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 Harmonisches Potential

1.1 Ermittelung der Verteilung $\phi(q)$

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 Harmonischer Oszillator vorliegen:

$$E_{\text{Pot}} = \frac{1}{2} k x^2$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{\bar{h}^2}{2m} \cdot \psi'' + \frac{1}{2} k x^2 \cdot \psi = E \cdot \psi$$

$\Rightarrow$

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

Eine Variablentransformation wird durchgeführt:

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

$\Rightarrow$

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

Lösung durch den Ansatz nach Allgemeine, homogene, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung. Die Charakteristische Gleichung:

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

$\Rightarrow$[1]

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

$\Rightarrow$

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

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:[2]

$$q^2 - \varepsilon > 0$$

$\Rightarrow$

$$q^2 > \varepsilon$$

Liegt diese Bedingung vor, ist das System schwingungsfähig. Für eine noch restriktivere Annahme, $q^2 >> \varepsilon$ vereinfacht sich die Differentialgleichung:

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

$\Rightarrow$

$$\phi'' - q^2 \cdot \phi = 0$$

Die Charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 - q^2 = 0$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\lambda_1 = +q \qquad \lambda_2 = -q$$

[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.

[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.

Das Ergebnis der Charakteristischen Gleichung ergibt diesmal den Fall:

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

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = e^{+q \cdot x} \qquad \phi_2 = e^{-q \cdot x}$$

Kontrolle der Lösung:

$$\begin{array}{lclcl} \phi_1 = e^{+q \cdot x} & \rightarrow & \phi_1' = +q \cdot e^{+q \cdot x} & \rightarrow & \phi_1'' = +q^2 \cdot e^{+q \cdot x} \\ \phi_2 = e^{-q \cdot x} & \rightarrow & \phi_1' = -q \cdot e^{-q \cdot x} & \rightarrow & \phi_1'' = +q^2 \cdot e^{-q \cdot x} \end{array}$$

$\Rightarrow$

$$\phi'' - q^2 \cdot \phi = 0 \qquad \rightarrow \qquad \begin{array}{l} q^2 \cdot e^{+q \cdot x} - q^2 \cdot e^{+q \cdot x} = 0 \\ q^2 \cdot e^{-q \cdot x} - q^2 \cdot e^{-q \cdot x} = 0 \end{array}$$

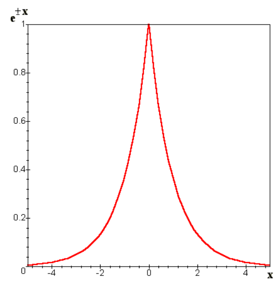
Die Lösungen sind exakt. Zu sehen ist, dass die Wellenfunktion nur dann gegen einen konkreten Wert konvergiert, wenn $e^{-\infty}$ gilt, so wird ϕ_1 und ϕ_2 sinnvoll zusammen gefasst und die Transformation vollendet.

$$\phi_1(x) = e^{+qx} \qquad \phi_2(x) = e^{-qx}$$

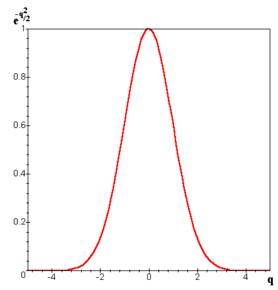
$\Rightarrow$[3]

$$\phi(q) = e^{-\frac{q^2}{2}}$$

[3] Transformation der Funktionen $\phi_1(x) \leftrightarrow \phi_2(x)$ zur Verteilung $\phi(p)$:



$\Rightarrow$



Mit:

$$\int_{-\infty}^{0} \phi_1\left(q = +\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right) + \int_{0}^{+\infty} \phi_2\left(q = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(q) = \sqrt{2\pi}$$

1.2 Ermittlung der Potentialstufen

Es wird ein Formfaktor H eingeführt, um die nun vorliegende normierte Normalverteilung $\phi(q)$ zu präzisieren:

$$\phi(q) = H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

$\Rightarrow$

$$\phi'(q) = H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} = H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot \phi(q)$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - \phi(q) - q \cdot \phi'(q)$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot \left[H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}\right]$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + q^2 \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

$\Rightarrow$

$$\phi''(q) = H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - 2q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + \left(q^2 - 1\right) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Vorliegende Differentiale werden in die ursprüngliche DGL eingesetzt:

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

$\Rightarrow$

$$H''(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} - 2q \cdot H'(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + \left(q^2 - 1\right) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} + \left(\varepsilon - q^2\right) \cdot H(q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}} = 0$$

$\Rightarrow$

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + \left(q^2 - 1\right) \cdot H(q) + \left(\varepsilon - q^2\right) \cdot H(q) = 0$$

$\Rightarrow$

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + q^2 \cdot H(q) - H(q) + \varepsilon \cdot H(q) - q^2 \cdot H(q) = 0$$

$\Rightarrow$

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + (\varepsilon - 1) \cdot H(q) = 0$$

Die nun ermittelte Differentialgleichung ist als die Hermitesche Differentialgleichung bekannt. Für die Funktion H stehen nun die Berechnungsgrundlagen der Hermiteschen Polynome zur Verfügung. Für $H(q)$ existiert eine unendliche Potenzreihe:

$$H(q) = \sum_k c_k q^k$$

$\Rightarrow$

$$H'(q) = \sum_k k c_k q^{k-1}$$

$\Rightarrow$

$$H''(q) = \sum_k k(k-1) c_k q^{k-2}$$

Vorliegende Differentiale werden in die Hermitesche DGL eingesetzt:

$$H''(q) - 2q \cdot H'(q) + (\varepsilon - 1) \cdot H(q) = 0$$

$\Rightarrow$

$$\sum_k k(k-1) c_k q^{k-2} - 2q \sum_k k c_k q^{k-1} + (\varepsilon - 1) \sum_k c_k q^k = 0$$

$\Rightarrow$

$$\sum_k \left[k(k-1) c_k q^{k-2} - 2qk c_k q^{k-1} + (\varepsilon - 1) c_k q^k\right] = 0$$

$\Rightarrow$

$$\sum_k \left[(k+2)(k+1) c_{k+2} q^k - 2k c_k q^k + (\varepsilon - 1) c_k q^k\right] = 0$$

$\Rightarrow$

$$\sum\nolimits_k q^k \left[(k+2)(k+1)\, c_{k+2} - (2k+1-\varepsilon)\, c_k \right] = 0$$

Eine Rekursionsformel für die Berechnung der Koeffizienten ist extrahierbar:

$$(k+2) \cdot (k+1) \cdot c_{k+2} - (2k+1-\varepsilon) \cdot c_k = 0$$

$\Rightarrow$

$$c_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2) \cdot (k+1)} \cdot c_k$$

Für die spätere Normierung der Wellenfunktion ist es nötig, dass ein endliches Polynom vorliegt, daher muss die obige Rekursion abbrechen, bedeutet konkret:

$$c_{k+2} = 0$$

$\Rightarrow$

$$\frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2) \cdot (k+1)} \cdot c_k = 0$$

$\Rightarrow$

$$\varepsilon = 2k+1$$

Die Abbruchbedingung ist dann erfüllt, wenn der Wert ε eine ungerade positive Zahl darstellt. Daher gilt:

$$\varepsilon = 2n+1 \qquad \text{mit} \qquad n \in N_0$$

Für ε war außerdem festgelegt worden:

$$\varepsilon = 2m \cdot \frac{E}{\bar{h}^2}$$

Rücktransformiert von:

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

$\Rightarrow$

$$\frac{\bar{h}^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(E - \frac{1}{2} \cdot kx^2\right) \cdot \psi = 0$$

$\Rightarrow$

$$\varepsilon = E$$

Die Energie der ersten Potentialstufe $1/2$-Welle von $\omega_n = \omega_0 = \omega$ definiert durch:

$$\varepsilon = \frac{2}{\bar{h}\omega} \cdot E_n$$

$\Rightarrow$

$$2n+1 = \frac{2}{\bar{h}\omega} \cdot E_n$$

$\Rightarrow$

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

Damit ist die Berechnung der Oszillatorenenergien beendet, wobei für diese Darstellung noch ω zu ermitteln wäre.

Der noch gebrauchte Wert ω kann einfach über die Bewegungsdifferentialgleichung berechnet werden. Für die Energien gilt dann:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot mx'^2 \qquad E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot kx^2$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{2} \cdot mx'^2 + \frac{1}{2} \cdot kx^2 = E$$

$\Rightarrow$

$$x'' + \frac{k}{m} \cdot x = 0$$

Die Charakteristische dieser Bewegungsdifferentialgleichung:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:

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

Da diese Bedingung uneingeschränkt gilt (Die Werte k und m sind intrinsisch immer positiv) ist das System schwingungsfähig:

$$\omega = b \left[\sqrt{\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{mkg}}} = \sqrt{\frac{\mathrm{kgm}}{\mathrm{s^2mkg}}} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{s}^2}} = \frac{1}{\mathrm{s}}\right]$$

$\Rightarrow$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Für eine geänderte Annahme der kinetischen Energie:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot \frac{p^2}{m} \qquad E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot kx^2$$

Ergibt sich folgendes nichtrelativistisches Ergebnis:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{p} \cdot c} \left[\sqrt{\frac{\mathrm{Nm}}{\mathrm{mNs^2}}} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{s}^2}} = \frac{1}{\mathrm{s}}\right]$$

Für das vorliegende harmonische Potential ergibt sich damit eine neue Schreibweise,

$$\omega^2 = \frac{k}{p} \cdot c = \frac{k}{m}$$

$\Rightarrow$

$$k = m\omega^2 = \frac{p}{c} \cdot \omega^2$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{\bar{h}^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 x^2 - E\right) \cdot \psi = 0$$
$$-\frac{\bar{h}^2}{2m} \cdot \psi'' + \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 - E\right) \cdot \psi = 0$$

$\Rightarrow$

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\bar{h}^2} \cdot E - \frac{m^2\omega^2}{\bar{h}^2} \cdot x^2\right) \cdot \psi = 0$$
$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\bar{h}^2} \cdot E - \frac{m}{\bar{h}^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2\right) \cdot \psi = 0$$

$\Rightarrow$

$$\lambda^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2\right) = 0$$
$$\lambda^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2\right) = 0$$

$\Rightarrow$

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$
$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{p}{c} \cdot \omega^2 x^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$

$\Rightarrow$

$$m\omega^2 \cdot x^2 - 2 \cdot E > 0$$
$$p\omega^2 \cdot x^2 - 2c \cdot E > 0$$

$\Rightarrow$

$$\omega > \sqrt{2 \cdot \frac{E}{mx^2}} > 0 \left[\sqrt{\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kgm}^2}} = \sqrt{\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{kgm}}} = \sqrt{\frac{\mathrm{kgm}}{\mathrm{s}^2\mathrm{kgm}}} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{s}^2}} = \frac{1}{\mathrm{s}}\right]$$
$$\omega > \sqrt{2 \cdot \frac{cE}{px^2}} > 0 \left[\sqrt{\frac{\mathrm{Jm}}{\mathrm{sNsm}^2}} = \sqrt{\frac{\mathrm{Nm}^2}{\mathrm{Nm}^2\mathrm{s}^2}} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{s}^2}} = \frac{1}{\mathrm{s}}\right]$$

Beide Bedingungen sind nur erfüllt, wenn $E > 0$. Das System ist dann schwingungsfähig. Daher muss gelten:

$$E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$\Rightarrow$

$$E_0 = E = \frac{1}{2} \cdot \hbar\omega > 0$$

$\Rightarrow$

$$\hbar\omega > 0$$

Da dies immer erfüllt ist, schwingt das System sicher. Der Term $n + \frac{1}{2}$ ist zwingend notwendig. Die Nullstufenenergie $n = 0$ ist immer höher als das Minimum des Potentials.

1.3 Die H-Polynome

Die Lösungen sind exakt, jedoch muss noch überprüft werden:

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \cdot \bar{\psi} \cdot dx = 1$$

Wobei hier $\phi\left(q\right) = H\left(q\right) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$ hinreichend ist.

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \cdot \bar{\phi} \cdot dx = 1$$

$\Rightarrow$

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} H\left(q\right) \cdot \bar{H}\left(q\right) \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

Die Ermittlung von C als Wichtungsfaktor der Eigenfunktionen ist abhängig von der Kenntnis der Hermiteschen Polynome:[4]

$$H\left(q\right) = \sum\nolimits_k c_k q^k$$

$\Rightarrow$

$$\begin{array}{l}
H_0\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 \\
H_1\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 \\
H_2\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 \\
H_3\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 \\
H_4\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 + c_4 \cdot q^4 \\
H_5\left(q\right) = c_0 \cdot q^0 + c_1 \cdot q^1 + c_2 \cdot q^2 + c_3 \cdot q^3 + c_4 \cdot q^4 + c_5 \cdot q^5 \\
\ldots
\end{array}$$

Fehlen die Koeffizienten. Diese sind gegeben nach Hermite:

$$\begin{array}{l}
H_0\left(q\right) = 1 \\
H_1\left(q\right) = 2 \cdot q \\
H_2\left(q\right) = 4 \cdot q^2 - 2 \\
H_3\left(q\right) = 8 \cdot q^3 - 12 \cdot q \\
H_4\left(q\right) = 16 \cdot q^4 - 48 \cdot q^2 + 12 \\
H_5\left(q\right) = 32 \cdot q^5 - 160 \cdot q^3 + 120 \cdot q \\
\ldots
\end{array}$$

$\Rightarrow$

$$H_n\left(-q\right) = -n^n \cdot H_n\left(q\right)$$

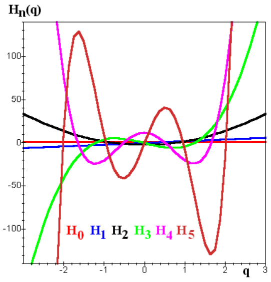
$\Rightarrow$

$$H_n\left(q\right) = 2q \cdot H_{n-1}\left(q\right) - 2 \cdot \left(n-1\right) \cdot H_{n-2}\left(q\right)$$

$\Rightarrow$

$$H_n\left(q\right) = \left(-1\right)^n \cdot e^{\left(+q^2\right)} \cdot \left(\frac{d}{dq}\right)^n \cdot e^{\left(-q^2\right)}$$

[4] Die ersten sechs Hermiteschen Polynome grafisch dargestellt.



$\Rightarrow$

Rodrigues-Formel

Das Integral kann berechnet werden, wobei die mit einem ungeraden Wert n und 0 analytisch leicht lösbar sind:

$\mathbf{n = 0}$:

$$C \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

$$C\sqrt{\pi} = 1$$

$\Rightarrow$

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

$\mathbf{n = 1}$:

$$4C \int\limits_{-\infty}^{+\infty} q \cdot \bar{q} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 4C \int\limits_{-\infty}^{+\infty} q^2 \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

$$2C\sqrt{\pi} = 1$$

$\Rightarrow$

$$C_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2} \cdot C_0$$

$\mathbf{n = 3}$:

$$C \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(8q^3 - 12q\right) \cdot \overline{\left(8q^3 - 12q\right)} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

$$48C\sqrt{\pi} = 1$$

$\Rightarrow$

$$C_3 = \frac{1}{48} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{48} \cdot C_0$$

$\mathbf{n = 5}$:

$$C \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(32q^5 - 160q^3 + 120q\right) \cdot \overline{\left(32q^5 - 160q^3 + 120q\right)} \cdot e^{-q^2} \cdot dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

$$3840C\sqrt{\pi} = 1$$

$\Rightarrow$

$$C_5 = \frac{1}{3840} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{3840} \cdot C_0$$

$\mathbf{n \in N_0}$:

$$C_n = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2^n n!} \cdot C_0$$

Es ist daher für das normierte $\phi_n(q)$ gefordert:

$$\phi_n\left(q\right) = \sqrt{C_n} \cdot H_n\left(q\right) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

$\Rightarrow$

$$\phi_n\left(q\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \cdot \sqrt{\pi}}} \cdot H_n\left(q\right) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Der Wert q ist kein ursprünglicher, es wird resubstituiert:

$$\psi'' + \left(2m \cdot \frac{E}{\hbar^2} - km \cdot \frac{x^2}{\hbar^2}\right) \cdot \psi = 0$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 \quad \leftrightarrow \quad q^2 = \frac{\sqrt{km}}{\hbar} \cdot x^2 = \frac{x^2}{z^2} \quad \leftrightarrow \quad z = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{km}}} \left[\sqrt{\frac{\mathrm{Js}}{\sqrt{\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{m}}\mathrm{kg}}}} = \sqrt{\mathrm{m}^2} = \mathrm{m} \right]$$

Äquivalent:

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2\right) \cdot \psi = 0$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 \quad \leftrightarrow \quad q^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x = \frac{x^2}{z^2} \quad \leftrightarrow \quad z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{\mathrm{Js}^2}{\mathrm{kg}}} = \sqrt{\mathrm{m}^2} = \mathrm{m} \right]$$

Damit ergibt sich:

$$\phi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! z \cdot \sqrt{\pi}}} \cdot H_n\left(\frac{x}{b}\right) \cdot e^{-\frac{x^2}{2z^2}}$$

Wobei das z im Wurzelausdruck aus dem Übergang Normierte Normalverteilung $N(0;1)$ zur Normalverteilung $N(0;\sigma^2)$ herrührt.

$$\varphi\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \qquad \leftrightarrow \qquad f\left(x\right) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Der Übergang zur zeitabhängigen Schrödinger- Gleichung erfolgt durch:

$$\psi\left(q; E; t\right) = \phi_n\left(q\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$\Rightarrow$

$$\psi\left(q; \omega; t\right) = \phi_n\left(q\right) \cdot e^{-i\omega t}$$

$\Rightarrow$

$$\psi\left(q; \omega; t\right) = \phi_n\left(q\right) \cdot \left[\cos\left(\omega t\right) - i \cdot \sin\left(\omega t\right)\right]$$

$\Rightarrow$

$$\psi\left(q; \omega; t\right) = \phi_n\left(q\right) \cdot \cos\left(\omega t\right) - i \cdot \phi_n\left(q\right) \cdot \sin\left(\omega t\right)$$

Es erfolgt eine Zerlegung in Real- und Imaginäranteil:

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}\ \psi &= +\phi_n\left(q\right) \cdot \cos\left(\omega t\right) \\ \mathrm{Im}\ \psi &= -\phi_n\left(q\right) \cdot \sin\left(\omega t\right) \end{aligned}$$

Die Ergebnisse werden den Achsen eines kartesischen $[X;Y]$-Koordinatensystems zugeordnet:

$$\begin{aligned} X\left(q; \omega; t\right) &= \mathrm{Re}\ \psi \\ Y\left(q; \omega; t\right) &= \mathrm{Im}\ \psi \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} X\left(q; \omega; t\right) &= +\phi_n\left(q\right) \cdot \cos\left(\omega t\right) \\ Y\left(q; \omega; t\right) &= -\phi_n\left(q\right) \cdot \sin\left(\omega t\right) \end{aligned}$$

Es besteht ein Zusammenhang zwischen q und ω:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad \rightarrow \qquad \hat{q}^2 = q_0 \cdot q^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \cdot x^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x^2$$

$\Rightarrow$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}\left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{Js}} = \frac{1}{\mathrm{s}}\right] \qquad q_0 = \omega \cdot \frac{m}{\hbar}\left[\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{Js}^2} = \frac{1}{\mathrm{m}^2}\right] \qquad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x \left[\sqrt{\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{Js}^2}\mathrm{m}^2} = 1\right]$$

$\Rightarrow$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad q_0 = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{m}{\hbar} \qquad q = \sqrt{\frac{E}{h} \cdot \frac{m}{\hbar}} \cdot x$$

$\Rightarrow$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad q = x \cdot \sqrt{q_0}$$

Es wird substituiert:

$$X(x;\omega;t) = +\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \cos(\omega t)$$
$$Y(x;\omega;t) = -\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \sin(\omega t)$$

Sowie nichtrelativistische Zusammenhänge:

$$c \cdot t = x$$

$\Rightarrow$

$$X(x;\omega) = +\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \cos\left(x \cdot \frac{\omega}{c}\right)$$
$$Y(x;\omega) = -\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \sin\left(x \cdot \frac{\omega}{c}\right)$$

Nit:

$$\omega = 2\pi \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{\bar{\lambda}}$$

$\Rightarrow$

$$X(x) = +\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \cos\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right)$$
$$Y(x) = -\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \cdot \sin\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right)$$

Wobei real gelten muss:

$$\frac{1}{\sqrt{q_0}}[\mathrm{m}] \leq \frac{\bar{\lambda}}{2}[\mathrm{m}] \qquad \rightarrow \qquad \bar{\lambda} \cdot \sqrt{q_0} \geq 2$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\hbar}{\sqrt{Em}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} = \frac{x}{q} \leq \frac{\bar{\lambda}}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{c}{\omega} = \frac{c}{2} \cdot \frac{\hbar}{E} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{t} \cdot \frac{\hbar}{E}$$

$\Rightarrow$

$$q \geq 2 \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot t = 2 \cdot \omega t$$

$\Rightarrow$

$$E \leq \frac{q}{2} \cdot \frac{\hbar}{t} = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\hbar m\omega} \cdot \frac{x}{t}\left[\sqrt{\mathrm{Jkg}}\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} = \frac{\mathrm{kgm}}{\mathrm{s}^2}\mathrm{m} = \mathrm{Nm} = \mathrm{J}\right]$$

$\Rightarrow$

$$E \leq \frac{p}{2} \cdot \frac{x}{t}\left[\mathrm{Ns}\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} = \mathrm{Nm} = \mathrm{J}\right] = \frac{1}{2} \cdot pv = \frac{1}{2} \cdot mv^2$$

$\Rightarrow$

$$E \leq E_{kin} \qquad \leftrightarrow \qquad \frac{E}{p} \leq \frac{v}{2}$$

Für ein $\bar{\lambda} \cdot \sqrt{q_0} >> 2$ kann vereinfacht werden:

$$\cos\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right) = \cos(\omega t) \approx 1 \qquad \sin\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right) = \sin(\omega t) \approx \frac{x}{\bar{\lambda}} = \omega t$$

$\Rightarrow$

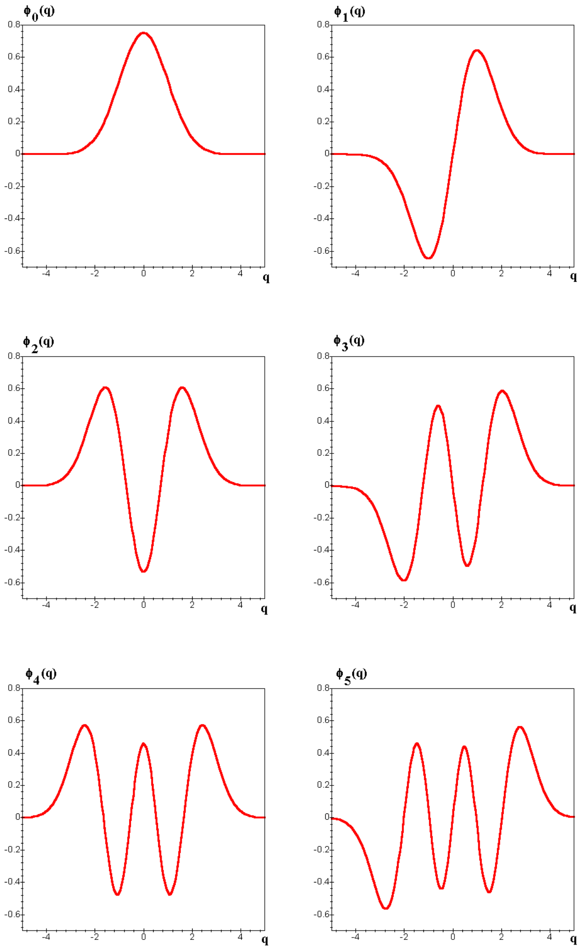
$$X(x) = +\phi_n \cdot \left(x \cdot \sqrt{q_0}\right) \qquad \leftrightarrow \qquad X(q) = +\phi_n(q)$$
$$Y(x) = -\phi_n \cdot \left(x \cdot \sqrt{q_0}\right) \cdot \frac{x}{\bar{\lambda}} \qquad \leftrightarrow \qquad Y(q;\omega;t) = -\phi_n(q) \cdot \omega t$$

$\Rightarrow$

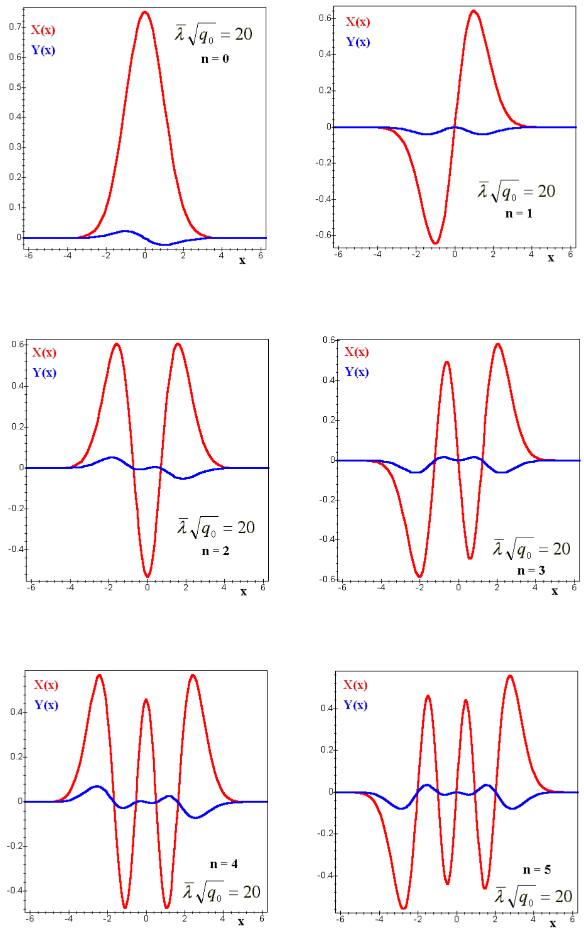
$$Y(x) \cdot \bar{\lambda} = -X(x) \cdot x \qquad \leftrightarrow \qquad Y(q;\omega;t) = -X(q) \cdot \omega t$$

Diese parametrische Funktion kann nun dargestellt werden.

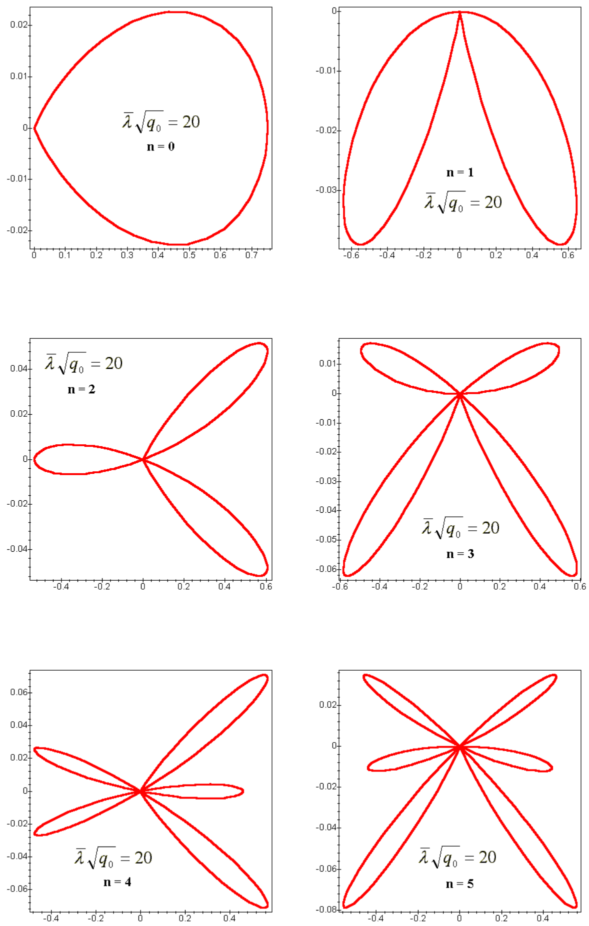
Die ersten sechs Verteilungen $\phi_n\left(q\right)$ grafisch dargestellt:



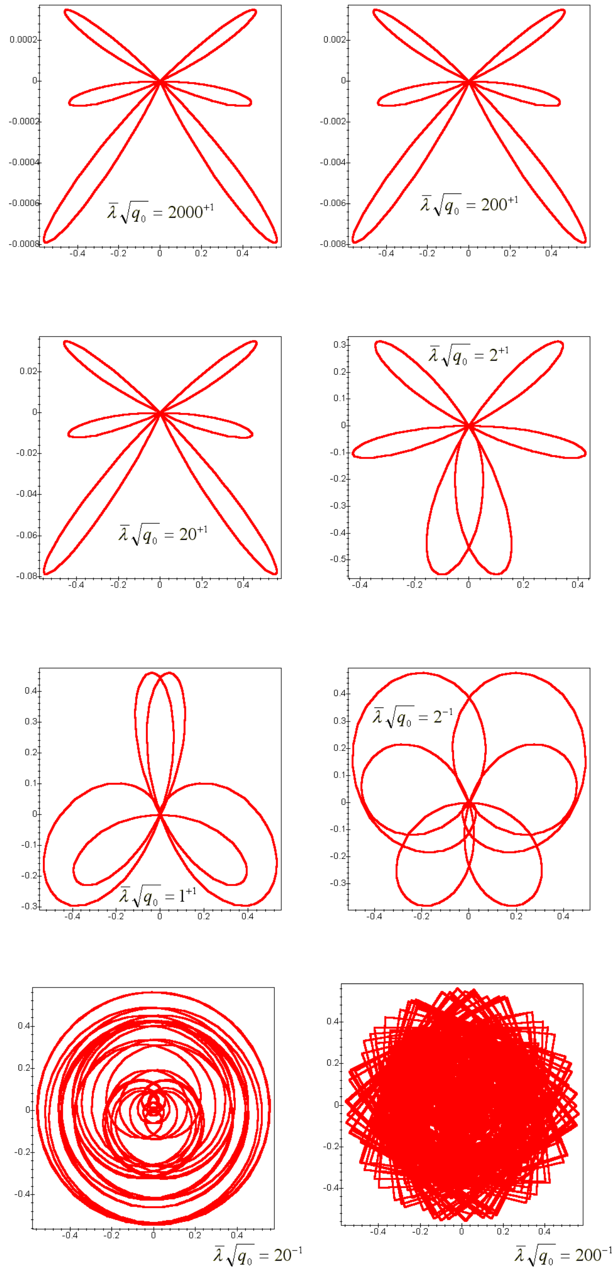
Die Funktionen $X(x)$ und $X(x)$ in grafischer Darstellung:



Die Orbitale aus der parametrischen Funktion $Y\left(x\right)\cdot\bar{\lambda}=-X\left(x\right)\cdot x$:



Wirkung des Verhältnisses $\bar{\lambda}\sqrt{q_0}$ auf das Orbital mit $n = 5$:



LaTeX 2_ε