

## Definition des Potentials als Oszillator

Einführung der Anharmonizität- „ $\chi$ “

Wie sieht die ganze Sache für den Anharmonischen Oszillator aus?

$$\Psi(c, n) = e^{n-\gamma-1} (1 - e^{-c} (c+1))$$

⇒

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} (c+1)$$

Die erwartete Differentialgleichung ist nichtlinear und so mit vertretbarem Aufwand unlösbar. Abhilfe schafft es, „ $\Psi_0(c)$ “ mittels Taylor- Entwicklung zu polynomisieren:

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c} (c+1)$$

⇒

$$\Psi_0(c) = \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{3}c^3 + \frac{1}{8}c^4 - \frac{1}{30}c^5 + \frac{1}{144}c^6 - \frac{1}{840}c^7 + \frac{1}{5760}c^8 - \frac{1}{40320}c^9 + \dots$$

⇒

$$\Psi_0(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left( \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{3}c^3 + \frac{1}{8}c^4 - \frac{1}{30}c^5 + \frac{1}{144}c^6 - \frac{1}{840}c^7 + \frac{1}{5760}c^8 - \frac{1}{40320}c^9 + \dots \right)$$

Vorerst wird mit bis „ $c^9$ “ weiter gerechnet. Im weiteren Verlauf wird dieser Mangel wieder beseitigt. Ein Vergleich für „ $\Psi_0(c)$ “ als Polynom und im Original graphisch dargestellt. Mann beachte die Potenz von „ $c^2$ “. Es entspricht die des Harmonischen Oszillators:

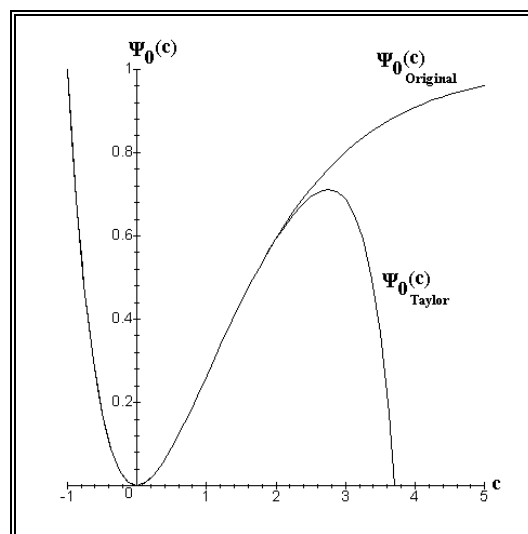


Abb. 13: Die beiden Berechnungsgrundlagen von „ $\Psi_0(c)$ “ graphisch dargestellt.

Für das „ $c^9$ “- Polynom sind zwischen „ $-1 < c < 2$ “ gute Ergebnisse zu erwarten.

Die Bewegungsdifferentialgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial c} \Psi(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left( c - c^2 + \frac{1}{2}c^3 - \frac{1}{6}c^4 + \frac{1}{24}c^5 - \frac{1}{120}c^6 + \frac{1}{720}c^7 - \frac{1}{5040}c^8 \right)$$

⇒

$$c'' = -\frac{\partial}{\partial c} \Psi^*(c, n)$$

⇒

$$c'' + e^{n-\gamma-1} \left( c - c^2 + \frac{1}{2}c^3 - \frac{1}{6}c^4 + \frac{1}{24}c^5 - \frac{1}{120}c^6 + \frac{1}{720}c^7 - \frac{1}{5040}c^8 \right) = 0$$

⇒

$$c'' + f(c, n)c = 0$$

mit:

$$f(c, n) = e^{n-\gamma-1} \left( 1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \right)$$

Die charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 + f(c, n) = 0$$

⇔

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{-1} \sqrt{f(c, n)}$$

⇒

$$a = 0$$

$$b = \omega_0 = \sqrt{f(c, n)}$$

Das System ist dann schwingungsfähig, wenn gilt:

$$f(c, n) > 0$$

Für das vollständige Taylor- Polynom ist bekannt, dass für „ $c \neq 0$ “ diese Bedingung erfüllt ist.

Die Schwingfähigkeit ist gegeben. Die Lösung der Differentialgleichung:

$$c = \sin(\omega_0 t) = \sin\left(t \sqrt{f(c, n)}\right)$$

Die Bewegungsdifferentialgleichung jetzt:

$$\omega_0^2 = f(c, n)$$

⇒

$$c'' + \omega_0^2 c = 0$$

Damit ist dies die gleiche Bewegungsdifferentialgleichung, wie bei einem Harmonischen Oszillator. Deshalb ergibt die Störungsrechnung das gleiche Ergebnis:

$$c(t) = \sin\left(\frac{\omega_0}{v} t\right) + \sin(vt)$$

Da außerdem eine weitere Bedingung die Periode „ $2\pi$ “ für Eigenwerte gefordert ist, sind nur ganzzahlige Vielfache von „ $\omega_0$ “ gültig:

$$\omega_0 = n v$$

Es war und ist gegeben:

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \left( 1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \right) \end{aligned}$$

Ob die Quantelung über „ $n$ “ weiterhin gegeben ist, soll überprüft werden:

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}} = 1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7$$

⇔

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}} = e^{\bar{\chi}} = \frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7$$

Der Wert „ $e^{\bar{\chi}}$ “ ist die globale, exponentielle Anharmonizität, im Bereich von „ $-1 < c < 2$ “ („ $c^9$ “- Polynom !) gilt:

c	-1	0	1	2	3
$e^{\bar{\chi}}$	2,718...	1,000...	0,367...	0,132...	-0,023...

Für „ $c = 0$ “ liegt keine Verzerrung des Ersatzsystemes, des Feder- Masse-Schwingsystems vor. Die globale, lineare Anharmonizität lässt sich berechnen über:

$$\bar{\chi} = \ln\left(\frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7\right)$$

⇒

c	-1	0	1	2	3
$\bar{\chi}$	1	0	-1	-2	-

Der Wert für „ $c = 3$ “ konnte nicht berechnet werden, welches daran liegt, dass die Polynomisierung bis „ $c^9$ “ über Taylor nicht mehr scharf genug ist.

Dieser schon angedeutete Mangel soll beseitigt werden. Es ist erkennbar, dass für die Anharmonizität über alles gilt:

$$\bar{\chi} = \ln \left( \frac{1}{1}c^0 - \frac{1}{1}c^1 + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \dots \right)$$

⇒

$$\bar{\chi} = \ln \left( \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{c^n}{n!} \right)$$

⇔

$$\bar{\chi} = \ln e^{-c}$$

⇔

$$\bar{\chi} = -c$$

Damit ist gezeigt, dass das vorliegende Potential ideal in seiner Anharmonizität ist. Die Teilanharmonizitäten können somit definiert werden:

$$\chi_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

Es wurde berechnet:

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \left( 1 - c + \frac{1}{2}c^2 - \frac{1}{6}c^3 + \frac{1}{24}c^4 - \frac{1}{120}c^5 + \frac{1}{720}c^6 - \frac{1}{5040}c^7 \right) \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1} e^{\bar{\chi}} \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned} (\omega_0^2)_{\text{Harmonic}} &= e^{n-\gamma-1} \\ (\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}} &= e^{n-\gamma-1+\bar{\chi}} \end{aligned}$$

Damit alle Bedingungen der Eigenfrequenzen erfüllt sind, muss gelten:

$$\frac{(\omega_0^2)_{\text{Harmonic}}}{(\omega_0^2)_{\text{Anharmonic}}} = n = \frac{e^{n-\gamma-1}}{e^{n-\gamma-1+\bar{\chi}}}$$

mit:

$$n \in \mathbb{N}$$

⇒

$$n = e^{-\bar{\lambda}} = e^c$$

↔

$$c = \ln n$$

Damit ist gezeigt, dass nur der rechte aufsteigende Zweig für die Quantelung verantwortlich ist. Nun ist berechenbar, an welcher Stelle von „c“ die Eigenfrequenz des Wertes „n“ liegt, es folgt:

n	1	2	3	4	5	6
c	0	0, 693...	1, 098...	1, 386...	1, 609...	1, 791...

Die Potentialstufen, an der die Eigenfrequenzen liegen:

$$\Psi_0(c) = 1 - e^{-c}(c+1)$$

⇒

$${}_n\Psi_0(n) = 1 - e^{-\ln n}(\ln n + 1)$$

↔

$${}_n\Psi_0(n) = 1 - \frac{\ln n + 1}{n}$$

⇒

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} {}_n\Psi_0(n) = 1$$

⇒

n	1	2	3	4	5	6	7
${}_n\Psi_0(n)$	0	0, 153...	0, 300...	0, 403...	0, 478...	0, 534...	0, 579...

Diese Tatsache graphisch dargestellt:

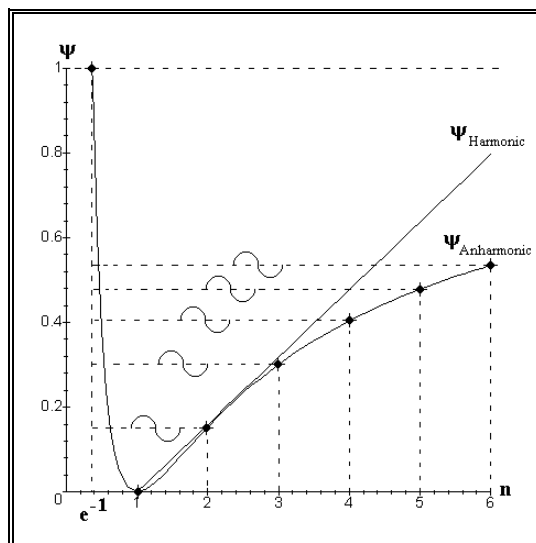


Abb. 14: Die Berechnungsgrundlage der Potentialstufen graphisch dargestellt.

