

# Der quantenmechanische Oszillator

## Gliederung

### 1. Der klassische harmonische Oszillator

#### 1.1. Wiederholungen

#### 1.2. Energiebetrachtungen

### 2. Der quantenmechanische harmonische Oszillator

#### 2.1. Das Potential

#### 2.2. Betrachtung eines Elektrons im Potentialtopf

#### 2.3. Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung für Fall eines harmonischen Oszillators

##### 2.3.1. Die Energieniveaus

### 3. Absoluter Nullpunkt

#### 3.1. Die Celsius-Skala

#### 3.2. Das Gasthermometer

#### 3.3. Die absolute Temperatur und die Kelvin-Skala

#### 3.4. Quantenmechanische Betrachtungsweise

### 4. Quellenangabe

# 1. Der klassische harmonische Oszillator

## 1.1. Wiederholungen:

$y(t) = y(\max) \cdot \sin(\omega t)$  heißt **Elongation** und gibt den Abstand von der Ruhelage des Körpers zur Zeit  $t$  an.

Die maximale Elongation  $y(\max)$  heißt **Amplitude** der Schwingung.

$T$  ist die **Umlaufzeit** der Kreisbewegung bzw. die **Schwingungsdauer** oder **Periodendauer** einer vollen Schwingung.

Die Anzahl der Umläufe pro Sekunde heißt **Drehzahl**, die Anzahl der Schwingungen pro Sekunde heißt **Frequenz**  $f$  der Schwingung.

Es gilt:  $f = 1/T$  und  $\omega = 2\pi f$ ; die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  ist also das  $2\pi$ -fache der Frequenz und heißt Kreisfrequenz der Schwingung.

Physikalische Systeme, die Schwingungen ausführen, bezeichnet man als **Oszillatoren**. Ist die Schwingung rein sinusförmig, so spricht man von **harmonischen Oszillatoren**.

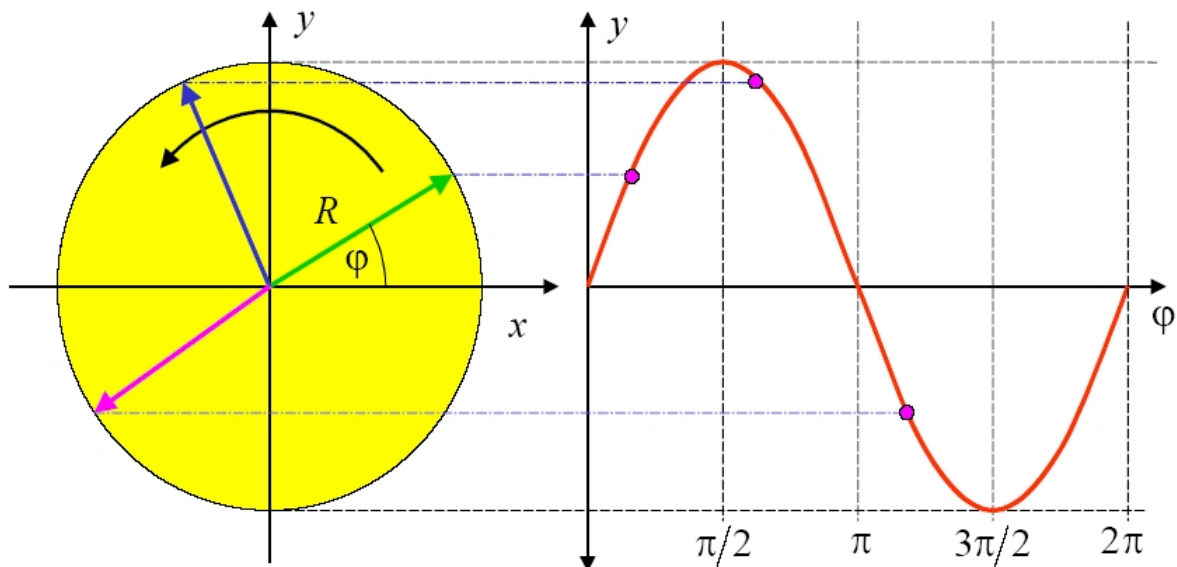
Nach dem **Hookeschen Gesetz** ist die Rücktreibende Kraft bei einem um  $x$  ausgelenktem Körper

$$F_x = -m\omega^2 x = -kx.$$

Bewegungen, die durch die Gleichung  $x = A \cdot \cos(\omega t + \delta)$  beschrieben werden, werden **harmonische Schwingungen** genannt. Ist die Beschleunigung eines Gegenstandes proportional zu seiner Auslenkung und dieser entgegengesetzt, dann führt der Gegenstand eine **einfache harmonische Schwingung** aus.

Beispiele für eine harmonische Schwingung sind das Fadenpendel (bei kleinen Amplituden) oder der Federschwinger.

## *Zusammenhang von Drehbewegung und harmonischer Schwingung*



Ort als Funktion des Winkels:

$$\begin{aligned} y(\varphi) &= R \cdot \sin(\varphi) = R \cdot \sin(\omega t + \delta), \\ x(\varphi) &= R \cdot \cos(\varphi) = R \cdot \cos(\omega t + \delta), \end{aligned}$$

wobei  $\varphi$  als **Phasenwinkel** oder auch **Phase der Schwingung** bezeichnet wird.

## 1.2. Energiebetrachtungen:

### potenzielle Energie:

Die potenzielle Energie lässt sich über die Arbeit ausdrücken:

$$W = \int F \cdot ds = -\Delta E_{\text{pot}} \quad \text{oder}$$
$$\Delta E_{\text{pot}} = E_{\text{pot},2} - E_{\text{pot},1} = -W = \int_{s_1}^{s_2} F \cdot ds .$$

Für infinitesimale Verschiebungen gilt:

$$dE_{\text{pot}} = -F \cdot ds$$
$$dE_{\text{pot}} = -F_x dx = -(-kx) dx = +kx dx$$

Durch Integration erhält man:

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

### kinetische Energie:

Die kinetische Energie einer Masse  $m$ , die sich mit der Geschwindigkeit  $v$  bewegt ist

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} mv^2 ,$$

wobei die kinetische Energie in den Umkehrpunkten der Schwingung ihr Minimum ( $v = \min$ ) und in der Ruhelage ihr Maximum ( $v = \max$ ) erreicht.

### Gesamtenergie:

Da sich potenzielle und kinetische Energie ineinander umwandeln, bleibt daher die Gesamtenergie, bei Vernachlässigung der Reibung, erhalten.

Somit gilt nach dem Energieerhaltungssatz:

$$E_{\text{ges}} = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} kx^2 + \frac{1}{2} mv^2$$

Ist  $x = A$  (maximale Auslenkung), dann gilt:

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{2} kA^2 \quad (E_{\text{ges}} \sim A^2) .$$

## 2. Der quantenmechanische harmonische Oszillator

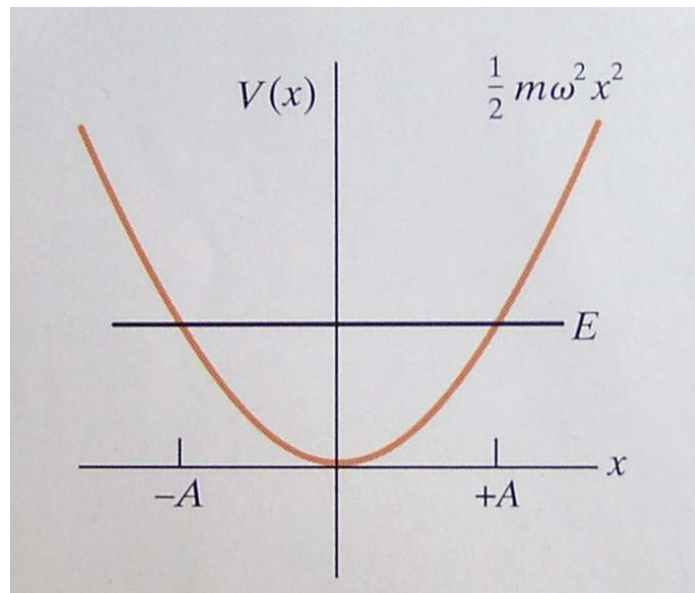
### 2.1. Das Potential des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Die Lösung der *zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung* für den Fall eines eindimensionalen harmonischen Oszillators lässt sich bei vielen Problemen wie etwa bei Schwingungen von Molekülen und in Festkörpern anwenden. Auch Planck musste zur Erklärung seiner Strahlungsformel annehmen, dass seine Modelloszillatoren nur Energie in Form von Quanten und nicht kontinuierlich abgeben. Die potenzielle Energie (auch Potential genannt) dieses Oszillators ist mit

$$E_{\text{pot}} = V(x) = \frac{1}{2} \cdot m\omega^2 x^2, \quad (1)$$

festgelegt, da die potenzielle Energie eines *harmonischen Oszillators* mit  $E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \cdot kx^2$

beschrieben wird, wobei  $\omega^2 = k / m$ .



*Das Potenzial eines harmonischen Oszillators*

Die Gesamtenergie  $E$  eines Teilchens, das zwischen den Punkten  $x = -A$  und  $x = A$  oszilliert, ist:  $E = \frac{1}{2} m\omega^2 A^2$ . Für den Fall, dass das Teilchen in der Ruhelage ( $x=0$ ) ruht, gilt:  $E = 0$ .

Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in einer Umgebung  $dx$  eines Punktes  $x$  zu finden, ist proportional zu Zeit  $dt = dx / v$ . Die Geschwindigkeit  $v$  kann durch Umstellen des Energieerhaltungssatzes gewonnen werden:

$$\frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} \cdot m\omega^2 x^2 = E$$

Somit gilt:

$$P(x) dx \sim \frac{dx}{v} = \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} \left( E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)}}$$

## 2.2. Betrachtung eines Elektrons im Potentialtopf

Die eindimensionale zeitunabhängige (stationäre) Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)} \quad \text{oder} \quad \boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - V(x)) \cdot \psi(x) = 0} \quad (2)$$

Für den Fall eines freien Teilchens ist  $V(x) = 0$ . Somit ergibt sich mit  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  die

Schrödinger-Gleichung  $\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 \cdot \Psi(x)}$ .

Diese Differentialgleichung zu lösen, heißt eine Funktion zu finden, die nach zweimaliger Differentiation diese Gleichung erfüllt. Wie man leicht sieht, kommt sowohl die Sinus-Funktion, als auch die Kosinus-Funktion in Frage:

$$\Psi_1(x) = A_1 \sin kx; \quad \Psi_2(x) = A_2 \cos kx. \quad (3)$$

Bei einem Elektron, das im Potentialtopf eingesperrt ist, gilt für den Fall  $x < A$  die Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k^2 \cdot \Psi(x)}, \quad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2}}. \quad (4)$$

Wenn jedoch der Fall der klassisch verbotenen Physik mit  $x > A$  auftritt, wird der Term  $(E - V(x))$  negativ und die Schrödinger-Gleichung lautet

$$\boxed{\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = +\alpha^2 \cdot \Psi(x)}, \quad \text{mit } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}}. \quad (5)$$

Um zu Lösungen der Differentialgleichungen (4) und (5) zu kommen, benötigt man nun den Ansatz

$$\Psi_1(x) = B_1 \cdot e^{+\alpha \cdot x} \quad \text{bzw.} \quad \Psi_2(x) = B_2 \cdot e^{-\alpha \cdot x}. \quad (6)$$

### 2.3.1. Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung für den Fall eines eindimensionalen harmonischen Oszillators

Setzt man nun das Potential (1) in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (2) ein, so erhält man:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad \text{bzw.} \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \cdot \psi(x) \quad (7)$$

Diese Gleichung lässt sich nun mit Hilfe des Ansatzes (6) lösen. Demzufolge probiert man den Lösungsansatz:

$$\psi(x) = A \cdot e^{-\alpha \cdot x^2} \quad (8)$$

Nach zweimaligen differenzieren, erhält man die 2. Ableitung von der  $\psi$ -Funktion:

$$\psi''(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = A(-2\alpha \cdot e^{-\alpha x^2} + 4\alpha^2 x^2 \cdot e^{-\alpha x^2})$$

Nach dem Einsetzen dieses Terms in Gleichung (7), erhält man:

$$\begin{aligned} (-2\alpha + 4\alpha^2 x^2) \cdot e^{-\alpha x^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \cdot e^{-\alpha x^2} \\ -2\alpha + 4\alpha^2 x^2 &= -\frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 \end{aligned}$$

Werden die Koeffizienten von  $x^2$  gleichgesetzt, dann erhält man:

$$4\alpha^2 = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \quad \text{bzw.} \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (9)$$

Das Gleichsetzen der konstanten Glieder hingegen ergibt:

$$\alpha = \frac{mE}{\hbar^2} \quad (10)$$

Das Einsetzen von  $\alpha$  aus (10) in die Gleichung (9) ergibt:

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

Somit war der Ansatz (8) mit  $\alpha$  aus (10) eine Lösung der eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für den Fall eines harmonischen Oszillators.

Die Wellenfunktion dieses Energiezustandes wird also mit der Gleichung

$$\psi_0(x) = A \cdot e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

beschrieben.

### 2.3.2. Die Energieniveaus des quantenmechanischen Oszillators

Die entsprechende Grundzustandsenergie beträgt somit

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

Die Funktionen

$$\psi_1(x) = Bx \cdot e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \quad \text{sowie}$$

$$\psi_2(x) = C \cdot \left(1 - \frac{2m\omega}{\hbar} x^2\right) \cdot e^{-(m\omega/2\hbar)x^2}$$

sind Lösungen der Schrödinger-Gleichung und liefern die Energiewerte:

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad \text{bzw.}$$

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega.$$

Für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator sind also nur bestimmte Energiewerte erlaubt, die auf quadratintegrale und somit normierbare Wellenfunktionen führen.

Die erlaubten Lösungen der Schrödinger-Gleichung lassen sich somit in der Form

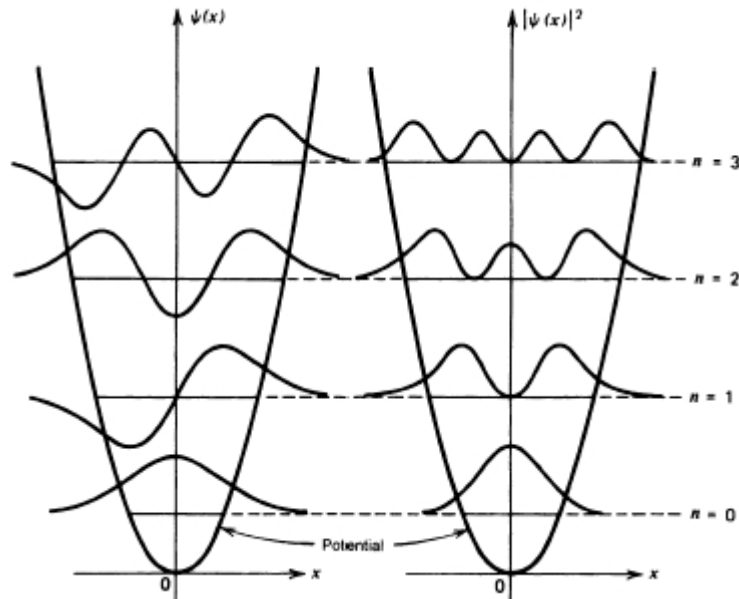
$$\psi_n(x) = C_n \cdot e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \cdot f_n(x)$$

darstellen, wobei  $C$  die Normierungskonstante und  $f_n(x)$  die sog. *Hermite-Polynome* sind.

Demzufolge sind die Energieniveaus des quantenmechanischen Oszillators *äquidistant* mit  $\hbar \omega$ :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

Die Energiequantisierung, die die Folge der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen, das harmonische Schwingungen um seine Ruhelage ausführt, war, benutze Planck um seine Strahlungsformel zu erklären.



*Energiewerte und Wahrscheinlichkeitsdichten des harmonischen Oszillators*

### Symmetrie:

Da das Potential des harmonischen Oszillators achsensymmetrisch zur Ordinatenachse ist, muss auch das Betragsquadrat der Wellenfunktion achsensymmetrisch zur  $y$ -Achse sein und es gilt:

$$|\psi(-x)|^2 = |\psi(x)|^2.$$

Die Wellenfunktion kann man entweder **symmetrisch**:  $\psi(-x) = \psi(x)$  oder **antisymmetrisch**:  $\psi(-x) = -\psi(x)$  nennen. Wie man der oberen Abb. entnehmen kann, ist die Wellenfunktion  $\psi(x)$  für alle geraden Werte von  $n$  *symmetrisch* und für alle ungeraden Werte von  $n$  *antisymmetrisch*.



### 3. Absoluter Nullpunkt

**Temperatur:** Die Temperatur ist ein Maß dafür, wie warm oder kalt ein Körper ist. Sie ist ein Maß für die mittlere kinetische Energie der Moleküle des entsprechenden Körpers.

**Wärme:** Wärme ist diejenige Energie, die von einem Körper auf einen anderen aufgrund einer Temperaturdifferenz übergeht.

Werden zwei Körper in Kontakt gebracht, ändern sich ihre physikalischen Eigenschaften (wie Aggregatzustand oder Form). Die Körper sind im **thermischen Gleichgewicht**, wenn keine weiteren Änderungen mehr stattfinden.

#### 3.1. Die Celsius-Skala

Der schwedische Astronom Anders Celsius (1701-1744) entwickelte ein noch heute benutztes Thermometer, das mit Quecksilber gefüllt war. Die Volumenänderung des Quecksilbers lässt sich an der Kapillare ablesen und einen nach Celsius definierten Wert zuordnen.

So sind nach Celsius  $0^{\circ}\text{C}$  die Temperatur des schmelzenden Eises und  $100^{\circ}\text{C}$  die Temperatur des siedenden Wassers. Die Temperatur des Quecksilbers mit dem Volumen  $V$  ist somit:

$$\vartheta = 100^{\circ}\text{C} \cdot \frac{V - V_0}{V_{100} - V_0}$$

$V_0$ ... Volumen des Quecksilbers bei  $0^{\circ}\text{C}$

$V_{100}$ ... Volumen des Quecksilbers bei  $100^{\circ}\text{C}$

Die Thermometerkapillare wird dann in leichgroße Teile zwischen  $0^{\circ}\text{C}$  und  $100^{\circ}\text{C}$  eingeteilt und auch für  $> 100^{\circ}\text{C}$  sowie  $< 0^{\circ}\text{C}$  fortgesetzt.

Jedoch werden zu genauen Messung von Temperaturen und für Messungen über  $357^{\circ}\text{C}$  (Siedepunkt von Quecksilber) und unter  $-39^{\circ}\text{C}$  (Erstarren von Quecksilber) auf andere Thermometersubstanzen bzw. Skalen zurückgegriffen.

#### 3.2. Das Gasthermometer

Wird als Substanz ein Gas anstatt Quecksilber genommen, so verhält sich die Volumenänderung  $\Delta V$  des Gases proportional zur Temperaturänderung  $\Delta \vartheta$  und zur vorhandenen Gasmenge. Der französische Chemiker und Physiker Louis Gay-Lussac (1778-1850) formulierte das **Gesetz von Gay-Lussac**:

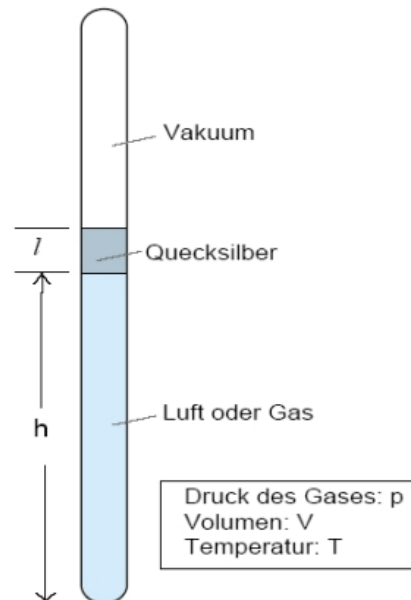
Ist  $V_0$  das Volumen eines Gases bei  $0^{\circ}\text{C}$ , dann ist sein Volumen bei der Temperatur  $\vartheta$ , in Celsiusgraden gemessen:

$$V = V_0 + \Delta V = V_0(1 + \beta\vartheta)$$

$\beta$  ... isobarer Ausdehnungskoeffizient (weitgehend von der Art des Gases unabhängig)

Je geringer die Gasdichte, desto mehr nähert sich  $\beta$  dem Wert  $\beta = 3,661 \cdot 10^{-3} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$  an.

Ein Gas, das unabhängig von der Dichte das Gesetz von Gay-Lussac mit dem Wert  $\beta = 3,661 \cdot 10^{-3} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$  streng erfüllen würde, nennt man **ideales Gas**. Wasserstoff und Helium verhalten sich bei normalen Bedingungen (20°C, Atmosphärendruck) fast wie ideale Gase.

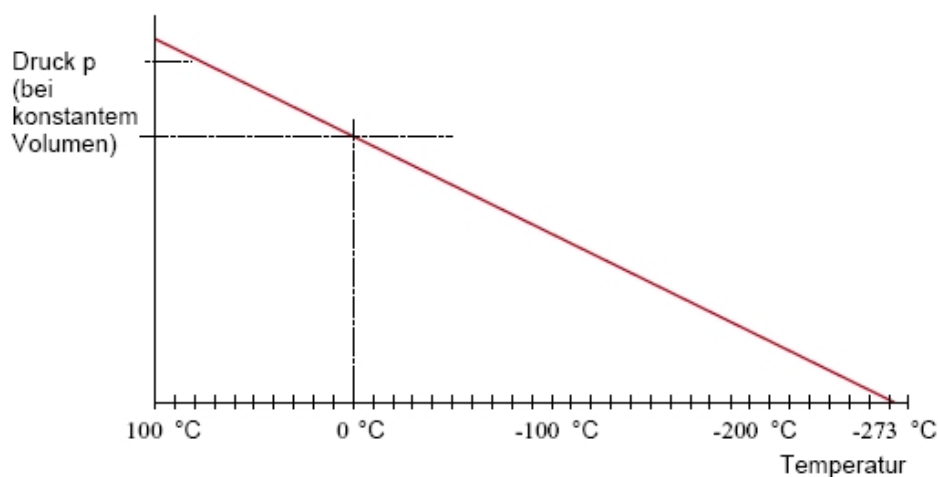


*Eine Version des Gasthermometers mit konstantem Druck  $p$*

### 3.3. Die absolute Temperatur und die Kelvin-Skala

Aus der Beobachtung des Verhaltens des Gasthermometers können wir schließen, dass es eine minimale Temperatur gibt, dem **absoluten Nullpunkt**.

Nimmt die Temperatur ab, so wird sich auch der Druck (bei konstantem Volumen) oder das Volumen (bei konstantem Druck) reduziert.



*Bestimmung des absoluten Nullpunkts*

Aus  $V(\vartheta_0) = V_0(1 + \beta\vartheta_0) = 0$  folgt  $\vartheta_0 = \frac{-1}{\beta} = 273,15^\circ\text{C}$ , d.h. dass sich alle Geraden in einem Punkt der Temperaturachse bei  $\vartheta_0 = -273,15^\circ\text{C}$  schneiden.

Sir William Thomson (Lord Kelvin) (1824-1907) entwickelte die **absolute Temperaturskala (Kelvin-Skala)**, die den absoluten Nullpunkt als Nullpunkt der Temperaturskala wählt. Als zweiter Fixpunkt wurde der **Tripelpunkt** des Wassers (Temperatur, bei der Wasser, Eis und Wasserdampf im thermischen Gleichgewicht existieren können) gewählt, der bei  $0,01^\circ\text{C}$  liegt.

Die Temperatur eines Körpers in der Kelvin-Skala kann mit Hilfe eines Gasthermometers bei gleichem Volumen gemessen werden:

$$T = \frac{273,16\text{K}}{p_3} p$$

$p$  ... Druck bei der Temperatur  $T$   
 $p_3$  ... Druck am Tripelpunkt des Wassers

bei konstantem Druck gilt:

$$T = \frac{273,16\text{K}}{V_t} V$$

$V$  ... Volumen des idealen Gases  
 $V_t$  ... Volumen am Tripelpunkt des Wassers

## Quantenmechanische Betrachtungsweise

Ein Körper hat genau dann eine Temperatur  $T$  mit  $T = 0\text{K}$ , wenn die Energie desselben Körpers gleich Null ist.

Da die Energie eines quantenmechanischen Oszillators im Grundzustand nicht null werden kann, da  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$  ist, wird nie der absolute Nullpunkt erreicht werden.

Wissenschaftlern ist es jedoch schon gelungen durch **Laserkühlen** eine Temperatur von einem Millionstel Kelvin zu erzeugen. Das ist Voraussetzung um die **Bose-Einstein-Kondensation** zu beobachten.

## **4.Quellenangabe**

### **Bücher:**

- Paul A. Tipler Physik
- Kuhn Physik Band2
- Metzler Physik
- Atom und Kernphysik von H. Lindner
- Lindner Das Bild der modernen Physik

### **Internet:**

- www.
- www.
- www.
- www.
- www.