χ-Oszillator

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

www.Zenithpoint.de

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

Inhaltsverzeichnis

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

---

1 Zusammenfassung der gewonnen Erkenntnisse - Ein Abstecher zum Morsepotential

Es interessiert die Entwicklung der Differenz der Potentialstufen, worauf die Eigenfrequenzen liegen. So wird angesetzt: [001]

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

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

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

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:

$$ \int_{c_n}^{\infty}\dots\int_{c_3}^{\infty}\int_{c_2}^{\infty}\int_{c_1}^{\infty}\int_{0}^{\infty} z dt dc_1 dc_2 dc_3 \dots dc_n = \Psi\left(c_n, n\right) = e^{-c_n}\cdot\left(\gamma - c_n - n\right) $$

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

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

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

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

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

$$ \left(\omega_0^2\right)_{\text{Anharmonic}} = e^{\bar{\chi}}\left(\omega_0^2\right)_{\text{Harmonic}} \qquad \leftrightarrow \qquad \left(\omega_0^2\right)_{\text{Harmonic}} = e^{n-\gamma-1} $$

- Die Eigenfrequenzen beider Oszillatoren werden über die Störungsrechnung definiert:

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

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

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

$\Rightarrow$

$$ {}_{n}\Psi_0\left(1\right)_{\text{Anharmonic}} = 0 \qquad = \qquad {}_{n}\Psi_0\left(1\right)_{\text{Harmonic}} = 0 $$

$\Rightarrow$

$$ {}_{n}\Psi_0\left(2\right)_{\text{Anharmonic}} = 0,153... \qquad \approx \qquad {}_{n}\Psi_0\left(2\right)_{\text{Harmonic}} = 0,159... $$

$\Rightarrow$

$$ {}_{n}\Psi_0\left(3\right)_{\text{Anharmonic}} = 0,300... \qquad < \qquad {}_{n}\Psi_0\left(3\right)_{\text{Harmonic}} = 0,318... $$

- 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:

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

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

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

$\Rightarrow$

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

Ein Vergleich zum Morsepotential. Dieses ist definiert als:

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

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

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

Taylorzerlegt:

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

Die erste Ableitung:

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

Durch c dividiert:

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

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

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

Es sind die Teilanharmonizitäten vergleichbar:

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

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:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Die Globale, lineare Anharmonizität besitzt ein Offset.

$\LaTeX\, 2_\varepsilon$