

Übung 1. [*Wasserstoffmolekül*]

Ähnlich wie beim Helium Atom existiert auch für das Wasserstoffmolekül ein Ortho- und ein Para-Zustand. Im Ortho-Zustand ist die Spin-Wellenfunktion der zwei Kerne symmetrisch, im Para-Zustand ist sie antisymmetrisch. Die interne Bewegung kann durch die eines starren Rotators dargestellt werden, dessen Eigenfunktionen die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} sind. Die entsprechenden Eigenwerte sind $l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$, wobei I das Trägheitsmoment des Moleküls um die Achse ist, die durch den Massenmittelpunkt geht und senkrecht zur Verbindungsachse der zwei Kerne steht.

- (a) Zeige, dass in einer Gleichgewichtsmischung von leichtem Wasserstoff bei der Temperatur T das Verhältnis zwischen der Anzahl Para-Zustände n_p und der Anzahl Ortho-Zustände n_o durch

$$\frac{n_p}{n_o} = \frac{1}{3} \frac{\sum_{l \text{ gerade}} (2l+1) e^{-l(l+1)x}}{\sum_{l \text{ ungerade}} (2l+1) e^{-l(l+1)x}}$$

gegeben ist, wobei $x = \frac{\hbar^2}{2I} \frac{1}{k_B T}$ und k_B die Boltzmann Konstante ist.

- (b) Bei einer Temperatur von 20.0 K besteht eine Gleichgewichtsmischung von leichtem Wasserstoff zu 99.83% aus Para-Zuständen. Wie gross ist die Entfernung der zwei Kerne im Molekül?
- (c) Angenommen, dass die Entfernung der Kerne bei leichtem und schwerem Wasserstoff gleich ist, finde der Prozentsatz an Ortho-Zuständen in einer Gleichgewichtsmischung von schwerem Wasserstoff bei derselben Temperatur ($T = 20.0 \text{ K}$).

Mit leichtem und schwerem Wasserstoff ist Wasserstoff bzw. Deuterium gemeint. Die Deuteriummasse m_d ist in guter Näherung $2m_p$.

Übung 2. [*Profil einer BEC-Wellenfunktion in einem harmonischen Potential ($d = 3$)*]

In dieser Aufgabe werden wir sehen, wie die Vielteilchen-Wellenfunktion eines Bose-Einstein-Kondensats (engl. "Bose-Einstein condensate" oder "BEC") mittels einer Molekularfeldtheorie beschrieben werden kann. Dies wird uns erlauben, das räumliche Profil der Wellenfunktion in Gegenwart einer Falle zu approximieren.

In einem vollständig kondensierten Zustand werden alle Bosonen den gleichen Einteilchen-Zustand $\phi(\vec{r})$ besetzen, *d.h.*:

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{j=1}^N \phi(\vec{r}_j) \quad \text{mit} \quad \int d^3r |\phi(\vec{r})|^2 = 1, \quad (1)$$

ist der N -Teilchen-Grundzustand. Der effektive Hamilton-Operator

$$H = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\vec{p}_j^2}{2m} + V(\vec{r}_j) \right) + U_0 \sum_{i < j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2)$$

kann benutzt werden, um räumliche Schwankungen zu untersuchen. Der erste Term beschreibt dabei freie Teilchen in einem externen Potential $V(\vec{r})$ und der zweite führt eine harte Repulsion kurzer Reichweite mit Stärke U_0 unter den Bosonen (z.B. ^{85}Rb Atomen) ein.

- (a) Wir führen die Grösse $\psi(\vec{r}) := \sqrt{N} \phi(\vec{r})$ ein. Zeige, dass die Energie des Zustandes Ψ bzgl. H

$$E[\psi] = \int d^3r \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\vec{r})|^2 + V(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi(\vec{r})|^4 \right) + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (3)$$

ist.

- (b) Die exakte Grundzustandswellenfunktion muss das Energiefunktional $E[\psi]$ minimieren. Zeige, dass die Minimierung $\delta E - \mu \delta N = 0$, unter der Einschränkung konstanter Teilchenzahl N , die *Gross-Pitaevskii-Gleichung*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + U_0 |\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) \quad (4)$$

liefert. Für eine abstossende Wechselwirkung und grosses N erwarten wir zudem, dass der kinetische Term in Gl. (4) vernachlässigbar klein wird (*Thomas-Fermi approximation*). Ermittle die allgemeine Lösung für $n(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ in diesem Fall.