

Fortgeschrittenenpraktikum der Fakultät Physik

## **Versuch 23: Quanten Analogien**

Luca Dietrich (luca.dietrich@tu-dortmund.de)  
Cihad Gözsüz (cihad.goezsuez@tu-dortmund.de)

Durchführung: 03.05.2021

Abgabe: 21.07.2021

TU Dortmund – Fakultät Physik

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Zielsetzung</b>	<b>3</b>
<b>2 Theorie</b>	<b>3</b>
2.1 Das Wasserstoffatom . . . . .	3
2.2 Das Wasserstoffmolekül . . . . .	5
2.3 Der 1-dim Festkörper . . . . .	6
2.4 Analogie zum Wasserstoffatom und -molekül . . . . .	7
2.4.1 Wasserstoffatom . . . . .	7
2.4.2 Wasserstoffmolekül . . . . .	9
2.5 Analogie zum 1-dim Festkörpers . . . . .	9
<b>3 Aufbau und Durchführung</b>	<b>9</b>
3.1 Der Aufbau . . . . .	9
3.2 Vorbereitende Experimente . . . . .	11
3.3 Das Wasserstoffatom . . . . .	11
3.4 Das Wasserstoffmolekül . . . . .	12
3.5 Der 1-dim Festkörper . . . . .	12
<b>4 Auswertung</b>	<b>13</b>
4.1 Eichung der Messanlage . . . . .	13
4.2 Das Wasserstoffatom . . . . .	15
4.2.1 Druckamplitude . . . . .	17
4.2.2 Aufspaltung der Peaks . . . . .	19
4.2.3 Druckamplitude mit der 9 mm Blende . . . . .	21
4.3 Das Wasserstoffmolekül . . . . .	21
4.3.1 Änderung des Frequenzspektrums in Abhängigkeit des Blenden- durchmessers . . . . .	21
4.3.2 Winkelverteilung mit der 20 mm Blende . . . . .	23
4.4 Zylinderketten als Modell für eindimensionale Festkörper . . . . .	25
4.4.1 Der Übergang von einem Molekül zum Festkörper . . . . .	25
4.4.2 Blenden verschiedener Durchmesser zwischen den Zylindern in der Resonatorkette . . . . .	26
4.4.3 Modifikation der Resonatorkette . . . . .	27
<b>5 Diskussion</b>	<b>30</b>
5.1 Wasserstoffatom . . . . .	30
5.2 Modellierung des Wasserstoffmoleküls . . . . .	30
5.3 Festkörper Modellierung . . . . .	30
<b>Literatur</b>	<b>31</b>

# 1 Zielsetzung

Ziel des Versuchs ist es quantenmechanische Strukturen wie das Wasserstoffatom, Wasserstoffmolekül und die Bandstruktur in eindimensionalen Festkörpern mit Hilfe von Analogien in der Akustik zu untersuchen und die Gemeinsamkeiten und Grenzen dieser Analogien zu untersuchen. Dazu werden akustische Experimente mit Hohlraumresonatoren und Zylindern aus Aluminium durchgeführt.

## 2 Theorie

Für die quantenmechanischen Modellen können Analogien mit Hilfe der Akustik geschaffen werden, im Folgenden werden die quantenmechanischen Grundlagen für die einzelnen Modelle erläutert und die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zu den akustischen Experimenten benannt und begründet.

### 2.1 Das Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist das simpelste Atom. Es besteht aus einem Proton im Kern und einem Elektron in der Hülle. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für dieses System lautet:

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (1)$$

Dabei ist  $\Psi(\vec{r})$  ist die Wellenfunktion,  $E$  die Gesamtenergie und  $\hat{H}$  der Hamiltonoperator. Für ein Elektron im Wasserstoffatom lautet  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} = -\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

Hierbei ist  $\hat{p}$  der Impulsoperator,  $\hbar$  das gekürzte planksche Wirkungsquantum,  $m$  die Masse des Elektrons,  $e$  die Elementarladung und  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante. Aufgrund der Kugelsymmetrie des Systemes werden Kugelkoordinaten verwendet, dort lautet der Laplace-Operator  $\Delta$ :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \quad (3)$$

Um die Schrödingergleichung zu lösen wird die Wellenfunktion  $\Psi$  mit dem Separationsansatz in einen Radialteil  $R_{nl}$  und einen Winkelanteil  $\Phi_{lm}$  aufgeteilt:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \Phi_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4)$$

Für das Wasserstoffatom gibt es 3 Quantenzahlen namens  $n, l, m$ . Dabei ist  $n$  die Hauptquantenzahl,  $l$  die Nebenquantenzahl und  $m$  die Magnetquantenzahl. Für die Quantenzahlen gilt

$$\begin{aligned}
n &\in \mathbb{N} \\
l &\in \mathbb{N}_0 \\
m &\in \mathbb{Z}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
l &< n \\
|m| &\leq l.
\end{aligned}$$

Mit dem Separationsansatz entstehen zwei entkoppelte Differentialgleichungen. Für dieses Experiment ist jedoch nur die Lösung des Winkelanteils interessant, da nur dieser in dem akustischen Modell modelliert werden kann. Dies führt für den Radialanteil und Winkelanteil zu folgender Differentialgleichung:

$$ER_{nl}(r) = \left( -\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) - \frac{e^2}{r} \right) R_{nl}(r) \quad (5)$$

$$-l(l+1)\Phi_{lm} = \Delta_{\theta,\varphi} \Phi_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6)$$

Dabei ist  $\Delta_{\theta,\varphi}$  der Winkelanteil des Laplaceoperators  $\Delta$  in Kugelkoordinaten. Der Term mit  $l(l+1)$  kommt in der Herleitung dadurch zustande, dass  $-\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} = \hat{L}^2$  entspricht, wobei  $\hat{L}$  der Drehimpulsoperator ist. Für  $\hat{L}^2$  gilt folgende Eigenwertgleichung:

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\psi\rangle \quad (7)$$

Die Eigenwertgleichung (6) kann mit Hilfe der *Kugelflächenfunktionen*  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  gelöst werden und diese ergeben sich zu:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{lm} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (8)$$

Hierbei bezeichnet  $P_{lm}$  die zugeordneten *Legendrepolynome*

$$P_{lm}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad (9)$$

und  $N_{lm}$  den Normierungsfaktor

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}. \quad (10)$$

Die Eigenenergiewerte des Wasserstoffatoms betragen:

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (11)$$

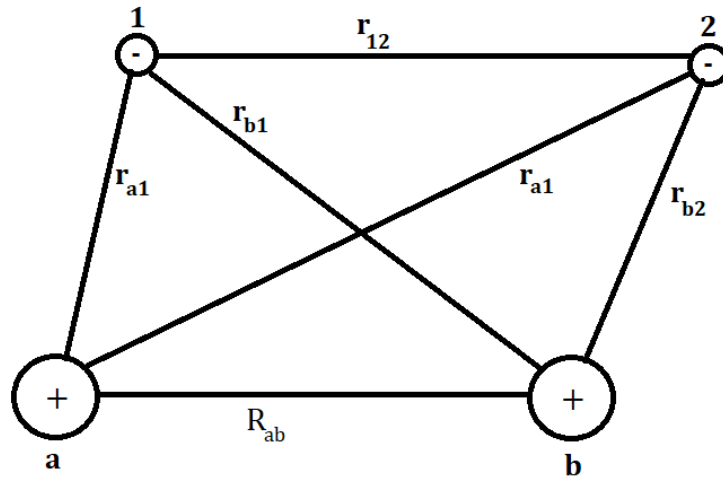
Dabei bezeichnet  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$  den Bohrschen Radius. In Gleichung (11) ist auffällig, dass die Eigenenergiewerte beim Wasserstoffatom eine Entartung in  $m$  aufzeigen, die durch die sphärische Symmetrie resultiert. Diese Entartung kann durch ein anlegen eines äußeren Magnetfeldes aufgehoben werden. Durch die Felder wird die Symmetrie gebrochen. Dieser Effekt wird *Zeemaneffekt* genannt. Die Entartung in  $l$  ist jedoch ein Resultat aus dem  $\frac{1}{r}$  - Potential. Zusätzlich führt die Berücksichtigung von Spin und relativistischen Beiträgen zu weiteren Aufspaltungen, diese wurden hierbei jedoch nicht berücksichtigt.

## 2.2 Das Wasserstoffmolekül

Das Wasserstoffmolekül  $H_2$  besteht aus 2 Wasserstoffatomen und ist damit das einfachste neutrale Molekül. Es besteht also aus 2 positiven Protonen und 2 Elektronen. Dieses Problem ist jedoch nicht analytisch lösbar. Jedoch existieren Näherungen, um die Wellenfunktion des Systems zu approximieren. Die zu lösende Schrödingergleichung lautet:

$$E\Psi(1,2) = \left( \hat{H}_1 + \hat{H}_2 - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{R_{ab}} \right) \Psi(1,2) \quad (12)$$

Hierbei sind  $\hat{H}_{1,2}$  die Hamiltonoperatoren der einzelnen Wasserstoffatome, und die anderen Variablen beschreiben die Abstände der Elektronen 1 und 2 zu den Kernen a und b aus Abbildung 1.



**Abbildung 1:** Schematische Skizze des Wasserstoffmoleküls.

Da die Elektronen Fermionen sind unterliegen sie dem *Pauli-Verbot* und dies muss auch die Wellenfunktion erfüllen. Also muss die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch sein. Die Gesamtwellenfunktion  $\Psi(1,2)$  besteht aus einer Ortswellenfunktion  $\tilde{\Psi}(1,2)$  und einer Spinwellenfunktion  $S(1,2)$ :

$$\Psi(1, 2) = \tilde{\Psi}(1, 2) \cdot S(1, 2) \quad (13)$$

Dadurch muss die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein, falls die Ortswellenfunktion symmetrisch ist und vice versa. Dadurch ergeben sich 4 mögliche Wellenfunktionen:

$$\Psi_{t1}(r_1, r_2) = \uparrow_1 \uparrow_2 (\Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2) - \Psi_a(r_2)\Psi_b(r_1)) \quad (14)$$

$$\Psi_{t2}(r_1, r_2) = \downarrow_1 \downarrow_2 (\Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2) - \Psi_a(r_2)\Psi_b(r_1)) \quad (15)$$

$$\Psi_{t3}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1 \downarrow_2 + \uparrow_2 \downarrow_1) (\Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2) - \Psi_a(r_2)\Psi_b(r_1)) \quad (16)$$

$$\Psi_s(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1 \downarrow_2 - \uparrow_2 \downarrow_1) (\Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2) + \Psi_a(r_2)\Psi_b(r_1)) \quad (17)$$

Hierbei bezeichnet  $\uparrow_i$  und  $\downarrow_i$  den jeweiligen Spin des jeweiligen Elektrons und  $r_i$  bezeichnet die position im Raum des Elektrons. Dabei bilden die  $\Psi_t$  Wellenfunktionen das *Triplet* mit antisymmetrischer Ortswellenfunktion und symmetrischer Spinwellenfunktion, dies wird als *Orthowasserstoff* bezeichnet.  $\Psi_s$  ist das *Singulett* mit antisymmetrischer Spinwellenfunktion und symmetrischer Ortswellenfunktion und wird als *Parawasserstoff* bezeichnet. Beim Wasserstoffmolekül gibt es *bindende* und *anti-bindende Zustände*, diese werden durch den Phasenunterschied  $\Delta\varphi$  definiert. Nur bei einer Überlappung mit einem geraden Zustand, wirkt das Resultat bindend und bei einem Phasenunterschied von  $\Delta\varphi = \pi$  wird dieser Zustand als ungerade bezeichnet und wirkt antibindend.

### 2.3 Der 1-dim Festkörper

Beim Festkörper kommt es durch das Pauli-Prinzip, das beschreibt dass 2 Fermionen wie Elektronen sich nicht gleichzeitig im selben Zustand befinden dürfen, im Gegensatz zum Wasserstoffatom nicht zu scharfen Spektrallinien sondern zu Energiebändern, die aus den *erlaubten Zonen* bestehen. Zwischen den Energiebändern gibt es Bandlücken, die aus den *verbotenen Zonen* bestehen. Um einen Festkörper zu modellieren werden Kastenpotentiale mit periodischen Randbedingungen verwendet. Dadurch ergibt sich in der Dispersionsrelation  $E(\vec{k})$  in erster Näherung eine Proportionalität zu  $k^2$ . Die Dispersionsrelation beträgt:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (18)$$

In einem eindimensionalen Festkörper wird ein Elektron in einem periodischen Potential  $U(x)$  betrachtet. Das Potential und die Wellenfunktion in eine Fourierreihe entwickelt ergibt dann:

$$U(x) = \sum_G U_G \cdot e^{iGx} \quad (19)$$

$$\Psi(x) = \sum_k C_k \cdot e^{ikx} \quad (20)$$

Aus den periodischen Randbedingungen ergibt sich dann  $k = \frac{2\pi}{L}n$ . Dies eingesetzt in die Schrödingergleichung ergibt dann:

$$E\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x)\right) \Psi(x) \quad (21)$$

Für ein Elektron ergibt sich dann folgende Gleichung:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0 \quad (22)$$

Die Darstellung der Dispersionsrelation muss jedoch auf ein reduziertes Zonenschema mit Wellenvektor beschränkt auf  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$  eingegrenzt werden. Das vollständige Zonenschema ergibt sich durch periodisches aneinander Reihensetzen dieser Dispersionsrelation vom reduzierten Zonenschema. Die Zone, die das reduzierte Zonenschema umfasst, wird auch als die *erste Brillouin-Zone* bezeichnet.

Jedoch sind Festkörper in der Realität nicht zu 100% reine Kristalle und besitzen oft Defekte. Diese Defekte werden häufig durch Fehlstellen oder Fremdatome in der Kristallstruktur ausgelöst und müssen durch veränderte Potentialtöpfe modelliert werden.

## 2.4 Analogie zum Wasserstoffatom und -molekül

Im Folgenden werden die Analogien zwischen akustischen Experimenten und dem Modell des Wasserstoffatom und Wasserstoffmolekül dargestellt.

### 2.4.1 Wasserstoffatom

Für einen Kugelresonator gilt im klassischen Fall die Helmholtzgleichung mit

$$\frac{\partial^2 p(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\Delta p(\vec{r}, t)}{\rho\kappa}, \quad (23)$$

wobei  $p(\vec{r}, t)$  der Druck ist an der Stelle  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$ ,  $\rho$  und  $\kappa$  sind dabei die Dichte und die Kompressibilität des Mediums bzw. der Luft. Ähnlich wie im quantenmechanischen Modell lässt sich die Zeitentwicklung von der räumlichen Entwicklung separieren, dafür wird folgender Ansatz verwendet:

$$p(\vec{r}, t) = p(\vec{r}) \cdot \cos(\omega t) \quad (24)$$

Durch Einsetzen von  $\frac{1}{c^2} = \rho\kappa$ , wobei  $c$  die Schallgeschwindigkeit ist, ergibt sich die stationäre Druckverteilung mit dem Laplaceoperator  $\Delta$  aus Gleichung (3) in Kugelkoordinaten:

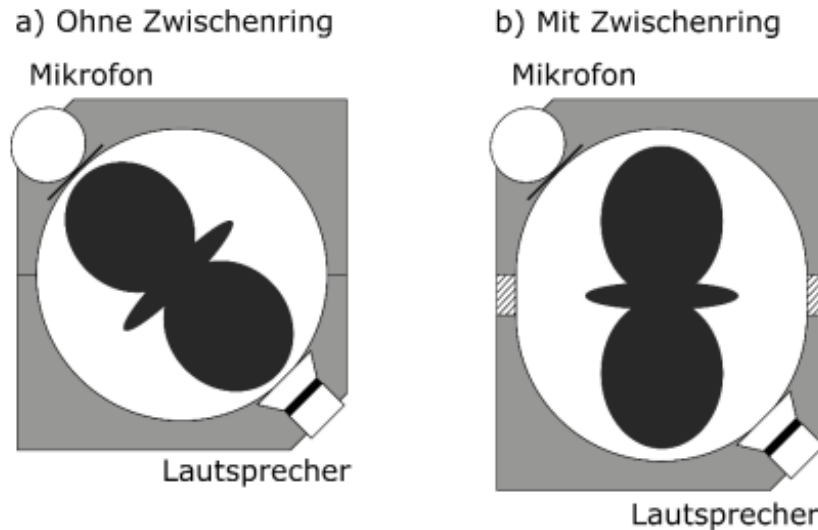
$$-\frac{\omega^2}{c^2} p(\vec{r}) = \Delta p(\vec{r}) = \left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}\right) p(\vec{r}) \quad (25)$$

Äquivalent wie in Kapitel 2.1 kann dieses Problem durch Separation mit  $p(r, \theta, \varphi) = \Psi_{lm}(\theta, \varphi) \cdot R(r)$  in einen Radial- und Winkelanteil separiert werden und es entstehen 2 unabhängige Gleichungen:

$$-l(l+1)\Psi_{lm}(\theta, \varphi) = \Delta_{\theta, \varphi} \Psi_{lm}(\theta, \varphi) \quad (26)$$

$$\frac{\omega^2}{c^2} R(r) = \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) \quad (27)$$

Der Vergleich zwischen der DGL (6) beim Wasserstoffatom und der DGL (26) beim Kugelresonator zeigt, dass sie identisch sind. Lediglich die DGL (27) für den räumlichen Anteil ist unterschiedlich zu der DGL (5) für den räumlichen Anteil vom Wasserstoffatom. Dadurch besteht keine Analogie zum räumlichen Anteil zwischen dem klassischen Modell und dem quantenmechanischen, dafür kann der Winkelanteil im klassischen Modell als Analogie zum quantenmechanischen benutzt werden. Im Kugelresonator treten dann beim Einschalten des Lautsprechers Resonanzfrequenzen auf, die mit dem Mikrofon vermessen werden können. Im Wasserstoffatom tritt sowohl eine Entartung in  $l$  als auch eine  $2l+1$ -fache Entartung in  $m$  auf. Im klassischen Kugelresonator wird die Entartung in  $l$  nicht realisiert, die Entartung von  $m$  jedoch schon. Im Wasserstoffatom könnte die Entartung durch Anlegen eines Magnetfeldes und den dadurch entstehenden *Zeeman-Effekt* aufgehoben werden, im Kugelresonator geschieht dies durch Symmetriebrechung. Ein schematischer Aufbau des Hohlresonators ist in Abbildung 2 zu sehen.



**Abbildung 2:** Schematischer Aufbau des Kugelresonators. [Anleitung]

Ohne den Zwischenring wird durch die Stellung von Mikrofon und Lautsprecher und die Symmetrie derer nur die  $m = 0$  Moden angeregt. Durch Einsetzen eines Zwischenrings wie in Abbildung 2 wird die Symmetrie gebrochen und es werden nun auch die  $m \neq 0$  Moden angeregt. Dadurch wird die Entartung in  $m$  teilweise aufgehoben. Dabei sind durch den Zwischenring nur noch die jeweiligen  $+m$ - und  $-m$ -Moden entartet. Die Kugelflächenfunktionen sind nun durch die Zwischenringe eigentlich auch keine exakte



Lösungen mehr, aber sie sind immernoch näherungsweise eine Lösung des Systems. Im Allgemeinen ergeben die Messungen mit dem Mikrofon in der Analogie auch nur das Betragsquadrat  $|\Psi|^2$  der Wellenfunktion und nicht die Wellenfunktion  $\Psi$  an sich.

#### 2.4.2 Wasserstoffmolekül

Für das Wasserstoffmolekül werden zwei Kugelresonator über eine kreisförmige Blende mit einander verbunden. Genau wie im Wasserstoffmolekül sind die Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen bzw. den einzelnen Kugelresonatoren miteinander gekoppelt und verbunden. Die dabei entstehenden Orbitale überlappen dann in den verbundenen Resonatoren. Genau wie beim Wasserstoffmolekül gibt es *bindende* und *anti-bindende Zustände*, diese werden auch über den Phasenunterschied  $\Delta\varphi$  definiert wie im Ende von Abschnitt 2.2 beschrieben.

### 2.5 Analogie zum 1-dim Festkörpers

Beim akustischen Analogon werden Aluminiumzylinder mit Irisblenden zu einer linearen Kette gereiht. Für einen zylindrischen Hohlraumresonator ist die Dispersionsrelation linear abhängig zur Wellenzahl  $\kappa$ , im Festkörper ist ein quadratischer Zusammenhang vorhanden. Resonanzen entstehen, wenn die Länge des Zylinders einem Vielfachen der Wellenlänge des Schalls entspricht. Die einzelnen Röhren werden mit Blenden aneinander gereiht, dadurch beeinflussen sich die einzelnen Resonatoren gegenseitig. Die Strecke von einer Blende zur nächsten entspricht im akustischen Analogon der ersten Brillouin-Zone. Der Durchmesser der Öffnungen der eingesetzten Blenden entspricht dann der Kopplungsstärke der einzelnen Resonatoren und jede Schallwelle wird beim Durchlaufen der Blende gestreut. Defekte stören die Periodizität in einem realen Festkörper, im Akustikexperiment werden die Störungen durch einzelne Zylinder in der Kette simuliert, die entweder kürzer oder länger sind als die anderen. Dadurch entstehen Störungen in der Resonator-Kette und diese können als Defekte bezeichnet werden.

## 3 Aufbau und Durchführung

Im Folgenden wird der Aufbau und die Durchführung des Versuchs beschrieben.

### 3.1 Der Aufbau

Die Materialien für den Versuch sind in Abbildung 3 zu sehen. Für den Versuch stehen in einem Baukasten kugelförmige Hohlraumresonatoren als Halbkugeln mit Lautsprecher und Mikrofon jeweils in einer der beiden Hälften zur Verfügung. Außerdem gibt es 2 weitere Halbkugeln mit einem Loch und dazugehörige Blenden mit den Durchmessern von  $d = \{10, 13, 16\}$  mm. Zusätzlich sind in einem Baukasten zylinderförmige Hohlraumresonatoren mit den Längen von  $l = \{12.5, 50, 75\}$  mm und Blenden mit den Durchmessern von  $d = \{10, 13, 16\}$  mm vorhanden. Diese Bauteile können auf eine Schiene aufgebracht werden, wo dann auch ein Lautsprecher und ein Mikrofon als Enden vorhanden sind. Die

Messung kann einerseits über einen Computer mit der Software namens *SpectrumSLC* durchgeführt werden. Dabei bietet die Schnittstelle mit dem Computer ein Audiosignal an den Lautsprecher und kann die Signale des Mikrofons empfangen und verarbeiten. Eine andere Variante ist die Messung mit Hilfe eines Oszilloskops. Die Schaltung ist in Abbildung 4 skizziert. Dafür wird der Lautsprecher an der Steuerelektronik an *Speaker Out* und das Mikrofon an *Micro Input* angeschlossen. Ein Sinusgenerator wird einerseits mit Channel 1 vom Oszilloskop verbunden als auch in *Sine Input* der Steuerelektronik. Channel 2 wird an den Anschluss namens *AC Monitor* in der Steuerelektronik angeschlossen. In der Steuerelektronik ist ein Frequenz-Amplitude-Konverter vorhanden, damit die Frequenzen am Oszilloskop untersucht werden können. Mit Hilfe der sweep-Funktion des Sinusgenerators können dann die Daten zeitlich mit der Frequenz am Oszilloskop verarbeitet werden. Am PC können die Daten direkt gespeichert werden und am Oszilloskop können durch Anschließen eines USB-Sticks die Bilder gespeichert werden.



**Abbildung 3:** Hohlraumresonatoren und Aluminiumzylinder. [Anleitung]

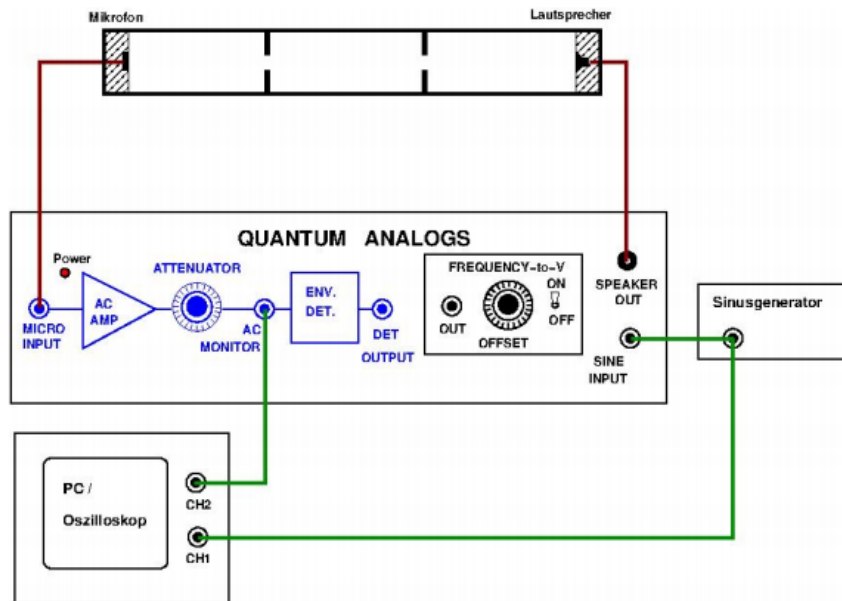


Abbildung 4: Skizze der Schaltung des Versuchs. [Anleitung]

### 3.2 Vorbereitende Experimente

Bevor mit den richtigen Experimenten angefangen werden kann, muss die Versuchstechnik getestet werden. Dafür werden die Zylinder mit einer Länge von 50 mm benötigt. Es wird nun zuerst ein Zylinder zwischen Lautsprecher und Mikrofon gestellt und ein Frequenzspektrum von 100 Hz bis 12 kHz mit dem Oszilloskop aufgenommen und dokumentiert. Danach wird ein Zylinder an die Kette angehängen und dasselbe Spektrum aufgenommen. Dies wird bis zum 12. Zylinder durchgeführt. Danach wird dieselbe Messung mit dem Computer durchgeführt. Die Frequenzspektren sollten jeweils keine signifikanten Unterschiede zwischen der Messung mit dem Oszilloskop und dem Computer aufweisen. Zum Schluss wird ein Frequenzspektrum eines einzelnen 75 mm Zylinders mit Oszilloskop und Computer aufgenommen und verglichen.

### 3.3 Das Wasserstoffatom

Für das Wasserstoffatom wird das Frequenzspektrum eines kugelförmigen Hohlraumresonators mit dem Computer aufgenommen. Die beiden Kugelhälften werden zu einer Kugel zusammengefügt und das Mikrofon und der Lautsprecher sind im Inneren mit einem Winkel von  $\alpha = 180^\circ$  ausgerichtet. Das Frequenzspektrum wird in 5 Hz Schritten und einer Schrittdauer von 5 ms aufgenommen.

Im Anschluss wird wieder das Oszilloskop verwendet und es wird mit einem Sinusgenerator der Frequenzbereich von 100 Hz bis 10 kHz durchlaufen. Dabei sollte die Frequenz, Amplitude und Phasenverschiebung beobachtet werden. Die auftretenden Resonanzfre-

quenzen und ihre Ordnung werden dokumentiert.

Im Folgenden wird wieder der Computer verwendet. Ziel ist es für mindestens 4 Resonanzfrequenzen die Druckamplitude als Funktion des Drehwinkels  $\alpha$  zu bestimmen. Dafür wird wieder ein Frequenzbereich von 100 Hz bis 10 kHz durchlaufen mit 5 Hz Schritten und einer Schrittdauer von 5 ms. Dabei wird nach jeder Messung der Winkel  $\alpha$  zwischen Mikrofon und Lautsprecher durch Rotation der oberen Kugelhälfte zwischen  $0^\circ$  und  $180^\circ$  in  $5^\circ$  Schritten variiert.

Anschließend werden die Peaks mit verschiedenen Zwischenringen zwischen den Kugelhälften aufgespalten. Dafür wird zuerst zwischen den Kugelhälften jeweils ein Zwischenring mit gesetzt und die Resonanzfrequenz bei ca. 2,3 kHz mit  $\alpha = 180^\circ$  vermessen. Dafür wird mit dem PC ein hochaufgelöstes Frequenzspektrum zwischen 1,8 kHz und 2,6 kHz mit 1 Hz Schritten und einer Schrittdauer von 5 ms aufgenommen. Diese Messung wird für jeden Zwischenring mit jeweils verschiedenem Durchmesser wiederholt. In diesem Experiment werden Zwischenringe mit den Durchmessern von  $d = \{3, 6, 9\}$  mm verwendet.

Zum Schluss wird nur der Zwischenring mit 9 mm Durchmesser und der Computer verwendet. Dazu wird wie im vorherigen Absatz ein hochaufgelöstes Frequenzspektrum zwischen 1,8 kHz und 2,6 kHz mit den selben Schrittweiten und -dauern aufgenommen nur für verschiedene Winkel  $\alpha$ . Dafür wird wieder nach jeder Messung der Winkel  $\alpha$  zwischen  $0^\circ$  und  $180^\circ$  in  $5^\circ$  Schritten variiert.

### 3.4 Das Wasserstoffmolekül

Für das Wasserstoffmolekül wird zwischen den Kugelhälften mit Mikrofon und Lautsprecher 2 Hälften mit einem Loch gesetzt, sodass 2 Kugelresonatoren entstehen, die durch eine Öffnung verbunden sind. Im Anschluss wird jeweils mit dem Computer ein hochaufgelöstes Frequenzspektrum zwischen 2,2 kHz und 2,5 kHz mit 1 Hz Schritten und einer Schrittdauer von 7,5 ms aufgenommen. Dies wird für verschiedene Blenden mit unterschiedlichen Durchmessern zwischen den Kugelresonatoren wiederholt. Im Experiment sind Blenden mit den Durchmessern von  $d = \{10, 13, 16\}$  mm vorhanden.

Danach wird nur die 16 mm Blende und der Computer verwendet. Jetzt wird wieder ein hochaufgelöstes Frequenzspektrum zwischen 2,2 kHz und 2,5 kHz mit 1 Hz Schritten und einer Schrittdauer von 7,5 ms aufgenommen und dies wird für jeden Winkel  $\alpha$  in  $5^\circ$  Schritten zwischen  $0^\circ$  und  $180^\circ$  wiederholt.

### 3.5 Der 1-dim Festkörper

Der 1 dimensionale Festkörper wird in diesem Experiment durch eine Resonatorkette aus Aluminiumzylindern und Irisblenden simuliert. Am Anfang und Ende befindet sich der Lautsprecher und das Mikrofon. Zur Verfügung stehen Zylinder der Längen  $l = \{12.5, 50, 75\}$  mm und Irisblenden mit den Durchmessern von  $d = \{10, 13, 16\}$  mm.

In diesem Teil des Experiment werden mit dem Computer immer Frequenzspektren von 100 Hz bis 12 kHz und 5 Hz Schritten mit einer Schrittdauer von 50 ms aufgenommen.

Zu Beginn werden 2 Zylinder mit 50 mm Länge und einer 16 mm Blende dazwischen zu einer Kette zusammengefügt und das Frequenzspektrum wird aufgenommen. Nach der Messung wird die Kette um einen Zylinder und eine Blende mit der selben Länge und Durchmesser ergänzt und dieselbe Messung wiederholt. Dies wird wiederholt bis zu einer Länge von 10 Zylindern.

Dieses Experiment wird nun wiederholt mit einer Kette aus jeweils 2, 4 und 10 Zylindern. Der einzige Unterschied ist nun, dass dies mit Blenden mit 13 mm und 10 mm Durchmesser jeweils durchgeführt wird.

Im Anschluss werden wieder Blenden mit 16 mm Durchmesser verwendet. In der Kette aus 10 Zylindern wird nun einer der 50 mm Zylinder durch einen Zylinder mit 75 mm ausgetauscht und das selbe Frequenzspektrum gemessen. Danach wird der 75 mm Zylinder durch 3 Zylinder mit 12,5 mm Länge, die zusammen dann einen 37,5 mm langen Zylinder ergeben, ausgetauscht und wieder das Frequenzspektrum aufgenommen. Dann werden diese 3 Zylinder durch einen 50 mm und einen 12,5 mm Zylinder ersetzt, die dann zusammen einen 62,5 mm langen Zylinder ergeben und wieder wird das Frequenzspektrum aufgenommen.

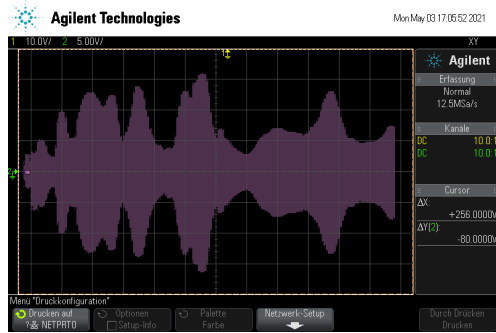
Nun wird eine Kette aus 10 Zylindern zusammengebaut, bei denen jeweils abwechselnd ein 50 mm Zylinder und ein 75 mm Zylinder eingebaut wird mit einer 16 mm Blenden immer dazwischen. Wieder wird das Frequenzspektrum aufgenommen.

Zum Schluss wird eine Kette aus 8 Zylindern mit einer Länge von 50 mm zusammengebaut. Dabei besitzt jede Blende zwischen den Zylindern abwechselnd einen Durchmesser von 13 mm und 16 mm. Dann wird das Frequenzspektrum aufgenommen.

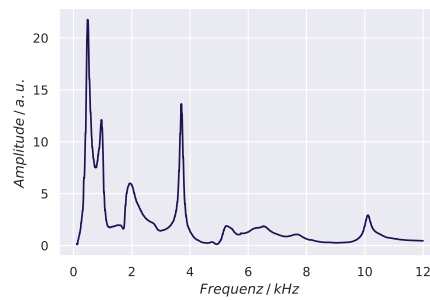
## **4 Auswertung**

### **4.1 Eichung der Messanlage**

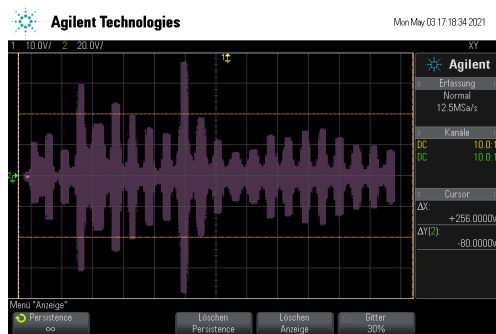
Für die Eichung der Messanlagen wurden Messungen der Frequenzspektren von verschiedenen Ketten aus Zylinderresonatoren aufgenommen. Die Messung wurde sowohl mit dem Oszilloskop als auch mit dem Computer aufgenommen. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 5 dargestellt.



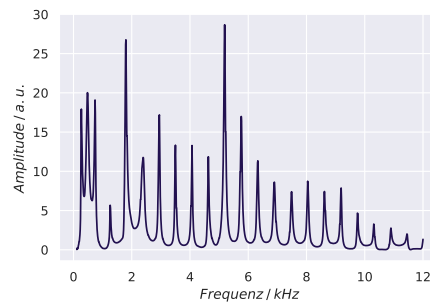
(a) 1 Zylinder



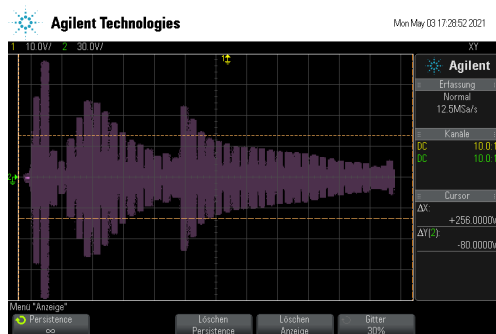
(b) 1 Zylinder



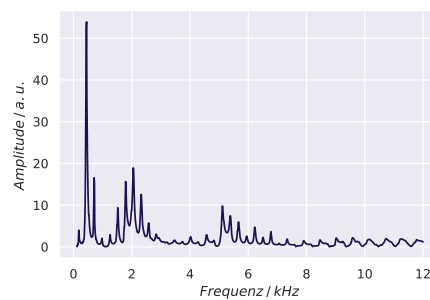
(c) 6 Zylinder



(d) 6 Zylinder



(c) 12 Zylinder

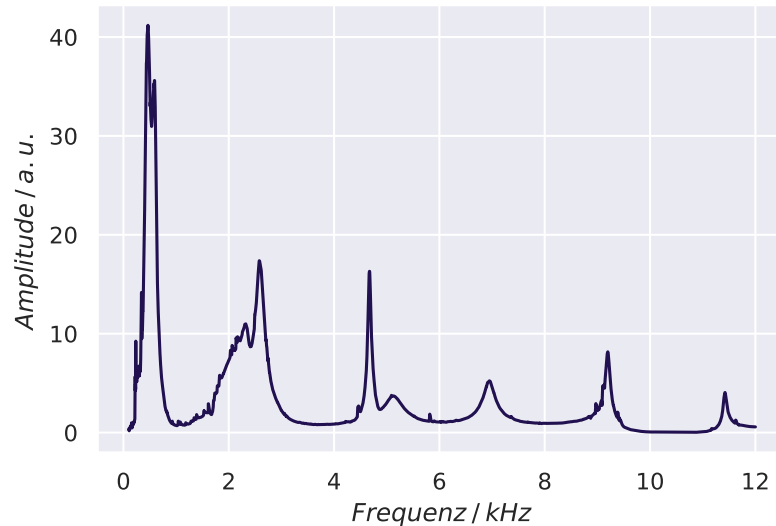


(d) 12 Zylinder

**Abbildung 5:** Gemessene Frequenzspektren der Zylinder-Resonatoren mit unterschiedlicher Länge. Die Messung am Oszillator ist links angegeben und die Messung am Computer rechts.

Die Messungen mit dem Oszilloskop zeigen den selben Verlauf wie die Messungen mit dem Computer. Es ist bei allen Messungen das charakteristische Spektrum eines Festkörpers ersichtlich. Die einzelnen Peaks geben die Resonanzen wieder der Zylinderkette. Wie erwartet, nimmt auch die Amplitude mit steigender Frequenz ab. Somit bestätigen die Messungen insgesamt die Erwartungen und die Eichung war damit erfolgreich. Es ist zu erwähnen, dass die Messung des einzelnen Zylinders ersichtlich nur unsauber gelungen

ist. Hier sind die Resonanzen des Zylinders nicht eindeutig erkennbar. Für die weiteren Messungen sind jedoch scharfe Peaks an den Resonanzfrequenzen zu erkennen. Hieran anschließend, wurde das Spektrum eines Zylinders der Länge 75 mm aufgenommen. Das Spektrum ist in der Abbildung 6 zu sehen.

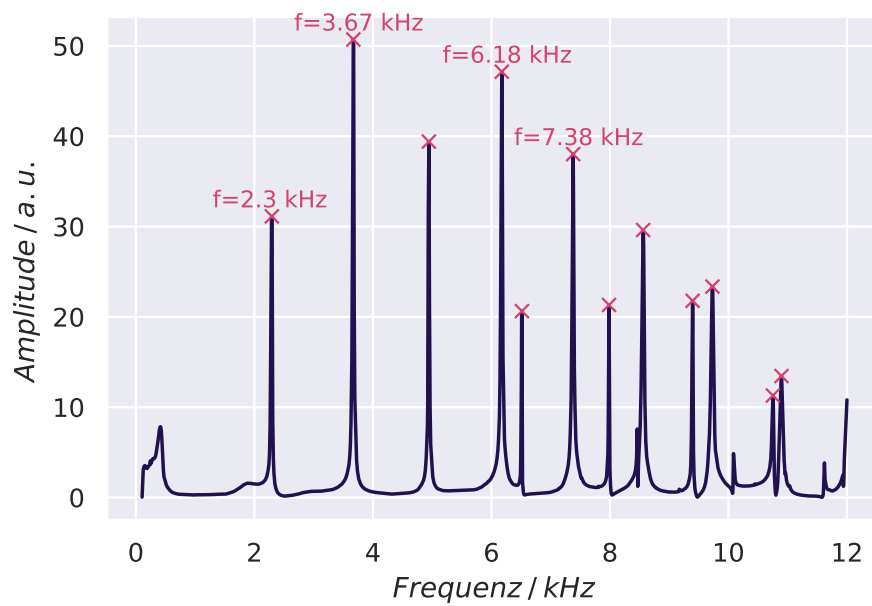


**Abbildung 6:** Das Frequenzspektrum eines 75 mm langen Zylinder-Resonators.

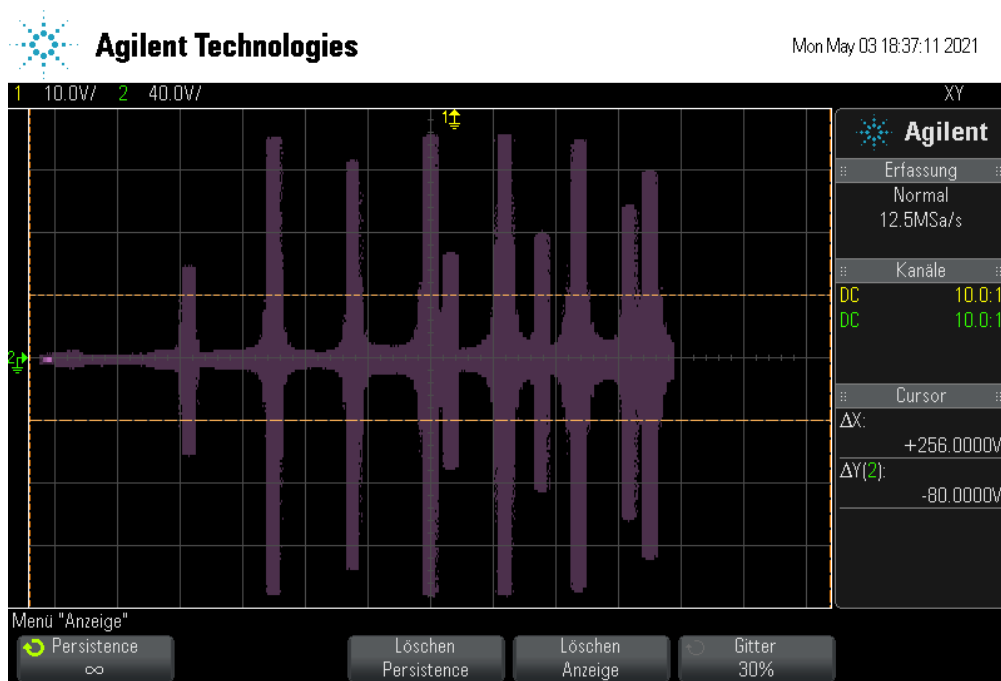
An diesem Spektrum sind periodisch auftretende Resonanzen ersichtlich. Die Resonanzen des 75 mm Zylinders müssen an den Frequenzen auftreten, die ca.  $\frac{2}{3}$  der Resonanzfrequenzen des 50 mm Zylinders entsprechen. Dies folgt aus der größeren Länge des Zylinders. Die stehende Welle des 75 mm Zylinders hat die 1.5-fache Wellenlänge der stehenden Welle des 50 mm Zylinders. Die Frequenz ist umgekehrt proportional zur Wellenlänge und damit folgt der Faktor  $\frac{2}{3}$ .

## 4.2 Das Wasserstoffatom

Das Frequenzspektrum des Kugelresonators bei einer Ausrichtung von  $\theta = 180^\circ$  wurde mit dem Computer aufgenommen und in der Abbildung 7 grafisch dargestellt. Die beschrifteten Resonanzen werden in der folgenden Analyse für die Berechnung der Druckamplitude verwendet.



(a) Messung am Computer



(b) Messung am Oszilloskop

**Abbildung 7:** Das Frequenzspektrum eines kugelförmigen Hohlraumresonators bei einer Ausrichtung von  $\theta = 180^\circ$  in dem Bereich 0.1 kHz bis 10 kHz.

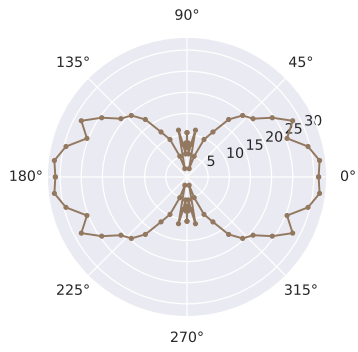


#### 4.2.1 Druckamplitude

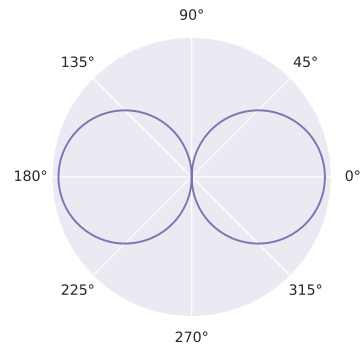
Für die Berechnung der Druckamplitude mithilfe der gemessenen Werte wird der Ausrichtungswinkel  $\theta$  folgendermaßen in den Polarwinkel  $\varphi$  umgerechnet:

$$\varphi = \arccos\left(\frac{1}{2} \cos(\theta) - \frac{1}{2}\right).$$

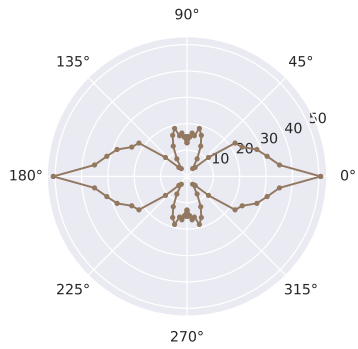
Diese Umrechnung folgt aus einer Analyse mit Drehmatrizen [5]. Die in Abbildung 7 beschrifteten Resonanzfrequenzen (also 2.3 Hz, 3.67 Hz, 6.18 Hz und 7.38 Hz) werden nur in Abhängigkeit der Auslenkung in 10°-Schritten erneut gemessen. Die Messung wird in Abhängigkeit des Polarwinkels in Abbildung 8 aufgetragen. In der selben Abbildung befindet sich der theoretisch erwartete Verlauf bzw. die entsprechenden Legendrepolynome.



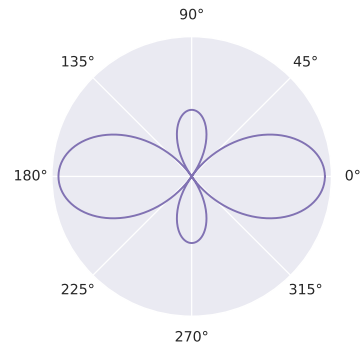
(a) Resonanz bei 2.3 kHz



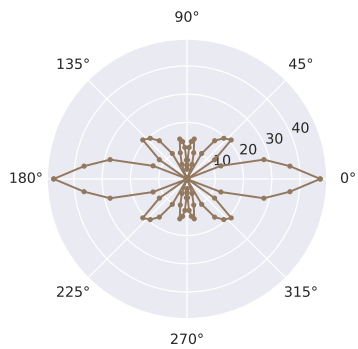
(b)  $P_1(\cos(\phi))$



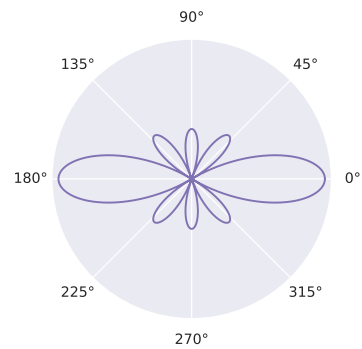
(c) Resonanz bei 3.67 kHz



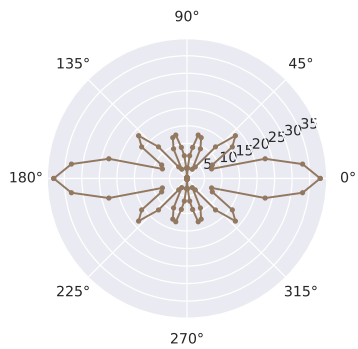
(d)  $P_2(\cos(\phi))$



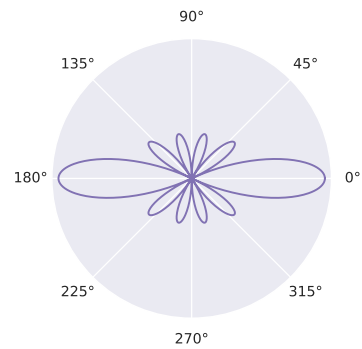
(c) Resonanz bei 6.18 kHz



(d)  $P_4(\cos(\phi))$



(c) Resonanz bei 7.38 kHz

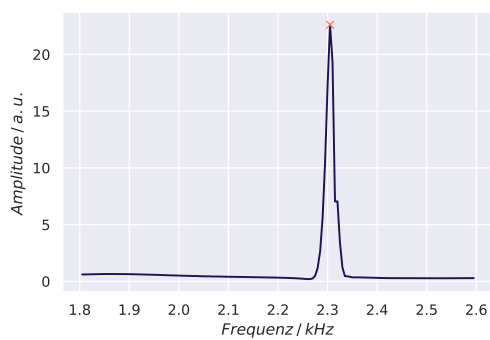


(d)  $P_5(\cos(\phi))$

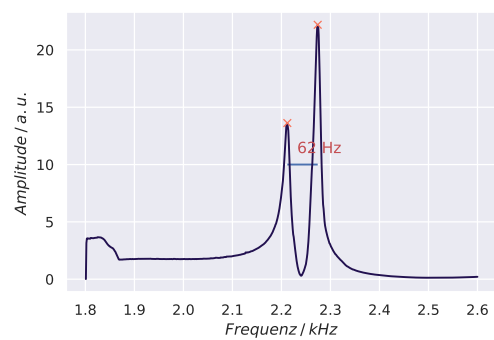
**Abbildung 8:** Amplitudenmessung an den Resonanzfrequenzen in Abhängigkeit vom Azimutwinkel  $\phi$  neben der passenden Legendrepolynome.

#### **4.2.2 Aufspaltung der Peaks**

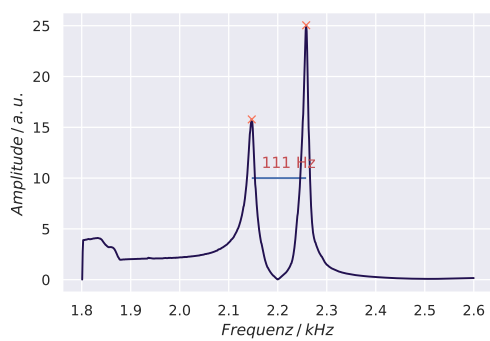
In diesem Abschnitt werden die Frequenzspektren um die Resonanz bei 2.3 kHz bei einer Ausrichtung von  $\theta = 0^\circ$  aufgenommen mit Blenden verschiedener Dicke aufgenommen. Das Ergebnis sind in den Abbildungen 9 dargestellt. Die Resonanz spaltet sich in zwei Peaks auf, da die Kugelsymmetrie des Resonators durch die Blenden gebrochen wird. Der Abstand der Peaks ist ungefähr proportional zur Dicke der Blenden.



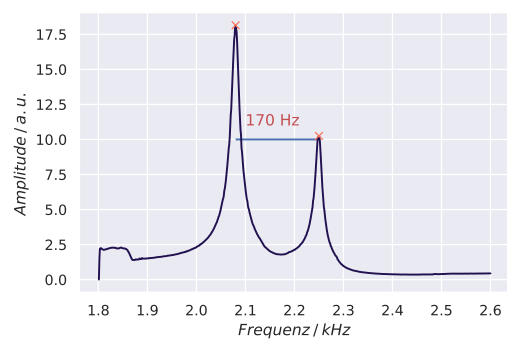
(a) Ohne Ring



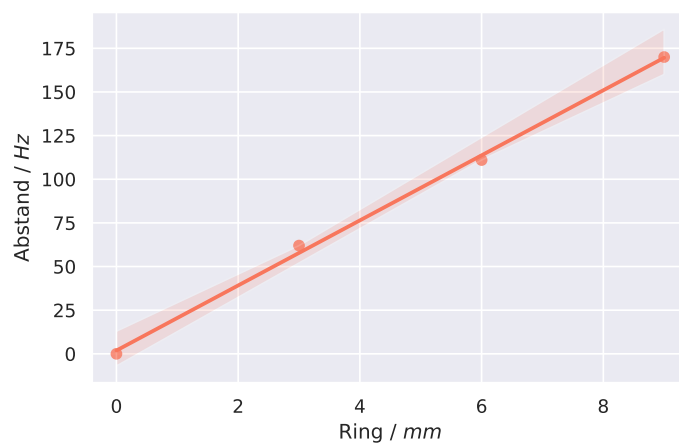
(b) 3 mm Ring



(c) 6 mm Ring



(d) 9 mm Ring

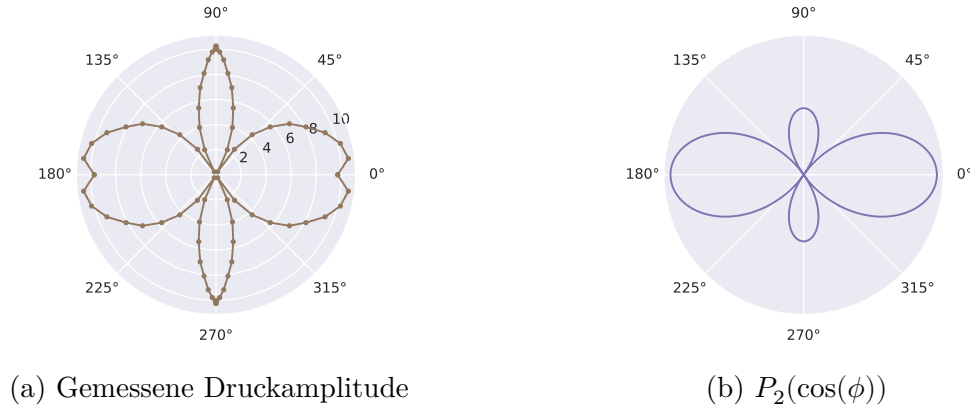


(e) Abstand in Abhängigkeit von der Blendendicke.

**Abbildung 9:** Aufspaltung des Peaks bei 2.3 kHz nachdem verschiedene Ringe die Kugelsymmetrie brechen.

### 4.2.3 Druckamplitude mit der 9 mm Blende

Die Druckamplitude wurde um die Frequenz 2.25 kHz und in der Abbildung 10 aufgezeichnet. Die zugehörigen Legendrepolynome sind ebenfalls in der Abbildung zu sehen. Der Vergleich liefert die Quantenzahlen  $l = 2$  und  $m = 0$ . Es ergibt sich das 3D-Orbital eines Wasserstoffatoms.

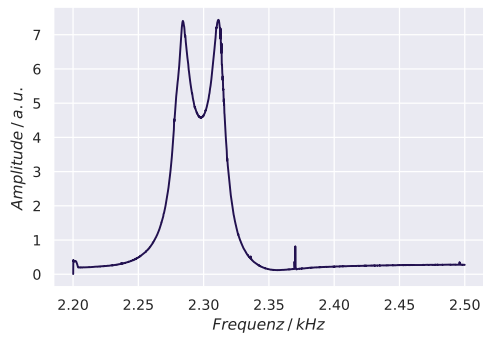


**Abbildung 10:** Gemessene Druckamplitude der 2.25 kHz Resonanz mit der 9 mm Blende mit den zugehörigen Legendrepolynomen.

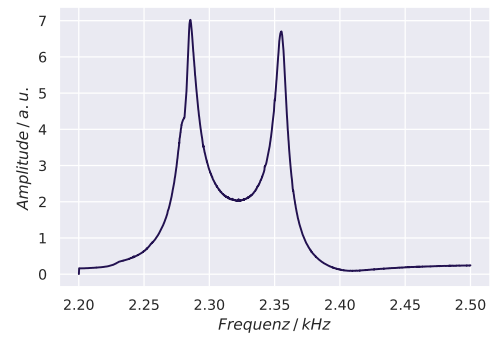
## 4.3 Das Wasserstoffmolekül

### 4.3.1 Änderung des Frequenzspektrums in Abhängigkeit des Blendendurchmessers

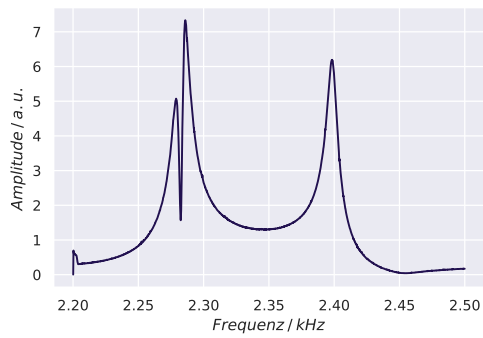
Ein Wasserstoffmolekülion ist anhand zwei gekoppelter Kugelresonatoren modelliert. Die folgenden Messungen wurden mit Blenden verschiedener Durchmesser zwischen den Kugelresonatoren aufgenommen. Das Frequenzspektrum dieses gekoppelten Resonators wurde für die Blenden mit 5 mm, 10 mm, 15 mm und 20 mm Durchmesser gemessen und in der Abbildung 11 visualisiert.



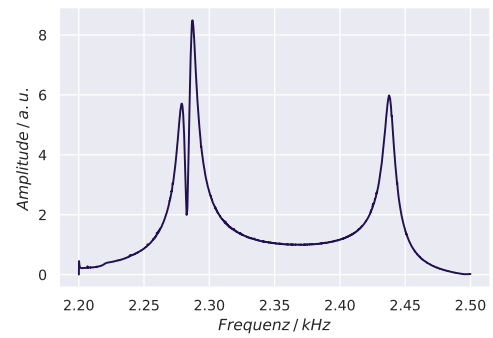
(a) 5 mm



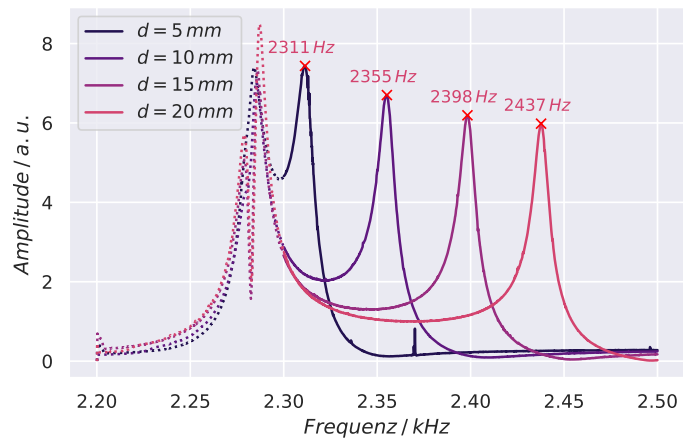
(b) 10 mm



(c) 15 mm

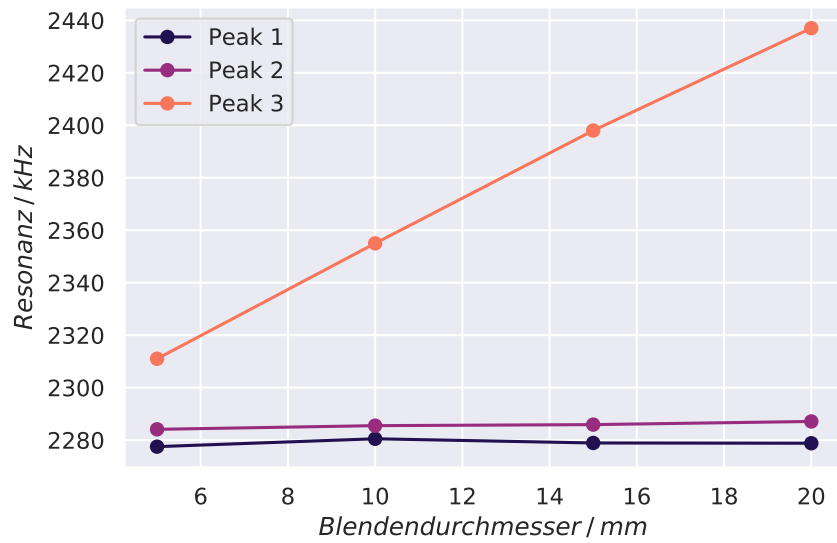


(d) 20 mm



(e) Vergleich

**Abbildung 11:** Frequenzspektren des gekoppelten Resonators in Abhängigkeit der verschiedenen Blendendurchmesser.

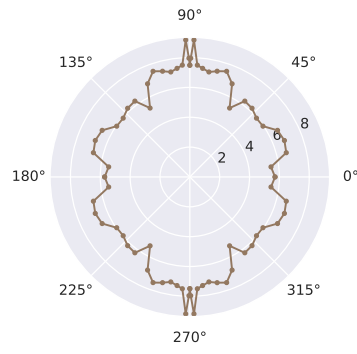


**Abbildung 12:** Resonanzfrequenzen des gekoppelten Resonators in Abhängigkeit der verschiedenen Blendendurchmesser

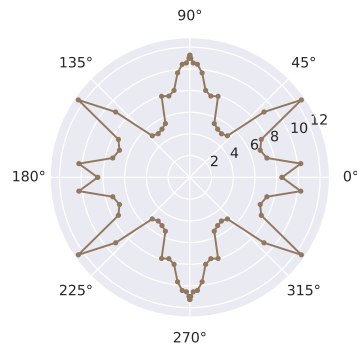
#### 4.3.2 Winkelverteilung mit der 20 mm Blende

Die Winkelverteilung der drei Peaks aus Abschnitt 4.3.1 wurden in  $10^\circ$  Schritten aufgenommen und in der Abbildung 13 wiedergegeben.

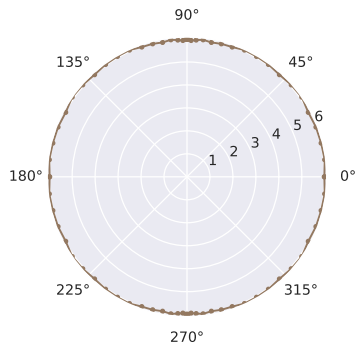
Die Verteilungen der ersten beiden Peaks weisen keine erkennbare Struktur auf und können aus diesem Grund nicht identifiziert werden. Die Verteilung des dritten Peak jedoch deckt exakt die Form der Legendrepolynomen  $P_0(\cos(\phi))$ . Damit liegt nahe, dass der dritte Peak den anti-bindenden Zustand mit  $m = 1$  zeigt.



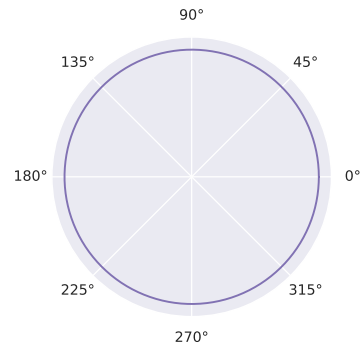
(a) Peak 1



(b) Peak 2



(c) Peak 3



(d)  $P_0(\cos(\phi))$

**Abbildung 13:** Winkelverteilung des gekoppelten Resonators bei einem Blendendurchmesser von  $20\text{ mm}$  mit passenden Legendrepolyomen.



## 4.4 Zylinderketten als Modell für eindimensionale Festkörper

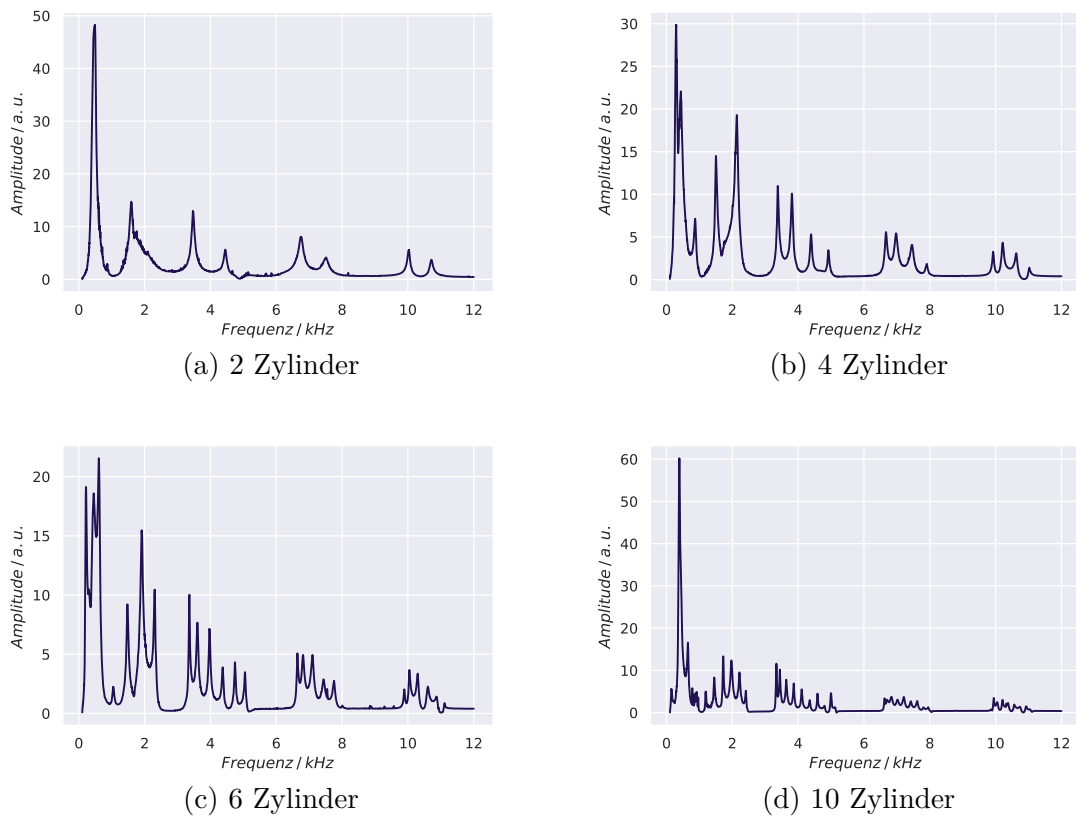
### 4.4.1 Der Übergang von einem Molekül zum Festkörper

In diesem Abschnitt wurden die Frequenzspektren von Zylinderketten mit einer wachsenden Anzahl an Zylindern gemessen. Die Ergebnisse für Ketten mit 2, 4, 6 und 10 Zylindern und einem Blendendurchmesser von 16 mm sind in der Abbildung 14 angegeben.

In der Festkörperphysik beschreiben Bänder die dicht beieinander liegende Resonanzfrequenzen der Elektronen in einem Festkörper. Diese entsprechen den Schwingungen, welche sich nur wenig von den Eigenschwingungen der anderen Elektronen unterscheiden. In dem betrachteten Modell werden diese Schwingungen durch Schallwellen dargestellt. In der Abbildung 14 sind deutlich Bänder zu erkennen, welche auch unabhängig von der Anzahl der Zylinder sind. Die Bänder selbst werden durch verschiedene stehende Schallwellen im Zylinder erzeugt. Die stehende Welle kann beschrieben werden durch

$$\Psi(x) = A \cdot \sin(k_x x), \quad k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$$

wobei  $A$  die Amplitude angibt und  $n_x \in \mathbb{N}$  ist. Das  $L$  gibt die Länge der Zylinder an. Die Abbildung 14 zeigt, dass die Amplitude der Resonanzfrequenzen mit steigender Frequenz abnimmt. Dies kann damit erklärt werden, dass höhere Frequenzen höhere Energien benötigen. Damit sinkt die Amplitude aufgrund der Energieerhaltung.

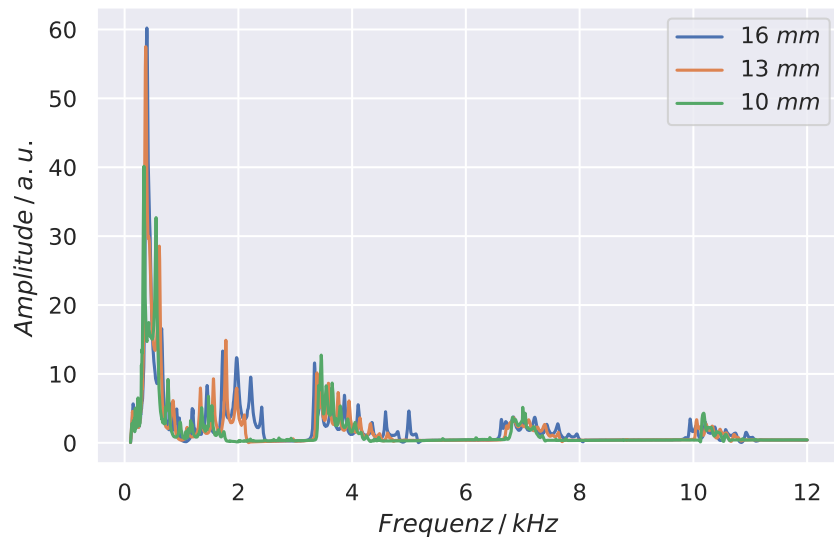


**Abbildung 14:** Die Frequenzspektren der Zylinderketten verschiedener Länge bei einem Irisdurchmesser von 16 mm

#### 4.4.2 Blenden verschiedener Durchmesser zwischen den Zylindern in der Resonatorkette

Das Frequenzspektrum der Resonatorkette mit 2,4 und 10 Zylindern wurden erneut aufgenommen wobei dieses Mal der Durchmesser der Blenden variiert wurde. Die der Vergleich der Frequenzspektren mit verschiedene Blendendurchmesser ist für die Kette aus 10 Zylindern in der Abbildung 15 gezeigt.

Es ist zunächst zu bemerken, dass die Abstände der Peaks für größere Durchmesser vergrößern. Dies liegt an der veränderten Kopplung zwischen den einzelnen Resonatoren. Des Weiteren haben die Peaks der ersten Ordnungen für Blenden mit größerem Durchmesser eine höhere Amplitude. Die somit werden die Peaks erster Ordnungen durch kleinere Blendendurchmesser unterdrückt.



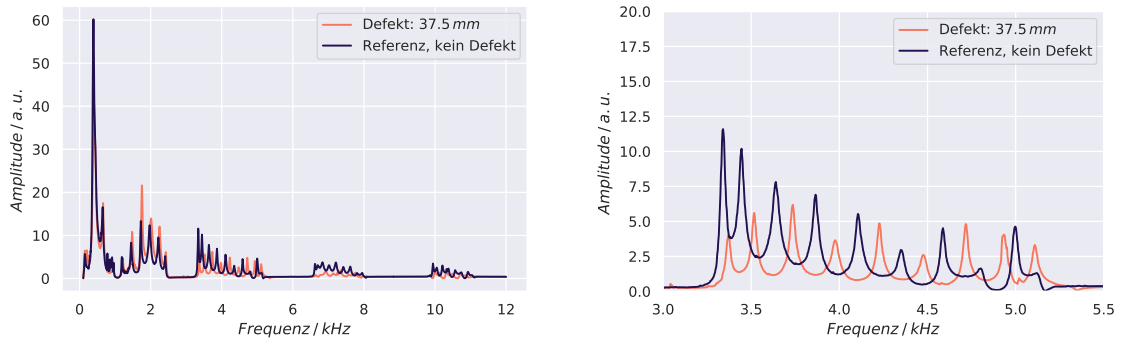
**Abbildung 15:** Vergleich zwischen den Frequenzspektren der Zylinderketten mit verschiedenen Irisdurchmesser.

#### 4.4.3 Modifikation der Resonatorkette

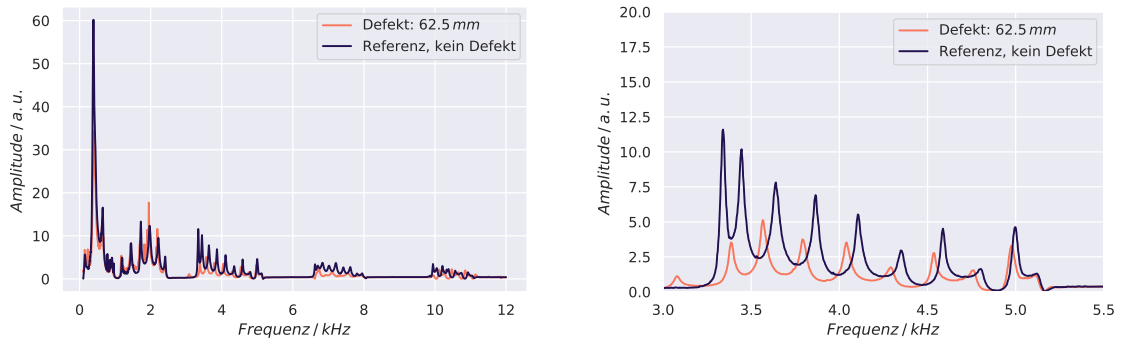
In vorher betrachteten Ketten hatten alle Zylinder die selbe Länge. Dieser Abschnitt wird untersucht, welchen Einfluss Variationen in der Kette haben.

Zunächst wurden die Frequenzspektren der Resonatorketten mit drei verschiedenen Defekten, also Zylinder mit unterschiedlicher Länge in der Kette, aufgenommen und in der Abbildung 16 mit dem Spektrum der Kette ohne ein Defekt verglichen.

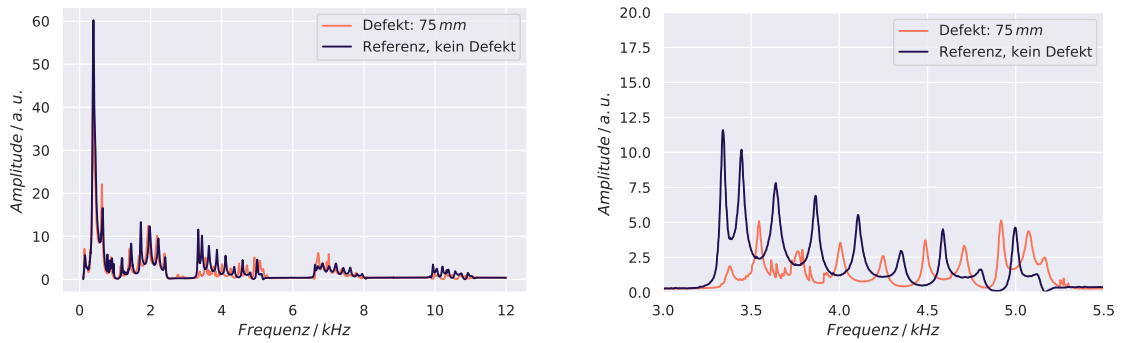
Es ist zunächst zu erkennen, dass sich die Bänder durch das Einfügen eines Defektes verschoben haben. Die Resonanzen liegen somit innerhalb der Bandlücken des Spektrums ohne ein Defekt. In der dritten Abbildung 16c) ist ebenfalls noch zu erkennen, dass sich neue Resonanzen in den Lücken bilden und so das Band füllen.



(a) 37.5 mm Zylinder als Defekt



(b) 62.5 mm Zylinder als Defekt

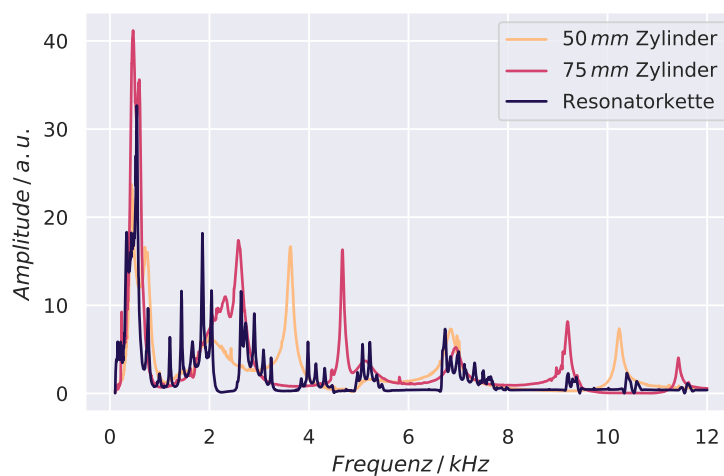


(c) 75 mm Zylinder als Defekt

**Abbildung 16:** Auswirkungen eines Defekts in der Resonatorkette auf das Frequenzspektrum. Die rechten Plots zeigen den Zoom auf das zweite Band.

Für die folgende Analyse wurde die Kette so aufgebaut, dass sie alternierend Zylinder der Länge 50 mm bzw. 75 mm besitzt. Das Frequenzspektrum dieser alternierenden Kette wurde in Abbildung 17 mit dem Spektrum eines einzelnen 50 mm bzw. 75 mm Zylinders verglichen.

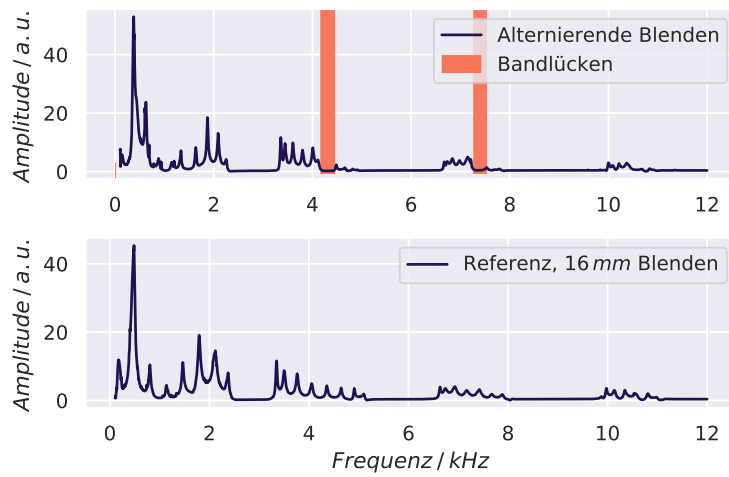
Das Frequenzspektrum der alternierenden Kette zeigt große Unterschiede im Vergleich mit den zuvor betrachteten Spektren. Die Resonanzen sind erneut verschoben jedoch fallen die Bänder zusätzlich kaum mit den Resonanzen der einzelnen Zylinder zusammen. Stattdessen sind die Bänder der alternierenden Kette innerhalb der Bandlücken der einzelnen Zylinder zu finden. Dies ist damit zu erklären, dass die Aneinanderreihung der Zylinder zu destruktiver Interferenz an den Resonanzen führt. Es kann nur zu Resonanzen in der alternierenden Kette kommen, wenn nicht beide Zylindertypen die Resonanzen des jeweils anderen Typen stark unterdrücken. Dies ist der Fall bei dem Band um die Frequenz 7000 Hz. Hier liegen überlappen sich die Resonanzen der einzelnen Zylinder, es kommt zu keiner destruktiven Interferenz und somit kann sich an dieser Stelle ein Band im Gesamtsystem bilden.



**Abbildung 17:** Vergleich zwischen dem Frequenzspektrum der Resonatorkette mit abwechselnder Zylinderlänge und dem Spektrum der einzelnen Zylinder.

Abschließend wird nun das Frequenzspektrum einer Kette aus acht 50 mm Zylinder mit alternierenden Blendendurchmesser (16 mm und 13 mm) gemessen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 18 wiedergegeben. Zum Vergleich wurde ebenfalls das Spektrum der selben Kette mit ausschließlich 16 mm Blenden dargestellt.

Hier verschieben sich die Bänder nicht. Trotzdem unterscheidet sich die Struktur wesentlich von der Struktur des Referenzspektrums. Insbesondere haben sich kleine Bandlücken innerhalb der Bänder aufgespalten. Die deutlich erkennbaren Bandlücken sind in der Abbildung orange markiert. Die variierenden Blenden beeinflussen somit die Dispersionsrelation und die allgemeine Bandstruktur des simulierten Festkörpers.



**Abbildung 18:** Vergleich zwischen dem Frequenzspektrum der Resonatorkette mit abwechselnden Blendendurchmesser und dem Spektrum der Kette mit ausschließlich 16 mm Blenden.

## 5 Diskussion

### 5.1 Wasserstoffatom

### 5.2 Modellierung des Wasserstoffmoleküls

### 5.3 Festkörper Modellierung

## Literatur

- [1] John D. Hunter. „Matplotlib: A 2D Graphics Environment“. Version 1.4.3. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 90–95. URL: <http://matplotlib.org/>.
- [2] Aaron Meurer u. a. „SymPy: symbolic computing in Python“. In: *PeerJ Computer Science* 3 (Jan. 2017), e103. ISSN: 2376-5992. DOI: 10.7717/peerj-cs.103. URL: <https://doi.org/10.7717/peerj-cs.103>.
- [3] Travis E. Oliphant. „NumPy: Python for Scientific Computing“. Version 1.9.2. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 10–20. URL: <http://www.numpy.org/>.
- [4] *V23 Quanten Analogien*. Technische Universität Dortmund. 2021.
- [5] *Versuchsanleitung - Quantenanalogue (QA)*. Technische Universität Dresden. Nov. 2018.
- [6] Michael L. Waskom. „seaborn: statistical data visualization“. In: *Journal of Open Source Software* 6.60 (2021), S. 3021. DOI: 10.21105/joss.03021. URL: <https://doi.org/10.21105/joss.03021>.