Lösung der Schrödinger- Gleichung für ein Harmonisches Potential.

Gegeben ist die Schrödinger Gleichung in stationärer Form:

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

Es soll ein Harmonischer Oszillator vorliegen:

$$E_{pot} = \frac{1}{2}kx^2$$

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Eine Variablentransformation wird durchgeführt:

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

$\Rightarrow$

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

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

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

$\Rightarrow$*

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

$\Rightarrow$

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

Schwingungsfähig dann, wenn gilt:**

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

$\Rightarrow$

* 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. 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.

$$q^2 > \varepsilon$$

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

$$q^2 >> \varepsilon$$

vereinfacht sich die Differentialgleichung:

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

$\Rightarrow$

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

Die Charakteristische Gleichung:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Das Ergebnis der Charakteristischen Gleichung ergibt diesmal den Fall:

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

Die partikulären Lösungen daher:

$$\phi_1 = e^{+qx}$$
$$\phi_2 = e^{-qx}$$

Kontrolle der Lösung:

$$\phi_1 = e^{+qx} \rightarrow \phi_1' = +qe^{+qx} \rightarrow \phi_1'' = +q^2 e^{+qx}$$
$$\phi_2 = e^{-qx} \rightarrow \phi_1' = -qe^{-qx} \rightarrow \phi_1'' = +q^2 e^{-qx}$$

$\Rightarrow$

$$\phi'' - q^2\phi = 0 \rightarrow \begin{matrix} q^2 e^{+qx} - q^2 e^{+qx} = 0 \\ q^2 e^{-qx} - q^2 e^{-qx} = 0 \end{matrix}$$

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.

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

$\Rightarrow$

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

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Vorliegende Differentiale werden in die ursprüngliche DGL eingesetzt:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

⇒

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

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:

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

⇒

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

⇒

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

Vorliegende Differentiale werden in die Hermitesche DGL eingesetzt:

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

⇒

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

⇒

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

⇒

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

⇒

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

Eine Rekursionsformel für die Berechnung der Koeffizienten ist extrahierbar:

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

⇒

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

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

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\varepsilon = 2k+1$$

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

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

Für „ε“ war außerdem festgelegt worden:

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

Rücktransformiert von:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\varepsilon = E$$

Die Energie der ersten Potentialstufe ($^1/_2$- Welle von $\omega_n = \omega_0 = \omega$) definiert durch (Begründung folgend):

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m x'^2$$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{2} m x'^2 + \frac{1}{2} k x^2 = E$$

$\Rightarrow$

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

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:

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

$\Rightarrow$

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

Für eine geänderte Annahme der kinetischen Energie:

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

Ergibt sich folgendes nichtrelativistisches Ergebnis:

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

Für das vorliegende harmonische Potential ergibt sich damit eine neue Schreibweise

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

$$a \pm ib = 0 \pm i\sqrt{\frac{m^2\omega^2}{\bar{h}^2}x^2 - \frac{2m}{\bar{h}^2}E}$$

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

$\Rightarrow$

$$m\omega^2 x^2 - 2E > 0$$

$$p\omega^2 x^2 - 2cE > 0$$

$\Rightarrow$

$$\omega > \sqrt{2\frac{E}{mx^2}} > 0\left[\sqrt{\frac{J}{kgm^2}} = \sqrt{\frac{N}{kgm}} = \sqrt{\frac{kgm}{s^2 kgm}} = \sqrt{\frac{1}{s^2}} = \frac{1}{s}\right]$$

$$\omega > \sqrt{2\frac{cE}{px^2}} > 0\left[\sqrt{\frac{Jm}{sNsm^2}} = \sqrt{\frac{Nm^2}{Nm^2 s^2}} = \sqrt{\frac{1}{s^2}} = \frac{1}{s}\right]$$

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

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

$\Rightarrow$

$$E_0 = E = \frac{1}{2}\bar{h}\omega > 0$$

$\Rightarrow$

$$\bar{h}\omega > 0$$

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.

Die Lösungen sind exakt, jedoch muss noch überprüft werden:

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

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

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

⇒

$$C\int_{-\infty}^{+\infty} H(q)\overline{H}(q)e^{-q^2}\,dq = 1$$

Die Ermittlung von „C“ als Wichtungsfaktor der Eigenfunktionen ist abhängig von der Kenntnis der Hermiteschen Polynome:

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

⇒

$$\begin{aligned}
&H_0(q) = c_0q^0\\
&H_1(q) = c_0q^0 + c_1q^1\\
&H_2(q) = c_0q^0 + c_1q^1 + c_2q^2\\
&H_3(q) = c_0q^0 + c_1q^1 + c_2q^2 + c_3q^3\\
&H_4(q) = c_0q^0 + c_1q^1 + c_2q^2 + c_3q^3 + c_4q^4\\
&H_5(q) = c_0q^0 + c_1q^1 + c_2q^2 + c_3q^3 + c_4q^4 + c_5q^5\\
&\ldots
\end{aligned}$$

Fehlen die Koeffizienten. Diese sind gegeben nach Hermite:

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

⇒

$$H_n(-q) = -n^n H_n(q)$$

⇒

$$H_n(q) = 2qH_{n-1}(q) - 2(n-1)H_{n-2}(q)$$

⇒

$$H_n(q) = (-1)^n e^{\left(q^2\right)}\left(\frac{d}{dq}\right)^n e^{\left(-q^2\right)} \quad \text{(Rodrigues- Formel)}$$

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

- „n = 0“:

$$C\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-q^2}\,dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

- „n = 1“:

$$4C\int_{-\infty}^{+\infty} q\bar{q}e^{-q^2}\,dq = 4C\int_{-\infty}^{+\infty} q^2 e^{-q^2}\,dq = 1$$

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

- „n = 3“:

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

- „n = 5“:

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

$\Leftrightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

- „n ∈ N_0“:

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

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

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

$\Rightarrow$

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

Der Wert „q“ ist kein ursprünglicher, es wird resubstituiert:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Äquivalent:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Damit ergibt sich:

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

Wobei das „z“ im Wurzelausdruck aus dem Übergang „Normierte Normalverteilung N(0;1)“ zur „Normalverteilung N(0;σ^2)“ herrührt.

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

Der Übergang zur zeitabhängigen Schrödinger- Gleichung erfolgt durch:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Es erfolgt eine Zerlegung in Real- und Imaginäranteil:

$$\Re\psi=\phi_n(q)\cos(\omega t)$$
$$\Im\psi=-\phi_n(q)\sin(\omega t)$$

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

$$X(q;\omega;t)=\Re\psi$$
$$Y(q;\omega;t)=\Im\psi$$

$\Rightarrow$

$$X(q;\omega;t)=\phi_n(q)\cos(\omega t)$$
$$Y(q;\omega;t)=-\phi_n(q)\sin(\omega t)$$

Es besteht ein Zusammenhang zwischen „q“ und „ω“:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

Es wird substituiert:

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

Sowie nichtrelativistische Zusammenhänge:

$$ct = x$$

$\Rightarrow$

$$X(x;\omega) = \phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right)\cos\left(x\frac{\omega}{c}\right)$$

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

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

$\Rightarrow$

$$X(x) = \phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right)\cos\left(\frac{x}{\bar{\lambda}}\right)$$

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

Wobei real gelten muss:

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

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

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

$\Rightarrow$

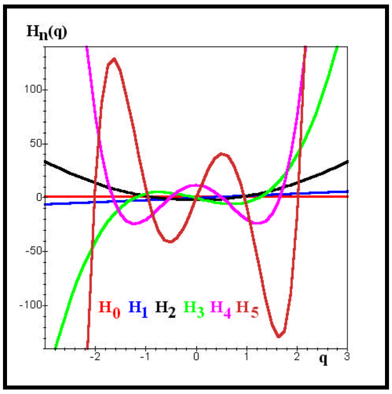
$$X(x)=\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right) \qquad \leftrightarrow \qquad X(q)=\phi_n(q)$$
$$Y(x)=-\phi_n\left(x\sqrt{q_0}\right)\frac{x}{\bar{\lambda}} \qquad \qquad Y(q;\omega;t)=-\phi_n(q)\omega t$$

$\Rightarrow$

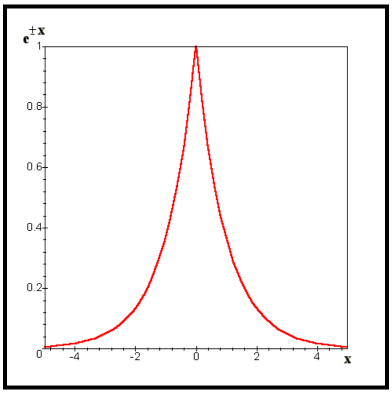
$$Y(x)\cdot\bar{\lambda}=-X(x)\cdot x \quad \leftrightarrow \quad Y(q;\omega;t)=-X(q)\omega t$$

Diese parametrische Funktion kann nun dargestellt werden.

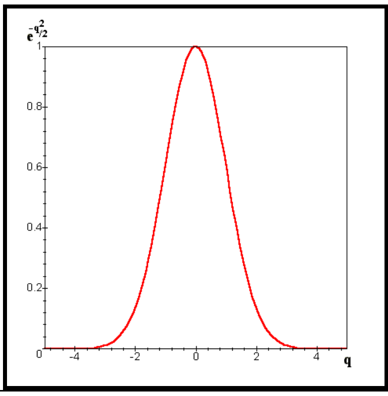
Die ersten sechs Hermiteschen Polynome grafisch dargestellt:



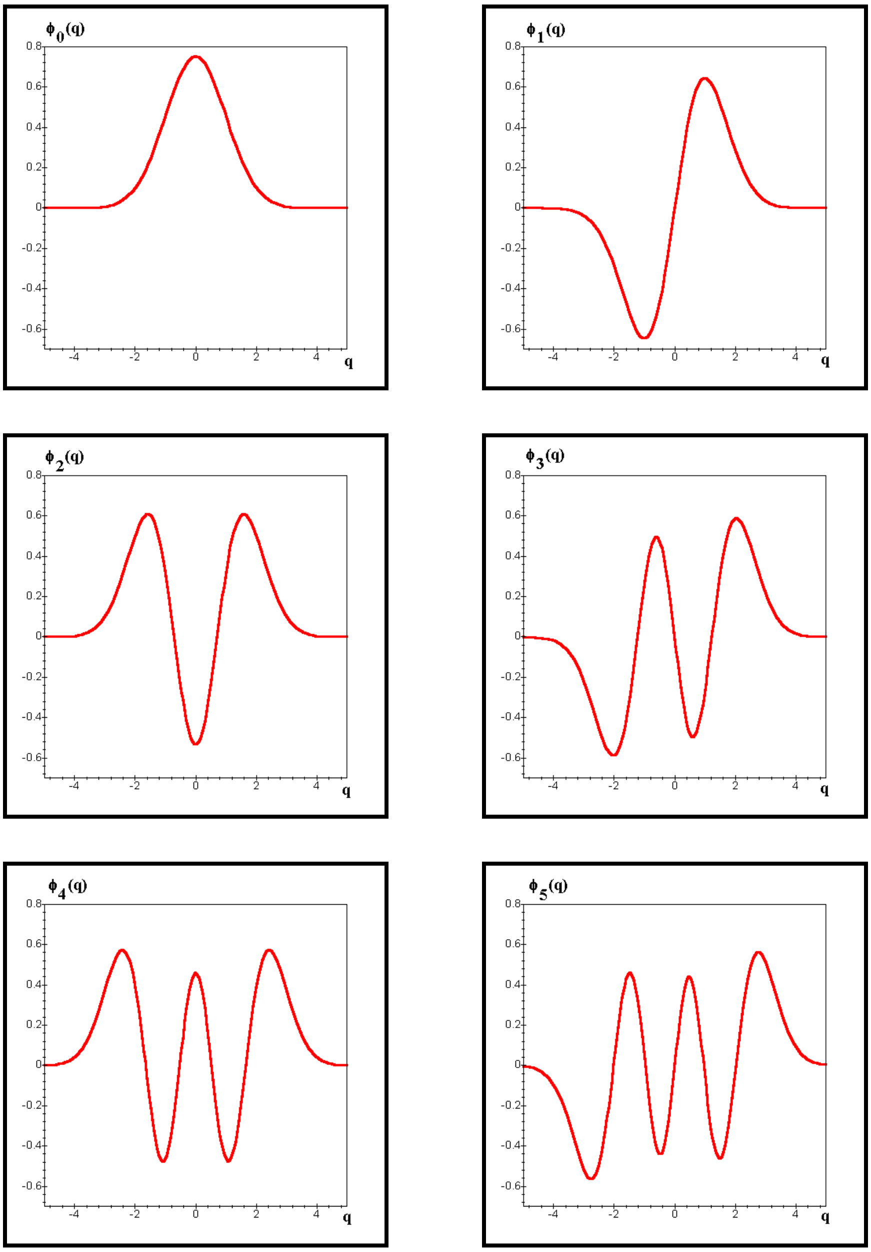
Transformation der Funktionen „$\phi_1(x)\leftrightarrow\phi_2(x)$“ zur Verteilung „$\phi(p)$“:



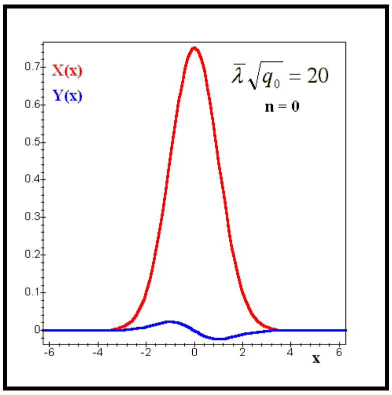
$\Rightarrow$

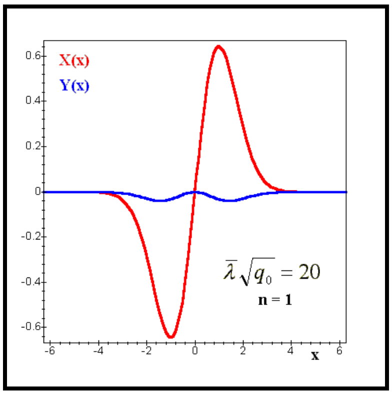


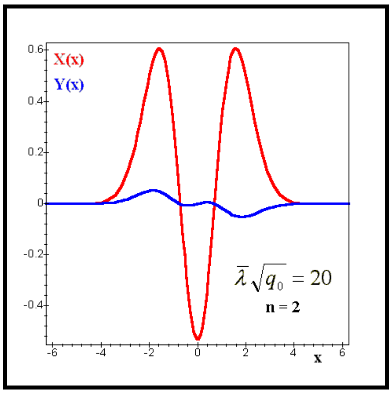
Die ersten sechs Verteilungen „$\phi_n(q)$“ grafisch dargestellt:

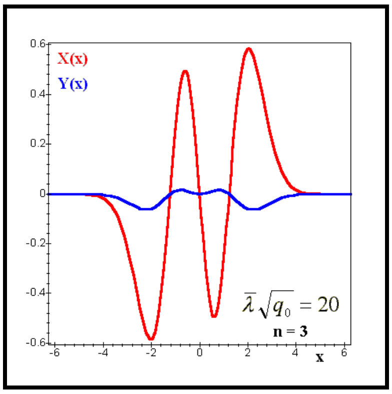


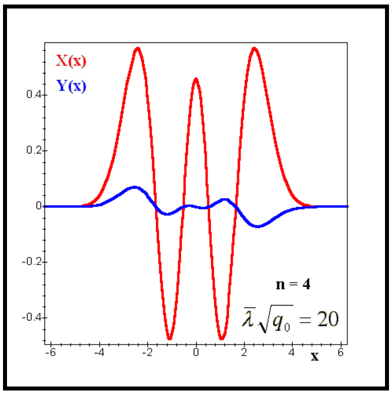
Die Funktionen „X(x)“ und „X(x)“ in grafischer Darstellung:

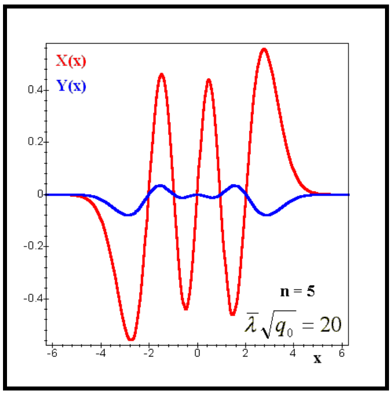




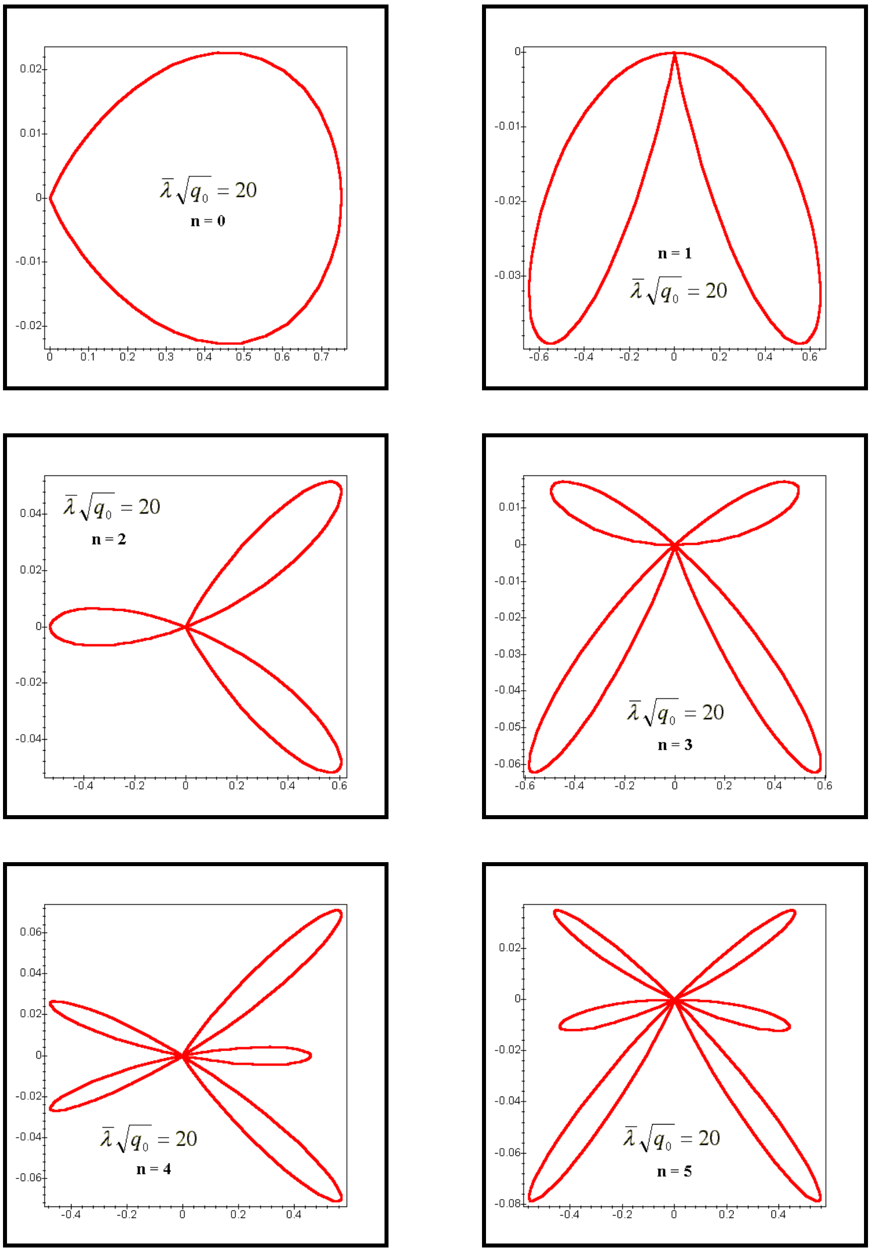








Die Orbitale aus der parametrischen Funktion „$Y(x)\cdot\bar{\lambda} = -X(x)\cdot x$“:



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