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 Schrödinger-Gleichung und μ-Potential

1.1 Ermittelung der Verteilung $\phi\left(p\right)$

Gegeben ist die Schrödinger Gleichung in stationärer Form: [001]

$$-\frac{\bar{h}^2}{2m}\cdot\psi''+E_{\text{Pot}}\cdot\psi=E\cdot\psi$$

Es soll ein Morse- Potential vorliegen:

$$E_{\text{Pot}}=E_{\text{Dis}}\cdot\left(1-e^{-ax}\right)^2=E_{\text{Max}}\cdot\left(1-e^{-ax}\right)^2=\hat{E}\cdot\left(1-e^{-ax}\right)^2\qquad\rightarrow\qquad a>0$$

Es wird modifiziert indem die Zentrierung aufgehoben wird:

$$E_{\text{Pot}}-\hat{E}=\hat{E}\cdot\left(1-e^{-ax}\right)^2-\hat{E}$$

$\Leftrightarrow$

$$\hat{E}_{\text{Pot}}=\hat{E}\cdot\left(1-2e^{-ax}+e^{-2ax}\right)-\hat{E}$$

$\Leftrightarrow$

$$\hat{E}_{\text{Pot}}=\hat{E}\cdot\left(e^{-2ax}-2e^{-ax}\right)$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{\bar{h}^2}{2m}\cdot\psi''+\hat{E}\cdot\left(e^{-2ax}-2e^{-ax}\right)\cdot\psi=E\cdot\psi$$

$\Leftrightarrow$

$$\psi''+2m\cdot\frac{E+2\hat{E}\cdot e^{-ax}-\hat{E}\cdot e^{-2ax}}{\bar{h}^2}\cdot\psi=0$$

Eine Variablentransformation wird durchgeführt:

$$\psi''+\left(2m\cdot\frac{E}{\bar{h}^2}+2m\cdot\frac{2\hat{E}\cdot e^{-ax}-\hat{E}\cdot e^{-2ax}}{\bar{h}^2}\right)\cdot\psi=0$$

$\Leftrightarrow$

$$\psi''+\left(2m\cdot\frac{E}{\bar{h}^2}+4m\cdot\hat{E}\cdot\frac{e^{-ax}}{\bar{h}^2}-2m\cdot\hat{E}\cdot\frac{e^{-2ax}}{\bar{h}^2}\right)\cdot\psi=0$$

Mit:

$$\varepsilon=2m\cdot\frac{E}{\bar{h}^2}\left[\text{kg}\frac{\text{J}}{\text{J}^2\text{s}^2}=\frac{1}{\text{m}^2}\right]\qquad q=q_0\cdot\hat{q}=\frac{2m}{\bar{h}^2}\cdot\hat{E}\cdot e^{-ax}\left[\frac{\text{kgJ}}{\text{J}^2\text{s}^2}=\frac{1}{\text{m}^2}\right]$$

$\Rightarrow$

$$\phi''+\left(\varepsilon+2q_0\hat{q}-q_0\hat{q}^2\right)\phi=0$$

$\Leftrightarrow$

$$\phi''+\left(\varepsilon+2q-\hat{q}q\right)\phi=0$$

Lösung durch den Ansatz nach Allgemeine, homogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung.

Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2+\left(\varepsilon+2q-\hat{q}q\right)=0$$

$\Rightarrow$[1]

$$\lambda_{1;2}=\pm\sqrt{\varepsilon+2q-\hat{q}q}=\pm\sqrt{\left(-1\right)\left(\hat{q}q-2q-\varepsilon\right)}$$

$\Leftrightarrow$

$$a\pm ib=0\pm i\sqrt{\hat{q}q-2q-\varepsilon}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q-2q-\varepsilon>0$$

[1] Diese Missachtung der Umformungsregel, respektive Erzwingung einer komplexen Lösung, bewirkt das Erzeugen eines kontinuierlichen Spektrums. Die Lösung der Schrödinger- Gleichung und Ziel vorliegender Berechnungen ist die Ermittlung des diskreten Spektrums.

$\Leftrightarrow$[2]

$$\hat{q}q - 2q > \varepsilon$$

Liegt diese Bedingung vor, ist das System schwingungsfähig. Für eine noch restriktivere Annahme,

$$\hat{q}q - 2q >> \varepsilon$$

vereinfacht sich die Differentialgleichung:

$$\lambda^2 - (\hat{q}q - 2q) = 0$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_{1;2} = \pm\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

Fallunterscheidung:

Komplexe Lösung:

$$\lambda_{1;2} = \pm\sqrt{2q - \hat{q}q} = \pm\sqrt{(-1)\,(\hat{q}q - 2q)}$$

$\Rightarrow$

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q - 2q > 0$$

$\Leftrightarrow$

$$\hat{q} = e^{-ax} > 2$$

$\Leftrightarrow$

$$x < -\frac{1}{a} \cdot \ln 2$$

$\Rightarrow$

$$\hat{E}_{\text{Pot}} = \hat{E} \cdot \left(e^{-2ax} - 2e^{-ax}\right)$$

$\Rightarrow$

$$\hat{E}_{\text{Pot}} > \hat{E} \cdot (4 - 2 \cdot 2) = 0$$

Relle Lösung mit $\hat{q} = 2$:

$$\lambda_{1;2} = \pm\sqrt{2q - 2q} = 0$$

$\Rightarrow$

$$(\lambda_1 = \lambda_2) \in R$$

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = 0 \qquad\qquad \phi_2 = x$$

Kontrolle der Lösungen:

$$\begin{array}{ccccc} \phi_1 = 0 & \rightarrow & \phi_1' = 0 & \rightarrow & \phi_1'' = 0 \\ \phi_2 = x & \rightarrow & \phi_2' = 1 & \rightarrow & \phi_2'' = 0 \end{array}$$

$\Rightarrow$

$$\phi'' - (\hat{q}q - 2q) \cdot \phi = 0 \qquad \rightarrow \qquad \begin{array}{c} 0 - 0 \cdot 0 = 0 \\ \\ 0 - 0 \cdot x = 0 \end{array}$$

Reelle Lösung ohne $\hat{q} = 2$:

Dann, wenn gilt:

$$\hat{q}q - 2q < 0$$

$\Leftrightarrow$

$$\hat{q} = e^{-ax} < 2$$

[2]Dies verlangt im exakten Sinne $q^2 < \varepsilon$ welches erfüllt ist bei korrekter Umformung, jedoch als restriktivere Annahme im Folgenden $q^2 << \varepsilon$ keine Lösung liefert.

$\Rightarrow$

$$\hat{E}_{\text{Pot}} < \hat{E} \cdot (4 - 2 \cdot 2) = 0$$

Das Ergebnis der Charakteristischen Gleichung ergibt diesmal:

$$\lambda_1 = +\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

$$\lambda_2 = -\sqrt{\hat{q}q - 2q}$$

$\Rightarrow$

$$(\lambda_1 \neq \lambda_2) \in R$$

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

$$\phi_2 = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

Kontrolle der Lösungen:

$$\phi_1 = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \quad \to \quad \phi_1' = +\sqrt{\hat{q}q - 2q} \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \quad \to \quad \phi_1'' = +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

$$\phi_2 = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \quad \to \quad \phi_2' = -\sqrt{\hat{q}q - 2q} \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \quad \to \quad \phi_2'' = +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}}$$

$\Rightarrow$

$$\phi'' - (\hat{q}q - 2q) \cdot \phi = 0 \quad \to \quad \begin{array}{c} +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} - (\hat{q}q - 2q) \cdot e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} = 0 \\ +(\hat{q}q - 2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} - (\hat{q}q - 2q) \cdot e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} = 0 \end{array}$$

Zusammenfassung der Fälle:

$$\begin{array}{lcl} \hat{E}_{\text{Pot}} > 0 & \to & \text{kontinuierliches Spektrum} \\ \hat{E}_{\text{Pot}} = 0 & \to & \text{diskretes Spektrum} \\ \hat{E}_{\text{Pot}} < 0 & \to & \text{diskretes Spektrum} \end{array}$$

Ziel der Lösung der Schrödinger-Gleichung ist es, das diskrete Spektrum berechnen zu können, daher sind zwei Lösungen von Bedeutung:

$$L_1 = \left\{ \begin{array}{l} \phi_1(x) = 0 \\ \phi_2(x) = x \end{array} \right\} \quad \leftrightarrow \quad L_2 = \left\{ \begin{array}{l} \phi_1(x) = e^{+x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \\ \phi_2(x) = e^{-x\sqrt{\hat{q}q-2q}} \end{array} \right\}$$

Für ein $\hat{q} \to 2$ wird sich die gegebene Differentialgleichung wie die Lösung L_1 verhalten, für $\hat{q} \to \pm\infty$ wie L_2. Dabei ist zu beachten, dass die Wellenfunktion nur dann einen endlichen Wert annimmt, wenn L_n konvergiert, also $e^{-\infty}$ gilt (Daher entfällt ϕ_1 in beiden L). Die verbleibenden Lösungsmengen können transformiert und zusammen gefasst werden:

$$-x\sqrt{\hat{q}q - 2q} \quad \to \quad p = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m \cdot \hat{E}}}{\bar{h}} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax} \left[\frac{\sqrt{\text{kgJ}}}{\text{Js}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

$$x \quad \to \quad s = \sqrt{\varepsilon} = \frac{\sqrt{2m \cdot E}}{\bar{h}} \left[\frac{\sqrt{\text{kgJ}}}{\text{Js}} = \frac{1}{\text{m}} \right]$$

$\Rightarrow$

$$\phi(p) = e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s$$

Wobei $\phi(p)$ für ein $\hat{E} < 0$ gültig ist, diskretes Spektrum, dezentriertes Morsepotential![3]

[3] Die Funktion $\phi(p)$ ist tatsächlich eine Verteilung, zur grafischen Verdeutlichung wird beispielshaft gesetzt:

$$\hat{E} = -1 \qquad E = \frac{1}{4} \qquad m = 2 \qquad \bar{h} = 1 \qquad a = 2 \qquad F(p) = \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$

$$p = 2e^{-x} \qquad s = 1$$

$\Rightarrow$

$$\phi(x) = e^{-e^{-x}} e^{-x}$$

1.2 Ermittlung der Potentialstufen

Es wird ein Formfaktor F eingeführt, um die nun vorliegende Verteilung $\phi(p)$ zu präzisieren:

$$\phi(p) = F(p) \cdot e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s$$

$\Rightarrow$

$$\phi'(p) = F'(p) \cdot e^{-\frac{p}{2}} \cdot p^s + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi(p) = \left(\frac{F'(p)}{F(p)} + \frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi(p)$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(p) = \left(\frac{F''(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} - \frac{s}{p^2}\right) \cdot \phi(p) + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \phi'(p)$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(p) = \left[\frac{F''(p)}{F(p)} + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right] \cdot \phi(p)$$

Vorliegende Differentiale werden in die ursprüngliche DGL eingesetzt:

$$\phi'' + \left(\varepsilon + 2q_0\hat{q} - q_0\hat{q}^2\right) \cdot \phi = 0$$

$\Rightarrow$

$$\phi'' + \left(\varepsilon + (2 - \hat{q})\, p^2\right) \cdot \phi = 0$$

$\Rightarrow$

$$\frac{F''(p)}{F(p)} + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{F'(p)}{F(p)} + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2} + \varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$F''(p) + 2 \cdot \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right) \cdot F'(p) + \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot F(p) = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$p \cdot F''(p) + (2s - p) \cdot F'(p) + \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot p \cdot F(p) = 0$$

Es wird substituiert:

$$l = \left(\varepsilon + (2 - \hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot p$$

$\Rightarrow$

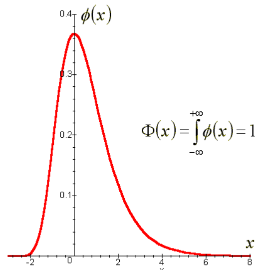
$$p \cdot F''(p) + (2s - p) \cdot F'(p) + l \cdot F(p) = 0$$

Die nun vorliegende Differentialgleichung ist als die Konfluente hypergeometrische Differentialgleichung bekannt. Für die Funktion F steht die Konfluente hypergeometrische Funktion als Berechnungsgrundlage zur Verfügung.

$\Rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) = e^{-e^{-x}}\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 1$$

$\Rightarrow$



Die Konfluente hypergeometrische Funktion wird durch die Reihe

$$F(\alpha;\gamma;z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \cdot \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \cdot \frac{z^2}{2!} + ...$$

definiert. Die Funktion genügt der Gleichung:

$$zu'' + (\gamma - z)\,u' - \alpha u = 0$$

Die Funktion F ist für alle endlichen Werte von z konvergent. Der Parameter α kann beliebig gewählt werden, der von γ nicht Null oder eine negative ganze Zahl. Wenn $\alpha = -N_0$ gilt, dann reduziert sich F auf ein Polynom vom Grade α.

Für vorliegende Konfluente hypergeometrische Differentialgleichung gilt:

$$F(-l;2s;p) = 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{p}{1!} + \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l-1}{2s+1} \cdot \frac{p^2}{2!} + ...$$

Nachweis, dass der Wert p ein endlicher ist, somit F konvergent, welches zur weiteren Berechnung notwendig ist:

$$p = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m\hat{E}}}{\bar{h}} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax}$$

Die Masse m und die Steife a sind per Aufgabenstellung endlich (sonst wäre die Aufgabenstellung per se hinfällig) ebenso die Auslenkung x, das Wirkungsquantum h per definitionem. Die Energie $\hat{E} < 0$ ist die maximale Energie des Potentials und somit ebenfalls endlich. Der Wert p besitzt keine Pole oder Sprungstellen und ist somit im Rahmen der Aufgabenstellung endlich. Damit kann die Funktion F als konvergent angesehen werden.

Nachweis, dass der Wert $2s$ nicht Element von $-N_0$ werden kann:

$$s = \sqrt{\varepsilon} = \frac{\sqrt{2mE}}{\bar{h}}$$

Das Wirkungsquantum h ist positiv endlich, was s unmöglich zu Null werden lassen könnte. Die Werte Masse m und die Gesamtenergie E müssen größer 0 sein für die Existenz der Aufgabenstellung. Daher ist gegeben:

$$s > 0$$

Nachweis, das sich die Funktion F zu einem Polynom reduzieren lässt, was notwendig zur Lösung der Schrödinger- Gleichung ist. Dabei reicht der einfache Nachweis über eine spezielle Lösung mit sinnvoll gewählten Werten völlig aus, denn gibt es mindestens eine Lösung, ist die Schrödinger-Gleichung für vorliegenden Potential lösbar:

$$-l = -N_0$$

$\Rightarrow$

$$l = \left(\varepsilon + (2-\hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2}\right) \cdot p$$

Dabei soll hier der Nachweis mit $l = 0$ geführt werden:

$$l = 0 \rightarrow \quad p_1 = 0$$

$\Rightarrow$

$$\varepsilon + (2-\hat{q}) \cdot p^2 + \left(\frac{s}{p} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{s}{p^2} = 0$$

$\Rightarrow$

$$p^4 + \frac{\varepsilon + \frac{1}{4}}{2-\hat{q}} \cdot p^2 - \frac{s}{2-\hat{q}} \cdot p + \frac{s-1}{2-\hat{q}} \cdot s = 0$$

Mit:

$$2 - \hat{q} = 1 \qquad \rightarrow \qquad \hat{q} = 1 \qquad \rightarrow \qquad x = 0 \qquad \rightarrow \qquad \text{definiert}$$

$\Rightarrow$

$$p^4 + \left(\varepsilon + \frac{1}{4}\right) \cdot p^2 - s \cdot p + s \cdot (s-1) = 0$$

Mit:

$$s = 1 \qquad \rightarrow \qquad \varepsilon = 1 \qquad \rightarrow \qquad \sqrt{2mE} = \bar{h} \qquad \rightarrow \qquad \text{definiert}$$

$\Rightarrow$

$$p^3 + \tfrac{5}{4} \cdot p - 1 = 0$$
$$\rightarrow$$
$$p_2 = 0 \qquad p_3 = 0,6144... \qquad p_4 \in \mathrm{Im} \qquad p_5 \in \mathrm{Im}$$

$\Rightarrow$

$$p_3 = 0,6144... = \sqrt{q} = \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}} = \frac{\sqrt{-2m\hat{E}}}{\bar{h}} \cdot e^{-\frac{1}{2}ax}$$

$\Leftrightarrow$

$$p_3^2 = 0,3775... = q = q_0 \cdot \hat{q} = \frac{-2m\hat{E}}{\bar{h}^2} \cdot e^{-ax} \quad \rightarrow \quad \hat{E} < 0 \quad \rightarrow \quad \text{diskretes Spektrum}$$

Damit ist der Nachweis erbracht, dass die Konfluente hypergeomentrische Funktion bei speziellen gegebenen Randbedingungen als Polynom angesehen werden kann. Dann gilt:

$$F(p) = \sum\nolimits_{k=0} a_k p^k$$

$\Rightarrow$

$$F'(p) = \sum\nolimits_{k=0} k a_k p^{k-1}$$

$\Rightarrow$

$$F''(p) = \sum\nolimits_{n=0} k(k-1) a_k p^{k-2}$$

Vorliegende Differentiale werden in die Konfluente hypergeometrische DGL eingesetzt:

$$p \sum\nolimits_{k=0} k(k-1) a_k p^{k-2} + (2s - p) \sum\nolimits_{k=0} k a_k p^{k-1} + l \sum\nolimits_{k=0} a_k p^k = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$\sum\nolimits_{k=0} \left[k(k-1) a_k p^{k-1} + 2sk a_k p^{k-1} - k a_k p^k + l a_k p^k\right] = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$\sum\nolimits_{k=0} \left[(k+1) k a_{k+1} p^k + 2s(k+1) a_{k+1} p^k - k a_k p^k + l a_k p^k\right] = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$((k+2s)(k+1) a_{k+1} + (l-k) a_k) p^k = 0$$

Es ist eine Rekursionsgleichung für die Berechnung der Koeffizienten extrahierbar:

$$(k+2s) \cdot (k+1) \cdot a_{k+1} + (l-k) \cdot a_k = 0$$

$\Leftrightarrow$

$$a_{k+1} = \frac{k-l}{(k+2s) \cdot (k+1)} \cdot a_k$$

Damit ist die Berechnungsgrundlage der Koeffizienten der Konfluenten hypergeometrischen Funktion gefunden. Für die spätere Normierung der Wellenfunktion ist es nötig, dass ein endliches Polynom vorliegt, daher muss die obige Rekursion abbrechen, bedeutet konkret:

$$a_{k+1} = 0$$

$\Rightarrow$

$$0 = (k-l) \cdot a_k$$

$\Rightarrow$

$$(k = l) \in N_0$$

Was hier über die Koeffizienten $a_{k(+1)}$, oben als Einzelnachweis durch p gezeigt wurde.

Um endgültig zum Lösungsergebnis der Schrödinger-Gleichung zu kommen, muss nun der Anfangswert a_0 gesetzt und die Variablen interpretiert werden. Bekannt ist, das für kleine Werte von x das Morse-Potential sich verhält wie ein Harmonisches Potential. Daher sind Startwerte definierbar:

$$a_0 = -\hat{E} = -\bar{h}\omega \quad \rightarrow \quad \bar{h}\omega = \hat{E} < 0$$
$\rightarrow$
diskretes Spektrum
$\rightarrow$
Potentialmulde (Minimum) des dezentrierten Potentials

$\Rightarrow$

$$p \quad \rightarrow \quad \sqrt{q} \quad \rightarrow \quad \sqrt{q_0 \cdot \hat{q}}$$

$\Rightarrow$

$$p^2 \quad \rightarrow \quad p^2 \cdot \left(2 - \hat{q}^2\right) \quad \rightarrow \quad (-1\cdot)\left(2e^{-ax} - e^{-2ax}\right) = -2 \cdot \frac{m\hat{E}}{\bar{h}^2} \cdot \left(2e^{-ax} - e^{-2ax}\right)$$

$\Rightarrow$

$$p^2 \quad \rightarrow \quad 2 \cdot \frac{m\hat{E}}{\bar{h}^2} \cdot \frac{\hat{E}_{\text{Pot}}}{\hat{E}} \quad \rightarrow \quad 2 \cdot \frac{m}{\bar{h}^2} \cdot \hat{E}_{\text{Pot}} \quad \rightarrow \quad \hat{E}_{pot} < 0 \quad \rightarrow \quad \text{diskretes Spektrum}$$

Die Variable p repräsentiert die Energieeigenwerte des Potentials, für ein Harmonisches Potential gilt:

$$E_{\text{Harmonic}}\,(n) = \bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$\Rightarrow$

$$p \quad \rightarrow \quad n + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} = \bar{h}\omega \left[\frac{\text{Js}}{\text{s}} = \text{J}\right]$$

Damit kann $F(p)$ ermittelt werden:

$$F\,(-l; 2s; p) = a_0 \frac{p^0}{0!} + a_1 \frac{p^1}{1!} + a_2 \frac{p^2}{2!} + a_3 \frac{p^3}{3!} + a_4 \frac{p^4}{4!} + a_5 \frac{p^5}{5!} + ...$$

Da die im Nenner stehende Fakultät sehr schnell wächst, wird der Einfluss der Glieder wachsender Potenzen immer kleiner. Im Allgemeinen wird nur das erste und zweite Glied genutzt:

$\mathbf{k = 0}$:

$$a_1 = \frac{0 - l}{(0 + 2s) \cdot (0 + 1)} \cdot a_0 = \frac{1}{1!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \hat{E}$$

$\mathbf{k = 1}$:

$$a_2 = \frac{1 - l}{(1 + 2s) \cdot (1 + 1)} \cdot a_0 = -\frac{1}{2!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \hat{E}$$

$\mathbf{k = 2}$:

$$a_3 = \frac{2 - l}{(2 + 2s) \cdot (2 + 1)} \cdot a_2 = \frac{1}{3!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2}{2s + 2} \cdot \hat{E}$$

$\mathbf{k = 3}$:

$$a_4 = \frac{3 - l}{(3 + 2s) \cdot (3 + 1)} \cdot a_3 = -\frac{1}{4!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2)}{2s + 2} \cdot \frac{l - 3}{2s + 3} \cdot \hat{E}$$

$\mathbf{k = 4}$:

$$a_5 = \frac{4 - l}{(4 + 2s) \cdot (4 + 1)} \cdot a_3 = \frac{1}{5!} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{s} \cdot \frac{l - 1}{2s + 1} \cdot \frac{l - 2}{2s + 2} \cdot \frac{l - 3}{2s + 3} \cdot \frac{l - 4}{2s + 4} \cdot \hat{E}$$

Es wird substituiert:

$$\begin{aligned}
a_0 &= -\frac{1}{1}\cdot\hat{E}\\
&= -\bar{\chi}_0\cdot\hat{E}\\
a_1 &= +\frac{1}{1}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l}{s}\cdot\hat{E}\\
&= +\bar{\chi}_0\cdot\bar{\chi}_1\cdot\hat{E}\\
a_2 &= -\frac{1}{1}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l}{s}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l-1}{2s+1}\cdot\hat{E}\\
&= -\bar{\chi}_0\cdot\bar{\chi}_1\cdot\bar{\chi}_2\cdot\hat{E}\\
a_3 &= +\frac{1}{1}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l}{s}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l-1}{2s+1}\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{l-2}{2s+2}\cdot\hat{E}\\
&= +\bar{\chi}_0\cdot\bar{\chi}_1\cdot\bar{\chi}_2\cdot\bar{\chi}_3\cdot\hat{E}\\
a_4 &= -\frac{1}{1}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l}{s}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l-1}{2s+1}\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{l-2}{2s+2}\cdot\frac{1}{4}\cdot\frac{l-3}{2s+3}\cdot\hat{E}\\
&= -\bar{\chi}_0\cdot\bar{\chi}_1\cdot\bar{\chi}_2\cdot\bar{\chi}_3\cdot\bar{\chi}_4\cdot\hat{E}\\
a_5 &= +\frac{1}{1}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l}{s}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{l-1}{2s+1}\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{l-2}{2s+2}\cdot\frac{1}{4}\cdot\frac{l-3}{2s+3}\cdot\frac{1}{5}\cdot\frac{l-4}{2s+4}\cdot\hat{E}\\
&= +\bar{\chi}_0\cdot\bar{\chi}_1\cdot\bar{\chi}_2\cdot\bar{\chi}_3\cdot\bar{\chi}_4\cdot\bar{\chi}_5\cdot\hat{E}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
a_0 &= -\chi_0\cdot\hat{E} = -\chi_0\cdot\bar{h}\omega\\
a_1 &= +\chi_1\cdot\hat{E} = +\chi_1\cdot\bar{h}\omega\\
a_2 &= -\chi_2\cdot\hat{E} = -\chi_2\cdot\bar{h}\omega\\
a_3 &= +\chi_3\cdot\hat{E} = +\chi_3\cdot\bar{h}\omega\\
a_4 &= -\chi_4\cdot\hat{E} = -\chi_4\cdot\bar{h}\omega\\
a_5 &= +\chi_5\cdot\hat{E} = +\chi_5\cdot\bar{h}\omega
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$F\left(-l;2s;p\right) = \hat{E}\left(n\right) = \begin{cases} -\hat{E} + \bar{h}\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ -\bar{h}\omega\chi_2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 + \bar{h}\omega\chi_3\left(n+\frac{1}{2}\right)^3 \\ -\bar{h}\omega\chi_4\left(n+\frac{1}{2}\right)^4 + \bar{h}\omega\chi_5\left(n+\frac{1}{2}\right)^5 \\ -\ldots \end{cases}$$

$\Rightarrow$

$$\hat{E}\left(n\right) = -\hat{E} + \bar{h}\omega\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 + \ldots$$

$\Leftrightarrow$

$$\hat{E}\left(n\right) + \hat{E} = \bar{h}\omega\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 + \ldots$$

$\Rightarrow$[4]

$$E\left(n\right) = \bar{h}\omega\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega\chi_2\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)^2$$

$\Leftrightarrow$

$$E\left(n\right) = \bar{h}\omega\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)\cdot\left(1-\chi_2\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)$$

[4]Wobei:

$$\omega = \frac{a}{2\pi}\cdot\sqrt{\frac{2E_{\text{Max}}}{m}}$$

Und:

$$\chi_2 = \frac{h^2\omega^2}{4E_{\text{Max}}}$$

Mit:

$$E_{\text{Max}} = -\hat{E}$$

$\Rightarrow$

$$E_{\text{Morse}}\left(n\right) = E_{\text{Harmonic}}\left(n\right)\left(1 - \chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) + ...\right)$$

Wenn gelten soll $E_{\text{Morse}}\left(n\right) = E_{\text{Harmonic}}\left(n\right)$, dann muss χ_2 sein:

$$\chi_2 = 0$$

Für einen rein Harmonischen Oszillator gibt es keine maximale Anzahl von Energiestufen, während für einen Anharmonischen die Anzahl begrenzt ist, damit die Bedingung $\hat{E} < 0$ erfüllt ist:

$$\bar{h}\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) - \bar{h}\omega \cdot \chi_2 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 < \hat{E}$$

$\Rightarrow$

$$a^2 - \frac{1}{\chi_2} \cdot a + \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega} > 0$$

$\Rightarrow$

$$a_1 = \frac{1}{2\chi_2} + \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$
$$a_2 = \frac{1}{2\chi_2} - \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$

$\Rightarrow$

$$n_{\max} = \frac{1 - \chi_2}{2\chi_2} + \sqrt{\frac{1}{4\chi_2^2} - \frac{\hat{E}}{\chi_2 \cdot \bar{h}\omega}}$$

$\Rightarrow$

$$\bar{h}\omega > 4 \cdot \hat{E} \cdot \chi_2$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\bar{h}\omega}{4\hat{E}} > \chi_2$$

Dieses Ergebnis geht konform mit der Notwendigkeit des Harmonischen Oszillators $\chi_2 = 0$, denn dann:

$$\frac{\bar{h}\omega}{4\hat{E}} = 0$$

Kann nur gelten:

$$\hat{E} = \infty$$

1.3 Die z-Polynome

Die Anharmonizitäten sollen noch einmal aus der Konfluenten hypergeometrischen Funktion extrahiert und betrachtet werden:

$$\begin{aligned}
-\left(\frac{1}{1}\right) &= -\bar{\chi}_0 \\
+\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{l}{s}\right) &= +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1 \\
-\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{l}{s}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{(l-1)}{(2s+1)}\right) &= -\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2 \\
+\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{l}{s}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{(l-1)}{(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3}\frac{(l-2)}{(2s+2)}\right) &= +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3 \\
-\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{l}{s}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{(l-1)}{(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3}\frac{(l-2)}{(2s+2)}\right)\left(\frac{1}{4}\frac{(l-3)}{(2s+3)}\right) &= -\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3\bar{\chi}_4 \\
+\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{l}{s}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{(l-1)}{(2s+1)}\right)\left(\frac{1}{3}\frac{(l-2)}{(2s+2)}\right)\left(\frac{1}{4}\frac{(l-3)}{(2s+3)}\right)\left(\frac{1}{5}\frac{(l-4)}{(2s+4)}\right) &= +\bar{\chi}_0\bar{\chi}_1\bar{\chi}_2\bar{\chi}_3\bar{\chi}_4\bar{\chi}_5
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
+\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\right)\left(\frac{l}{s}\right) &= \chi_0 \\
-\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right) &= \chi_1 \\
+\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\frac{1}{2}\frac{1}{3}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right) &= \chi_2 \\
-\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\frac{1}{2}\frac{1}{3}\frac{1}{4}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right) &= \chi_3 \\
+\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{1}\frac{1}{2}\frac{1}{3}\frac{1}{4}\frac{1}{5}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right)\left(\frac{l-4}{2s+4}\right) &= \chi_4
\end{aligned}$$

Die Anharmonizitäten folgen der Vorschrift:

$$\chi_n = \frac{-1^n}{n+1} z_{n+1}$$

$\Rightarrow$

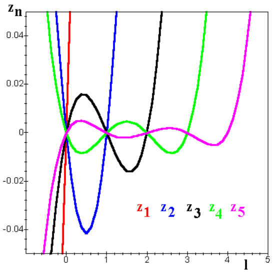
$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right) &= z_1 \\
\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right) &= z_2 \\
\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right) &= z_3 \\
\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right) &= z_4 \\
\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{l}{s}\right)\left(\frac{l-1}{2s+1}\right)\left(\frac{l-2}{2s+2}\right)\left(\frac{l-3}{2s+3}\right)\left(\frac{l-4}{2s+4}\right) &= z_5
\end{aligned}$$

Die z-Polynome sind für $s > 0$ polstellenfrei und uneingeschränkt definiert. Für die Erzwingung des Harmonischen Oszillators muss dann gelten $z_n = 0$:

$$\begin{aligned}
l &= 0 \\
l\,(l-1) &= 0 \\
l\,(l-1)\,(l-2) &= 0 \\
l\,(l-1)\,(l-2)\,(l-3) &= 0 \\
l\,(l-1)\,(l-2)\,(l-3)\,(l-3) &= 0
\end{aligned}$$

Demnach reicht es, wenn die erste Anharmonizität $\chi_2 = 0$ gilt, um einen Anharmonischen Oszillator vorliegen zu haben was einer Eigenschaft der Konfluenten hypergeometrischen Funktion entspricht.

Die z-Polynome grafisch dargestellt für ein $s = 1$:



$\LaTeX\ 2_\varepsilon$