

Quantentheorie II

Prof. Klaus Richter

Dr. Andrea Donarini

Blatt 8

1. Wechselwirkendes Bose-Einstein-Kondensat

Gegeben seien N identische bosonische Atome mit der Masse m in einem dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillatorpotential mit Frequenz ω . Die Zweiteilchen-Wechselwirkung zwischen den Atomen werde durch ein Kontaktpotential der Form $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ approximiert.

- a) • Berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Systems für kleine U_0 mit Störungstheorie erster Ordnung. (3 Punkte)
- b) In der “mean field” Näherung für $N \gg 1$ nimmt man an, dass sich alle Atome im gleichen Einteilchenzustand $\phi(\vec{r})$ befinden (Hartree-Ansatz), und definiert die “Kondensatswellenfunktion” durch $\psi(\vec{r}) := \sqrt{N} \phi(\vec{r})$. Zeigen Sie, dass ein Variationsansatz für den Grundzustand, bei dem der Erwartungswert der Gesamtenergie $\mathcal{H}[\psi]$ unter der Nebenbedingung $\mathcal{N}[\psi] := \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r = N$ minimiert wird, auf die “Gross-Pitaevskii-Gleichung”

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) + U_0 |\psi(\vec{r})|^2 \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r})$$

führt. Dabei bezeichnen $V(\vec{r})$ das externe harmonische Oszillatorpotential und μ das “chemische Potential” des Kondensats, welches als Lagrange-Parameter gemäß der Bedingung

$$\frac{\delta}{\delta \psi^*} [\mathcal{H}[\psi] - \mu (\mathcal{N}[\psi] - N)] = 0$$

in das Variationsproblem eingeführt wird (und die Energie angibt, die ein einzelnes Atom aufweist, das dem Kondensat entnommen wird).

- c) • In der “Thomas-Fermi-Näherung” wird der kinetische Term in der Gross-Pitaevskii-Gleichung für sehr große repulsive Wechselwirkungsstärken U_0 vernachlässigt. Wir erhalten somit (zusätzlich zur Normierungsbedingung für ψ) die Gleichung

$$V(\vec{r}) + U_0 |\psi(\vec{r})|^2 = \mu$$

in dem Raumbereich, in dem $\mu > V(\vec{r})$ ist, sowie $\psi(\vec{r}) = 0$ außerhalb dieses Raumbereichs. Bestimmen Sie mit dieser Näherung, wie die Gesamtenergie bzw. das chemische Potential μ mit der Teilchenzahl N variieren. (3 Punkte)

2. Heliumatom

Der Hamiltonoperator zweier Elektronen, die sich im Coulombfeld eines Kerns der Ladung Z bewegen, laute $H = H_0 + H_1$ mit

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1 + \Delta_2) - Ze^2 \left(\frac{1}{|\vec{x}_1|} + \frac{1}{|\vec{x}_2|} \right)$$

und

$$H_1 = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}.$$

- a) • Berechnen Sie in 1. Ordnung Störungstheorie die Grundzustandsenergie, indem Sie den Zustand 0-ter Ordnung ansetzen als

$$\psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp \left[-\frac{Z(|\vec{x}_1| + |\vec{x}_2|)}{a_0} \right]$$

Hinweis: Verwenden Sie die Multipol-Entwicklung:

$$\frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \phi_2),$$

wo $r_{<} = \min(|\vec{x}_1|, |\vec{x}_2|)$ und $r_{>} = \max(|\vec{x}_1|, |\vec{x}_2|)$ und $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ die Kugelflächenfunktionen sind. (3 Punkte)

- b) Berechnen Sie die Grundzustandsenergie auch näherungsweise durch Minimierung des Funktionals $E(\beta) = \langle \psi_{\beta} | H | \psi_{\beta} \rangle$ mit der Versuchsfunktion

$$\psi_{\beta}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{\beta^3}{\pi a_0^3} \exp \left[-\frac{\beta(|\vec{x}_1| + |\vec{x}_2|)}{a_0} \right].$$

Vergleichen Sie beide Ergebnisse für verschiedene Werte von Z ($Z = 1, \dots, 6$).

Frohes Schaffen!