Julius-Maximilians-
UNIVERSITÄT
WÜRZBURG

PiD
Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

# Simulationen und Modellierungen im Unterricht zur Quantenphysik

## Workshop auf der Lehrerfortbildung „Quantenphysik“

*Dr. Christoph Stolzenberger*
*(Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik, Julius-Maximilians-Universität Würzburg)*

02.10.2024 | Uni Würzburg

# Simulationen zur Quantenmechanik

## Ein paar Hinweise ...

1) Im Workshop „Experimente im Schulunterricht“ vorhanden: E

2) Unterscheide:
   „Echte“ Simulation ≠ Visualisierung

3) Diese Folien werden Ihnen im Download-Ordner der Lehrerfortbildung zugänglich gemacht.

4) Für Internetzugang Tablets mit „Bayern WLAN“ verbinden.

# Simulationen zur Quantenmechanik

Lehrplan PLUS

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

**Ph13 Lernbereich 1: Grundideen der Quantenphysik (ca. 27 Std.)**

**Ph13 1.1 Eigenschaften von Quantenobjekten (ca. 14 Std.)**

**Kompetenzerwartungen**

Die Schülerinnen und Schüler ...

- erklären den Aufbau sowie die Funktion einzelner Komponenten der Elektronenbeugungsröhre und formulieren basierend auf quantitativen Untersuchungen Hypothesen zur Interpretation des Schirmbilds. Zur Überprüfung der Hypothese, dass Elektronen Welleneigenschaften besitzen, planen sie ein weiteres Experiment.
- schließen anhand experimenteller Daten auf den quantitativen Zusammenhang zwischen Impuls und Wellenlänge des Quantenobjekts Elektron.
- erschließen sich mithilfe einer digitalen Simulation Aussagen zu Eigenschaften von Elektronen. Die Entstehung des Interferenzbilds erläutern sie dabei mithilfe von Zeigerdiagrammen. Sie folgern die Unzulänglichkeit der klassischen Beschreibung des Elektrons sowie die Notwendigkeit der Einführung des Begriffs Quantenobjekt.
- identifizieren im simulierten Experiment mit einzelnen Photonen im Mach-Zehnder-Interferometer das Photon als Quantenobjekt. Sie beschreiben unter Verwendung der Fachsprache Aufbau und Durchführung dieses Interferenzexperiments und erläutern kausal korrekt strukturiert die Koinzidenzmethode zur Präparation einzelner Photonen. Sie erklären die Entstehung von Interferenzen durch Analyse der Phasenbeziehungen mit Zeigerdiagrammen.
- entnehmen einem vorgegebenen Text zum lichtelektrischen Effekt die Interpretation experimenteller Beobachtungen auf Basis der Lichtquantenhypothese nach Einstein und analysieren die Argumentationsstruktur der Quelle. Sie diskutieren die Bedeutung des Planck'schen Wirkungsquantums als universelle Naturkonstante. Den Impuls des Photons leiten sie aus einer relativistischen Betrachtung ab.

- erklären den Aufbau sowie die Funktion einzelner Komponenten der Elektronenbeugungsröhre und formulieren basierend auf quantitativen Untersuchungen Hypothesen zur Interpretation des Schirmbilds. Zur Überprüfung der Hypothese, dass Elektronen Welleneigenschaften besitzen, planen sie ein weiteres Experiment.

- erschließen sich mithilfe einer digitalen Simulation Aussagen zu Eigenschaften von Elektronen. Die Entstehung des Interferenzbilds erläutern sie dabei mithilfe von Zeigerdiagrammen. Sie folgern die Unzulänglichkeit der klassischen Beschreibung des Elektrons sowie die Notwendigkeit der Einführung des Begriffs Quantenobjekt.

- identifizieren im simulierten Experiment mit einzelnen Photonen im Mach-Zehnder-Interferometer das Photon als Quantenobjekt. Sie beschreiben unter Verwendung der Fachsprache Aufbau und Durchführung dieses Interferenzexperiments und erläutern kausal korrekt strukturiert die Koinzidenzmethode zur Präparation einzelner Photonen. Sie erklären die Entstehung von Interferenzen durch Analyse der Phasenbeziehungen mit Zeigerdiagrammen.

Workshop-Inhalt

1.1a Elektronen-Beugungsröhre

1.1b Doppelspalt mit und ohne Zeigerformalismus

1.1c M-Z-Interferometer mit und ohne Zeigerformalismus

# Simulationen zur Quantenmechanik

Lehrplan PLUS

**Ph13 1.2 Einblick in das Weltbild der Quantenphysik (ca. 13 Std.)**

**Kompetenzerwartungen**

Die Schülerinnen und Schüler ...

- interpretieren das Betragsquadrat der Wellenfunktion als Nachweiswahrscheinlichkeit. Sie erläutern das Prinzip der Superposition quantenphysikalischer Zustände und die Determiniertheit der zeitlichen Entwicklung der Wellenfunktion.
- erläutern das grundlegende Prinzip der Komplementarität am Beispiel der Beschreibung eines Quantenobjekts als Welle und Teilchen. Anhand einer Betrachtung von Wellenpaketen machen sie die Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation plausibel und identifizieren Ort und Impuls als komplementäre Größen.
- beschreiben den quantenphysikalischen Messprozess als zufällige Auswahl eines Realität werdenden Zustands. Sie vergleichen den quantenphysikalischen mit dem klassischen Messprozess und reflektieren die Problematik der Übertragung von Begriffen aus der Anschauungswelt in die Quantenphysik.
- erläutern unter Verwendung von Zeigerdiagrammen die Änderung der Ergebnisse von Interferenzexperimenten durch Löschen einer bereits vorhandenen Weginformation am Beispiel Quantenradierer.
- beschreiben die Auswirkungen einer Änderung des Aufbaus eines Experiments während dessen Durchführung auf die Messung. Dabei stellen sie die unterschiedlichen Erwartungen aus klassischer und quantenphysikalischer Sicht gegenüber.
- erläutern an ausgewählten Beispielen den Übergang von der quantenphysikalischen zur klassischen Beschreibung von makroskopischen Objekten und bewerten die Übertragbarkeit quantenphysikalischer Betrachtungen auf Alltagssituationen.
- prüfen fachliche und außerfachliche Texte mit quantenphysikalischen Bezügen hinsichtlich Fachsprache und Korrektheit und bewerten sie bezüglich ihrer Vertrauenswürdigkeit und der Intention des Autors.


- erläutern unter Verwendung von Zeigerdiagrammen die Änderung der Ergebnisse von Interferenzexperimenten durch Löschen einer bereits vorhandenen Weginformation am Beispiel Quantenradierer.


Workshop-Inhalt

1.2 M-Z-Interferometer mit Polfiltern

# Simulationen zur Quantenmechanik

Lehrplan PLUS

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

**Ph13 Lernbereich 2: Ein Atommodell der Quantenphysik (ca. 22 Std.)**

**Kompetenzerwartungen**

Die Schülerinnen und Schüler ...

- verwenden das Modell des eindimensionalen Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden, um grundlegende Eigenschaften eines Systems mit räumlich eingeschränkten Elektronen zu beschreiben. Auf der Grundlage der Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung skizzieren sie die Wellenfunktionen sowie die zugehörigen Dichten der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und schließen auf diskrete Energieniveaus. Zur Lage dieser Energieniveaus stellen sie quantitative Betrachtungen an.
- erkunden mithilfe digitaler Simulationen für weitere einfache Potentialverläufe die Form der Wellenfunktionen sowie die Lage der Energieniveaus. Hierbei machen sie auch das Zustandekommen der Atombindung plausibel.
- erweitern die Betrachtungen von eindimensionalen Orbitalen auf drei Dimensionen, auch mithilfe von mechanischen Analogien und digitalen Simulationen. Sie beschreiben den Zusammenhang zwischen Quantenzahlen und Struktur der Orbitale am Beispiel des Wasserstoffatoms und entnehmen der Simulation die Energiewerte des Wasserstoffatoms.
- verifizieren anhand des Wasserstoffspektrums das dem Modell entnommene Energieniveauschema. Sie übertragen ihre Betrachtungen auf wasserstoffähnliche Systeme und untersuchen dabei die Grenzen der verwendeten Modellierung.
- beschreiben Systeme mit mehreren Elektronen durch das Besetzen der Energieniveaus eines einzelnen Elektrons nach dem Pauli-Prinzip und durch das Energieniveauschema der Atomhülle als Ganzes. Sie vergleichen die Aussagen der beiden Darstellungen und erläutern für Atome und weitere quantenphysikalischen Strukturen Beobachtungen zur Emission und Absorption von Strahlung.
- erläutern die Funktion der Komponenten des Aufbaus sowie die Durchführung und die Auswertung des Franck-Hertz-Versuchs. Dabei formulieren sie unter Verwendung der Fachsprache kausal und chronologisch korrekt strukturiert. Sie erläutern die grundlegenden Unterschiede zwischen einer Anregung durch Photonenabsorption und durch Elektronenstöße.


- verwenden das Modell des eindimensionalen Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden, um grundlegende Eigenschaften eines Systems mit räumlich eingeschränkten Elektronen zu beschreiben. Auf der Grundlage der Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung skizzieren sie die Wellenfunktionen sowie die zugehörigen Dichten der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und schließen auf diskrete Energieniveaus. Zur Lage dieser Energieniveaus stellen sie quantitative Betrachtungen an.
- erkunden mithilfe digitaler Simulationen für weitere einfache Potentialverläufe die Form der Wellenfunktionen sowie die Lage der Energieniveaus. Hierbei machen sie auch das Zustandekommen der Atombindung plausibel.
- erweitern die Betrachtungen von eindimensionalen Orbitalen auf drei Dimensionen, auch mithilfe von mechanischen Analogien und digitalen Simulationen. Sie beschreiben den Zusammenhang zwischen Quantenzahlen und Struktur der Orbitale am Beispiel des Wasserstoffatoms und entnehmen der Simulation die Energiewerte des Wasserstoffatoms.
- erläutern die Funktion der Komponenten des Aufbaus sowie die Durchführung und die Auswertung des Franck-Hertz-Versuchs. Dabei formulieren sie unter Verwendung der Fachsprache kausal und chronologisch korrekt strukturiert. Sie erläutern die grundlegenden Unterschiede zwischen einer Anregung durch Photonenabsorption und durch Elektronenstöße.


Workshop-Inhalt

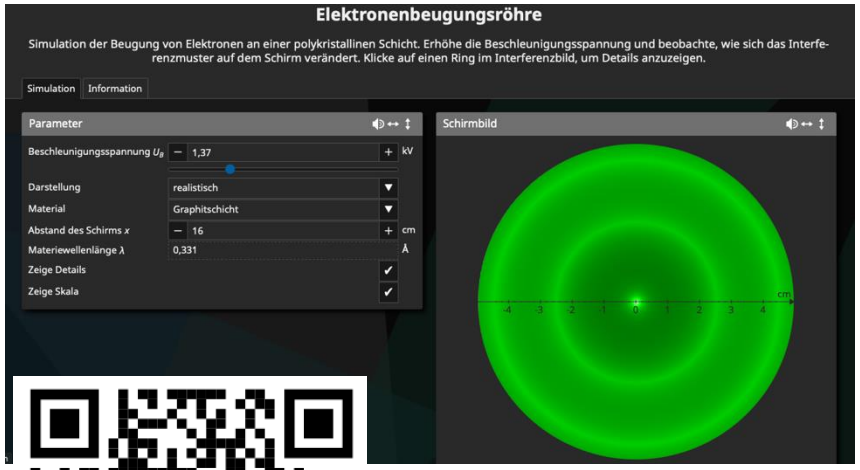
- 2a Wellenfunktion im 1-D Potentialtopf
- 2b Wellenfunktion in verschiedenen Potentialen
- 2c Visualisierung Orbitale H-Atom
- 2d Franck-Hertz-Versuch

# Simulationen zur Quantenmechanik

## Elektronenbeugungsröhre + Doppelspalt

1.1a

- erklären den Aufbau sowie die Funktion einzelner Komponenten der Elektronenbeugungsröhre und formulieren basierend auf quantitativen Untersuchungen Hypothesen zur Interpretation des Schirmbilds. Zur Überprüfung der Hypothese, dass Elektronen Welleneigenschaften besitzen, planen sie ein weiteres Experiment.




E

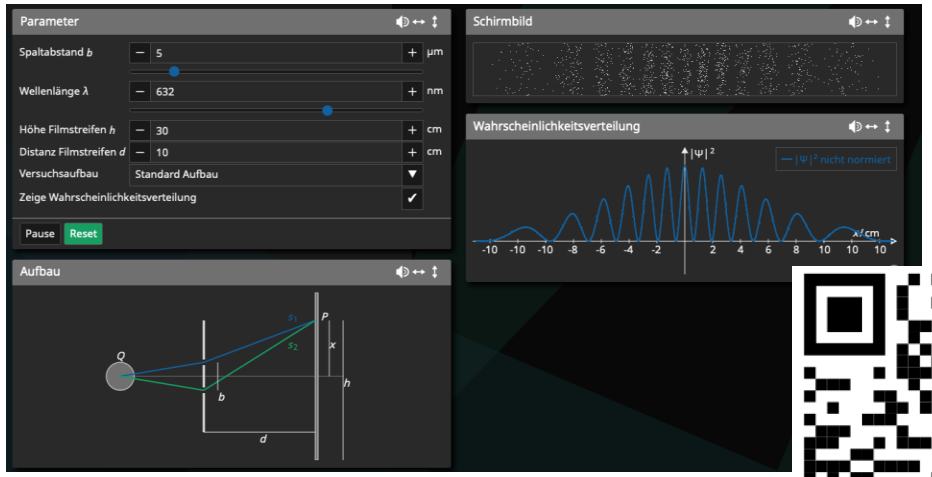
Mögliche Aufgabe:

1) Finden Sie (bei Graphit) zu einem Netzebenenabstand Beugungsringe für k=1, k=2 und k=3

https://www.kippenbergs.de/de/mint-electron-diffraction

1.1b

- erschließen sich mithilfe einer digitalen Simulation Aussagen zu Eigenschaften von Elektronen. Die Entstehung des Interferenzbilds erläutern sie dabei mithilfe von Zeigerdiagrammen. Sie folgern die Unzulänglichkeit der klassischen Beschreibung des Elektrons sowie die Notwendigkeit der Einführung des Begriffs Quantenobjekt.




Mögliche Aufgaben:

1) Alle drei Versuchsaufbauten (Standard, Welcher-Weg, Quantenradierer) testen
2) Wahrscheinlichkeitsverteilung richtig? (mit Parameter spielen)

https://www.kippenbergs.de/de/mint-dualism

# Simulationen zur Quantenmechanik

## Zeigerformalismus

1.1b

- erschließen sich mithilfe einer digitalen Simulation Aussagen zu Eigenschaften von Elektronen. Die Entstehung des Interferenzbilds erläutern sie dabei mithilfe von Zeigerdiagrammen. Sie folgern die Unzulänglichkeit der klassischen Beschreibung des Elektrons sowie die Notwendigkeit der Einführung des Begriffs Quantenobjekt.

- Der Zeigerformalismus ist laut Author eine Methode, die Dynamik von Quantenobjekten „mit einfachem grafischen Verfahren“ zu behandeln
- Vorteil/Nachteil: bereits in der klassischen Optik einsetzbar (vgl. Lehrplan 12. Klasse)




Roger Erb
De Gruyter, 2017 - 185 Seiten
Optik mit GeoGebra verdeutlicht die Anwendung der frei erhältlichen Software >GeoGebra

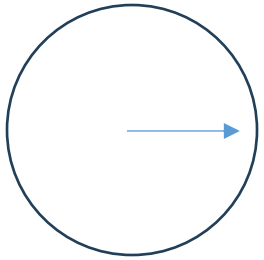
Alle GeoGebra-Modelle aus dem Buch können auf https: //www.geogebra.org/m/ceu3jJeM heruntergeladen werden.

Mehr »

Formalismus nach Roger Erb (Uni Frankfurt)

Vorgehen:

- Die Länge jedes Lichtwegs wird berechnet.
- Für jeden Lichtweg wird ein Zeiger mit derselben Länge gezeichnet. Der Zeiger wird entsprechend der Länge dieses Lichtwegs im Uhrzeigersinn gedreht. Die Drehung startet dabei jeweils bei 3 Uhr. Der Zeiger erfährt eine vollständige Drehung, während das Licht einen Weg entsprechend seiner Wellenlänge zurücklegt.
- Abschließend werden alle Zeiger wie Vektoren addiert. Das Quadrat des resultierenden Zeigers ist ein Maß für die Intensität des Lichts im Empfängerpunkt.





# Simulationen zur Quantenmechanik

1.1b

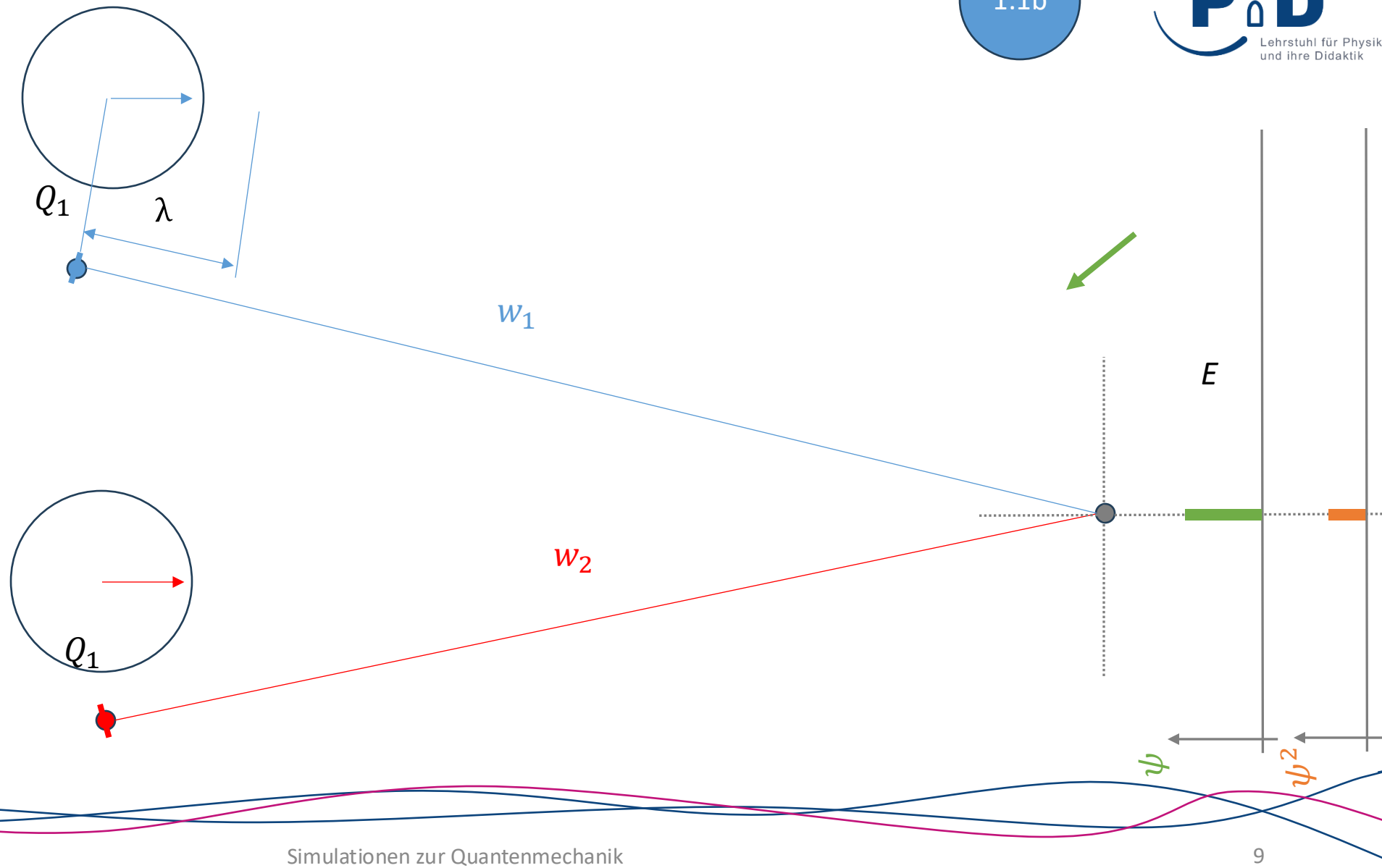
Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

Bsp: Interferenz von zwei Punktquellen
(entspricht Interferenz an einem Doppelspalt ohne Beugung)

- 2 Lichtwege $w_1$ und $w_2$ werden zur Berechnung des Drehwinkels der Zeiger verwendet

$$Winkel = \frac{2\pi\, w}{\lambda}$$

- Zeiger werden addiert
  -> "grüne" Amplitude
- Diese wird am Empfängerpunkt *E* auf den Schirm übertragen
- Quadrat der Amplitude wird als Intensität angezeigt (orange)
- Es ergibt sich das Interferenzbild



# Simulationen zur Quantenmechanik

Zeigerformalismus

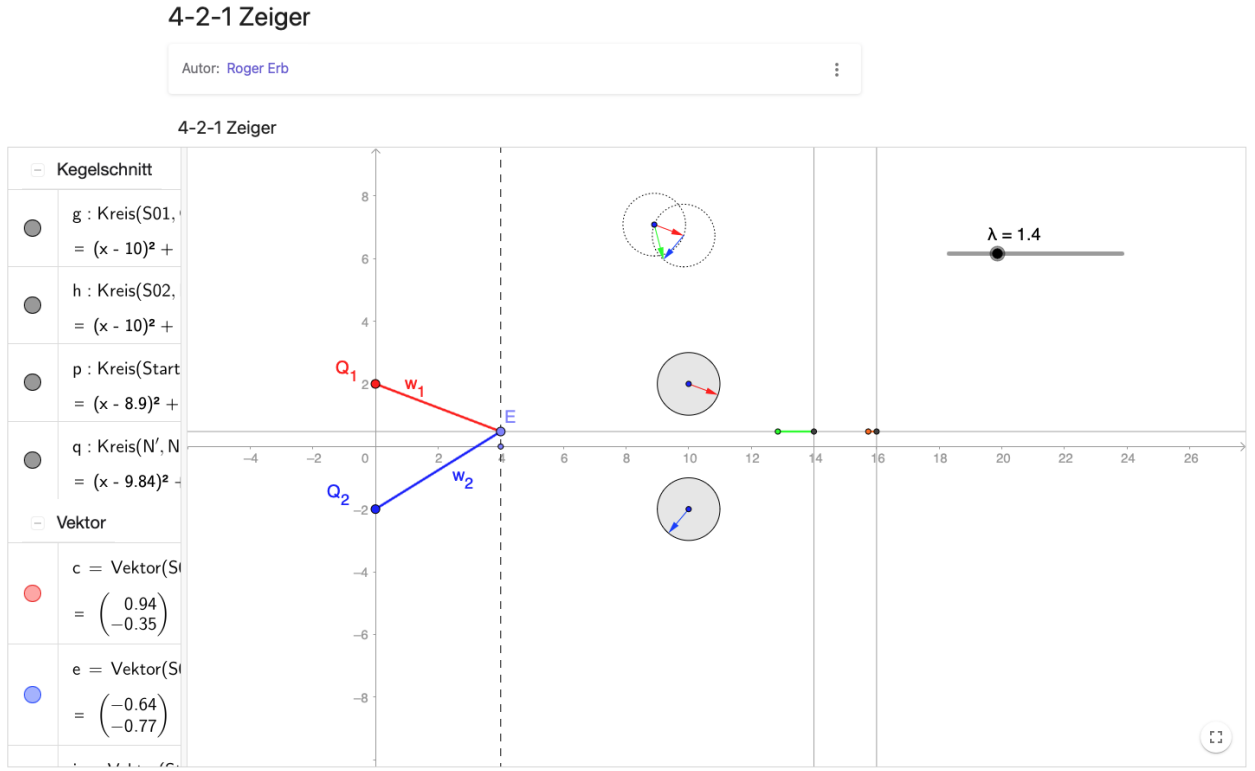
1.1b

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

## Visualisierung mit Geogebra

„4-2-1 Zeiger“ auswählen

https://www.geogebra.org/m/ceu3jJeM




Mögliche Aufgaben:

1) Empfängerpunkt *E* verschieben und $\psi$- bzw. $\psi^2$-Verteilung betrachten
2) Punkte *Q* verschieben, danach *E* verschieben
3) Nah-/Fernfeld? Was sollte man im Unterricht zeigen?

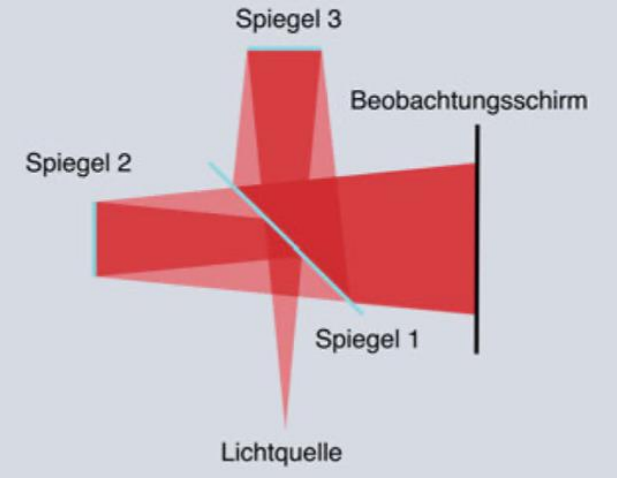
# Simulationen zur Quantenmechanik

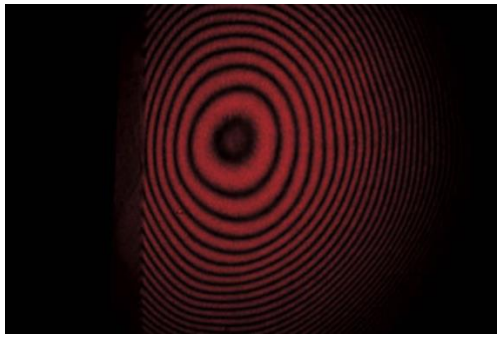
1.1b

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

## Zeigerformalismus

- Schirmbild eines Michelson-Interferometers
- Polarisationsfilter bestimmt Wahrscheinlichkeit, dass Photon durchgelassen wird (parallel -> WS = 1, senkrecht -> WS = 0
- Einbau von gekreuzten Polfiltern ermöglicht festzustellen, welchen Weg das Photon genommen hat („Welcher-Weg-Information“)
- Auslöschen dieser Information durch 45° Polfilter führt wieder zu Interferenz



Ohne Polfilter



Mit gekreuzten Polfiltern



Mit 45° Polfilter vor dem Schirm

# Simulationen zur Quantenmechanik

## Zeigerformalismus

1.1b

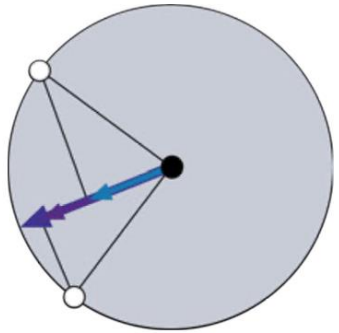
Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

1.2

- erläutern unter Verwendung von Zeigerdiagrammen die Änderung der Ergebnisse von Interferenzexperimenten durch Löschen einer bereits vorhandenen Weginformation am Beispiel Quantenradierer.

Polarisationsfilter:

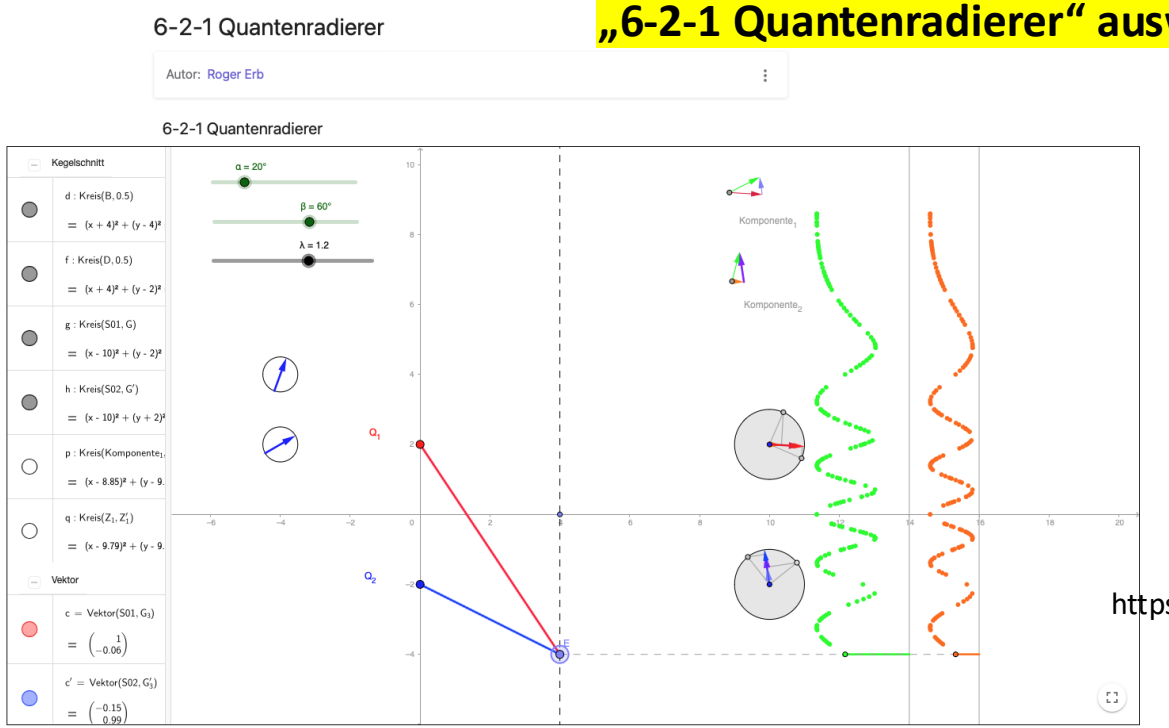
- Jeder Zeiger wird in zwei zueinander senkrechte Komponenten zerlegt
- Projektion der Anteile in der Zeigerdarstellung
- Zeiger zeigt nun gleichzeitig die Polarisation und die Raumrichtung des Feldvektors
- Am Ende Zeigeraddition doppelt (für jede der zwei Komponenten)



Mögliche Aufgaben:

1) Mit Polfilter die „Welcher Weg – Information „aktivieren“
2) Was fehlt noch zum „Quantenradierer?“

**„6-2-1 Quantenradierer“ auswählen**




https://www.geogebra.org/m/ceu3jJeM

# Simulationen zur Quantenmechanik

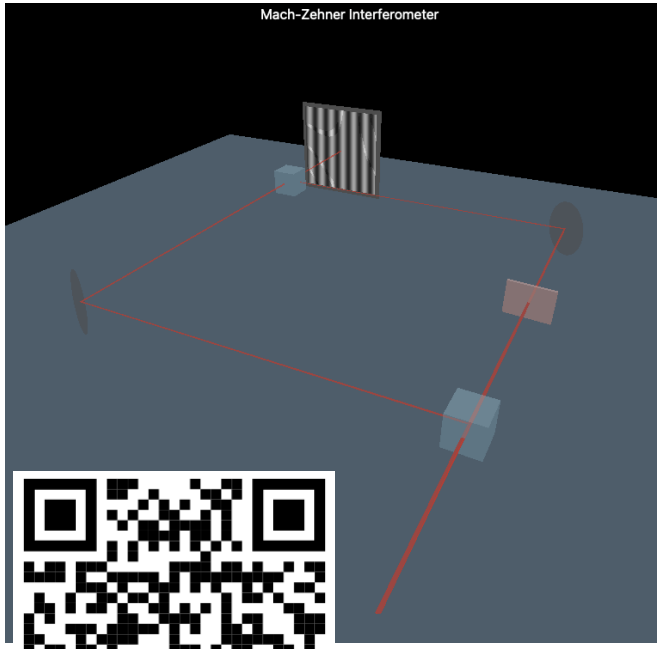
1.1c

## Mach-Zehnder-Interferometer

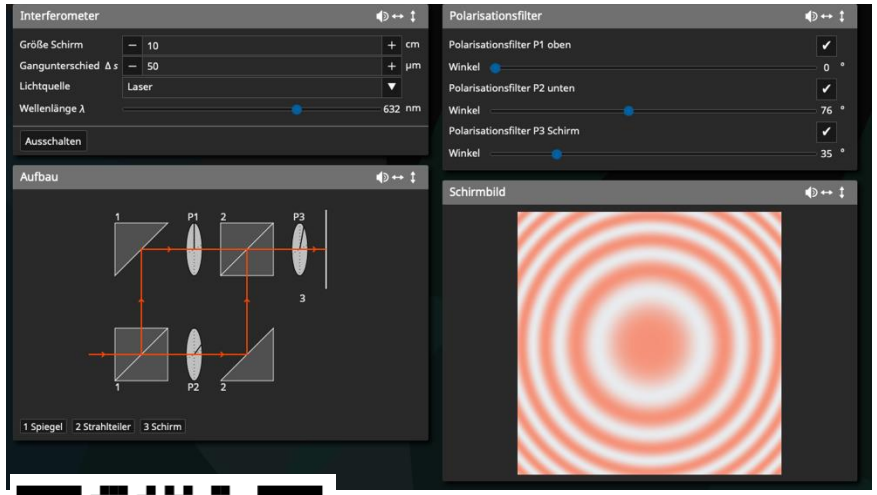
- identifizieren im simulierten Experiment mit einzelnen Photonen im Mach-Zehnder-Interferometer das Photon als Quantenobjekt. Sie beschreiben unter Verwendung der Fachsprache Aufbau und Durchführung dieses Interferenzexperiments und erläutern kausal korrekt strukturiert die Koinzidenzmethode zur Präparation einzelner Photonen. Sie erklären die Entstehung von Interferenzen durch Analyse der Phasenbeziehungen mit Zeigerdiagrammen.

Mögliche Aufgaben:

1) Warum ergibt sich einmal ein Streifen- und einmal ein Kreismuster?
2) In der Kippenberg-Simulation $\Delta s$ bzw. $\lambda$ verändern und Auswirkungen auf das Schirmbild diskutieren




https://estherlin.github.io/MachZehnder/

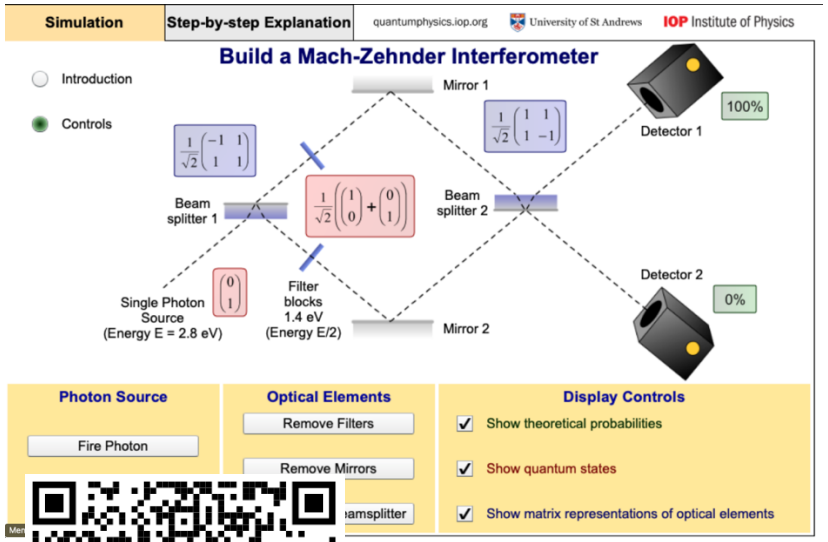



E

https://www.kippenbergs.de/de/mint-machzehnder

Mögliche Aufgaben:

1) An welchen Stellen ergibt sich ein Phasensprung?
2) Welche Funktion haben die „Filter blocks“?




https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_html5/sims/Mach-Zehnder-Interferometer/Mach_Zehnder_Interferometer.html

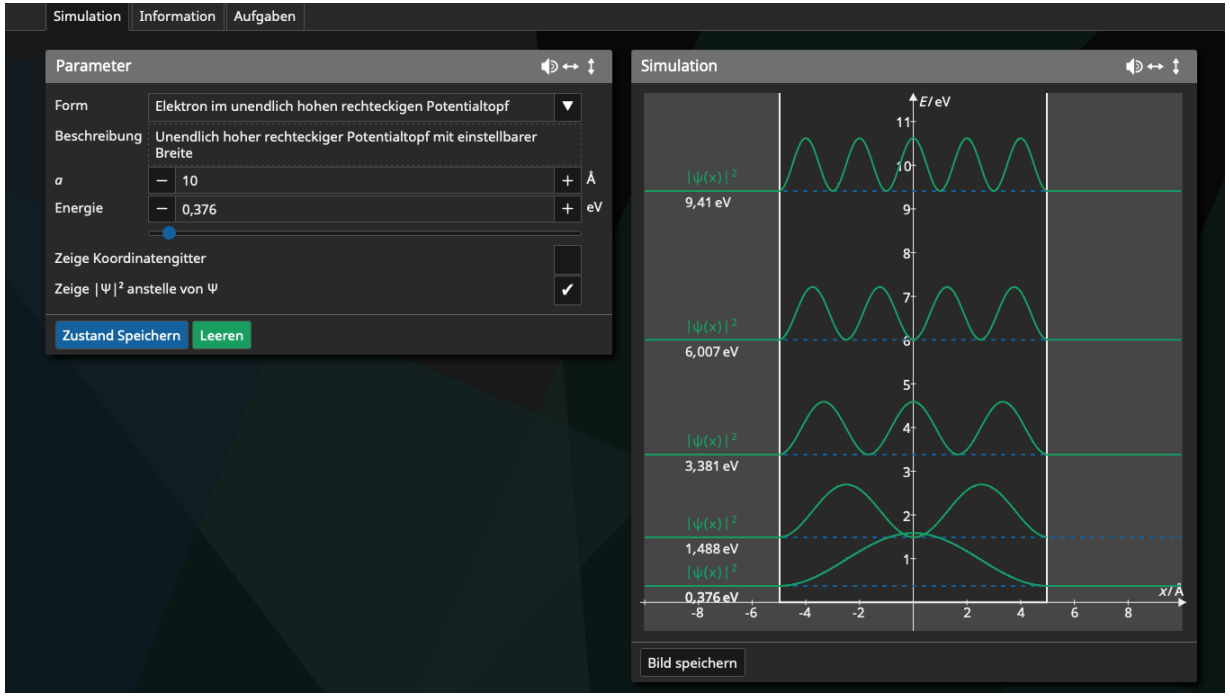
# Simulationen zur Quantenmechanik

## 1-D Potentialtopf („Schrödingers Schlange“)

2a

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

- verwenden das Modell des eindimensionalen Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden, um grundlegende Eigenschaften eines Systems mit räumlich eingeschränkten Elektronen zu beschreiben. Auf der Grundlage der Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung skizzieren sie die Wellenfunktionen sowie die zugehörigen Dichten der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und schließen auf diskrete Energieniveaus. Zur Lage dieser Energieniveaus stellen sie quantitative Betrachtungen an.




https://www.kippenbergs.de/de/mint-schroedinger

$$E_n = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

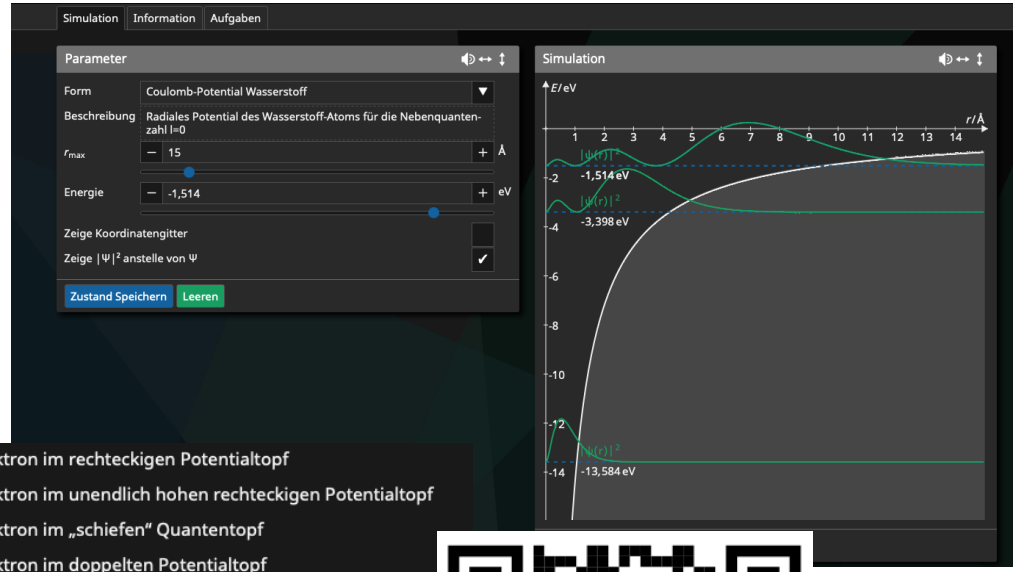
# Simulationen zur Quantenmechanik

## Verschiedene Potentialverläufe

2b

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

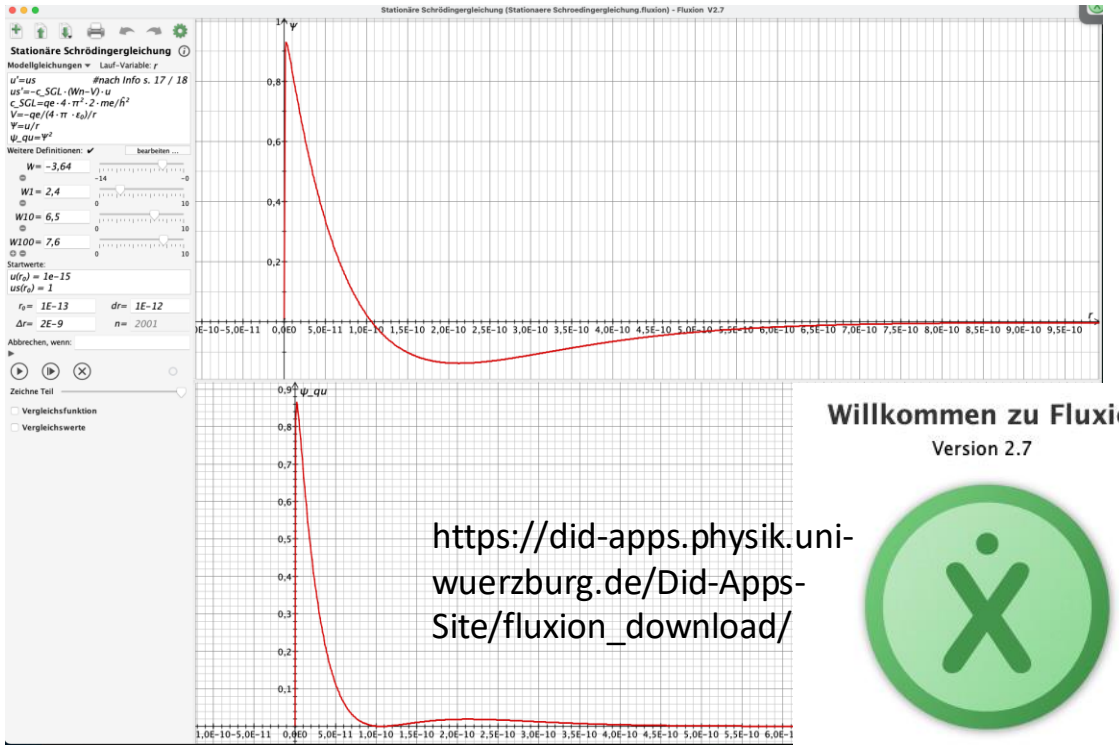
- erkunden mithilfe digitaler Simulationen für weitere einfache Potentialverläufe die Form der Wellenfunktionen sowie die Lage der Energieniveaus. Hierbei machen sie auch das Zustandekommen der Atombindung plausibel.




https://www.kippenbergs.de/de/mint-schroedinger

Mögliche Aufgaben:

1) Finden Sie Energieeigenwerte für verschiedene Potentiale
2) Z.B. $E \sim \frac{1}{n^2}$ (für Coulomb) bzw. $E \sim n^2$ (für ∞ Pot.Topf) verifizieren




Willkommen zu Fluxion
Version 2.7

https://did-apps.physik.uni-wuerzburg.de/Did-Apps-Site/fluxion_download/

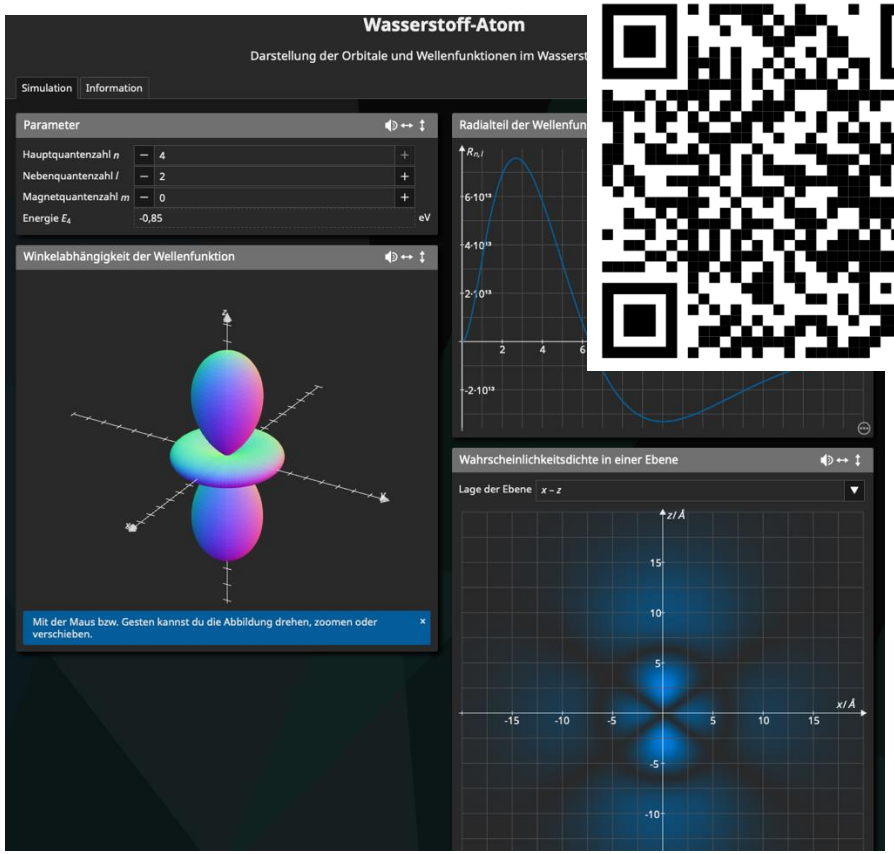
# Simulationen zur Quantenmechanik

## 3-dim Orbitale Wasserstoffatom

2c

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

- erweitern die Betrachtungen von eindimensionalen Orbitalen auf drei Dimensionen, auch mithilfe von mechanischen Analogien und digitalen Simulationen. Sie beschreiben den Zusammenhang zwischen Quantenzahlen und Struktur der Orbitale am Beispiel des Wasserstoffatoms und entnehmen der Simulation die Energiewerte des Wasserstoffatoms.

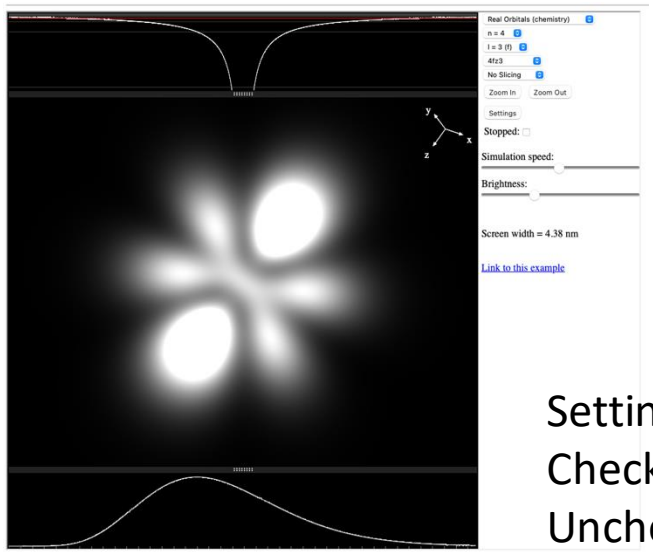



https://www.kippenbergs.de/de/mint-hydrogen

Mögliche Aufgaben:

1) Quantenzahlen variieren. Welche Darstellung hängt von welcher QZ ab?
2) Wie ist der „Radialteil der Wellenfunktion“ zu interpretieren?

http://www.falstad.com/qmatom/



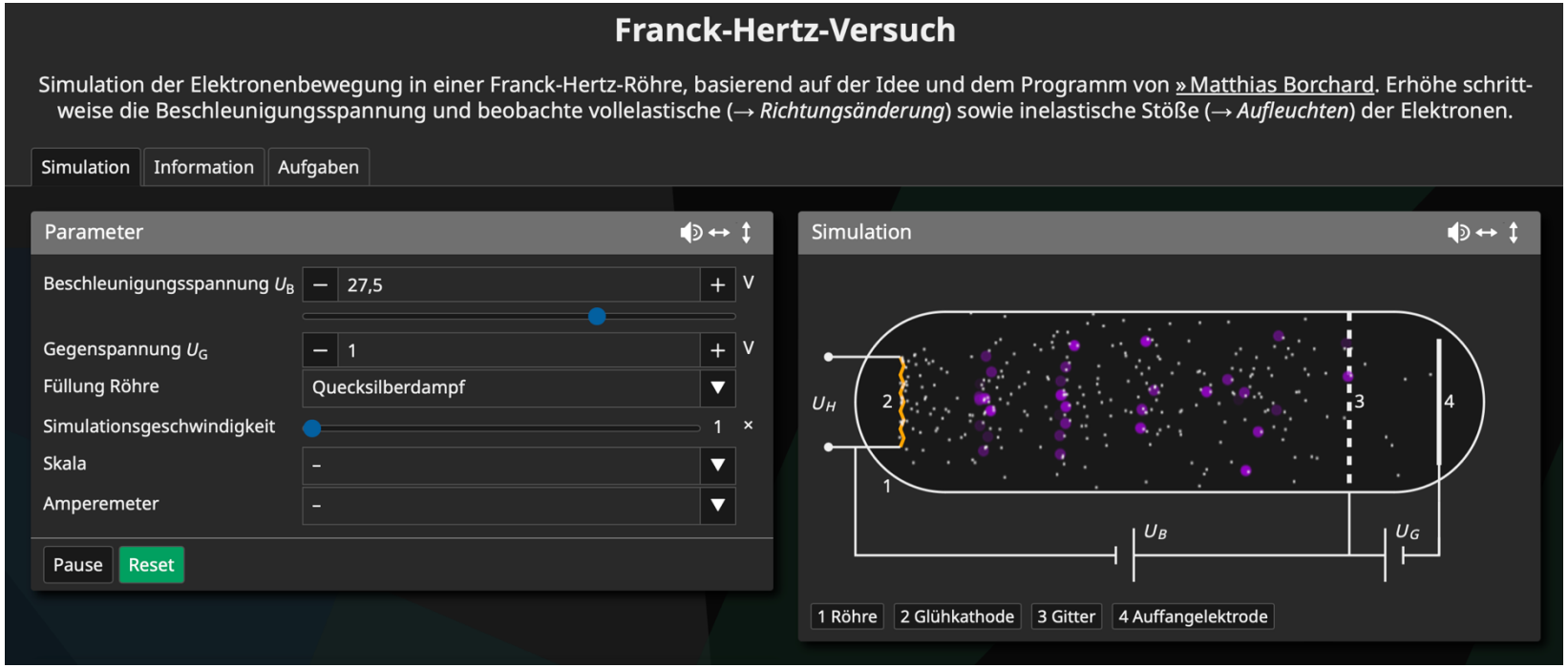

Settings:
Check: View radial distribution
Uncheck: View phase as color

# Simulationen zur Quantenmechanik

## Frank-Hertz-Versuch

2d

- erläutern die Funktion der Komponenten des Aufbaus sowie die Durchführung und die Auswertung des Franck-Hertz-Versuchs. Dabei formulieren sie unter Verwendung der Fachsprache kausal und chronologisch korrekt strukturiert. Sie erläutern die grundlegenden Unterschiede zwischen einer Anregung durch Photonenabsorption und durch Elektronenstöße.




E

https://www.kippenbergs.de/de/mint-franckhertz

# Simulationen zur Quantenmechanik

Lehrstuhl für Physik und ihre Didaktik

https://www.katzeq.app




Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit !

Kontakt:
Dr. Christoph Stolzenberger
christoph.stolzenberger@uni-wuerzburg.de

ct.qmat Complexity and Topology in Quantum Matter
Universität Würzburg
Technische Universität Dresden
gefördert durch
Bundesministerium für Bildung und Forschung
Research in Germany Land of Ideas