Die Anharmonizität „χ"

Es sollen die Erkenntnisse über die charakteristische Potentialeigenschaft „Anharmonizität" zusammen gefasst werden.

Es sei gegeben ein Potential der Form:

$$\boxed{\Psi(c) = E_{\max}\Psi_0(c)}$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$$\boxed{\Psi_0(c)}$$

Die Ableitung nach dem intrinsischen Faktor:

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

Die erste Potenz des intrinsischen Faktors wird ausgeklammert:

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

Damit ist die **„Globale, exponentielle Anharmonizität"** definiert:

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

Die **„Globale, lineare Anharmonizität"** demzufolge:

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

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

- Beispiel:

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

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

Dabei ist der Wert „k" die Federkonstante:

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\chi=0}$$

Es liegt ein „Harmonischer Oszillator“ vor !

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

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

$\Rightarrow$

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

Die erste Ableitung:

$$\boxed{kc+mc''=0}$$

$\Rightarrow$

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

Die charakteristische Gleichung:

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

$\Leftrightarrow$

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

In komplexer Form:

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

Die Schwingungsfähigkeit kann nun nachgewiesen werden über die Forderung:

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

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:

$$\boxed{\Psi(c) = E_{\max}\Psi_0(c)}$$

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

$$\boxed{\Psi_0(c)}$$

Die Ableitung nach dem intrinsischen Faktor:

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

Es schliesst sich eine Polynomisierung an:

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

Die erste Potenz des intrinsischen Faktors wird ausgeklammert:

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

Die **„Teilanharmonizitäten“** sind ablesbar:

$$\boxed{\chi_n = a_n}$$

- Beispiel:

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

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

Die Polynomisierung:

$$\boxed{c\frac{\partial}{\partial c}\Psi_0(c) = c\left(1c^0\right)}$$

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

$$\boxed{\chi_0 = 1}$$

- Beispiel:

Das Morsepotential. Dieses ist definiert als:

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

Das Rumpfpotential wird extrahiert:

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

„Taylor"- zerlegt:

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

Die erste Ableitung:

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

Durch „c" dividiert:

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

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

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

Es sind die Teilanharmonizitäten ablesbar:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
$\chi_{n;Morse}$	$+^2/_1$	$-^3/^1$	$+^7/_3$	$-^5/_4$	$+^{31}/_{60}$	$-^7/_{40}$	$+^{127}/_{2520}$	$-^{17}/_{1344}$

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\boxed{\overline{\chi} = \ln 2 - c}$$

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:

$$\boxed{\Psi(c) = E_{\max}\left(1 - e^{-c}(c+1)\right)}$$

$\Rightarrow$

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

Die Polynom- Entwicklung für das Potential:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Die Teilanharmonizitäten:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
χ_n	$+^1/_1$	$-^1/_1$	$+^1/_2$	$-^1/_6$	$+^1/_{24}$	$-^1/_{120}$	$+^1/_{720}$	$-^1/_{5040}$

Die Globale, lineare Anharmonizität wird ermittelt

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

$\Rightarrow$

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

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\overline{\chi} = -c}$$

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

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

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:

$$\boxed{\Psi(c,q) = E_{\max}\left(1 - e^{-qc}(qc+1)\right)}$$

mit:

$$\boxed{q > 0}$$

$\Rightarrow$

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

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

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\boxed{e^{\chi} = qe^{-qc}}$$

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\chi = \ln q - qc}$$

Zu beachten ist das Ausmultiplizieren von „qc“ !

Die Teilanharmonizitäten sind von Interesse:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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:

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

$\Rightarrow$

$$E_{\max}\left(1-e^{-qc}(qc+1)\right)<\lim_{c=+\infty}E_{\max}\left(1-e^{-qc}(qc+1)\right)$$

$\Leftrightarrow$

$$E_{\max}\left(1-e^{-qc}(qc+1)\right)<E_{\max}$$

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$$qc+1>0$$

$\Rightarrow$

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

$$qc>-1$$

$\Rightarrow$

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

Die Schwingungsfähigkeit ist ab obigen Wert nachgewiesen.

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

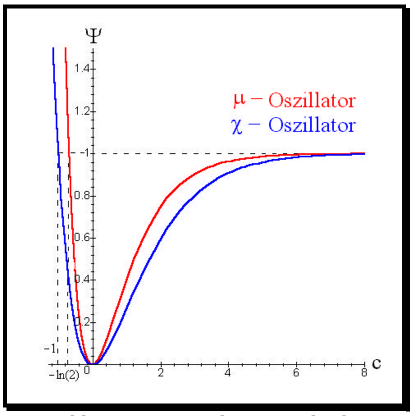

Bild 1: Die Potentiale im Vergleich.

Es existiert folgender Zusammenhang für das „χ- Potential“:

$$\boxed{-\infty < c_{\min} < 0}$$

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{+\infty > q = -\frac{1}{c_{\min}} > 0}$$

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\ln q = -\ln(-c_{\min})}$$

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

$$\boxed{-\infty < c_{\min} < 0}$$

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{+\infty > q = -\frac{\ln 2}{c_{\min}} > 0}$$

für die Annahme:

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

und:

$$\boxed{\chi = \ln 2 - qc}$$

sowie:

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

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

Da dieses Potential schwingungsfähig ist, ist dieses ein **„μ- Oszillator“**.