi_0(q, n) = 1 - \frac{\ln(qn) + 1}{qn}$$

Aus der Definition eines Rumpfpotentials ist ermittelbar, für welches (Start)- n das Potential definiert ist:

μ -Oszillator:

$${}_0\Psi_{\text{Morse}}(n) = 0 = \left(1 - \frac{1}{2n}\right)^2$$

\Leftrightarrow

$$n = \frac{1}{2}$$

χ -Oszillator:

$$\Psi_0(q, n) = 0 = 1 - \frac{\ln(qn) + 1}{qn}$$

\Leftrightarrow

$$\ln(qn) + 1 = qn$$

Der Wert q beeinflusst demnach das (Start)- n über eine Lambert-W- Funktion. Für $q = 2$ gilt:

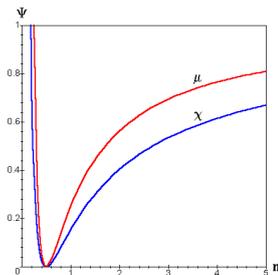
$$\ln(2n) + 1 = 2n$$

\Rightarrow

$$n = \frac{1}{2}$$

Zu beachten ist der Wegfall des Wertes q im μ -Oszillator und das (Start)- n für $q = 2$ beim χ -Oszillator von $n = \frac{1}{2}$.

Diese Situation grafisch dargestellt:



9 Schrödinger-Gleichung und Freies Teilchen

Gegeben ist die Schrödinger Gleichung in stationärer Form:

[001]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \phi'' + E_{\text{Pot}} \cdot \phi = E\phi$$

Es soll ein freies Teilchen vorliegen:

$$E_{\text{Pot}} = 0$$

⇒

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \phi'' + E \cdot \phi = 0$$

⇒

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \phi = 0$$

Lösung durch den Ansatz nach Allgemeine, homogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung.
Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E = 0$$

⇒

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$

⇒

$$a \pm ib = 0 \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E > 0$$

Ist immer erfüllt. Die Lösung lautet daher:

$$\phi = \sin(bx)$$

⇒

$$\phi = \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right)$$

Mit:

$$b = \omega_x = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E} \left[\sqrt{\frac{\text{kg}}{\text{J}^2 \text{s}^2} \text{J}} = \sqrt{\frac{\text{kg}}{\text{Nms}^2}} = \sqrt{\frac{\text{kg} \text{s}^2}{\text{kgm}^2 \text{s}^2}} = \sqrt{\frac{1}{\text{m}^2}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

⇒

$$\omega_x = \frac{\sqrt{2m \cdot E}}{\hbar}$$

⇒

$$f_x = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E} \left[\frac{1}{\text{Js}} \sqrt{\text{kgJ}} = \frac{1}{\text{Nms}} \sqrt{\text{kgNm}} = \frac{\text{s}^2}{\text{kgm}^2 \text{s}} \sqrt{\text{kg} \frac{\text{kgm}}{\text{s}^2} \text{m}} = \frac{\text{skgm}}{\text{kgm}^2 \text{s}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

Kontrolle der Lösung:

$$\phi = \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right)$$

$$\phi' = \frac{\sqrt{2m \cdot E}}{\hbar} \cdot \cos\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right)$$

$$\phi'' = -\frac{2m \cdot E}{\hbar^2} \cdot \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right)$$

⇒

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \phi = 0$$

⇒

$$-\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right) = 0$$

⇒

$$0 = 0$$

Die Lösung ist exakt, jedoch muss gelten:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \bar{\phi} dx = 1$$

⇒

$$\phi = \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right) = \sin kx$$

In Komplexschreibweise:

$$\phi = \sin kx = \cos kx + i \sin kx$$

⇒

$$\phi = \cos kx + i \sin kx = e^{ikx}$$

⇒

$$\bar{\phi} = e^{-ikx}$$

⇒

$$\phi \bar{\phi} = e^{ikx} \cdot e^{-ikx} = e^0 = 1$$

⇒

$$C \int_0^L dx = 1$$

⇒

$$C = \frac{1}{L} \quad \rightarrow \quad \lim_{L \rightarrow \pm\infty} = 0$$

Wobei L die betrachtete Weglänge darstellt. Das Teilchen hält sich unabhängig von seiner Geschwindigkeit überall und ständig mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf. Der Ort ist unbestimmt. Daher gilt endgültig:

$$\phi = \sin\left(\frac{x}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot E}\right) \left[\frac{\text{m}}{\text{Js}} \sqrt{\text{kgJ}} = \frac{\text{m}}{\text{Nms}} \sqrt{\text{kgNm}} = \frac{\text{s}}{\text{kgm}} \sqrt{\frac{\text{kg}^2 \text{m}^2}{\text{s}^2}} = 1 \right]$$

Wobei die Energie der freien Welle die kinetische Energie ist:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

⇒

$$\phi = \sin\left(x \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{p^2}{2m}}\right)$$

⇒

$$\phi(x) = \sin\left(\frac{p}{\hbar} \cdot x\right) \left[\frac{\text{Ns}}{\text{Js}} \text{m} = \frac{\text{N}}{\text{Nm}} \text{m} = 1 \right]$$

Wobei p den Impuls des Teilchens darstellt.

$$\omega(x) = \frac{p}{\hbar} \left[\frac{\text{Ns}}{\text{Js}} = \frac{\text{N}}{\text{Nm}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

⇒

$$f_x = \frac{p}{\hbar} \left[\frac{\text{Ns}}{\text{Js}} = \frac{\text{N}}{\text{Nm}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

Die de- Broglie- Relation:

$$p = \frac{h}{\lambda} = k \cdot \hbar$$

⇒

$$\phi = \sin\left(\frac{p}{\hbar} \cdot x\right) = \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right)$$

Die Wellenlänge-Frequenz-Relation:

$$\lambda = \frac{c}{f_t}$$

⇒

$$\phi = \sin\left(\frac{2\pi}{c} \cdot f_t \cdot x\right)$$

Die Definition der Kreisfrequenz:

$$\omega = \omega_t = 2\pi \cdot f_t = 2\pi \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{c \cdot p}{\hbar}$$

⇒

$$\phi = \sin\left(\frac{\omega}{c} \cdot x\right)$$

Die Definition der nichtrelativistischen Geschwindigkeit:

$$c = \frac{x}{t}$$

⇒

$$\phi(t) = \sin(\omega t) \left[\frac{1}{s} s = 1 \right]$$

Die Energie für eine Welle:

$$E = \hbar\omega \left[\frac{J^S}{s} = J \right]$$

Mit:

$$\omega(t) = \frac{p}{\hbar} \cdot c \left[\frac{mNs}{sJs} = \frac{mN}{sNm} = \frac{1}{s} \right]$$

Der Übergang zur zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung erfolgt durch:

$$\psi(x; t) = \phi(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot E \cdot t}$$

⇒

$$\psi(x; t) = \phi(x) \cdot e^{-i\omega t}$$

⇒

$$\psi(x; t) = \sin(\omega_x x) \cdot e^{-i\omega t}$$

⇒

$$\psi(x; t) = \sin(\omega_x x) [\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)]$$

⇒

$$\psi(x; t) = \sin(\omega_x x) \cos(\omega t) - i \sin(\omega_x x) \sin(\omega t)$$

Es erfolgt eine Zerlegung in Real- und Imaginäranteil:

$$\text{Re } \psi = + \sin(\omega_x x) \cos(\omega t)$$

$$\text{Im } \psi = - \sin(\omega_x x) \sin(\omega t)$$

Die Ergebnisse werden den Achsen eines kartesischen Koordinatensystems zugeordnet und in polare umgewandelt:

$$x(\psi) = \text{Re } \psi$$

$$y(\psi) = \text{Im } \psi$$

⇒

$$x(\psi) = + \sin(\omega_x x) \cos(\omega t)$$

$$y(\psi) = - \sin(\omega_x x) \sin(\omega t)$$

⇒

$$x(\psi)^2 + y(\psi)^2 = +\sin^2(\omega_x x) (\cos^2(\omega_t t) + \sin^2(\omega_t t))$$

$$\frac{y}{x}(\psi) = -\frac{\sin(\omega_t t)}{\cos(\omega_t t)}$$

⇒

$$r = \sqrt{x(\psi)^2 + y(\psi)^2} = +\sin(\omega_x x)$$

$$\tan \varphi = \frac{y}{x}(\psi) = -\tan(\omega_t t)$$

⇒

$$r = +\sin(\omega_x x) \quad \varphi = -\omega_t t$$

Es wurde berechnet:

$$\omega(x) = \frac{p}{\hbar} \quad \omega(t) = \frac{p}{\hbar} \cdot c$$

⇒

$$\omega(t) = c \cdot \omega(x)$$

⇒

$$r = \sin(\omega_x x) \quad \varphi = -c \cdot \omega_x t$$

Sowie:

$$c \cdot t = x$$

⇒

$$r(x) = \sin(\omega_x x) \quad \varphi(x) = -\omega_x x$$

⇒

$$r(\varphi) = -\sin \varphi$$

Oder man wählt folgende Umformung zwecks graphischer Veranschaulichung:

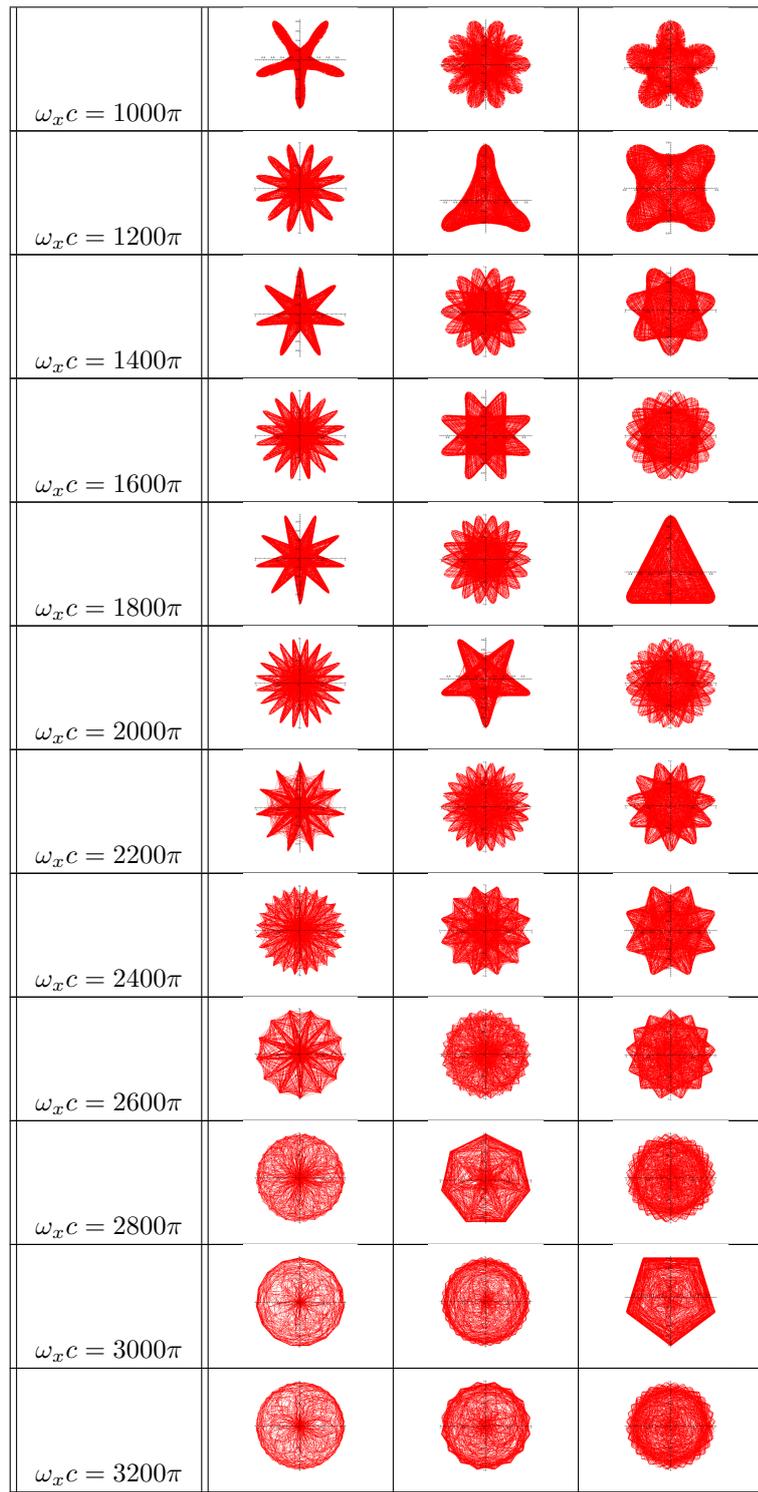
$$c \cdot t = x$$

⇒

$$r(t) = \sin(\omega_x c t) \quad \varphi(t) = -\omega_t t$$

In Polarkoordinatendarstellung ergeben sich folgende Schaubilder:

	$t = 0..1$	$\omega_t = 200\pi$	$\omega_t = 400\pi$	$\omega_t = 800\pi$
$\omega_x c = 200\pi$				
$\omega_x c = 400\pi$				
$\omega_x c = 600\pi$				
$\omega_x c = 800\pi$				



10 Schrödinger-Gleichung und Harmonisches Potential

10.1 Ermittlung der Verteilung $\phi(q)$

Gegeben ist die Schrödinger Gleichung in stationärer Form:

[001]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + E_{\text{Pot}} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

Es soll ein Harmonischer Oszillator vorliegen:

$$E_{\text{Pot}} = \frac{1}{2} kx^2$$

⇒

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + \frac{1}{2} kx^2 \cdot \psi = E \cdot \psi$$

⇒

$$\psi'' + m \cdot \frac{2E - kx^2}{\hbar^2} \cdot \psi = 0$$

Eine Variablentransformation wird durchgeführt:

$$\psi'' + \left(2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} - km \cdot \frac{x^2}{\hbar^2} \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\phi'' + (\varepsilon - q^2) \cdot \phi = 0$$

Lösung durch den Ansatz nach Allgemeine, homogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung.
Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + (\varepsilon - q^2) = 0$$

⇒¹

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{(-1)(q^2 - \varepsilon)} = \pm \sqrt{\varepsilon - q^2}$$

⇒

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{q^2 - \varepsilon}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:²

$$q^2 - \varepsilon > 0$$

⇒

$$q^2 > \varepsilon$$

Liegt diese Bedingung vor, ist das System schwingungsfähig. Für eine noch restriktivere Annahme, $q^2 \gg \varepsilon$ vereinfacht sich die Differentialgleichung:

$$\phi'' + (\varepsilon - q^2) \cdot \phi = 0$$

⇒

$$\phi'' - q^2 \cdot \phi = 0$$

Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 - q^2 = 0$$

⇒

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{q^2}$$

⇒

$$\lambda_1 = +q \quad \lambda_2 = -q$$

¹Diese Missachtung der Umformungsregel, respektive Erzwingung einer komplexen Lösung, bewirkt das Erzeugen eines kontinuierlichen Spektrums. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung und Ziel vorliegender Berechnungen ist die Ermittlung des diskreten Spektrums.

²Dies verlangt im exakten Sinne $q^2 < \varepsilon$ welches erfüllt ist bei korrekter Umformung, jedoch als restriktivere Annahme im Folgenden $q^2 \ll \varepsilon$ keine Lösung liefert.

Das Ergebnis der Charakteristischen Gleichung ergibt diesmal den Fall:

$$(\lambda_1 \neq \lambda_2) \in \mathbb{R}$$

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = e^{+q \cdot x} \quad \phi_2 = e^{-q \cdot x}$$

Kontrolle der Lösung:

$$\begin{aligned} \phi_1 = e^{+q \cdot x} &\rightarrow \phi_1' = +q \cdot e^{+q \cdot x} \rightarrow \phi_1'' = +q^2 \cdot e^{+q \cdot x} \\ \phi_2 = e^{-q \cdot x} &\rightarrow \phi_2' = -q \cdot e^{-q \cdot x} \rightarrow \phi_2'' = +q^2 \cdot e^{-q \cdot x} \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\phi'' - q^2 \cdot \phi = 0 \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} q^2 \cdot e^{+q \cdot x} - q^2 \cdot e^{+q \cdot x} &= 0 \\ q^2 \cdot e^{-q \cdot x} - q^2 \cdot e^{-q \cdot x} &= 0 \end{aligned}$$

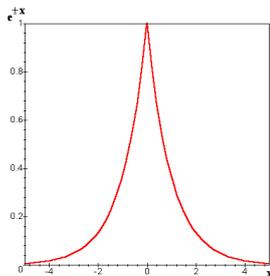
Die Lösungen sind exakt. Zu sehen ist, dass die Wellenfunktion nur dann gegen einen konkreten Wert konvergiert, wenn $e^{-\infty}$ gilt, so wird ϕ_1 und ϕ_2 sinnvoll zusammen gefasst und die Transformation vollendet.

$$\phi_1(x) = e^{+qx} \quad \phi_2(x) = e^{-qx}$$

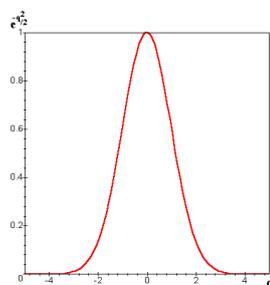
\Rightarrow^3

$$\phi(q) = e^{-\frac{q^2}{2}}$$

³Transformation der Funktionen $\phi_1(x) \leftrightarrow \phi_2(x)$ zur Verteilung $\phi(p)$:



\Rightarrow



Mit:

$$\int_{-\infty}^0 \phi_1 \left(q = +\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) + \int_0^{+\infty} \phi_2 \left(q = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(q) = \sqrt{2\pi}$$

10.2 Ermittlung der Potentialstufen

Es wird ein Formfaktor H eingeführt, um die nun vorliegende normierte Normalverteilung $\phi(q)$ zu präzisieren:

$$\phi(q) = H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

\Rightarrow

$$\phi'(q) = H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} = H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot \phi(q)$$

\Rightarrow

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - \phi(q) - q \cdot \phi'(q)$$

\Rightarrow

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot \left[H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} \right]$$

\Rightarrow

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + q^2 \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

\Rightarrow

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - 2q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + (q^2 - 1) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Vorliegende Differentiale werden in die ursprüngliche DGL eingesetzt:

$$\phi'' + (\varepsilon - q^2) \cdot \phi = 0$$

\Rightarrow

$$H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - 2q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + (q^2 - 1) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + (\varepsilon - q^2) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} = 0$$

\Rightarrow

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + (q^2 - 1) \cdot H(q) + (\varepsilon - q^2) \cdot H(q) = 0$$

\Rightarrow

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + q^2 \cdot H(q) - H(q) + \varepsilon \cdot H(q) - q^2 \cdot H(q) = 0$$

\Rightarrow

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + (\varepsilon - 1) \cdot H(q) = 0$$

Die nun ermittelte Differentialgleichung ist als die Hermitesche Differentialgleichung bekannt. Für die Funktion H stehen nun die Berechnungsgrundlagen der Hermiteschen Polynome zur Verfügung. Für $H(q)$ existiert eine unendliche Potenzreihe:

$$H(q) = \sum_k c_k q^k$$

\Rightarrow

$$H'(q) = \sum_k k c_k q^{k-1}$$

\Rightarrow

$$H''(q) = \sum_k k(k-1) c_k q^{k-2}$$

Vorliegende Differentiale werden in die Hermitesche DGL eingesetzt:

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + (\varepsilon - 1) \cdot H(q) = 0$$

\Rightarrow

$$\sum_k k(k-1) c_k q^{k-2} - 2q \sum_k k c_k q^{k-1} + (\varepsilon - 1) \sum_k c_k q^k = 0$$

\Rightarrow

$$\sum_k [k(k-1) c_k q^{k-2} - 2q k c_k q^{k-1} + (\varepsilon - 1) c_k q^k] = 0$$

\Rightarrow

$$\sum_k [(k+2)(k+1) c_{k+2} q^k - 2k c_k q^k + (\varepsilon - 1) c_k q^k] = 0$$

⇒

$$\sum_k q^k [(k+2)(k+1)c_{k+2} - (2k+1-\varepsilon)c_k] = 0$$

Eine Rekursionsformel für die Berechnung der Koeffizienten ist extrahierbar:

$$(k+2) \cdot (k+1) \cdot c_{k+2} - (2k+1-\varepsilon) \cdot c_k = 0$$

⇒

$$c_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2) \cdot (k+1)} \cdot c_k$$

Für die spätere Normierung der Wellenfunktion ist es nötig, dass ein endliches Polynom vorliegt, daher muss die obige Rekursion abbrechen, bedeutet konkret:

$$c_{k+2} = 0$$

⇒

$$\frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2) \cdot (k+1)} \cdot c_k = 0$$

⇒

$$\varepsilon = 2k+1$$

Die Abbruchbedingung ist dann erfüllt, wenn der Wert ε eine ungerade positive Zahl darstellt. Daher gilt:

$$\varepsilon = 2n+1 \quad \text{mit} \quad n \in N_0$$

Für ε war außerdem festgelegt worden:

$$\varepsilon = 2m \cdot \frac{E}{\hbar^2}$$

Rücktransformiert von:

$$\phi'' + (\varepsilon - q^2) \cdot \phi = 0$$

⇒

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(E - \frac{1}{2} \cdot kx^2 \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\varepsilon = E$$

Die Energie der ersten Potentialstufe 1/2-Welle von $\omega_n = \omega_0 = \omega$ definiert durch:

$$\varepsilon = \frac{2}{\hbar\omega} \cdot E_n$$

⇒

$$2n+1 = \frac{2}{\hbar\omega} \cdot E_n$$

⇒

$$E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Damit ist die Berechnung der Oszillatorenenergien beendet, wobei für diese Darstellung noch ω zu ermitteln wäre.

Der noch gebrauchte Wert ω kann einfach über die Bewegungsdifferentialgleichung berechnet werden. Für die Energien gilt dann:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot mx'^2 \quad E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot kx^2$$

⇒

$$E_{kin} + E_{pot} = E$$

⇒

$$\frac{1}{2} \cdot mx'^2 + \frac{1}{2} \cdot kx^2 = E$$

⇒

$$x'' + \frac{k}{m} \cdot x = 0$$

Die Charakteristische dieser Bewegungsdifferentialgleichung:

$$\lambda^2 + \frac{k}{m} = 0$$

⇒

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{-\frac{k}{m}}$$

⇒

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\frac{k}{m} > 0$$

Da diese Bedingung uneingeschränkt gilt (Die Werte k und m sind intrinsisch immer positiv) ist das System schwingungsfähig:

$$\omega = b \left[\sqrt{\frac{\text{N}}{\text{mkg}}} = \sqrt{\frac{\text{kgm}}{\text{s}^2\text{mkg}}} = \sqrt{\frac{1}{\text{s}^2}} = \frac{1}{\text{s}} \right]$$

⇒

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Für eine geänderte Annahme der kinetischen Energie:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot \frac{p^2}{m} \quad E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot kx^2$$

Ergibt sich folgendes nichtrelativistisches Ergebnis:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{p} \cdot c} \left[\sqrt{\frac{\text{Nm}}{\text{mNs}^2}} = \sqrt{\frac{1}{\text{s}^2}} = \frac{1}{\text{s}} \right]$$

Für das vorliegende harmonische Potential ergibt sich damit eine neue Schreibweise,

$$\omega^2 = \frac{k}{p} \cdot c = \frac{k}{m}$$

⇒

$$k = m\omega^2 = \frac{p}{c} \cdot \omega^2$$

⇒

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + E_{pot} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

⇒

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2$$

⇒

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 x^2 - E \right) \cdot \psi = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 - E \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 \right) \cdot \psi = 0$$

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\lambda^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 \right) = 0$$

$$\lambda^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 \right) = 0$$

⇒

$$a \pm ib = 0 \pm i \sqrt{\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$

$$a \pm ib = 0 \pm i \sqrt{\frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$

⇒

$$m\omega^2 \cdot x^2 - 2 \cdot E > 0$$

$$p\omega^2 \cdot x^2 - 2c \cdot E > 0$$

⇒

$$\omega > \sqrt{2 \cdot \frac{E}{m x^2}} > 0 \left[\sqrt{\frac{\text{J}}{\text{kgm}^2}} = \sqrt{\frac{\text{N}}{\text{kgm}}} = \sqrt{\frac{\text{kgm}}{\text{s}^2 \text{kgm}}} = \sqrt{\frac{1}{\text{s}^2}} = \frac{1}{\text{s}} \right]$$

$$\omega > \sqrt{2 \cdot \frac{cE}{p x^2}} > 0 \left[\sqrt{\frac{\text{Jm}}{\text{sNsm}^2}} = \sqrt{\frac{\text{Nm}^2}{\text{Nm}^2 \text{s}^2}} = \sqrt{\frac{1}{\text{s}^2}} = \frac{1}{\text{s}} \right]$$

Beide Bedingungen sind nur erfüllt, wenn $E > 0$. Das System ist dann schwingungsfähig. Daher muss gelten:

$$E_n = \hbar \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

⇒

$$E_0 = E = \frac{1}{2} \cdot \hbar \omega > 0$$

⇒

$$\hbar \omega > 0$$

Da dies immer erfüllt ist, schwingt das System sicher. Der Term $n + \frac{1}{2}$ ist zwingend notwendig. Die Nullstufenenergie $n = 0$ ist immer höher als das Minimum des Potentials.

10.3 Die H -Polynome

Die Lösungen sind exakt, jedoch muss noch überprüft werden:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \cdot \bar{\psi} \cdot dx = 1$$

Wobei hier $\phi(q) = H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$ hinreichend ist.

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \cdot \bar{\phi} \cdot dx = 1$$

\Rightarrow

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} H(q) \cdot \bar{H}(q) \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

Die Ermittlung von C als Wichtungsfaktor der Eigenfunktionen ist abhängig von der Kenntnis der Hermiteischen Polynome:⁴

$$H(q) = \sum_k c_k q^k$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} H_0(q) &= c_0 \cdot q^0 \\ H_1(q) &= c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 \\ H_2(q) &= c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 \\ H_3(q) &= c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 \\ H_4(q) &= c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 + c_4 \cdot q^4 \\ H_5(q) &= c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 + c_4 \cdot q^4 + c_5 \cdot q^5 \\ &\dots \end{aligned}$$

Fehlen die Koeffizienten. Diese sind gegeben nach Hermite:

$$\begin{aligned} H_0(q) &= 1 \\ H_1(q) &= 2 \cdot q \\ H_2(q) &= 4 \cdot q^2 - 2 \\ H_3(q) &= 8 \cdot q^3 - 12 \cdot q \\ H_4(q) &= 16 \cdot q^4 - 48 \cdot q^2 + 12 \\ H_5(q) &= 32 \cdot q^5 - 160 \cdot q^3 + 120 \cdot q \\ &\dots \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$H_n(-q) = -n^n \cdot H_n(q)$$

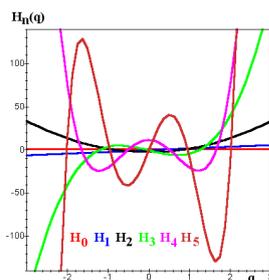
\Rightarrow

$$H_n(q) = 2q \cdot H_{n-1}(q) - 2 \cdot (n-1) \cdot H_{n-2}(q)$$

\Rightarrow

$$H_n(q) = (-1)^n \cdot e^{(+q^2)} \cdot \left(\frac{d}{dq} \right)^n \cdot e^{(-q^2)}$$

⁴Die ersten sechs Hermiteischen Polynome grafisch dargestellt.



⇒

Rodrigues-Formel

Das Integral kann berechnet werden, wobei die mit einem ungeraden Wert n und 0 analytisch leicht lösbar sind:

$n = 0$:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

⇔

$$C\sqrt{\pi} = 1$$

⇒

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

$n = 1$:

$$4C \int_{-\infty}^{+\infty} q \cdot \bar{q} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 4C \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

⇔

$$2C\sqrt{\pi} = 1$$

⇒

$$C_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2} \cdot C_0$$

$n = 3$:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} (8q^3 - 12q) \cdot \overline{(8q^3 - 12q)} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

⇔

$$48C\sqrt{\pi} = 1$$

⇒

$$C_3 = \frac{1}{48} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{48} \cdot C_0$$

$n = 5$:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} (32q^5 - 160q^3 + 120q) \cdot \overline{(32q^5 - 160q^3 + 120q)} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

⇔

$$3840C\sqrt{\pi} = 1$$

⇒

$$C_5 = \frac{1}{3840} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{3840} \cdot C_0$$

$n \in \mathbf{N}_0$:

$$C_n = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2^n n!} \cdot C_0$$

Es ist daher für das normierte $\phi_n(q)$ gefordert:

$$\phi_n(q) = \sqrt{C_n} \cdot H_n(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

⇒

$$\phi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot H_n(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Der Wert q ist kein ursprünglicher, es wird resubstituiert:

$$\psi'' + \left(2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} - km \cdot \frac{x^2}{\hbar^2} \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\phi'' + (\varepsilon - \hat{q}^2) \cdot \phi = 0$$

⇒

$$\hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 \quad \leftrightarrow \quad q^2 = \frac{\sqrt{km}}{\hbar} \cdot x^2 = \frac{x^2}{z^2} \quad \leftrightarrow \quad z = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{km}}} \left[\sqrt{\frac{\text{Js}}{\sqrt{\frac{\text{N}}{\text{m}} \text{kg}}}} = \sqrt{\text{m}^2} = \text{m} \right]$$

Äquivalent:

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 \right) \cdot \psi = 0$$

⇒

$$\phi'' + (\varepsilon - \hat{q}^2) \cdot \phi = 0$$

⇒

$$\hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 \quad \leftrightarrow \quad q^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x = \frac{x^2}{z^2} \quad \leftrightarrow \quad z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{\text{Js}^2}{\text{kg}}} = \sqrt{\text{m}^2} = \text{m} \right]$$

Damit ergibt sich:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! z} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot H_n\left(\frac{x}{z}\right) \cdot e^{-\frac{x^2}{2z^2}}$$

Wobei das z im Wurzelausdruck aus dem Übergang Normierte Normalverteilung $N(0; 1)$ zur Normalverteilung $N(0; \sigma^2)$ herrührt.

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \quad \leftrightarrow \quad f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Der Übergang zur zeitabhängigen Schrödinger- Gleichung erfolgt durch:

$$\psi(q; E; t) = \phi_n(q) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

⇒

$$\psi(q; \omega; t) = \phi_n(q) \cdot e^{-i\omega t}$$

⇒

$$\psi(q; \omega; t) = \phi_n(q) \cdot [\cos(\omega t) - i \cdot \sin(\omega t)]$$

⇒

$$\psi(q; \omega; t) = \phi_n(q) \cdot \cos(\omega t) - i \cdot \phi_n(q) \cdot \sin(\omega t)$$

Es erfolgt eine Zerlegung in Real- und Imaginäranteil:

$$\begin{aligned} \text{Re } \psi &= +\phi_n(q) \cdot \cos(\omega t) \\ \text{Im } \psi &= -\phi_n(q) \cdot \sin(\omega t) \end{aligned}$$

Die Ergebnisse werden den Achsen eines kartesischen $[X; Y]$ -Koordinatensystems zugeordnet:

$$\begin{aligned} X(q; \omega; t) &= \text{Re } \psi \\ Y(q; \omega; t) &= \text{Im } \psi \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned} X(q; \omega; t) &= +\phi_n(q) \cdot \cos(\omega t) \\ Y(q; \omega; t) &= -\phi_n(q) \cdot \sin(\omega t) \end{aligned}$$

Es besteht ein Zusammenhang zwischen q und ω :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad \rightarrow \quad \hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x^2$$

⇒

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \left[\frac{\text{J}}{\text{Js}} = \frac{1}{\text{s}} \right] \quad q_0 = \omega \cdot \frac{m}{\hbar} \left[\frac{\text{kg}}{\text{Js}^2} = \frac{1}{\text{m}^2} \right] \quad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x \left[\sqrt{\frac{\text{kg}}{\text{Js}^2} \text{m}^2} = 1 \right]$$

⇒

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad q_0 = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{m}{\hbar} \quad q = \sqrt{\frac{E}{\hbar} \cdot \frac{m}{\hbar}} \cdot x$$

⇒

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad q = x \cdot \sqrt{q_0}$$

Es wird substituiert:

$$X(x; \omega; t) = +\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \cos(\omega t)$$

$$Y(x; \omega; t) = -\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \sin(\omega t)$$

Sowie nichtrelativistische Zusammenhänge:

$$c \cdot t = x$$

⇒

$$X(x; \omega) = +\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \cos\left(x \cdot \frac{\omega}{c}\right)$$

$$Y(x; \omega) = -\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \sin\left(x \cdot \frac{\omega}{c}\right)$$

Nit:

$$\omega = 2\pi \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{\bar{\lambda}}$$

⇒

$$X(x) = +\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \cos\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right)$$

$$Y(x) = -\phi_n(x\sqrt{q_0}) \cdot \sin\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right)$$

Wobei real gelten muss:

$$\frac{1}{\sqrt{q_0}} [\text{m}] \leq \frac{\bar{\lambda}}{2} [\text{m}] \quad \rightarrow \quad \bar{\lambda} \cdot \sqrt{q_0} \geq 2$$

⇒

$$\frac{\hbar}{\sqrt{Em}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} = \frac{x}{q} \leq \frac{\bar{\lambda}}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{c}{\omega} = \frac{c}{2} \cdot \frac{\hbar}{E} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{t} \cdot \frac{\hbar}{E}$$

⇒

$$q \geq 2 \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot t = 2 \cdot \omega t$$

⇒

$$E \leq \frac{q}{2} \cdot \frac{\hbar}{t} = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\hbar m \omega} \cdot \frac{x}{t} \left[\sqrt{\text{Jkg} \frac{\text{m}}{\text{s}}} = \frac{\text{kgm}}{\text{s}^2} \text{m} = \text{Nm} = \text{J} \right]$$

⇒

$$E \leq \frac{p}{2} \cdot \frac{x}{t} \left[\text{Ns} \frac{\text{m}}{\text{s}} = \text{Nm} = \text{J} \right] = \frac{1}{2} \cdot p v = \frac{1}{2} \cdot m v^2$$

⇒

$$E \leq E_{kin} \quad \leftrightarrow \quad \frac{E}{p} \leq \frac{v}{2}$$

Für ein $\bar{\lambda} \cdot \sqrt{q_0} \gg 2$ kann vereinfacht werden:

$$\cos\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right) = \cos(\omega t) \approx 1 \quad \sin\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right) = \sin(\omega t) \approx \frac{x}{\bar{\lambda}} = \omega t$$

⇒

$$X(x) = +\phi_n \cdot (x \cdot \sqrt{q_0}) \quad \leftrightarrow \quad X(q) = +\phi_n(q)$$

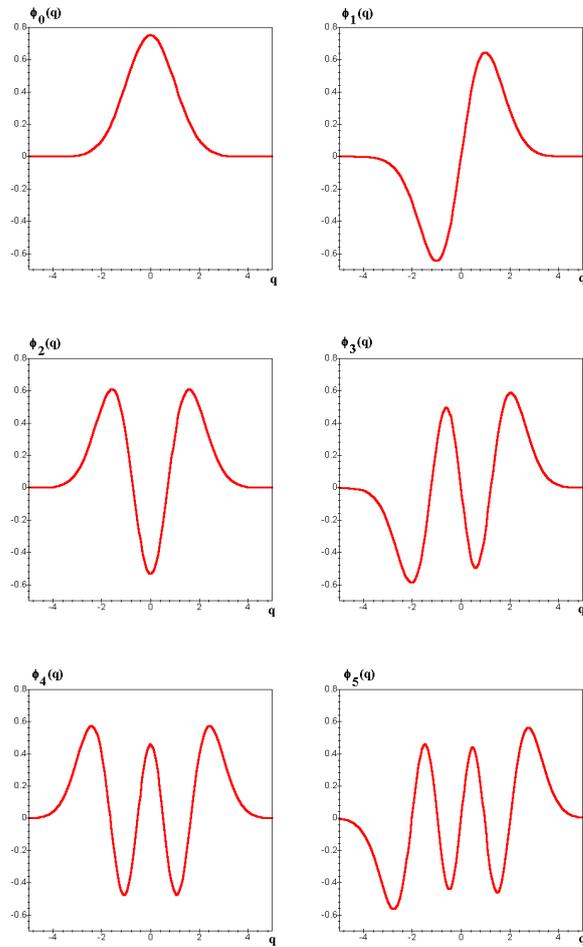
$$Y(x) = -\phi_n \cdot (x \cdot \sqrt{q_0}) \cdot \frac{x}{\bar{\lambda}} \quad \leftrightarrow \quad Y(q; \omega; t) = -\phi_n(q) \cdot \omega t$$

⇒

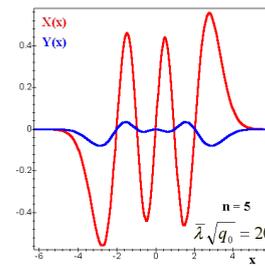
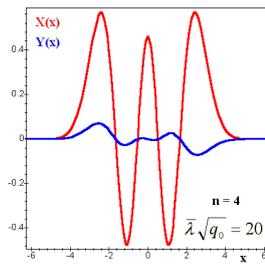
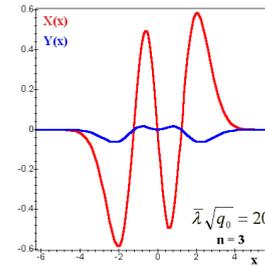
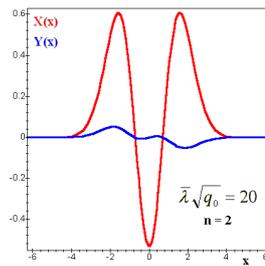
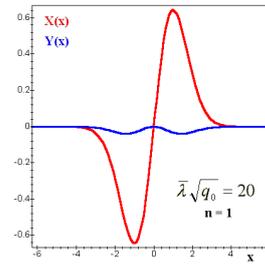
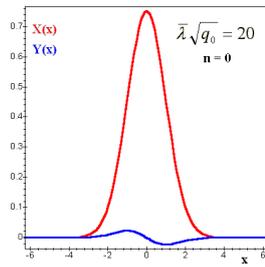
$$Y(x) \cdot \bar{\lambda} = -X(x) \cdot x \quad \leftrightarrow \quad Y(q; \omega; t) = -X(q) \cdot \omega t$$

Diese parametrische Funktion kann nun dargestellt werden.

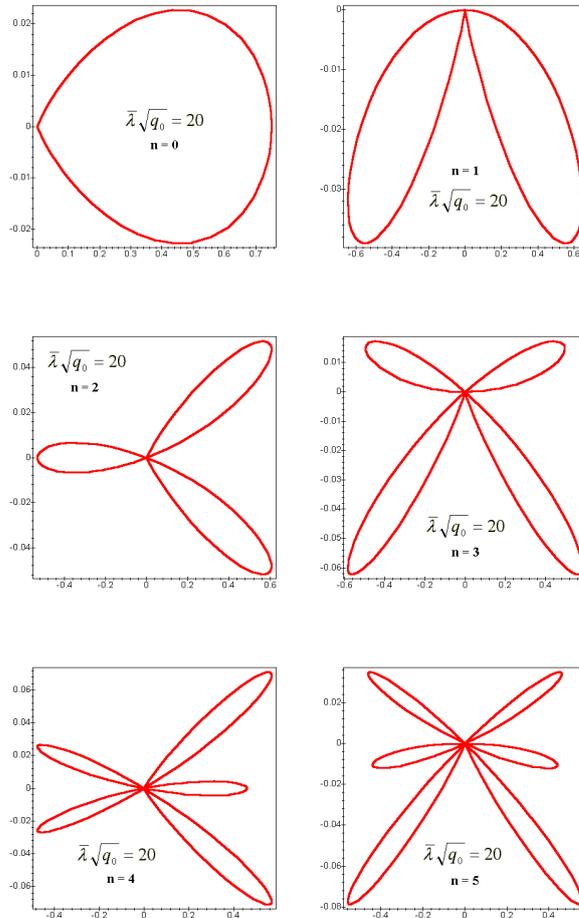
Die ersten sechs Verteilungen $\phi_n(q)$ grafisch dargestellt:



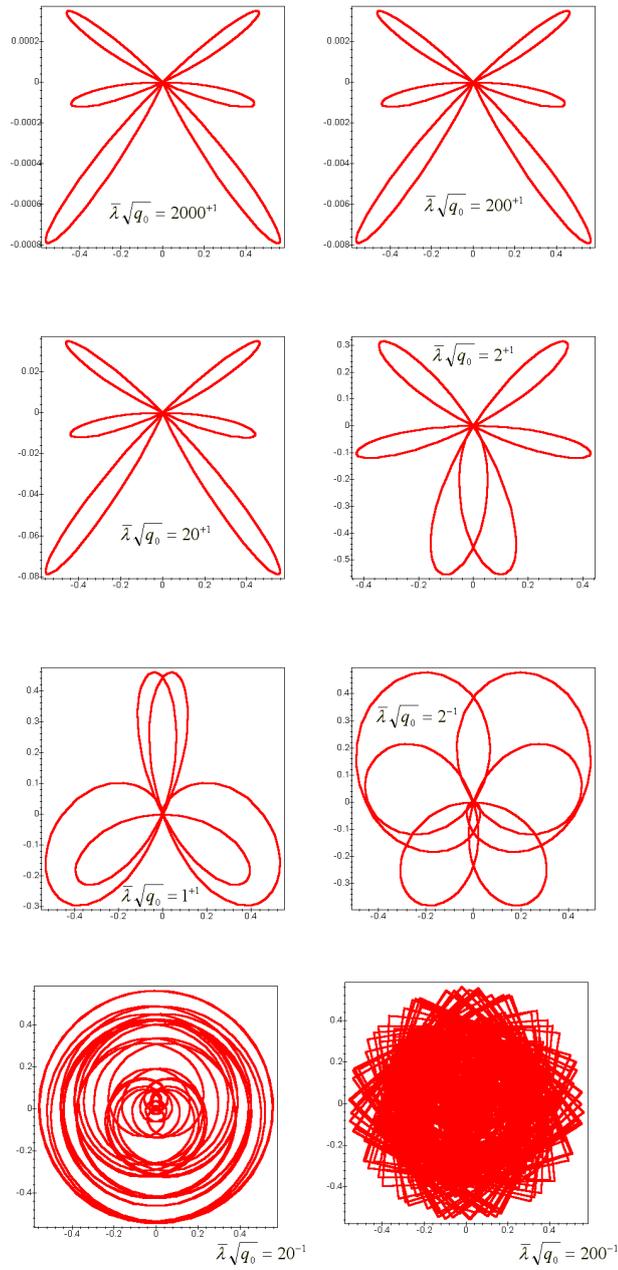
Die Funktionen $X(x)$ und $Y(x)$ in grafischer Darstellung:



Die Orbitale aus der parametrischen Funktion $Y(x) \cdot \bar{\lambda} = -X(x) \cdot x$:



Wirkung des Verhältnisses $\bar{\lambda}\sqrt{q_0}$ auf das Orbital mit $n = 5$:



11 Schrödinger-Gleichung und μ -Potential

11.1 Ermittlung der Verteilung $\phi(p)$

Gegeben ist die Schrödinger Gleichung in stationärer Form:

[001]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + E_{\text{Pot}} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

Es soll ein Morse- Potential vorliegen:

$$E_{\text{Pot}} = E_{\text{Dis}} \cdot (1 - e^{-ax})^2 = E_{\text{Max}} \cdot (1 - e^{-ax})^2 = \hat{E} \cdot (1 - e^{-ax})^2 \quad \rightarrow \quad a > 0$$

Es wird modifiziert indem die Zentrierung aufgehoben wird:

$$E_{\text{Pot}} - \hat{E} = \hat{E} \cdot (1 - e^{-ax})^2 - \hat{E}$$

\Leftrightarrow

$$\hat{E}_{\text{Pot}} = \hat{E} \cdot (1 - 2e^{-ax} + e^{-2ax}) - \hat{E}$$

\Leftrightarrow

$$\hat{E}_{\text{Pot}} = \hat{E} \cdot (e^{-2ax} - 2e^{-ax})$$

\Rightarrow

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi'' + \hat{E} \cdot (e^{-2ax} - 2e^{-ax}) \cdot \psi = E \cdot \psi$$

\Leftrightarrow

$$\psi'' + 2m \cdot \frac{E + 2\hat{E} \cdot e^{-ax} - \hat{E} \cdot e^{-2ax}}{\hbar^2} \cdot \psi = 0$$

Eine Variablentransformation wird durchgeführt:

$$\psi'' + \left(2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} + 2m \cdot \frac{2\hat{E} \cdot e^{-ax} - \hat{E} \cdot e^{-2ax}}{\hbar^2} \right) \cdot \psi = 0$$

\Leftrightarrow

$$\psi'' + \left(2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} + 4m \cdot \hat{E} \cdot \frac{e^{-ax}}{\hbar^2} - 2m \cdot \hat{E} \cdot \frac{e^{-2ax}}{\hbar^2} \right) \cdot \psi = 0$$

Mit:

$$\varepsilon = 2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{J}}{\text{J}^2 \text{s}^2} = \frac{1}{\text{m}^2} \right] \quad q = q_0 \cdot \hat{q} = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \hat{E} \cdot e^{-ax} \left[\frac{\text{kgJ}}{\text{J}^2 \text{s}^2} = \frac{1}{\text{m}^2} \right]$$

\Rightarrow

$$\phi'' + (\varepsilon + 2q_0 \hat{q} - q_0 \hat{q}^2) \phi = 0$$

\Leftrightarrow

$$\phi'' + (\varepsilon + 2q - \hat{q}q) \phi = 0$$

Lösung durch den Ansatz nach Allgemeine, homogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung.

Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + (\varepsilon + 2q - \hat{q}q) = 0$$

\Rightarrow^5

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{\varepsilon + 2q - \hat{q}q} = \pm \sqrt{(-1)(\hat{q}q - 2q - \varepsilon)}$$

\Leftrightarrow

$$a \pm ib = 0 \pm i \sqrt{\hat{q}q - 2q - \varepsilon}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q - 2q - \varepsilon > 0$$

⁵Diese Missachtung der Umformungsregel, respektive Erzwingung einer komplexen Lösung, bewirkt das Erzeugen eines kontinuierlichen Spektrums. Die Lösung der Schrödinger- Gleichung und Ziel vorliegender Berechnungen ist die Ermittlung des diskreten Spektrums.

\Leftrightarrow^6

$$\hat{q}q - 2q > \varepsilon$$

Liegt diese Bedingung vor, ist das System schwingungsfähig. Für eine noch restriktivere Annahme,

$$\hat{q}q - 2q \gg \varepsilon$$

vereinfacht sich die Differentialgleichung:

$$\lambda^2 - (\hat{q}q - 2q) = 0$$

 \Rightarrow

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

Fallunterscheidung:

Komplexe Lösung:

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{2q - \hat{q}q} = \pm \sqrt{(-1)(\hat{q}q - 2q)}$$

 \Rightarrow

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q - 2q > 0$$

 \Leftrightarrow

$$\hat{q} = e^{-ax} > 2$$

 \Leftrightarrow

$$x < -\frac{1}{a} \cdot \ln 2$$

 \Rightarrow

$$\hat{E}_{\text{Pot}} = \hat{E} \cdot (e^{-2ax} - 2e^{-ax})$$

 \Rightarrow

$$\hat{E}_{\text{Pot}} > \hat{E} \cdot (4 - 2 \cdot 2) = 0$$

Reelle Lösung mit $\hat{q} = 2$:

$$\lambda_{1;2} = \pm \sqrt{2q - \hat{q}q} = 0$$

 \Rightarrow

$$(\lambda_1 = \lambda_2) \in \mathbb{R}$$

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = 0 \quad \phi_2 = x$$

Kontrolle der Lösungen:

$$\begin{array}{lclclcl} \phi_1 = 0 & \rightarrow & \phi_1' = 0 & \rightarrow & \phi_1'' = 0 \\ \phi_2 = x & \rightarrow & \phi_2' = 1 & \rightarrow & \phi_2'' = 0 \end{array}$$

 \Rightarrow

$$\begin{array}{lcl} \phi'' - (\hat{q}q - 2q) \cdot \phi = 0 & \rightarrow & 0 - 0 \cdot 0 = 0 \\ & & 0 - 0 \cdot x = 0 \end{array}$$

Reelle Lösung ohne $\hat{q} = 2$:

Dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q - 2q < 0$$

 \Leftrightarrow

$$\hat{q} = e^{-ax} < 2$$

⁶Dies verlangt im exakten Sinne $q^2 < \varepsilon$ welches erfüllt ist bei korrekter Umformung, jedoch als restriktivere Annahme im Folgenden $q^2 \ll \varepsilon$ keine Lösung liefert.

⇒

$$\hat{E}_{\text{Pot}} < \hat{E} \cdot (4 - 2 \cdot 2) = 0$$

Das Ergebnis der Charakteristischen Gleichung ergibt diesmal:

$$\lambda_1 = +\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

$$\lambda_2 = -\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

⇒

$$(\lambda_1 \neq \lambda_2) \in \mathbb{R}$$

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

$$\phi_2 = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

Kontrolle der Lösungen:

$$\phi_1 = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \rightarrow \phi_1' = +\sqrt{\hat{q}q-2q} \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \rightarrow \phi_1'' = +(\hat{q}q-2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

$$\phi_2 = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \rightarrow \phi_2' = -\sqrt{\hat{q}q-2q} \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \rightarrow \phi_2'' = +(\hat{q}q-2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

⇒

$$\begin{aligned} \phi'' - (\hat{q}q - 2q) \cdot \phi = 0 &\rightarrow +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} - (\hat{q}q - 2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} = 0 \\ &\rightarrow +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} - (\hat{q}q - 2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} = 0 \end{aligned}$$

Zusammenfassung der Fälle:

$$\begin{aligned} \hat{E}_{\text{Pot}} > 0 &\rightarrow \text{kontinuierliches Spektrum} \\ \hat{E}_{\text{Pot}} = 0 &\rightarrow \text{diskretes Spektrum} \\ \hat{E}_{\text{Pot}} < 0 &\rightarrow \text{diskretes Spektrum} \end{aligned}$$

Ziel der Lösung der Schrödinger-Gleichung ist es, das diskrete Spektrum berechnen zu können, daher sind zwei Lösungen von Bedeutung:

$$L_1 = \left\{ \begin{array}{l} \phi_1(x) = 0 \\ \phi_2(x) = x \end{array} \right\} \leftrightarrow L_2 = \left\{ \begin{array}{l} \phi_1(x) = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \\ \phi_2(x) = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \end{array} \right\}$$

Für ein $\hat{q} \rightarrow 2$ wird sich die gegebene Differentialgleichung wie die Lösung L_1 verhalten, für $\hat{q} \rightarrow \pm\infty$ wie L_2 . Dabei ist zu beachten, dass die Wellenfunktion nur dann einen endlichen Wert annimmt, wenn L_n konvergiert, also $e^{-\infty}$ gilt (Daher entfällt ϕ_1 in beiden L). Die verbleibenden Lösungsmengen können transformiert und zusammen gefasst werden:

$$-x\sqrt{\hat{q}q-2q} \rightarrow p = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m \cdot \hat{E}}}{\hbar} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax} \left[\frac{\sqrt{\text{kgJ}}}{\text{Js}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

$$x \rightarrow s = \sqrt{\varepsilon} = \frac{\sqrt{2m \cdot \hat{E}}}{\hbar} \left[\frac{\sqrt{\text{kgJ}}}{\text{Js}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

⇒

$$\phi(p) = e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s$$

Wobei $\phi(p)$ für ein $\hat{E} < 0$ gültig ist, diskretes Spektrum, dezentriertes Morsepotential!⁷

⁷Die Funktion $\phi(p)$ ist tatsächlich eine Verteilung, zur grafischen Verdeutlichung wird beispielhaft gesetzt:

$$\hat{E} = -1 \quad E = \frac{1}{4} \quad m = 2 \quad \hbar = 1 \quad a = 2 \quad F(p) = \frac{1}{2}$$

⇒

$$p = 2e^{-x} \quad s = 1$$

⇒

$$\phi(x) = e^{-e^{-x}} e^{-x}$$

11.2 Ermittlung der Potentialstufen

Es wird ein Formfaktor F eingeführt, um die nun vorliegende Verteilung $\phi(p)$ zu präzisieren:

$$\phi(p) = F(p) \cdot e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s$$

\Rightarrow

$$\phi'(p) = F'(p) \cdot e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi(p) = \left(\frac{F'(p)}{F(p)} + \frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi(p)$$

\Rightarrow

$$\phi''(p) = \left(\frac{F''(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} - \frac{s}{p^2}\right) \cdot \phi(p) + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi'(p)$$

\Rightarrow

$$\phi''(p) = \left[\frac{F''(p)}{F(p)} + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right] \cdot \phi(p)$$

Vorliegende Differentiale werden in die ursprüngliche DGL eingesetzt:

$$\phi'' + (\varepsilon + 2q_0\hat{q} - q_0\hat{q}^2) \cdot \phi = 0$$

\Rightarrow

$$\phi'' + (\varepsilon + (2 - \hat{q})p^2) \cdot \phi = 0$$

\Rightarrow

$$\frac{F''(p)}{F(p)} + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2} + \varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 = 0$$

\Leftrightarrow

$$F''(p) + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot F'(p) + \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot F(p) = 0$$

\Leftrightarrow

$$p \cdot F''(p) + (2s - p) \cdot F'(p) + \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot p \cdot F(p) = 0$$

Es wird substituiert:

$$l = \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot p$$

\Rightarrow

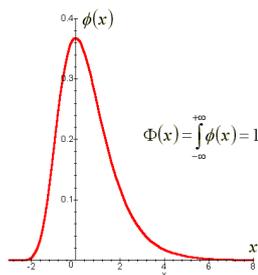
$$p \cdot F''(p) + (2s - p) \cdot F'(p) + l \cdot F(p) = 0$$

Die nun vorliegende Differentialgleichung ist als die Konfluente hypergeometrische Differentialgleichung bekannt. Für die Funktion F steht die Konfluente hypergeometrische Funktion als Berechnungsgrundlage zur Verfügung.

\Rightarrow

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) = e^{-e^{-x}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 1$$

\Rightarrow



Die Konfluente hypergeometrische Funktion wird durch die Reihe

$$F(\alpha; \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \cdot \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \cdot \frac{z^2}{2!} + \dots$$

definiert. Die Funktion genügt der Gleichung:

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0$$

Die Funktion F ist für alle endlichen Werte von z konvergent. Der Parameter α kann beliebig gewählt werden, der von γ nicht Null oder eine negative ganze Zahl. Wenn $\alpha = -N_0$ gilt, dann reduziert sich F auf ein Polynom vom Grade α .

Für vorliegende Konfluente hypergeometrische Differentialgleichung gilt:

$$F(-l; 2s; p) = 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{p}{1!} + \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \frac{p^2}{2!} + \dots$$

Nachweis, dass der Wert p ein endlicher ist, somit F konvergent, welches zur weiteren Berechnung notwendig ist:

$$p = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m\hat{E}}}{\hbar} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax}$$

Die Masse m und die Steife a sind per Aufgabenstellung endlich (sonst wäre die Aufgabenstellung per se hinfällig) ebenso die Auslenkung x , das Wirkungsquantum \hbar per definitionem. Die Energie $\hat{E} < 0$ ist die maximale Energie des Potentials und somit ebenfalls endlich. Der Wert p besitzt keine Pole oder Sprungstellen und ist somit im Rahmen der Aufgabenstellung endlich. Damit kann die Funktion F als konvergent angesehen werden.

Nachweis, dass der Wert $2s$ nicht Element von $-N_0$ werden kann:

$$s = \sqrt{\varepsilon} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Das Wirkungsquantum \hbar ist positiv endlich, was s unmöglich zu Null werden lassen könnte. Die Werte Masse m und die Gesamtenergie E müssen größer 0 sein für die Existenz der Aufgabenstellung. Daher ist gegeben:

$$s > 0$$

Nachweis, dass sich die Funktion F zu einem Polynom reduzieren lässt, was notwendig zur Lösung der Schrödinger-Gleichung ist. Dabei reicht der einfache Nachweis über eine spezielle Lösung mit sinnvoll gewählten Werten völlig aus, denn gibt es mindestens eine Lösung, ist die Schrödinger-Gleichung für vorliegenden Potential lösbar:

$$-l = -N_0$$

\Rightarrow

$$l = \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{s}{p^2} \right) \cdot p$$

Dabei soll hier der Nachweis mit $l = 0$ geführt werden:

$$l = 0 \rightarrow p_1 = 0$$

\Rightarrow

$$\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{s}{p^2} = 0$$

\Rightarrow

$$p^4 + \frac{\varepsilon + \frac{1}{4}}{2 - \hat{q}} \cdot p^2 - \frac{s}{2 - \hat{q}} \cdot p + \frac{s - 1}{2 - \hat{q}} \cdot s = 0$$

Mit:

$$2 - \hat{q} = 1 \quad \rightarrow \quad \hat{q} = 1 \quad \rightarrow \quad x = 0 \quad \rightarrow \quad \text{definiert}$$

\Rightarrow

$$p^4 + \left(\varepsilon + \frac{1}{4}\right) \cdot p^2 - s \cdot p + s \cdot (s - 1) = 0$$

Mit:

$$s = 1 \quad \rightarrow \quad \varepsilon = 1 \quad \rightarrow \quad \sqrt{2mE} = \hbar \quad \rightarrow \quad \text{definiert}$$

\Rightarrow

$$p^3 + \frac{5}{4} \cdot p - 1 = 0$$

$$\rightarrow$$

$$p_2 = 0 \quad p_3 = 0,6144\dots \quad p_4 \in \text{Im} \quad p_5 \in \text{Im}$$

\Rightarrow

$$p_3 = 0,6144\dots = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m\hat{E}}}{\hbar} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax}$$

\Leftrightarrow

$$p_3^2 = 0,3775\dots = q = q_0 \cdot \hat{q} = \frac{-2m\hat{E}}{\hbar^2} \cdot e^{-ax} \quad \rightarrow \quad \hat{E} < 0 \quad \rightarrow \quad \text{diskretes Spektrum}$$

Damit ist der Nachweis erbracht, dass die Konfluente hypergeometrische Funktion bei speziellen gegebenen Randbedingungen als Polynom angesehen werden kann. Dann gilt:

$$F(p) = \sum_{k=0} a_k p^k$$

\Rightarrow

$$F'(p) = \sum_{k=0} k a_k p^{k-1}$$

\Rightarrow

$$F''(p) = \sum_{n=0} k(k-1) a_k p^{k-2}$$

Vorliegende Differentiale werden in die Konfluente hypergeometrische DGL eingesetzt:

$$p \sum_{k=0} k(k-1) a_k p^{k-2} + (2s-p) \sum_{k=0} k a_k p^{k-1} + l \sum_{k=0} a_k p^k = 0$$

\Leftrightarrow

$$\sum_{k=0} [k(k-1) a_k p^{k-1} + 2s k a_k p^{k-1} - k a_k p^k + l a_k p^k] = 0$$

\Leftrightarrow

$$\sum_{k=0} [(k+1) k a_{k+1} p^k + 2s(k+1) a_{k+1} p^k - k a_k p^k + l a_k p^k] = 0$$

\Leftrightarrow

$$((k+2s)(k+1) a_{k+1} + (l-k) a_k) p^k = 0$$

Es ist eine Rekursionsgleichung für die Berechnung der Koeffizienten extrahierbar:

$$(k+2s) \cdot (k+1) \cdot a_{k+1} + (l-k) \cdot a_k = 0$$

\Leftrightarrow

$$a_{k+1} = \frac{k-l}{(k+2s) \cdot (k+1)} \cdot a_k$$

Damit ist die Berechnungsgrundlage der Koeffizienten der Konfluenten hypergeometrischen Funktion gefunden. Für die spätere Normierung der Wellenfunktion ist es nötig, dass ein endliches Polynom vorliegt, daher muss die obige Rekursion abbrechen, bedeutet konkret:

$$a_{k+1} = 0$$

\Rightarrow

$$0 = (k-l) \cdot a_k$$

\Rightarrow

$$(k=l) \in N_0$$

Was hier über die Koeffizienten $a_{k(+1)}$, oben als Einzelnachweis durch p gezeigt wurde.

Um endgültig zum Lösungsergebnis der Schrödinger-Gleichung zu kommen, muss nun der Anfangswert a_0 gesetzt und die Variablen interpretiert werden. Bekannt ist, dass für kleine Werte von x das Morse-Potential sich verhält wie ein Harmonisches Potential. Daher sind Startwerte definierbar:

$$\begin{aligned} a_0 = -\hat{E} = -\bar{h}\omega &\quad \rightarrow \quad \bar{h}\omega = \hat{E} < 0 \\ &\rightarrow \\ &\text{diskretes Spektrum} \\ &\rightarrow \\ &\text{Potentialmulde (Minimum) des dezentrierten Potentials} \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$p \quad \rightarrow \quad \sqrt{q} \quad \rightarrow \quad \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}}$$

\Rightarrow

$$p^2 \quad \rightarrow \quad p^2 \cdot (2 - \hat{q}^2) \quad \rightarrow \quad (-1 \cdot) (2e^{-ax} - e^{-2ax}) = -2 \cdot \frac{m\hat{E}}{\hbar^2} \cdot (2e^{-ax} - e^{-2ax})$$

\Rightarrow

$$p^2 \quad \rightarrow \quad 2 \cdot \frac{m\hat{E}}{\hbar^2} \cdot \frac{\hat{E}_{\text{Pot}}}{\hat{E}} \quad \rightarrow \quad 2 \cdot \frac{m}{\hbar^2} \cdot \hat{E}_{\text{Pot}} \quad \rightarrow \quad \hat{E}_{\text{pot}} < 0 \quad \rightarrow \quad \text{diskretes Spektrum}$$

Die Variable p repräsentiert die Energieeigenwerte des Potentials, für ein Harmonisches Potential gilt:

$$E_{\text{Harmonic}}(n) = \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

\Rightarrow

$$p \quad \rightarrow \quad n + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} = \bar{h}\omega \left[\frac{\text{Js}}{s} = \text{J} \right]$$

Damit kann $F(p)$ ermittelt werden:

$$F(-l; 2s; p) = a_0 \frac{p^0}{0!} + a_1 \frac{p^1}{1!} + a_2 \frac{p^2}{2!} + a_3 \frac{p^3}{3!} + a_4 \frac{p^4}{4!} + a_5 \frac{p^5}{5!} + \dots$$

Da die im Nenner stehende Fakultät sehr schnell wächst, wird der Einfluss der Glieder wachsender Potenzen immer kleiner. Im Allgemeinen wird nur das erste und zweite Glied genutzt:

k = 0 :

$$a_1 = \frac{0 - l}{(0 + 2s) \cdot (0 + 1)} \cdot a_0 = \frac{1}{1!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \hat{E}$$

k = 1 :

$$a_2 = \frac{1 - l}{(1 + 2s) \cdot (1 + 1)} \cdot a_0 = -\frac{1}{2!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \hat{E}$$

k = 2 :

$$a_3 = \frac{2 - l}{(2 + 2s) \cdot (2 + 1)} \cdot a_2 = \frac{1}{3!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2}{2s + 2} \cdot \hat{E}$$

k = 3 :

$$a_4 = \frac{3 - l}{(3 + 2s) \cdot (3 + 1)} \cdot a_3 = -\frac{1}{4!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2}{2s + 2} \cdot \frac{l - 3}{2s + 3} \cdot \hat{E}$$

k = 4 :

$$a_5 = \frac{4 - l}{(4 + 2s) \cdot (4 + 1)} \cdot a_4 = \frac{1}{5!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2}{2s + 2} \cdot \frac{l - 3}{2s + 3} \cdot \frac{l - 4}{2s + 4} \cdot \hat{E}$$

Es wird substituiert:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= -\frac{1}{1} \cdot \hat{E} \\
 &= -\bar{\chi}_0 \cdot \hat{E} \\
 a_1 &= +\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \hat{E} \\
 &= +\bar{\chi}_0 \cdot \bar{\chi}_1 \cdot \hat{E} \\
 a_2 &= -\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \hat{E} \\
 &= -\bar{\chi}_0 \cdot \bar{\chi}_1 \cdot \bar{\chi}_2 \cdot \hat{E} \\
 a_3 &= +\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{l-2}{2s+2} \cdot \hat{E} \\
 &= +\bar{\chi}_0 \cdot \bar{\chi}_1 \cdot \bar{\chi}_2 \cdot \bar{\chi}_3 \cdot \hat{E} \\
 a_4 &= -\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{l-2}{2s+2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{l-3}{2s+3} \cdot \hat{E} \\
 &= -\bar{\chi}_0 \cdot \bar{\chi}_1 \cdot \bar{\chi}_2 \cdot \bar{\chi}_3 \cdot \bar{\chi}_4 \cdot \hat{E} \\
 a_5 &= +\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{l-2}{2s+2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{l-3}{2s+3} \cdot \frac{1}{5} \cdot \frac{l-4}{2s+4} \cdot \hat{E} \\
 &= +\bar{\chi}_0 \cdot \bar{\chi}_1 \cdot \bar{\chi}_2 \cdot \bar{\chi}_3 \cdot \bar{\chi}_4 \cdot \bar{\chi}_5 \cdot \hat{E}
 \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}
 a_0 &= -\chi_0 \cdot \hat{E} = -\chi_0 \cdot \bar{h}\omega \\
 a_1 &= +\chi_1 \cdot \hat{E} = +\chi_1 \cdot \bar{h}\omega \\
 a_2 &= -\chi_2 \cdot \hat{E} = -\chi_2 \cdot \bar{h}\omega \\
 a_3 &= +\chi_3 \cdot \hat{E} = +\chi_3 \cdot \bar{h}\omega \\
 a_4 &= -\chi_4 \cdot \hat{E} = -\chi_4 \cdot \bar{h}\omega \\
 a_5 &= +\chi_5 \cdot \hat{E} = +\chi_5 \cdot \bar{h}\omega
 \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$F(-l; 2s; p) = \hat{E}(n) = \begin{cases} -\hat{E} + \bar{h}\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ -\bar{h}\omega\chi_2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \bar{h}\omega\chi_3 \left(n + \frac{1}{2}\right)^3 \\ -\bar{h}\omega\chi_4 \left(n + \frac{1}{2}\right)^4 + \bar{h}\omega\chi_5 \left(n + \frac{1}{2}\right)^5 \\ \dots \end{cases}$$

\Rightarrow

$$\hat{E}(n) = -\hat{E} + \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots$$

\Leftrightarrow

$$\hat{E}(n) + \hat{E} = \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots$$

\Rightarrow^8

$$E(n) = \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$

\Leftrightarrow

$$E(n) = \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(1 - \chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)$$

⁸Wobei:

$$\omega = \frac{a}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{2E_{\text{Max}}}{m}}$$

Und:

$$\chi_2 = \frac{h^2\omega^2}{4E_{\text{Max}}}$$

Mit:

$$E_{\text{Max}} = -\hat{E}$$

⇒

$$E_{\text{Morse}}(n) = E_{\text{Harmonic}}(n) \left(1 - \chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) + \dots \right)$$

Wenn gelten soll $E_{\text{Morse}}(n) = E_{\text{Harmonic}}(n)$, dann muss χ_2 sein:

$$\chi_2 = 0$$

Für einen rein Harmonischen Oszillator gibt es keine maximale Anzahl von Energiestufen, während für einen Anharmonischen die Anzahl begrenzt ist, damit die Bedingung $\hat{E} < 0$ erfüllt ist:

$$\bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) - \bar{h}\omega \cdot \chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 < \hat{E}$$

⇒

$$a^2 - \frac{1}{\chi_2} \cdot a + \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega} > 0$$

⇒

$$a_1 = \frac{1}{2\chi_2} + \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$

$$a_2 = \frac{1}{2\chi_2} - \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$

⇒

$$n_{\text{max}} = \frac{1 - \chi_2}{2\chi_2} + \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$

⇒

$$\bar{h}\omega > 4 \cdot \hat{E} \cdot \chi_2$$

⇒

$$\frac{\bar{h}\omega}{4\hat{E}} > \chi_2$$

Dieses Ergebnis geht konform mit der Notwendigkeit des Harmonischen Oszillators $\chi_2 = 0$, denn dann:

$$\frac{\bar{h}\omega}{4\hat{E}} = 0$$

Kann nur gelten:

$$\hat{E} = \infty$$

11.3 Die z -Polynome

Die Anharmonizitäten sollen noch einmal aus der Konfluenten hypergeometrischen Funktion extrahiert und betrachtet werden:

$$\begin{aligned}
 & -\left(\frac{1}{1}\right) = -\bar{\chi}_0 \\
 & +\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2s}\right) = +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1 \\
 & -\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2s}\right)\left(\frac{1}{2(2s+1)}\right) = -\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2 \\
 & +\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2s}\right)\left(\frac{1}{2(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3(2s+2)}\right) = +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3 \\
 & -\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2s}\right)\left(\frac{1}{2(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3(2s+2)}\right)\left(\frac{1}{4(2s+3)}\right) = -\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3\bar{\chi}_4 \\
 & +\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2s}\right)\left(\frac{1}{2(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3(2s+2)}\right)\left(\frac{1}{4(2s+3)}\right)\left(\frac{1}{5(2s+4)}\right) = +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3\bar{\chi}_4\bar{\chi}_5 \\
 \Rightarrow &
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right) = \chi_0 \\
 & -\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right) = \chi_1 \\
 & +\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right) = \chi_2 \\
 & -\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right) = \chi_3 \\
 & +\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right)\left(\frac{l-4}{2s+4}\right) = \chi_4
 \end{aligned}$$

Die Anharmonizitäten folgen der Vorschrift:

$$\chi_n = \frac{-1^n}{n+1} z_{n+1}$$

\Rightarrow

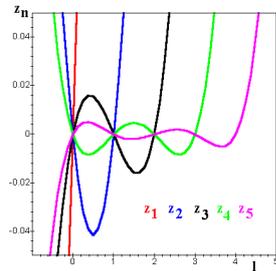
$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right) = z_1 \\
 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right) = z_2 \\
 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right) = z_3 \\
 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right) = z_4 \\
 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right)\left(\frac{l-4}{2s+4}\right) = z_5
 \end{aligned}$$

Die z -Polynome sind für $s > 0$ polstellenfrei und uneingeschränkt definiert. Für die Erzwingung des Harmonischen Oszillators muss dann gelten $z_n = 0$:

$$\begin{aligned}
 l &= 0 \\
 l(l-1) &= 0 \\
 l(l-1)(l-2) &= 0 \\
 l(l-1)(l-2)(l-3) &= 0 \\
 l(l-1)(l-2)(l-3)(l-4) &= 0
 \end{aligned}$$

Demnach reicht es, wenn die erste Anharmonizität $\chi_2 = 0$ gilt, um einen Anharmonischen Oszillator vorliegen zu haben was einer Eigenschaft der Konfluenten hypergeometrischen Funktion entspricht.

Die z -Polynome grafisch dargestellt für ein $s = 1$:



L^AT_EX 2_ε

