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 betreffenden Oszillator:

- μ- Oszillator:

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

- χ- Oszillator:

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

Aus der zwingend gleichen Eigenfrequenz des Rumpfpotentiales ist ein Zusammenhang zwischen einer Quantelung „n“ und „χ“ ermittelt worden:

- μ- Oszillator:

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

⇒

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

⇒

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

- χ- Oszillator:

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

⇒

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

⇒

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

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

- μ- Oszillator:

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

⇒

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

- χ- Oszillator:

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

$\Rightarrow$

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

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

- μ- Oszillator:

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

$\Leftrightarrow$

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

- χ- Oszillator:

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

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\ln(qn)+1 = qn}$$

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

$$\boxed{\ln(n)+1 = n}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{n = 1}$$

Zu beachten ist der Wegfall des Wertes „q" im „μ- Oszillator" und das (Start)- „n" für „q = 2" beim „χ- Oszillator" von n = ½.

Diese Situation grafisch dargestellt:

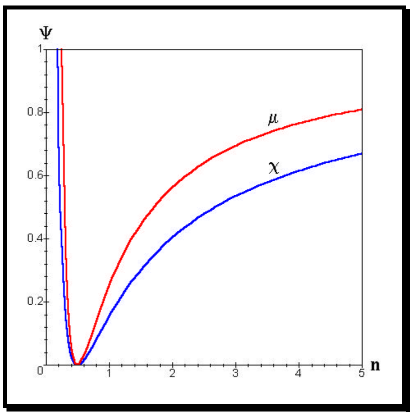

Bild 1: Die Potentiale in Abhängigkeit von „n" im Vergleich mit „q = 2".