

Zusammenfassung der gewonnenen Erkenntnisse

Ein Abstecher zum Morsepotential

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

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

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

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

Zusammenfassung:

Was wurde auf den etwa letzten 10 Seiten dargestellt:

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

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

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

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

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

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

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

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

- Die Eigenfrequenzen beider Oszillatoren werden über die Störungsrechnung definiert:

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

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

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

⇒

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

⇒

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

⇒

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

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

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

- 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:

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

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

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

⇒

$$\begin{aligned} \chi_0 &= +\frac{1}{1} \\ \chi_1 &= -\frac{1}{1} \\ \chi_2 &= +\frac{1}{2} \end{aligned}$$

Ein Vergleich zum Morsepotential. Dieses ist definiert als:

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

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

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

„Taylor“- zerlegt:

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

Die erste Ableitung:

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

Durch „c“ dividiert:

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

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

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

Es sind die Teilanharmonizitäten vergleichbar:

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

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 „c¹“ gestrichen werden. Ergebnis ist eine Näherung:

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

⇒

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

⇒

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

\Rightarrow

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

 \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.