

# **Quanten Analogien**

Marcel Kebekus  
marcel.kebekus@tu-dortmund.de

Konstantin Mrozik  
konstantin.mrozik@tu-dortmund.de

Abgabe: 20. September 2021

TU Dortmund – Fakultät Physik

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Ziel</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Versuchseinführung</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
3.1	Der Rohrresonator . . . . .	3
3.1.1	Rohrresonator mit Blenden . . . . .	4
3.2	Analogon Teilchen im unendlichen Potenzialtopf . . . . .	4
3.3	Der Kugelresonator . . . . .	5
3.4	Analogon Wasserstoffatom . . . . .	7
3.5	Gekoppelte Kugelresonatoren . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Durchführung</b>	<b>8</b>
<b>5</b>	<b>Auswertung</b>	<b>8</b>
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>8</b>
<b>7</b>	<b>Anhang</b>	<b>9</b>

# 1 Ziel

Ziel ist die Durchführung von akustischen Experimenten mit einem Kugelresonator und verschiedenen Resonatorketten und der Vergleich mit quantenmechanischen Systemen eines Wasserstoffatoms, Wasserstoffmoleküls und 1-dimensionalen-Festkörpern.

## 2 Versuchseinführung

Im Folgenden Versuch wird mit Hilfe eines Mikrofons und eines Lautsprechers die Druckverteilung in einem Rohr- und Kugelresonator betrachtet. Dazu wird ein jeweils das Frequenzspektrum für die jeweiligen Resonatoren betrachtet, die durch ein Frequenz zu Spannung Konverter mittels einer geeigneten Software erstellt werden.

## 3 Theorie

Bei den vermessenden Resonatoren kann ein Vergleich zu quantenmechanischen Modellen gezogen werden. In diesem Abschnitt sollen die Gemeinsamkeiten zwischen den im Versuch betrachteten Modellen und ihren quantenmechanischen Analogien aufgezeigt werden. Die Druckverteilung in einem Resonator kann mithilfe der Helmholtzgleichung

$$\Delta\varphi = \lambda \cdot \varphi \quad (1)$$

beschrieben werden. Diese Differentialgleichung beschreibt die Druckänderung mit den Randbedingungen

$$\Delta = \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k^2} \quad (2)$$

des Resonatorrand  $\delta\Omega$ .

### 3.1 Der Rohrresonator

Der Rohrresonator wird an einem Ende mit dem Mikrophon und am anderen Ende mit dem Lautsprecher abgeschlossen. Beim Abspielen einzelner Frequenzen entsteht genau dann eine Resonanz, wenn die Wellenlänge  $\lambda$  der Schallwelle mit der Reflexion der Welle konstruktiv interferieren. Dies geschieht genau dann, wenn gilt

$$L = n \frac{\lambda}{2} = n \frac{c}{2f}. \quad (3)$$

Wobei  $L$  die Rohrlänge,  $c$  die Schallgeschwindigkeit und  $f$  die Frequenz der Schallwelle und  $n$  ein ganzzahliges Vielfaches ist. Im Rohr findet dabei nur eine waagerechte Ausbreitung der Luftmoleküle zur Ausbreitungsrichtung der Schallwelle statt. Die Druckverteilung  $P(x, t)$  ergibt sich dann mit der Gleichung 1 zu

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} P(x, t) = \frac{1}{\rho_\kappa} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \quad (4)$$

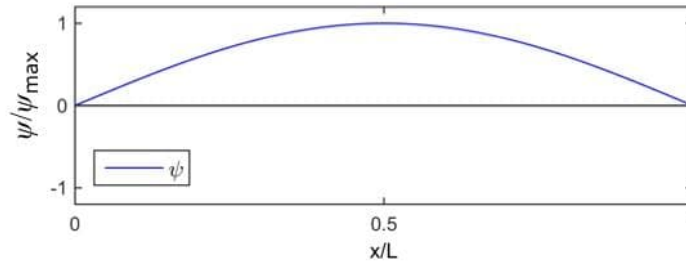
wobei  $\rho$  die Dichte und  $\kappa$  die Kompressibilität des Mediums ist indem sich die Schallwellen ausbreiten (hier: Luft). Daraus folgt die zeitabhängige Lösung

$$P(x, t) = p(x) \cdot \cos(\omega t) \quad (5)$$

mit der Ortsanteil  $p(x)$ . Die Kreiszahl  $k$  lässt sich über die Beziehung  $k = 2\pi/\lambda$  zu

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad (6)$$

bestimmen.



**Abbildung 1:** Skizze zur Herleitung der Resonanz im Rohrresonator. Zu sehen ist die Grundschiwingung. [uni]

### 3.1.1 Rohrresonator mit Blenden

Koppelt man zwei Rohrresonatoren mit einer Blende, so verhält sich das System ähnlich zu einem gekoppelten Pendel. Es kommt zur einer zusätzlichen Resonanz  $\omega_{R2}$  zur Ursprungsresonanz  $\omega_{R1}$ . Es gilt zusätzlich  $\omega_{R2} \geq \omega_{R1}$ . Dies lässt sich nun durch eine Kette von Resonatoren und Blenden weitertreiben, wobei jeweils zusätzliche Resonanzen auftreten, die im Spektrum immer dichter aneinander liegen. Bei unendlich vielen gekoppelten Resonatoren kann man von einem Band sprechen.

## 3.2 Analogon Teilchen im unendlichen Potenzialtopf

Der Vergleich mit einem Teilchen im unendlichen Potenzialtopf ist dabei ein Analogon, den Materie (bzw. Elektronen und Protonen) besitzen ebenfalls Wellencharakter die durch die de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda_B$  über

$$\lambda_B = \frac{h}{p} \quad (7)$$

mit dem Planckschen Wirkungsquantum  $h$  und dem Impuls des Teilchens  $p$  beschreiben werden kann. Die Differentialgleichung für die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  für das Teilchen im Kasten folgt dabei aus der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) + V(x)P(x, t) \quad (8)$$

mit der teilchenmasse  $m$ , dem Potenzial  $V(x)$ . Für den unendlichen Potenzialtopf gilt  $V(0 < x < L) = 0$  und  $V(x \geq L) \rightarrow \infty$  und  $V(x \leq 0) \rightarrow \infty$ . Damit ergibt sich die Lösung

$$P(x, t) = \rho(x) \cdot \exp(-i\omega t) \quad (9)$$

und die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$E\rho(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x) \quad (10)$$

mit der Energie  $E$ . Für eine stehende Welle folgt daraus die Gleichung der Form

$$\rho(x) = A \sin(kx + \phi) \quad (11)$$

mit der komplexen Amplitude  $A$ , der Kreiszahl  $k$  und der Phase  $\phi$ . An den Rändern ergibt sich dabei eine Wellenfunktion von null, sodass aus dieser Randbedingung  $\rho(x = 0) = 0$  und  $\rho(x = L) = 0$  folgt

$$k = \frac{n\pi}{L}. \quad (12)$$

Es wird deutlich dass der Vergleich der beiden Modelle bererechtigt ist. Im klassischen Fall erzeugt man eine kosinusabhängige stationäre Druckverteilung (vgl. Gl. 5), während das quantenmechanische Modell eine stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt (vgl. Gl. ??). Unterschiede zeigen sich bei den Randbedingungen. Denn während bei dem quantenmechanischen Teilchen die Wahrscheinlichkeitsdichte verschwindet, sind an den Enden des Rohres die Druchunterschiede maximal, was allerdings kein Einfluss auf die erlaubten Wellenlängen hat. Beide Modelle bilden dabei stehende Wellen für die Kreiszahl  $k$  nach Gleichung 12 aus.

### 3.3 Der Kugelsonator

Nun wird ein Resonator mit einer Kugelform betrachtet (Hohlkugel), der aus zwei Halbkugel besteht, die gegen einander verdreht werden können. Somit können die Resonanzamplituden in Abhängigkeit des Winkels  $\alpha$  gemessen werden.

Zur genauen Beschreibung der dreidimensionalen Problems der Druckverteilung wird nun die Kugelsymmetrie mit den Koordinaten des Polarwinkels  $\theta$  (0 bis  $\pi$ ) und des Azimutwinkel  $\varphi$  (0 bis  $2\pi$ ) verwendet. Analog zum Rohrrensonator folgt aus der Helmholtzgleichung

$$\frac{\partial^2 P(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho\kappa} \Delta P(\vec{r}, t) \quad (13)$$

Mit dem Ansatz  $P(\vec{r}, t) = p(\vec{r}) \cos(\omega t)$  ergibt sich die stationäre Druckverteilung nach

$$-\frac{w^2}{c^2} p(\vec{r}) = \Delta p(\vec{r}) \quad (14)$$

die mit dem Laplace-Operator  $\Delta$  in Kugelkoordinaten zu einem Winkel-  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  und Radialanteil  $f(r)$  seperiert werden kann. Dabei ist  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  die Kugelflächenfunktion,

welche die stationäre, zeitunabhängige Druckverteilung beschreibt. Dabei ist  $l$  die Drehimpulsquantenzahl ( $0 \leq l \leq n-1$ ), der ganzzahlige Index  $m$  mit  $-l \leq m \leq l$ . Sodass es für jedes  $l$  nach

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \cdot P_l^m(\cos(\theta)) \cdot e^{im\varphi} \quad (15)$$

nicht nur eine Kugelflächenfunktion sondern  $2l+1$  gibt. Somit gibt es bei einem festen  $l$  für eine Kugeloberfläche mehrere Schwingungsmöglichkeiten mit gleicher Frequenz und Energie. Man spricht von Entartung.

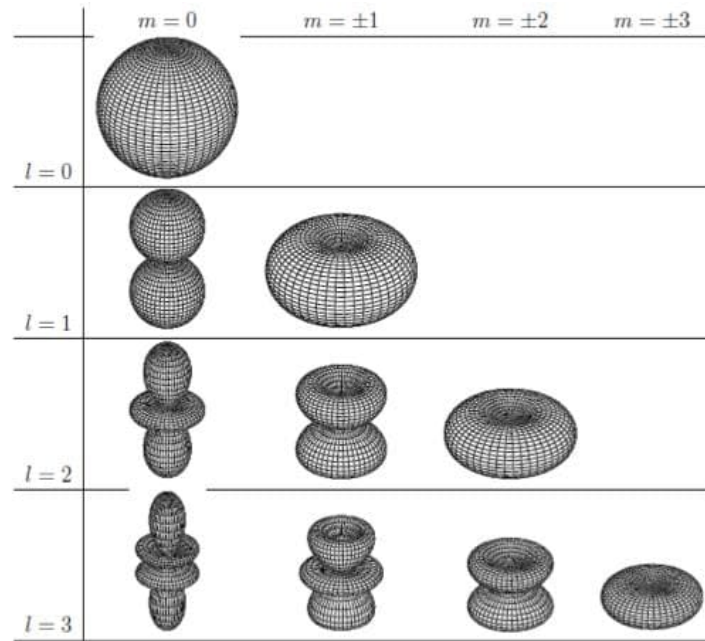
Stellt man den Laplace-Operator aus Gleichung 14 in Kugelkoordinaten da, so kann die entstehende Differentialgleichung durch den Ansatz

$$p(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \cdot f(r) \quad (16)$$

in zwei Differentialgleichung getrennt und somit gelöst werden.

	$m = 0$	$m = \pm 1$	$m = \pm 2$
$l = 0$	$P_0^0(\cos(\theta)) = 1$		
$l = 1$	$P_1^0(\cos(\theta)) = \cos(\theta)$	$P_1^{\pm 1}(\cos(\theta)) = \mp \sin(\theta)$	
$l = 2$	$P_2^0(\cos(\theta)) = \frac{1}{3}(3\cos^2(\theta) - 1)$	$P_2^{\pm 1}(\cos(\theta)) = \mp 3\cos(\theta)\sin(\theta)$	$P_2^{\pm 2}(\cos(\theta)) = 3\sin^2(\theta)$

**Tabelle 1:** Legendre-Polynome  $P_l^m$  bis  $l = 2$



**Abbildung 2:** Betrag der Schwingungsmoden  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|$ . [No]

## Symmetriebrechung

Ist die Kugelsymmetrie aufgehoben, so wird die Entartung der einzelnen  $m$ -Zustände aufgehoben, sodass die verschiedenen Kugelflächenfunktionen zu einem  $l$  nicht mehr die gleichen Energien haben. Da es zu jedem  $l$  insgesamt  $2l + 1$  verschiedene  $m$  gibt, sollte sich dies im Spektrum äußern. Allerdings wird im Spektrum lediglich eine Gruppe von  $l + 1$  Peaks deutlich, da sich die weiteren Zustände nur in der Phase unterscheiden. Bei geringer Verformung können die Kugelflächenfunktionen näherungsweise weiterhin als Lösung angenommen werden.

## 3.4 Analogon Wasserstoffatom

Das Analogon zum Kugelresonator bildet das Wasserstoffatom mit einem einzigen Elektron, was ein analytisches Lösen der Schrödingergleichung ermöglicht. Es folgt hierfür die dreidimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$E\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(r) \quad (17)$$

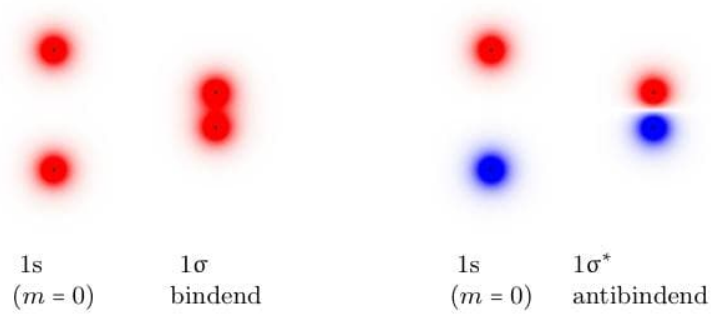
mit dem Coulombpotenzial  $V(r)$  des Kerns. Drückt man nun die Gleichung in Kugelkoordinaten aus so folgt durch einen Separationsansatz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) R_{n,l}(r) \quad (18)$$

als Lösung für die Differentialgleichung. Dabei lösen die Kugelflächenfunktionen  $Y_l^m$  die rein vom Winkel abhängigen Differentialgleichungen und  $R_{n,l}(r)$  den Radialteil. Dabei beschreibt  $n$  die Hauptquantenzahl. In diesem Index unterscheidet sich das Wasserstoffatom zum Kugelresonator. Das führt dazu, dass die Resonanzen der beiden Systeme nicht in der gleichen Reihenfolge im Spektrum auftreten und  $l$  ist dabei zu einem bestimmten  $n$  beim Kugelresonator nicht entartet, beim Wasserstoffatom jedoch schon. Grund dafür sind die verschiedenen Potenziale.

## 3.5 Gekoppelte Kugelresonatoren

Mit zwei gekoppelten Kugelresonatoren und einer Blende kann ein Wasserstoffmolekül mit einem Elektron  $\text{H}_2^+$  simuliert werden. Durch verschiedene Blenden kann eine unterschiedlich starke Kopplung dargestellt werden. Genauso wie beim Rohrresonator mit einer Blende, bildet sich auch beim gekoppelten Kugelresonator mit Blende eine zweite Resonanz aus. Dies lässt sich auf das Überlappen der einzelnen Atomorbitale zurückführen, die somit ein neues Molekülorbital bilden. Die Überlappung kann auf zwei Arten geschehen. Dabei können die Vorzeichen jeweils gleich sein (Phasenverschiebung von  $0^\circ$ ) oder unterschiedlich (Phasenverschiebung um  $180^\circ$ ). Man spricht von bindender oder antibindender Überlappung.



**Abbildung 3:** Beispiel für bindende und antibindende Molekülorbitale beim Zusammenführen zweier Atome. Die Farbe spiegelt dabei die Phase wieder.

Zwei Atome mit 1s-Orbitalen bilden somit bei positivem Vorzeichen ein zugehöriges  $1\sigma$ -Molekülorbital. Die neuen Orbitale werden dabei mit griechischen Buchstaben gekennzeichnet und resultieren aus der magnetischen Quantenzahl  $m$ . Aus  $m = 0$  folgt somit die neue Orbitalbezeichnung  $\sigma$ ,  $m = 1$  führt zu einem  $\pi$ -Orbital. Die Hauptquantenzahl unterscheidet dabei die Orbitale gleicher Symmetrien aber unterschiedlichen Energien. Zusätzlich kann die Wahrscheinlichkeit der Lage des Elektrons beschrieben werden. Dabei hat das  $1\sigma$  Molekülorbital eine hohe Wahrscheinlichkeit für die Lage zwischen den beiden Atomkernen (bindender Zustand, energetisch tiefere Lage). Bei niedriger Auftretswahrscheinlichkeit beim antibindenden Zustand  $1\sigma^*$  liegt der Zustand energetisch höher als der Zustand des Atoms.

## 4 Durchführung

## 5 Auswertung

## 6 Diskussion



## **7 Anhang**