

## 1.2 Quantenmodelle – Teil 2

### Ziel

Die Studierenden kennen akustische Resonanzen aneinander gekoppelter Rohrsegmente bzw. Kugelresonatoren und können deren Zusammenhang mit dem eindimensionalen Festkörper bzw. dem Wasserstoffmolekül erläutern. Außerdem können Sie das Entstehen von Bändern im Rohrresonator mit Blenden erklären.

### Hinweise zur Vorbereitung

Dieser Versuch wird im „AP-4“ immer erst nach dem Versuch „Quantenmodelle Teil 1“ durchgeführt. Er baut auf letzterem Versuch auf. Eine Kenntnis der Grundlagen des Versuchs „Quantenmodelle Teil 1“ ist daher unerlässlich.

Die Antworten auf folgende Fragen sollten Sie ebenfalls vor der Versuchsdurchführung wissen. Sie sind die Grundlage für das Gespräch mit Ihrer Tutorin/Ihrem Tutor vor dem Versuch.

- (a)
  - Wie unterscheidet sich die Dispersionsrelation eines Rohrresonators mit Blenden von der Dispersionsrelation eines Rohrresonators ohne Blenden?
  - Erklären Sie das Entstehen von Bändern im Rohrresonator anschaulich.
  - Wie hängt die Anzahl der Resonanzen pro Band mit der Anzahl der Rohrsegmente zusammen?
  - Wie ist ein kristalliner Festkörper aufgebaut?
  - Wie entstehen Bänder im kristallinen Festkörper?
  - Erklären Sie die Analogie zwischen einem Rohrresonator mit Blenden und einem kristallinen Festkörper.
- (b)
  - Betrachten Sie zwei gekoppelte Kugelresonatoren. Wie verändert sich das Spektrum im Vergleich zum einfachen Kugelresonator?
  - Erklären Sie die Analogie zum Wasserstoffmolekül.
  - Worin unterscheidet sich die Reihenfolge der Resonanzen?

### 1.2.1 Grundlagen

### 1.2.2 Die gekoppelten Kugelresonatoren und das Wasserstoffmolekül

Am ersten Versuchstag haben Sie den Kugelresonator als akustisches Analogon zum Wasserstoffatom kennengelernt. Mit einem zweiten Kugelresonator und einer Blende ist es möglich, zwei Kugelresonatoren zu koppeln und so ein ionisiertes Wasserstoffmolekül mit einem Elektron ( $\text{H}_2^+$ ) zu simulieren. Dazu setzen Sie zwei Kugelresonatoren vertikal übereinander, so dass der untere Resonator an der Oberseite und der obere Resonator an der Unterseite ein Loch aufweist. In dieses Loch legen Sie eine Blende. Die Blenden liegen mit verschiedenen großen Öffnungen vor, um unterschiedlich starke Kopplungen zu erhalten.

Analog zum Rohrresonator mit zwei Segmenten, die durch eine Blende getrennt sind, bildet sich auch bei zwei gekoppelten Kugelresonatoren für jede ursprüngliche Resonanz eine zweite Resonanz aus. Vergleicht man mit dem Wasserstoffmolekül, so stellt man fest, dass von diesen zwei Resonanzen diejenige mit niedrigerer Energie bindend ist, die mit höherer Energie antibindend.

Bildlich lässt sich dies zusätzlich wie folgt veranschaulichen: Man stelle sich zwei voneinander getrennte Wasserstoffatome vor, die einander angenähert werden. Ist der Abstand klein genug, beginnen die Atomorbitale zu überlappen und neue Orbitalformen zu bilden. Generell können Atomorbitale auf zwei verschiedene Arten überlagert werden, so dass die zugehörige Schrödingergleichung erfüllt wird: einmal mit gleichem Vorzeichen (Phasenverschiebung von  $0^\circ$ ) und einmal mit verschiedenem Vorzeichen (Phasenverschiebung von  $180^\circ$ ). Abhängig von dieser Phasenverschiebung können sich die Atomorbitale bindend oder antibindend überlagern. Letztere Molekülorbitale werden in der Regel mit einem Sternchen versehen.

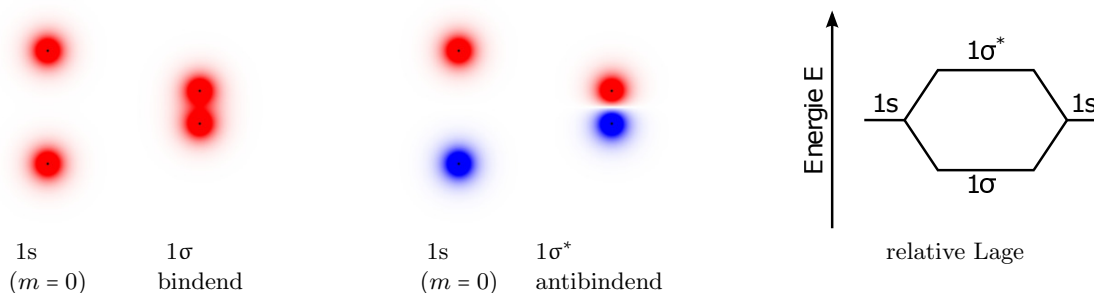


Abbildung 1.7: Atomare 1s-Orbitale zweier Atome mit großem Abstand und zugehörige  $1\sigma$ -Molekülorbitale, bzw. relative Lage der Orbitale. (Abbildungen der Orbitale entnommen aus [3].)

Abbildung 1.7 illustriert als Beispiel das Entstehen von Molekülorbitalen aus den 1s-Orbitalen der Atome. Molekülorbitale werden mit einem griechischen Buchstaben benannt, der sich in diesem Fall aus der magnetischen Quantenzahl  $m$  der ursprünglichen Atomorbitale ableitet.  $m = 0$  bedeutet, dass das neue Orbital mit  $\sigma$  bezeichnet wird (analog zu s für  $l = 0$  beim Atom),  $m = 1$  führt zu einem  $\pi$ -Orbital (analog zu p für  $l = 1$  beim Atom). Es wird eine Hauptquantenzahl eingeführt, um Orbitale gleicher Symmetrie aber unterschiedlicher Energie zu unterscheiden. Das Orbital  $1\sigma$  wurde also aus zwei 1s Orbitalen durch Überlagerung mit positivem Vorzeichen gebildet.  $1\sigma$  und  $1s$  können in den gekoppelten Kugelresonatoren nicht beobachtet werden, weil dieser Zustand einem einheitlichen Druck im Resonator entspricht und die Luft deshalb nicht schwingen kann (Resonanzfrequenz bei 0 Hz). Durch das Verwenden zweier gekoppelter Kugelresonatoren kann aber  $1\sigma^*$  sichtbar gemacht werden.

Außerdem zeigt Abbildung 1.7 qualitativ die Lage der Energieniveaus der  $1\sigma$ -Molekülorbitale des Wasserstoffmoleküls relativ zu den 1s-Atomorbitalen des Wasserstoffatoms. Hat ein Molekülorbital wie beispielsweise  $1\sigma$  eine hohe Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zwischen den beiden Atomkernen zu finden, ist der Zustand bindend und liegt energetisch tiefer als der entsprechenden Zustand des Atoms, hier 1s. Ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen hingegen gering/null, ist der Zustand antibindend wie im Fall von  $1\sigma^*$  und liegt energetisch höher als der Zustand des Atoms.

Abbildung 1.8 zeigt die Molekülorbitale, die aus  $2p_z$  ( $m = 0$ ) und  $2p_y$  ( $m = \pm 1$ ) entstehen. Auch hier finden sich wieder bindende und antibindende Orbitale. Abbildung 1.8 zeigt außerdem qualitativ die Lage der Energieniveaus der  $2\sigma$ - und  $1\pi$ -Molekülorbitale des Wasserstoffmoleküls relativ zu den 2p-Atomorbitalen des Wasserstoffatoms. Alle diese Orbitale liegen energetisch höher als die  $1\sigma$ -Molekülorbitale.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Die folgende Darstellung ist inhaltlich übernommen von [http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/15/thc/symmetrie/mulliken/vlu/tc051\\_symmetrie\\_mulliken\\_symbolik.vlu/Page/vsc/de/ch/15/thc/symmetrie/mulliken/sym\\_mo\\_linear.vscml.html](http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/15/thc/symmetrie/mulliken/vlu/tc051_symmetrie_mulliken_symbolik.vlu/Page/vsc/de/ch/15/thc/symmetrie/mulliken/sym_mo_linear.vscml.html) mit Stand vom 18.10.2020.

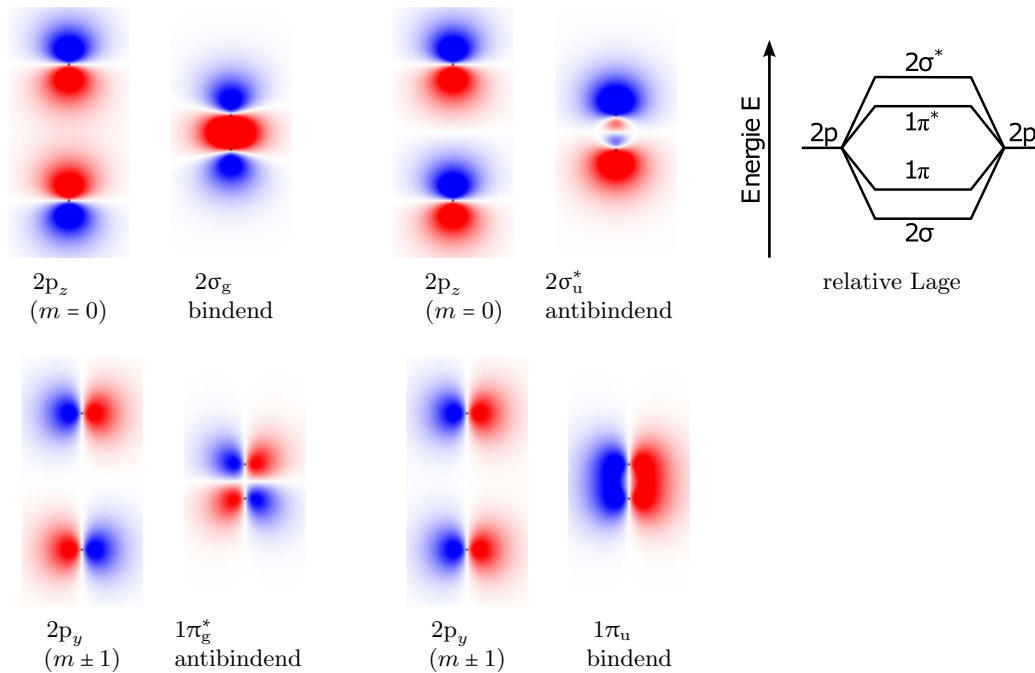


Abbildung 1.8: Atomare 2p-Orbitale zweier Atome mit großem Abstand sowie zugehörige  $2\sigma$ - und  $1\pi$ -Molekülorbitale; Energieniveaus der  $2\sigma$ -Molekülorbitale und  $1\pi$ -Molekülorbitale relativ zu den 2p-Atomorbitalen (qualitativ). (Abbildungen der Orbitale entnommen aus [3].)

### 1.2.3 Die Dispersionsrelation beim Rohrresonator ohne Blenden

Bereits vom ersten Versuchstag ist bekannt, dass die Resonanzfrequenzen  $f_n$  im Rohrresonator über

$$f_n = n \frac{c}{2L} \quad n = 1, 2, \dots, \infty \quad (1.24)$$

zur Nomenklatur:

- für Atomorbitale: lateinische Buchstaben s, p, d
- für Molekülorbitale: griechische Buchstaben  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ 
  - $\sigma$ -Orbitale haben keine Knotenfläche, die die Kernverbindungsline einschließt (d. h. sie vollständig enthält)
  - $\pi$ -Orbitale haben eine Knotenfläche, die die Kernverbindungsline einschließt (d. h. sie vollständig enthält)
  - $\delta$ -Orbitale haben zwei Knotenflächen, die die Kernverbindungsline einschließen (d. h. sie vollständig enthält)
- Der Stern markiert antibindende Orbitale, d. h. Orbitale, bei denen zwischen den Atomkernen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen gering/null ist.
- Der Index „g“ (gerade) steht dafür, dass sich bei der Inversionsoperation  $(x; y; z) \rightarrow (-x; -y; -z)$  das Vorzeichen der Wellenfunktion nicht ändert.  
Der Index „u“ (ungerade) steht dafür, dass sich bei der Inversionsoperation  $(x; y; z) \rightarrow (-x; -y; -z)$  das Vorzeichen der Wellenfunktion umkehrt.  
Diese Indices werden auch in englischsprachiger Literatur verwendet.
- Die Zahl nummeriert in aufsteigender energetischer Reihenfolge Molekülorbitale gleichen Typs ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ).

von der Schallgeschwindigkeit  $c$  und der Rohrlänge  $L$  abhängen. Je länger das Rohr wird, desto dichter liegen die Resonanzen beieinander, d. h. der Abstand

$$\Delta f = f_{n+1} - f_n = \frac{c}{2L} \quad (1.25)$$

zweier Resonanzen wird geringer. In einem unendlich langen Rohr wäre  $\Delta f = 0$ . In der Quantenmechanik verwendet man sehr häufig die Kreiswellenzahl  $k$ , um Zustände zu charakterisieren. In der Festkörperphysik tritt die Kreiswellenzahl i. d. R. im Zusammenhang mit periodischen Strukturen auf. Sie ist definiert über

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \quad (1.26)$$

wobei  $\lambda_n = 2L/n$  die im Rohr erlaubte Wellenlänge der Schallwelle ist. Verwendet man, dass  $f_n \cdot \lambda_n = c$ , erhält man den Zusammenhang zwischen den Resonanzfrequenzen und den im Rohr erlaubten Kreiswellenzahlen  $k_n = 2\pi/\lambda_n = n\pi/L$ :

$$f_n = \frac{c}{2\pi} k_n. \quad (1.27)$$

Demnach ist der Zusammenhang zwischen  $f_n$  und  $k_n$  bei Rohrresonator, wie er im ersten Versuchsteil verwendet wird, linear. Die Abhängigkeit  $f_n(k_n)$  wird als Dispersionsrelation bezeichnet. Oft wird nicht  $f_n(k_n)$  aufgetragen, sondern die Energie  $E_n$  in Abhängigkeit von  $k_n$ .  $E_n(k_n)$  wird ebenfalls Dispersionsrelation genannt. Da die Energie im Fall einer Schallwelle aber nicht so einfach bestimmt werden kann wie beispielsweise bei Licht/Photonen<sup>6</sup> oder bei Elektronen<sup>7</sup>, soll hier  $f_n(k_n)$  genügen.

#### 1.2.4 Der Rohrresonator mit Blenden

##### Die Analogie zu den gekoppelten Pendeln

##### Rückblick: Gekoppelte Pendel

Aus der Mechanik kennen Sie das Experiment der gekoppelten Pendel, bei dem zwei identische (idealerweise mathematische) Pendel durch eine Kopplungsfeder verbunden sind. Zitat aus der zugehörigen Versuchsanleitung:

„Die Schwingung der beiden gekoppelten Pendel lässt sich als eine Überlagerung von zwei sog. Fundamentalschwingungen mit den Kreisfrequenzen  $\omega_{\text{gl}}$  und  $\omega_{\text{geg}}$  darstellen. Diese beiden Kreisfrequenzen haben auch eine anschauliche Bedeutung:

- $\omega_{\text{gl}}$  ist die Kreisfrequenz der Schwingung der ungekoppelten Pendel, bzw. der gleichsinnig schwingenden gekoppelten Pendel,
- $\omega_{\text{geg}}$  ist die Kreisfrequenz der gegensinnig schwingenden Pendel.“

Fußnote der Versuchsanleitung: „Das Ergebnis lässt sich verallgemeinern: Die Bewegung von  $N$  gekoppelten Oszillatoren wird durch  $N$  Fundamentalschwingungen des Systems beschrieben. [...]“

<sup>6</sup>Bei Photonen gilt  $E = hf = \hbar\omega$  mit dem Planck'schen Wirkungsquantum  $\hbar$ , bzw.  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .

<sup>7</sup>Bei Elektronen gilt  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  mit der Elektronenmasse  $m$ .

Das System der gekoppelten Pendel dient als Modell für den Rohrresonator, bei dem zwei einzelne Segmente über eine Blende aneinander gekoppelt werden. Dazu stehen außer den Rohrsegmenten mit einem Innendurchmesser von 25 mm Blenden zur Verfügung, deren Öffnungsdurchmesser mit beispielsweise 16 mm kleiner als der Innendurchmesser der Segmente ist und die eine kurze Länge von 5 mm haben. Koppelt man ein zweites Rohrsegment mit Hilfe einer Blende an das erste Rohrsegment an, verhält sich das System sehr ähnlich wie die gekoppelten Pendel. Auch beim Rohrresonator kommt es um die ursprüngliche Resonanz herum (bei den gekoppelten Pendeln  $\omega_{gl}$ ) zu einer zweiten Resonanz (bei den gekoppelten Pendeln  $\omega_{geg}$ ). Diese zweite Resonanz liegt genau wie bei den gekoppelten Pendeln bei etwas höherer Frequenz als die Frequenz der ungekoppelten Systeme, d. h.  $\omega_{geg} > \omega_{gl}$ .

Beim Rohrresonator lässt sich dieses Verfahren mit Hilfe des Versuchsaufbaus noch weiter treiben: Koppelt man ein drittes Rohrsegment mit einer zweiten Blende an, so erhält man oberhalb der ursprünglichen Resonanz zwei weitere, insgesamt drei Resonanzen. Diese drei Resonanzen können durch drei gekoppelte Pendel erklärt werden. Eine Resonanz tritt erneut bei  $\omega_{gl}$  auf, wenn alle Pendel in Phase schwingen. Eine weitere Resonanz kommt zustande, wenn die beiden äußeren Pendel in Phase schwingen und das mittlere entgegengesetzt. Die dritte Resonanz erhält man, wenn die beiden linken oder die beiden rechten Pendel in Phase schwingen und das rechte bzw. das linke einzelne Pendel gegenphasig dazu schwingt.

Dieses Verfahren lässt sich auf beliebig viele weitere Rohrsegmente erweitern. Fügt man immer mehr davon aneinander, so kann man sich vorstellen, wie die Resonanzen immer dichter beieinander liegen und schließlich in einem quasi unendlich ausgedehnten Rohr mit unendlich vielen Blenden so dicht sind, dass sie nicht mehr getrennt wahrgenommen werden können (s. o.:  $\Delta f = 0$ ). In diesem Fall spricht man von einem Band. Hier soll der Begriff Band auch dann verwendet werden, wenn die Resonanzen tatsächlich noch getrennt zu erkennen sind.

Abbildung 1.9 zeigt die Transferfunktion und Spektren von Rohrresonatoren, die aus einer unterschiedlichen Anzahl an Segmenten bestehen. Die Länge eines einzelnen Segments beträgt 50 mm. Die Segmente wurden mit Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 16 mm aneinander gekoppelt.

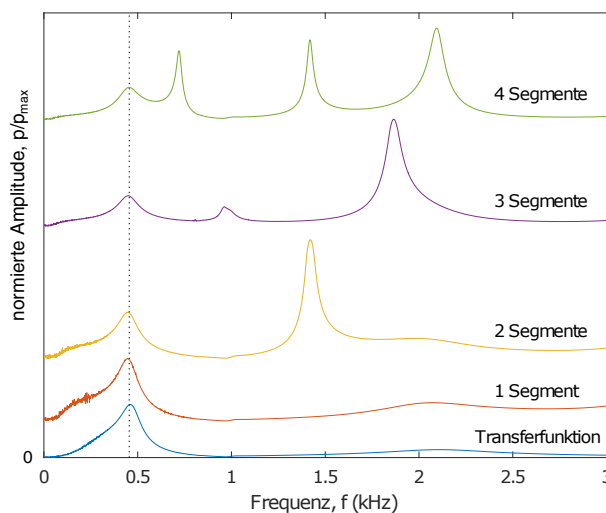


Abbildung 1.9: Transferfunktion (blau) und Spektren von Rohrresonatoren mit unterschiedlicher Anzahl an Segmenten, die mit Blenden aneinander gekoppelt wurden.

Das rote Spektrum gehört zu einem Rohrresonator, der nur aus einem einzelnen Segment aufgebaut ist. Da Oberschwingungen (Vielfache der Frequenz  $f_1 = 1 \cdot \frac{c}{2L}$ ) mit den gekoppelten Pendeln nicht abgebildet werden können, da dort keine Oberschwingungen auftreten, wurde das Spektrum bewusst vor der ersten sichtbaren Resonanz abgeschnitten und zeigt somit den gleichen Verlauf wie die Transferfunktion (blau) mit einem Maximum bei etwa 460 Hz. Die Resonanz bei  $\omega_{gl}$  kann nicht beobachtet werden, da sie beim Rohrresonator einer konstanten Druckverteilung entspricht, bei welcher die Luftmoleküle nicht schwingen (theoretisch bei einer Frequenz von 0 Hz).

Das gelbe Spektrum gehört zu einem Rohrresonator, der aus zwei Segmenten besteht, die durch eine Blende gekoppelt wurden. Auch in diesem Spektrum erkennt man deutlich das erste Maximum der Transferfunktion. Zusätzlich dazu lässt sich eine weitere Resonanz bei etwa 1,4 kHz identifizieren. Dabei handelt es sich um die Resonanz mit  $\omega_{geg}$ .

In violett ist das Spektrum eines Rohrresonators bestehend aus drei Segmenten gezeigt, die mit Hilfe von zwei Blenden gekoppelt wurden. Neben dem Maximum der Transferfunktion sind zusätzlich zwei Resonanzen zu erkennen, die zu den Schwingungen gehören, bei denen im Modell der gekoppelten Pendel eines der drei Pendel gegenphasig zu den anderen beiden schwingt.

In grün ist schließlich das Spektrum eines Resonators bestehend aus vier Segmenten gezeigt, wobei die Segmente mit drei Blenden gekoppelt wurden. Wie zu erwarten, treten zusätzlich zum Maximum der Transferfunktion drei weitere Resonanzen auf.

Wie bereits erläutert ist ein Nachteil der Analogie mit den gekoppelten Pendeln, dass die „Schwingung“ mit  $\omega_{gl}$  beim Rohrresonator nicht beobachtet werden kann und das Oberschwingungen nicht abgebildet werden können. Um das Verhalten der Oberschwingungen beim Rohrresonator mit Blenden dennoch zu erklären, wird im Folgenden auf die Druck- und Geschwindigkeitsverteilung eingegangen.

### Die Druck- und Geschwindigkeitsverteilung im Rohrresonator mit Blenden: das Entstehen von Bändern

Betrachten wir dazu zuerst Abbildung 1.10. Sie zeigt Spektren derselben Resonatoren wie Abbildung 1.9. Hier ist allerdings ein ausgedehnter Frequenzbereich bis 9 kHz gezeigt. Die Rohrlänge ist auf maximal zwei Segmente beschränkt. Die Transferfunktion (blau) und das Spektrum des Rohrresonators bestehend aus nur einem Segment (rot) wurden im Vergleich zu Abbildung 1.9 um einen Faktor 0,5 herunter skaliert, um das Spektrum des Rohrresonators bestehend aus zwei Segmenten mit Blende hervorheben zu können.

Man erkennt in Abbildung 1.10, dass die Resonanzen, die mit „a“ gekennzeichnet sind (1a, 2a, 3a), sowohl bei dem einzelnen Segment, als auch bei den zwei gekoppelten Segmenten auftreten. Zusätzlich treten bei den gekoppelten Segmenten drei Resonanzen 1b, 2b und 3b auf.

Ab hier sei mit  $L$  die Länge des Rohrresonators bestehend aus zwei Segmenten und einer Blende bezeichnet. Die Länge der Blende wird vernachlässigt. Somit ist die Länge eines Segments  $L_S = \frac{1}{2}L$ .

Die Resonanzen des Spektrums eines einzelnen Rohrsegments (rotes Spektrum) können leicht mit der Erkenntnis des ersten Versuchsteils von stehenden Wellen in einem Rohr erklärt werden. Resonanz 1a entspräche einer Schwingung bei 0 Hz, ist folglich nicht zu beobachten. Resonanz 2a zeigt Druckbäuche an den Rändern und einen Knoten in der Druckverteilung in der Mitte (siehe Abbildung 1.2). Die halbe Wellenlänge  $\frac{\lambda_{2a,rot}}{2}$  entspricht der Segmentlänge  $L_S$ . Resonanz

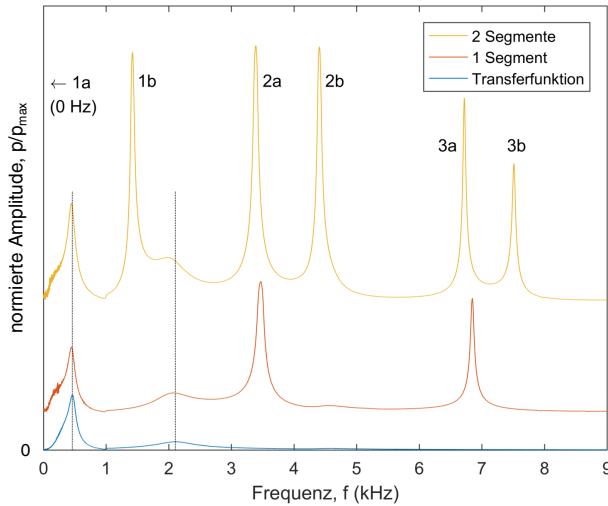


Abbildung 1.10: Transferfunktion (blau) und Spektren von Rohrresonatoren bestehend aus einem einzelnen Segment (rot) und aus zwei Segmenten und Blende (gelb).

3a zeigt entsprechend Druckbäuche an den Rändern und insgesamt zwei Knoten, einen bei  $\frac{1}{3}L_S$ , einen bei  $\frac{2}{3}L_S$ . Zusammenfassend lässt sich sagen

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\lambda_{2a,rot} &= L_S = \frac{1}{2}L \\ \lambda_{3a,rot} &= L_S = \frac{1}{2}L.\end{aligned}$$

Die Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen in einem Rohrresonator bestehend aus zwei Segmenten und einer Blende (gelbes Spektrum) kann die Position der Resonanzen erklären und ist deshalb eine genauere Betrachtung wert. An dieser Stelle bietet es sich an, zuerst zu überlegen, welche Druck- bzw. Geschwindigkeitsverteilungen dazu führen, dass die Resonanzen 1a, 2a und 3a für zwei gekoppelte Segmente entstehen.

Ein Rohrresonator mit Länge  $L = 2L_S$  ohne Blende hat einen halb so großen Abstand zwischen den Resonanzen wie ein Rohrsegment der Länge  $L_S$ . Somit sollten in einem Rohrresonator der Länge  $L$  ohne Blende ebenfalls die Resonanzen 1a, 2a und 3a auftreten, allerdings mit einer anderen Druckverteilung als in einem einzelnen Segment. Wird nun eine Blende eingebaut, stört diese u. U. die Druck- und Geschwindigkeitsverteilung. Die Resonanzen werden nur dann an ihrer ursprünglichen Position zu finden sein, wenn die Blende so positioniert ist, dass die Druck- bzw. Geschwindigkeitsverteilung davon nicht beeinflusst wird. Dies ist genau dann der Fall, wenn sich die Blende an einer Stelle mit einem Geschwindigkeitsknoten befindet: An einem Geschwindigkeitsknoten, an dem sich die Luftmoleküle ohnehin nicht bewegen, wird es die Geschwindigkeitsverteilung nicht stören, wenn dort ein Hindernis in Form einer Blende eingebaut ist.

Abbildung 1.11 zeigt die möglichen Lösungen dieser Bedingung. Die Bilder sind analog zu Abbildung 1.2 aufgebaut, nur dass zusätzlich zum Druck  $p$  (blau) noch die Geschwindigkeit  $v$  (rot) eingezeichnet ist. Geschwindigkeitsknoten sind im unteren Teil der Abbildung durch rote Punkte dargestellt. Die roten Pfeile verdeutlichen die Bewegung der Luftmoleküle an den entsprechenden Stellen. Je länger der Pfeil, desto größer die Geschwindigkeit. In der Mitte des Rohres ist die Blende als zwei blaue Balken eingezeichnet.

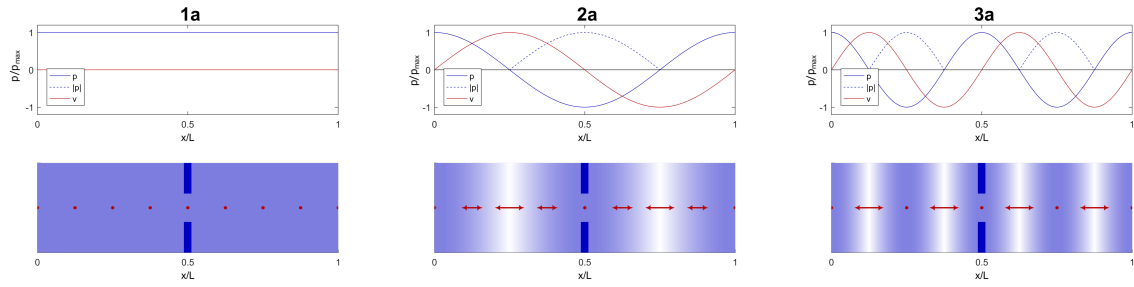


Abbildung 1.11: Druck- (blau) und Geschwindigkeitsverteilung (rot) zweier gekoppelter Segmente; Geschwindigkeitsknoten bei  $\frac{1}{2}L$ .

Aus dieser Abbildung lassen sich leicht die Wellenlängen für die Resonanzen im Rohrresonator mit gekoppelten Segmenten ablesen. Wie immer gilt, dass Resonanz 1a nicht zu beobachten ist. Für die anderen beiden Resonanzen stellt man fest, dass

$$\begin{aligned}\lambda_{2a,\text{gelb}} &= L \\ \lambda_{3a,\text{gelb}} &= \frac{1}{2}L.\end{aligned}$$

Vergleicht man die Resonanzbedingungen der beiden Resonatortypen, lässt sich sagen, dass

$$\begin{aligned}\lambda_{2a,\text{gelb}} &= \lambda_{2a,\text{rot}} \\ \lambda_{3a,\text{gelb}} &= \lambda_{3a,\text{rot}}.\end{aligned}$$

Die zugehörigen Resonanzfrequenzen sind folglich identisch. Bei genauer Betrachtung von Abbildung 1.10 zeigt sich, dass die Resonanzen der gekoppelten Segmente im Vergleich zu einem einzigen Segment zu leicht niedrigeren Frequenzen verschoben sind. Dies wird dadurch erklärt, dass das Einbringen von Blenden die Segmentlänge, genauer gesagt, das schwingfähige Volumen, geringfügig verlängert. Bei den gekoppelten Segmenten ist ein Segment folglich etwas länger als  $L_S$ , was zu einer größeren Wellenlänge, bzw. niedrigeren Frequenz führt.

Es bleibt zu klären, wie es zu den Resonanzen 1b, 2b und 3b kommt. Betrachtet man die Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen in Abbildung 1.11 erneut, stellt man fest, dass Moden fehlen, die gemäß der Rohrlänge  $L$  erlaubt wären. Es sind diejenigen, die einen Geschwindigkeitsbauch in der Mitte des Rohres, genau an der Position der Blende haben. Diese Moden sind in Abbildung 1.12 dargestellt. Sie sehen vor, dass sich die Luftmoleküle an der Stelle der Blende mit maximaler Geschwindigkeit bewegen. Die Blende hindert sie allerdings daran. Dies führt dazu, dass die Frequenz niedriger ist, als man sie aus der Resonanzbedingung ohne Blende erwarten würde. Deshalb treten die Resonanzen 1b, 2b und 3b nicht genau mittig zwischen 1a, 2a, 3a und (der theoretischen) 4a auf, sondern sind im Spektrum nach links verschoben.

Das hier vorgestellte Prinzip lässt sich auf beliebig viele gekoppelte Segmente verallgemeinern. Resonanzen treten immer dann unverschoben auf, wenn sich an den Positionen der Blenden Geschwindigkeitsknoten befinden. Bei drei Segmenten beispielsweise liegen die Blenden bei  $\frac{1}{3}L$  und  $\frac{2}{3}L$ . Die niedrigste Resonanz, die Geschwindigkeitsknoten an genau diesen Stellen ausweist, ist Resonanz 2b. Folglich werden 1b und 2a nicht an ihrer theoretisch möglichen Stelle im Spektrum, sondern nach links verschoben auftreten. Sie haben zwar an den Positionen der Blende nicht explizit Geschwindigkeitsbäuche, gehindert werden die Luftmoleküle aber dennoch. Wo im Fall von zwei gekoppelten Segmenten Zweiergruppen von Resonanzen ein Band bilden — (1a,



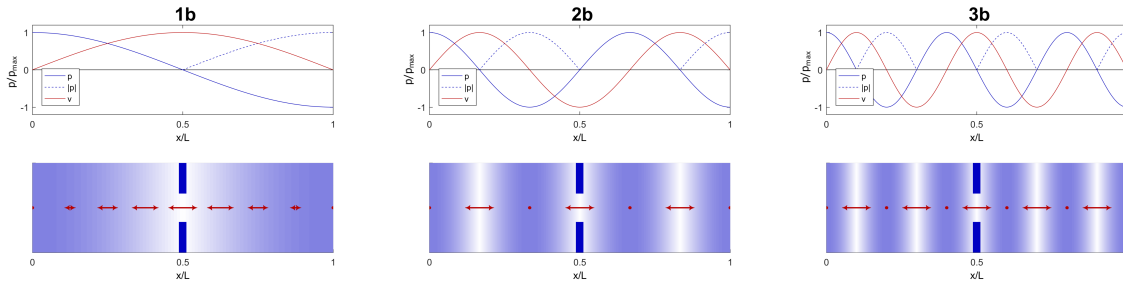


Abbildung 1.12: Druck- (blau) und Geschwindigkeitsverteilung (rot) zweier gekoppelter Segmente; Geschwindigkeitsbauch bei  $\frac{1}{2}L$ .

1b), (2a, 2b) und (3a, 3b) — besteht im Fall von drei gekoppelten Segmenten ein Band aus drei Resonanzen: (1a, 1b, 2a), (2b, 3a, 3b) und theoretisch (4a, 4b, 5a). Die niedrigste Resonanz eines solchen Bandes ist immer die unverschobene Resonanz.

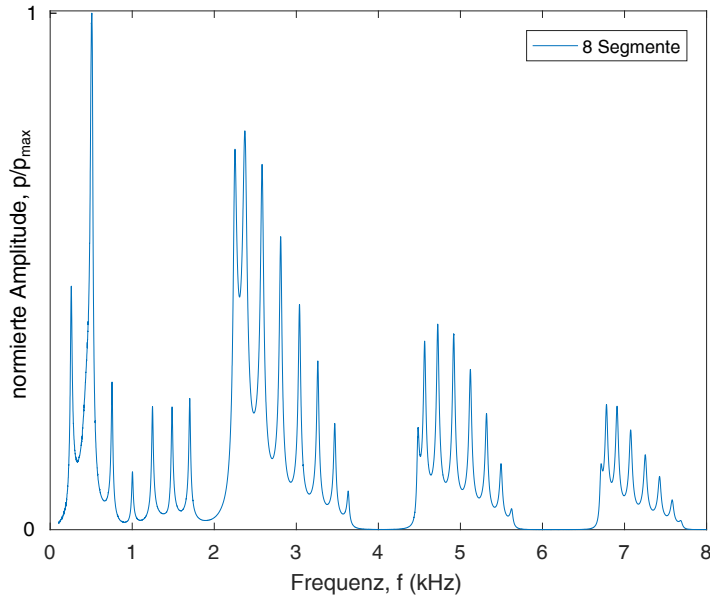


Abbildung 1.13: Spektrum eines Rohrresonators bestehend aus  $8 \times 75$  mm Segmenten getrennt durch Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 16 mm.

Abbildung 1.13 verdeutlicht dies noch einmal. Sie zeigt ein Spektrum eines Rohrresonators bestehend aus  $8 \times 75$  mm Segmenten, die durch Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 16 mm getrennt wurden. Das erste Band besteht aus sieben Resonanzen, alle weiteren Bänder aus acht. Zwischen den einzelnen Bändern liegen die Bandlücken um den Bereichen um 2 kHz, 4 kHz und 6 kHz. Die Dispersionsrelation zu diesem Spektrum wird im Folgenden erklärt.

### Die Dispersionsrelation beim Vorliegen von Bändern

Abbildung 1.14 zeigt die Dispersionsrelation eines Rohres mit  $8 \times 75$  mm Rohrsegmenten getrennt durch Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 16 mm.

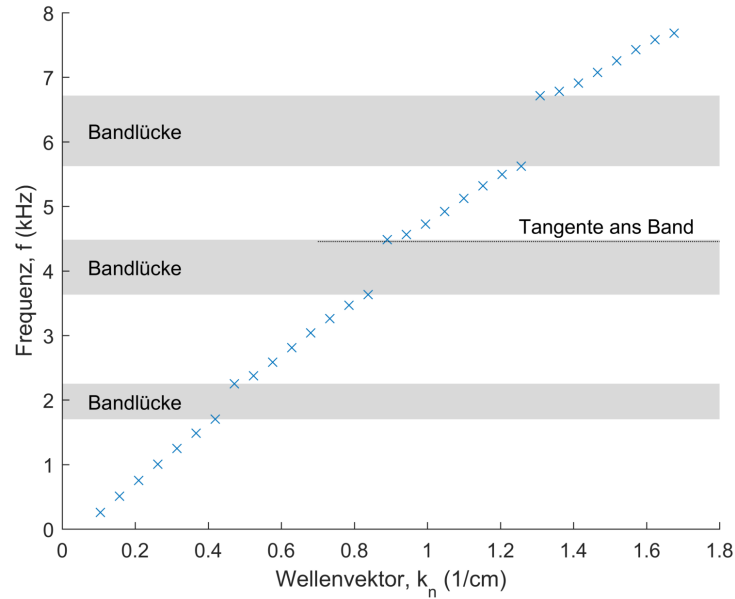


Abbildung 1.14: Dispersionsrelation eines Rohres mit  $8 \times 75$  mm Rohrsegmenten getrennt durch Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 16 mm.

Deutlich ist zu erkennen, dass es zur Ausbildung einzelner Bänder (Messwerte, als blaue Kreuze dargestellt) kommt. Jedes Band, abgesehen von dem ersten Band, dem die Resonanz bei 0 Hz fehlt, besteht aus acht Resonanzen. Das erste Band beinhaltet entsprechend nur sieben Resonanzen. Die Bänder sind durch sog. Bandlücken getrennt, in denen keine Zustände erlaubt sind. Anders formuliert bedeutet dies, dass die Frequenzen, bzw. Energien in diesen Bereichen verboten sind. In Abbildung 1.14 sind diese Bandlücken grau hinterlegt. Manchmal werden solche Bereiche auch verbotene Zone oder verbotenes Band genannt. Dann wird mit Bandlücke der energetische Abstand zwischen zwei Bändern bezeichnet. [4]

Die Dispersionsrelation beim Vorliegen von Bändern ist an keiner Stelle mehr linear. Jedes Band hat die Form eines langgestreckten „S“. In Abbildung 1.14 ist dies am besten an den beiden Bändern mit hoher Frequenz erkennbar: Insbesondere am Rand der Bänder nahe den Bandlücken treten Nichtlinearitäten auf. Diese äußern sich darin, dass das Band zu den Bandlücken hin abflacht. Eine Tangente an das Band, an der Stelle, an der das Band an die Bandlücke angrenzt, hat die Steigung null.

Die Bandlücken finden sich in Abbildung 1.14 in den Bereichen  $f_{1 \rightarrow 2} \approx$ ,  $f_{2 \rightarrow 3} \approx$  und  $f_{3 \rightarrow 4} \approx$ . Der Wert der Bandlücken beträgt entsprechend  $\Delta f_{1 \rightarrow 2} = 0,6$  kHz,  $\Delta f_{2 \rightarrow 3} = 0,9$  kHz und  $\Delta f_{3 \rightarrow 4} = 1,1$  kHz.

### Die Analogie zum eindimensionalen Festkörper

Mit dem einfachen Resonator des ersten Versuchstags wurde ein freies Elektron in einem Kasten modelliert. Das Modell des freien Elektrons lässt sich auf beliebig viele freie Elektronen erweitern. Mit diesem erweiterten Modell können bereits Phänomene wie die spezifische Wärme oder Transporteigenschaften von einfachen Systemen gut beschrieben werden. Für weitergehende Aussagen, z. B. zur Existenz von Halbleitern, muss allerdings das Potenzial, welches durch

das Gitter, also die positiv geladenen Atomrümpfe in einem Festkörper, hervorgerufen wird, einbezogen werden. [4]

Zur Erweiterung des Modells freier Elektronen wird ein Festkörper mit einem periodischen Gitter angenommen, bei welchem die Atomrümpfe in einer Raumrichtung stets denselben Abstand voneinander haben. Dadurch entsteht ein periodisches Potenzial. Durch Lösen der Schrödingergleichung unter Einbeziehung dieses Potenzials lassen sich viele Eigenschaften von Festkörpern erklären.

Es gibt grundsätzlich zwei Wege, die Bandstruktur in einem periodischen Potenzial eines Festkörpers zu beschreiben. Einer dieser Ansätze beginnt mit einem freien Elektron in einem konstanten Potenzial mit quadratischer Dispersionsrelation  $E(k) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ . Unter Berücksichtigung von schwach wechselwirkenden periodischen Streuzentren erhält man eine Aufspaltung in Bandlücken. Der andere Ansatz betrachtet zunächst ein einzelnes Atom mit diskreten Energieniveaus. Wechselwirkt das Atom mit einem weiteren, so erhält man eine Aufspaltung der Eigenzustände zu jeweils zwei Niveaus wie im vorigen Teil für das Wasserstoffmolekül. Für eine  $n$ -atomige Kette ( $n \gg 1$ ) führt dies zu einer Aufspaltung in ein Energieband.

Das periodische Potenzial wird beim Rohrresonator mit Hilfe der Blenden modelliert, die in periodischem Abstand eingebaut werden. Damit kann das Auftreten von Bandlücken beobachtet werden. Weitergehende Experimente mit dem Rohrresonator und Blenden könnten weitere Eigenschaften von Festkörpern, wie beispielsweise die Existenz von Defektzuständen simulieren.

### 1.2.5 Versuchsdurchführung

**Hinweis:** Speichern Sie alle aufgenommenen Spektren lokal auf dem Computer, nicht nur als Bilddateien, sondern auch als Textdateien. Sie benötigen eine Kopie dieser Daten für Ihre Auswertung.

**Wichtig:** Sie müssen dazu jede Messung einzeln auswählen und separat speichern! Das Programm speichert nur die aktuell ausgewählte Messung als Datensatz (\*.dat), aber immer das gesamte Bild (\*.jpg) mit allen auf dem Monitor sichtbaren Messungen!

#### Teil 1: Das Wasserstoffmolekül

**Hinweis:** Auch in diesem Versuchsteil sollten Sie davon Gebrauch machen, dass Sie bis zu vier Spektren gleichzeitig anzeigen und somit direkt vergleichen können. Zuerst sollen Sie sich dem Grundzustand, der im Atom mit 1s bezeichnet wird, widmen.

- Bauen Sie den Kugelresonator wie am ersten Versuchstag bestehend aus einer Kugel als Wasserstoffatom auf.
- Zeichnen Sie ein Spektrum von 0 Hz bis 1000 Hz bei  $\alpha = 180^\circ$  auf. Handelt es sich bei dem beobachteten Maximum um eine Resonanz des Systems oder um das Maximum der Transferfunktion?
- Bauen Sie ein Modell für ein Molekül: Setzen Sie dazu eine Halbkugel mit Loch auf die Halbkugel mit dem Lautsprecher. Wählen Sie dann eine der vier verfügbaren Blenden aus und legen Sie diese auf das Loch in der oberen Halbkugel. Setzen Sie auf die Blende eine weitere Halbkugel mit Loch und schließen Sie den Resonator mit der Halbkugel mit Mikrofon ab.

- d) Messen Sie für alle verfügbaren Blenden ein Spektrum von 0 Hz bis 1000 Hz bei  $\alpha = 180^\circ$ . Notieren Sie sich Ihre Beobachtung.
- e) Wählen Sie die größte Blende aus.
- f) Verbinden Sie den Lautsprecherauszug des PCs mittels eines BNC-T-Stücks gleichzeitig mit Kanal 1 des Oszilloskops und (über den TeachSpin-Verstärker: „Sine Wave Input“ zu „Speaker Output“) mit dem Lautsprecher des Kugelresonators.  
Verbinden Sie die beiden Mikrofone über den kleinen Verstärker mit den Kanälen 2 und 3 des Oszilloskops, sowie das obere Mikrofon gleichzeitig mit dem Mikrofoneingang des PCs.
- g) Wählen Sie durch Linksklick auf die Resonanz im Spektrum die zur Blende gehörende Resonanzfrequenz aus und nehmen Sie ein Oszillogramm für das Lautsprechersignal und die beiden Mikrofonsignale aus der obersten Halbkugel und der untersten Halbkugel auf.

**Hinweis:** Die Anzeige am Oszilloskop ist häufig verrauscht. Notieren Sie sich daher auch alle wichtigen Unsicherheiten zu dieser Messung! Um eine ausreichende Signalqualität zu erreichen, muss das Messsignal dabei über mehrere Durchgänge gemittelt werden (Menü „Acquire“).

Als zweites soll der im Atom mit 2p bezeichnete Zustand vermessen werden. Überlegen Sie sich zuerst, wie viele Resonanzen Sie erwarten.

- h) Messen Sie ein Spektrum von 2000 Hz bis 3000 Hz bei  $\alpha = 180^\circ$  mit einer Auflösung von 1 Hz und einer **time per step** von mindestens 50 ms. Achten Sie darauf, dass die Spektren nicht verrauscht sind und dass Sie die Position und Anzahl der auftretenden Maxima deutlich erkennen können.  
Stimmt die Anzahl der Resonanzen mit der von Ihnen erwarteten Anzahl überein?
- i) Messen Sie ein weiteres Spektrum von 2000 Hz bis 3000 Hz, ebenfalls mit dieser hohen Auflösung, allerdings bei  $\alpha = 0^\circ$  und vergleichen Sie die beiden Spektren.  
Was lässt sich jetzt über die Anzahl der Resonanzen sagen?
- j) Nehmen Sie für jede Resonanz wie zuvor ein Oszillogramm auf, das die Signale des Lautsprechers und beider Mikrofone beinhaltet. Messen Sie jeweils dabei jeweils für drei Winkel:  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ .

## Teil 2: Der Rohrresonator mit Blenden

**Hinweis:** In diesem Versuchsteil sollten Sie davon Gebrauch machen, dass Sie bis zu vier Spektren gleichzeitig anzeigen und somit direkt vergleichen können. **Wichtig:** Sie müssen dennoch jede Messung einzeln auswählen und separat speichern! Das Programm speichert nur die aktuell ausgewählte Messung als Datensatz (\*.dat), aber immer das gesamte Bild (\*.jpg) mit allen auf dem Monitor sichtbaren Messungen!

- k) Verwenden Sie Rohrsegmente der Länge 75 mm und Blenden mit einem Lochdurchmesser von 16 mm.
- l) Nehmen Sie für ein einzelnes Rohrsegment ohne Blende ein Spektrum von 0 Hz bis 16 kHz auf. (Die Frequenzauflösung sollte ca. 5 Hz betragen.)
- m) Setzen Sie ein Rohr aus zwei Rohrsegmenten zusammen, die durch eine Blende getrennt werden und nehmen Sie auch hierfür ein Spektrum von 0 Hz bis 16 kHz auf.
- n) Wiederholen Sie diesen Vorgang für zwei weitere Anzahlen von Rohrsegmenten, wobei die Rohrsegmente jeweils durch eine Blende getrennt werden. Wie hängt die Anzahl der

Resonanzen in einem Band mit der Anzahl der Rohrstücke zusammen? Entsprechen Ihre Beobachtungen Ihren Erwartungen?

**Hinweis:** Bei kürzeren Rohrlängen ist der Effekt besser zu beobachten, weil bei längeren Rohrlängen Resonanzen bei hohen Frequenzen oft nur noch als Schulter erkennbar sind und somit die korrekte Anzahl der Resonanzen schwieriger zu ermitteln ist.

- o) Setzen Sie ein Rohr maximaler Länge (8 Segmente) zusammen und trennen Sie alle Rohrsegmente durch eine Blende der gleichen Größe. Nehmen Sie für ein Spektrum von 0 Hz bis 16 kHz auf.
- p) Setzen Sie ein Rohr maximaler Länge aus 50 mm langen Rohrsegmenten zusammen (12 Segmente ohne Blenden) und nehmen Sie ein Spektrum von 0 Hz bis 12 kHz auf.
- q) Trennen Sie benachbarte Rohrsegmente jeweils durch eine Blende der Größe 16 mm. Nehmen Sie ein Spektrum von 0 Hz bis 12 kHz auf.
- r) Ersetzen Sie das kurze Rohrsegment an Position 8 durch ein langes Rohrsegment und nehmen Sie erneut ein Spektrum von 0 Hz bis 12 kHz auf.

### 1.2.6 Auswertung

#### Teil 1: Das Wasserstoffmolekül

- a) Bilden Sie die vier Spektren der  $1\sigma$ -Molekülorbitale zusammen in einer Grafik ab.
- b) Was beobachten Sie für die verschiedenen Blendengrößen? Erklären Sie dieses Verhalten.
- c) Bestimmen Sie aus dem Oszillogramm die Phasenverschiebung zwischen den beiden Mikrofonsignalen aus der obersten Halbkugel und der untersten Halbkugel.
- d) Handelt es sich bei der sichtbaren Resonanz um das bindende oder das antibindende Orbital? Begründen Sie Ihre Aussage mit Hilfe der Phasenverschiebung zwischen oberer und unterer Kugel und mit Hilfe von Abbildung 1.7.
- e) Bilden Sie die zwei Spektren der  $2\sigma$ - und  $1\pi$ -Molekülorbitale zusammen in einer Grafik ab.
- f) Wie viele Resonanzen können Sie beobachten?
- g) Bestimmen Sie aus den Oszillogrammen jeweils die Phasenverschiebung zwischen dem Lautsprechersignal und den beiden Mikrofonsignalen aus der obersten Halbkugel und der untersten Halbkugel.
- h) Ordnen Sie den einzelnen Resonanzen das jeweilige Molekülorbital zu, indem Sie z. B. Abbildung 1.8 zu Hilfe nehmen und begründen Sie Ihre Zuordnung.

#### Teil 2: Der Rohrresonator mit Blenden

**Hinweis:** Beachten Sie, dass bei höheren Frequenzen oft die Resonanzen nahe der Bandlücke nur als Schulter zu erkennen sind. Lassen Sie Resonanzen aus, die Sie nicht identifizieren können (nicht nur  $f_n$  sondern auch das dazugehörige  $k_n$ ).

#### „Tight-Binding-Methode“

- i) Wie hängt die Anzahl der Resonanzen in einem Band mit der Anzahl der verwendeten Rohrsegmente zusammen? Erklären Sie diesen Zusammenhang anschaulich.
- j) Betrachten Sie das Spektrum des Rohrresonators aus 8 langen Segmenten ohne Blenden. Bestimmen Sie die dazugehörige Dispersionsrelation  $f_n(k_n)$  und bilden Sie diese ab, indem Sie  $k_n = n\pi/L$  berechnen und  $f_n$  aus den Spektren ablesen.

- k) Tragen Sie in diese Abbildung zusätzlich die Dispersionsrelation  $f_n(k_n)$  für die alle Resonatoren aus langen Rohrsegmenten mit Blenden auf.

### Schwaches periodisches Potenzial

- l) Widmen Sie sich den Spektren der Resonatoren, die nur aus kurzen Segmenten bestehen. Tragen Sie diese Spektren grafisch auf. Bestimmen Sie jeweils die dazugehörige Dispersionsrelation  $f_n(k_n)$  und bilden Sie diese ab, indem Sie  $k_n = n\pi/L$  berechnen und  $f_n$  aus den Spektren ablesen.
- m) Durch welche Merkmale unterscheiden sich diese Dispersionsrelationen voneinander?
- n) Wie unterscheiden sich die Spektren und Dispersionsrelationen von Resonatoren aus kurzen bzw. langen Segmenten?
- o) Tragen Sie das Spektrum für den Rohrresonator mit dem langen Segment an Position 8 auf. Wie unterscheidet es sich von dem Spektrum aus 12 kurzen Segmenten?

### 1.2.7 Fragen und Aufgaben

- a) Wie und zu welchem Zweck werden Defektzustände in Festkörpern erzeugt?
- b) Wie könnte das im Spektrum des „gestörten“ Resonators (11 kurze und 1 langes Segment) beobachtbare Phänomen in der Dispersionsrelation dargestellt werden?

### 1.2.8 Literaturhinweise

Eine detaillierte Lösung der Helmholtzgleichung findet sich in [1]. Das Buch steht zwar nicht in der Bibliothek, die einzelnen Kapitel können aber innerhalb des Uninetzes vom Springer-Verlag unter <http://www.springerlink.com> (Stichwortsuche Ehlötzky Mathematik) heruntergeladen werden.

# Literaturverzeichnis

- [1] Fritz Ehlotzky. Angewandte Mathematik für Physiker. Springer-Verlag, Berlin, 2007. Das Buch steht nicht in der Bibliothek. Die einzelnen Kapitel können aber innerhalb des Uninetzes vom Springer-Verlag unter <http://www.springerlink.com> (Stichwortsuche **Ehlotzky Mathematik**) heruntergeladen werden.
- [2] Wolfgang Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 5/2 – Quantenmechanik – Methoden und Anwendungen. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 6. edition, 2006.
- [3] René Matzdorf. Quantum Analogs instructor’s manual. TeachSpin, Inc., 2495 Main Street, Buffalo, NY 14214-2153, USA, 2009.
- [4] Charles Kittel. Einführung in die Festkörperphysik. Oldenbourg Verlag, München, 14. edition, 2006.