

# Quantenmechanik II<sup>1</sup>

Prof. Blatter, FS 2020  
21. August

**Zusammenfassung** Seminarraum im HIT, Prof. Blatter und Beisitzer mit Maske (Corona). Prüfung findet an Wandtafel statt, Beisitzer und Prof. Blatter sitzen in zweiter Reihe. Fenster war geöffnet, laut sprechen sicherlich von Vorteil, trug zudem selber eine Maske. Prüfungssprache: Schweizerdeutsch.

Inhaltliche Beschreibung: (13.6.6, 14.1.2, 15.1, 15.3, 16.5.3, 16.6, 16.7, 16.8, 19.4, 21.1, 22.1, 23.2).<sup>2</sup>

**Ablauf** Warte vor dem Seminarraum, Prof. Blatter öffnet die Tür mit grossem Abstand. Werde aufgefordert eine Kreide (nur weisse, keine Farben) zu nehmen ohne die anderen anzufassen und meinen Namen an die Tafel zu schreiben.

**Prof:** Wann waren Sie zuletzt an einer Party?

**Ich:** Komme gerade von einer. *Beisitzer lacht, Prof. Blatter fand es nicht lustig.*

**Prof:** Sie erzählen mir jetzt etwas über Moleküle und das Wasserstoffmolekül.

**Ich:** Wir haben in der Vorlesung die Born-Oppenheimer Approximation angeschaut. *Schreibe Hamiltonian auf*

$$H = T_e + T_K + V_{ee} + V_{eK} + V_{KK}, \quad (1)$$

wobei wir die Abschätzung (*vertausche zuerst m und M, Prof. Blatter korrigiert mich sofort*)

$$\frac{m}{M} \sim 10^{-4} - 10^{-5} \quad (2)$$

benutzt haben, um  $T_K$  im ersten Schritt zu vernachlässigen. Damit verliert  $\mathbf{R}$  die Dynamik und wir können das elektronische Problem lösen:

$$[T_e + V_{ee} + V_{eK}]\Psi = [\epsilon - V_{KK}]\Psi \quad (3)$$

**Prof:** Was ist die Lösung für das elektronische Problem beim Wasserstoff?

**Ich:** Wir haben folgende zwei Ansätze angeschaut (*Schreibe zu Beginn noch die falsche Normierung auf, Blatter korrigiert.*)

$$\Psi_s^M = \phi_+(\mathbf{r}_1)\phi_+(\mathbf{r}_2)\chi_s \quad (4)$$

$$\Psi_s^M = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_+(\mathbf{r}_1)\phi_-(\mathbf{r}_2) - \phi_+(\mathbf{r}_2)\phi_-(\mathbf{r}_1)]\chi_t \quad (5)$$

<sup>1</sup>BSc Physik, Kernfach

<sup>2</sup>Die Kapitelnummern beziehen sich auf das Skript .

und

$$\Psi_s^V = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} [\phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) + \phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1)] \chi_s \quad (6)$$

$$\Psi_t^V = \frac{1}{\sqrt{2(1-S^2)}} [\phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) - \phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1)] \chi_t, \quad (7)$$

mit  $S = \int d\mathbf{r} \phi_A \phi_B$ .

**Prof:** Was sind diese  $\phi$  ?

**Ich:**

$$\phi_X = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_B^3}} e^{-\frac{|r-R_X|}{a_B}} \quad (8)$$

1-s Wasserstoff Wellenfunktion. Damit können wir Grenzwerte betrachten...

**Prof:** Interessiert mich nicht.

**Ich:** Dann machen wir weiter mit der Born-Approximation.

**Prof:** Sie haben das elektronische Problem noch nicht gelöst.

**Ich:** *Wusste zu Beginn nicht was er genau noch hören wollte. Wurde irgendwann klar dass ihn irgendetwas mit Energien interessierte.* Man benutzt Rayleigh-Ritz um die Energie im Grundzustand abzuschätzen:

$$\epsilon_{\pm}(R) = \frac{\langle AB | H | AB \rangle \pm \langle AB | H | BA \rangle}{1 \pm S^2}, \quad (9)$$

welches den folgenden Graphen ergibt.

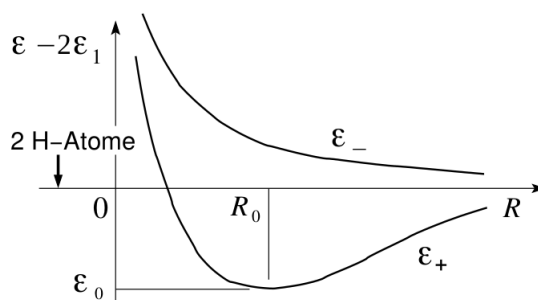


Abbildung 1: Abb: 15.6 im Skript. Detaillierte Achsenbeschriftung habe ich weggelassen, lediglich Energie-Abstand.

**Prof:** Welcher bindet? Bei welchen Grössen?

**Ich:** *Erkläre, dass  $\epsilon_+$  bindet.* Angstrom, Elektronenvolt.

**Prof:** Weiss den smoothen Themenübergang im Wortlaut nicht mehr, er wollte aber etwas vom Fermigas im Grundzustand hören.

**Ich:**

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (10)$$

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger |0\rangle \quad (11)$$

$$n_{\mathbf{k}, \sigma} = \begin{cases} 1 & |\mathbf{k}| \leq k_F \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (12)$$

Dabei sieht man in  $n_{\mathbf{k}, \sigma}$  das Pauli-Prinzip, welches nur ein Fermion in einem Zustand zulässt.

**Prof:** Was ist  $k_F$ ?

**Ich:** Entspricht dem Wellenvektor für die Fermienergie, welche die obere Grenze ist der Energiezustände bei  $T = 0$  für Fermionen.

**Prof:** In Formeln?

**Ich:**

$$k_F^3 = 3\pi^2 n \quad (13)$$

**Prof:** Wie beschreiben Sie die Wechselwirkung?

**Ich:**

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{s'}(\mathbf{r}') \Psi_s(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Vergesse zu Beginn noch den Faktor  $1/2$ , Prof. Blatter sagte mir ich hätte zu viel gezählt, worauf ich den Faktor dann bemerkte.

**Prof:** Was sind die Energien?

**Ich:** Beginne das Integral für die kinetische Energie aufzustellen

**Prof:** Bitte einfach das Resultat.

**Ich:**

$$\langle T \rangle = \frac{3}{5} N \epsilon_F \quad (15)$$

Die Potentielle Energie ergibt zwei Terme wobei der erste verschwindet wegen positiv geladenem Hintergrund...

**Prof:** Was kommt in der Rechnung vor?

**Ich:**

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 + \left(\frac{n}{2}\right)^2(1 - g_s^2) \quad (16)$$

Der Graph dazu:

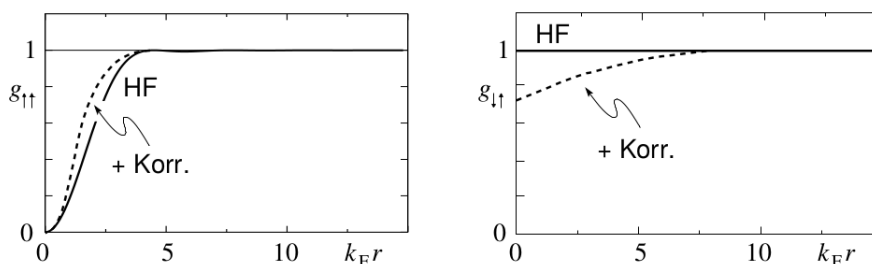


Abbildung 2: Abb. 16.5 im Skript.

**Prof:** Wie heisst dieses Ding?

**Ich:** Paarkorrelator.

**Prof:** Und was ist jetzt die Energie?

**Ich:** Wie erwähnt gibt es zwei Terme, wobei der  $E_H$  die Hartree Energie verschwindet und

$$E_{exc} = -\frac{3}{4\pi} N e^2 k_F. \quad (17)$$

*Es dauerte ein bisschen bis ich mich an diese Formel erinnern konnte. Ich hatte zu Beginn noch die Feinstrukturkonstante  $\alpha$  drin, worauf Prof. Blatter ein lautes "Nein!" von sich gab. Danach war noch die 3 und 4 vertauscht.*

**Prof:** Wieso minus?

**Ich:** (*Unsicher*) Ja Fermionen mögen sich ja nicht so sehr wegen Pauli.

**Prof:** Was sind die resultierenden Wellenfunktionen? Was waren die Annahmen und Randbedingungen in Hartree-Fock?

**Ich:** *Hatte die Frage schon nicht verstanden und von der Lösung dementsprechend keine Ahnung. Er kam dann auf das Potential  $U$  in Hartree-Fock zu sprechen, welches in diesem Fall verschwindet. Dann wiederholte er die Frage. Ja, Slaterdeterminante mit ebenen Wellen und Spin ist die Lösung.*

**Prof:** Wieso ebene Wellen?

**Ich:** Ja, weil das externe Potential verschwindet.

**Prof:** Was passiert jetzt bei höheren Temperaturen? Bitte für Bosonen und Fermionen.

**Ich:** Für Bosonen

$$Z = \prod_{\mathbf{p}} \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_p}} \quad (18)$$

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \log(1 - z) \quad (19)$$

$$n = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z} \quad (20)$$

(Habe zu Beginn noch  $z$  in  $Z$  vergessen, falsches Vorzeichen in  $p$  und im Logarithmus.) Für Fermionen:

$$Z = \prod_{\mathbf{p}} (1 + ze^{-\beta\epsilon_p}) \quad (21)$$

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \quad (22)$$

$$n = \frac{1}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (23)$$

**Prof:** Wie kommen Sie auf  $n$ ?

**Ich:** Das kommt aus der TdW. (Wollte der Frage ausweichen, weil ich die Formel nicht mehr wusste.)

**Prof:** Nein, das hat nichts mit Thermodynamik zu tun.

**Ich:** Es war Teil der statistischen Physik, welche wir in der TdW behandelt haben.

**Prof:** Betont: Statistische Physik. Was machen Sie damit?

**Ich:** Ja wir haben das im Grosskanonische Ensemble beschrieben.

$$\Omega = -pV = -k_B T \log(Z) \quad (24)$$

(Hoffte auf ein  $N$  irgendwo hier. Dann fiel mir plötzlich die Formel ungefähr wieder ein. Man kann dann

$$N = z \partial_z \log(Z) \quad (25)$$

bilden. (Hatte vorerst noch  $1/z$  geschrieben.)

**Prof:** Erzählen Sie mir was von diesem Übergang bei Bosonen.

**Ich:** Wir analysieren mal  $n$ . Zeichne Abbildung 3.

Dabei schauen wir den Limes an für  $V \rightarrow \infty$ , wobei  $\frac{z}{1-z}$  keinen Beitrag gibt für  $z \neq 1$ . Weiter kann man  $\langle n_0 \rangle$  betrachten (Vorzeichenfehler, welcher Prof. Blatter korrigierte).

$$\langle n_0 \rangle = \frac{V}{\lambda^3} (n\lambda^3 - n_{BE}\lambda^3) \propto V \quad (26)$$

$$\left[ \frac{v}{mp} \right]$$

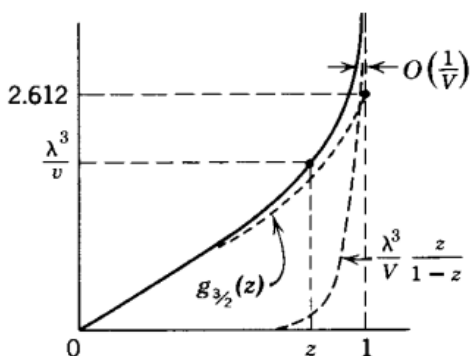


Abbildung 3: Fig.12.4 aus Kerson Huang - Statistical Mechanics.

Dies nennt man MQP (Macroscopic Quantum Phenomena). Über  $n_{BE}$  wird auch die kritische Temperatur definiert und die allgemeine Bedingung für Bose-Einstein Kondensation ist gegeben durch

$$n\lambda^3 = 2.612 \quad \text{wobei} \quad (27)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (28)$$

Damit kann man  $p$  studieren (*Wollte zu Beginn den Druck für  $z$  klein anschauen, wobei er meinte, dies interessiere ihn nicht.*)

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} 1.342 \propto T^{5/2} \quad (29)$$

Dies sieht folgendermassen aus (Abbildung 4): Wichtig ist zu bemerken, dass dieser Teil (verbotene

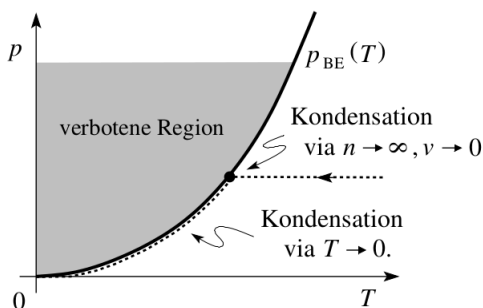


Abbildung 4: Abb. 23.7 aus Skript. Hatte etwas weniger Details aufgezeichnet wie hier gezeigt.

Region) nicht physikalisch ist und der Zustand entlang der Kondensationslinie geht.

**Prof:** Schreiben Sie mir bitte noch die Formel für die Emissionsrate auf.

**Ich:**

$$W_{ab}^{em,abs} = \frac{4}{3} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} |r_{ab}|^2 \begin{pmatrix} n_k + 1 \\ n_k \end{pmatrix} \quad (30)$$

**Prof:** Vielen Dank.

**Bemerkungen** Stimmung war immer angenehm, Prof. Blatter war gut gelaunt und hilft sofort bei kleinen Fehlern. Er hat am Ende des Semester klar kommuniziert was er an der Prüfung erwartet. Prüfungsmodus war ein spontaner Dialog. Am besten bereitet man sich vor, indem kleinere Vorträge eingeübt werden zu relevanten Themen. Die Serien habe ich nicht angeschaut. Das Skript orientiert sich stark an die angegebene Literatur. Habe hauptsächlich mit diesen drei Büchern gelernt: Baym - Lectures on Quantum Mechanics (sehr ähnlich zum Skript), Huang - Statistical Mechanics und zudem Ashcroft/Mermin - Solid State Physics (ist nicht auf der Liste, war aber hilfreich für Thomas-Fermi und Hartree Fock). Dieses Prüfungsprotokoll dient lediglich zur Orientierung wie eine Prüfung ablaufen kann und welche Themen wichtig sind (keine Garantie auf Vollständigkeit und Korrektheit).

**Erhaltene Note: 6**

**Erwartete Note: 5.5**