

χ -Oszillator

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

www.Zenithpoint.de

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

Inhaltsverzeichnis

1	Der Zusammenhang zwischen χ und einer Quantelung n	3
----------	--	----------

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

1 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:

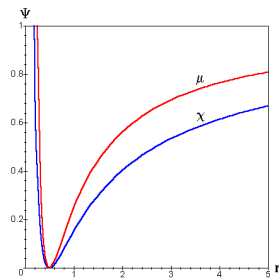
$$\ln(2n) + 1 = 2n$$

\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:



L^AT_EX 2_ε