

## Der Zusammenhang zwischen „ $\chi$ “ und einer Quantelung

### Zur Vorbereitung auf die Schrödinger- Gleichung

Gegeben aus vorangegangenen Kapiteln ist die Berechnung der Anharmonizitätskonstante „ $\chi$ “ für den betreffenden Oszillator:

- $\mu$ - Oszillator:

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

- $\chi$ - Oszillator:

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

Aus der zwingend gleichen Eigenfrequenz des Rumpfpotentials ist ein Zusammenhang zwischen einer Quantelung „ $n$ “ und „ $\chi$ “ ermittelt worden:

- $\mu$ - Oszillator:

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

⇒

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

⇒

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

- $\chi$ - Oszillator:

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

⇒

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

⇒

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

Die Rumpfpotentials können nun so modifiziert werden, dass nicht mehr „ $c$ “ maßgebend ist als intrinsischer Faktor, sondern „ $n$ “:

- $\mu$ - Oszillator:

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

⇒

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

- $\chi$ - Oszillator:

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

⇒

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

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

- $\mu$ - Oszillator:

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

⇔

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

- $\chi$ - Oszillator:

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

⇔

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

Der Wert „q“ beeinflusst demnach das (Start)- „n“ über eine Lambert- W-Funktion. Für „q = 1“ gilt:

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

⇒

$$n = 1$$

Zu beachten ist der Wegfall des Wertes „q“ im „ $\mu$ - Oszillator“ und das (Start)- „n“ für „q = 2“ beim „ $\chi$ - Oszillator“ von  $n = 1/2$ .

Diese Situation grafisch dargestellt:

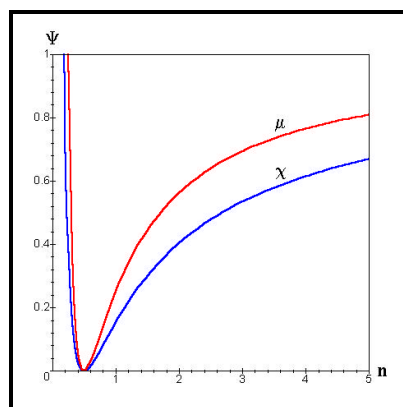


Bild 1: Die Potentiale in Abhängigkeit von „n“ im Vergleich mit „q = 2“.