Opgaven bij het college Kwantummechanica 3
Week 10

Opgave 20: **Statistische spreiding in de kwantummechanische distributies**

Beschouw een grootkanoniek ensemble waarvan de systemen bestaan uit een groot aantal niet-interagerende identieke deeltjes, zoals beschreven in § 2.6 van het collegedictaat. Daar is een afleiding gegeven van de kwantummechanische distributies van de gemiddelde bezettingsgetallen $[\hat{n}_k] = \bar{n}_k$ bij de volledig gespecificeerde 1-deeltjes energieniveaus E_k. We gaan nu de bijbehorende statistische spreiding bepalen. Gebruik hiertoe de identiteit

$$\hat{\rho}\,\hat{a}_k^\dagger \;=\; \exp(-\beta E_k - \alpha)\,\hat{a}_k^\dagger\,\hat{\rho}$$

voor de grootkanonieke dichtheidsoperator $\hat{\rho}$, alsmede de uitdrukkingen

$$\exp(\beta E_k + \alpha) \;=\; 1/\bar{n}_k \pm 1$$

voor de distributies, waarbij het bovenste (onderste) teken voor bosonen (fermionen) geldt.

(i) Leid de volgende ensemblegemiddelden af:

$$[\hat{n}_k\,\hat{n}_{j\neq k}] \;=\; \bar{n}_k\bar{n}_j \qquad \text{en} \qquad [\hat{n}_k^2] = \bar{n}_k\,(\bar{n}_k + 1 \pm \bar{n}_k)\;,$$

waarbij wederom het bovenste (onderste) teken voor bosonen (fermionen) geldt.

(ii) Waarom was de fermionische variant van de laatste uitdrukking in onderdeel (i) feitelijk zonder extra berekening te voorspellen?

(iii) Laat aan de hand van de ensemblegemiddelden uit onderdeel (i) zien dat er binnen het grootkanoniek-ensembleconcept sprake is van statistische spreidingen

$$\Delta n_k \;\equiv\; \sqrt{[\hat{n}_k^2] - \bar{n}_k^2} \;=\; \sqrt{\bar{n}_k\,(1 \pm \bar{n}_k)} \qquad \text{en} \qquad \Delta N \;=\; \sqrt{\sum_k (\Delta n_k)^2}$$

rond de gemiddelde waarden $\bar{n}_k$ respectievelijk $\bar{N}$.

(iv) Bediscussieer wanneer de statistische spreiding in het totale aantal deeltjes van het systeem de gebruikelijke ordegrootte $\mathcal{O}(\sqrt{\bar{N}})$ heeft en wanneer niet.

Hint: bekijk hiertoe de klassieke limiet en de speciale, puur kwantummechanische situaties die bij voldoende lage temperaturen kunnen optreden.

Opgave 21: **Bose–Einstein condensatie of geen Bose–Einstein condensatie**

Beschouw een veeldeeltjessysteem bestaande uit een zeer groot, constant aantal N vrije identieke deeltjes met geheeltallige spin s. De deeltjes zitten opgesloten binnen een macroscopische d-dimensionale omsluiting met constante zijden L en ondoordringbare wanden, waarbij de dimensionaliteit d de waarden 1, 2 of 3 kan aannemen. Neem aan dat voor de bijbehorende gekwantiseerde 1-deeltjes energie-eigenwaarden het volgende geldt:

$$E_\nu \;=\; \text{constante} * (\hbar\pi\nu/L)^q \;>\; 0 \;, \qquad \text{met} \quad \nu \;\equiv\; \sqrt{\sum_{i=1}^{d} \nu_i^2} \qquad (\nu_{1,\cdots,d} = 1, 2, \cdots) \;.$$

De positieve macht q geeft hier aan dat de energie en impuls van het beschouwde type deeltje samenhangen volgens de machtswet $E \propto p^q$. Immers, tussen de d-dimensionale impulsen $\vec{p}$, golfvectoren $\vec{k}$ en kwantumgetallen $\vec{\nu}$ geldt het verband $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \hbar\pi\vec{\nu}/L$.

(i) Beredeneer dat het aantal 1-deeltjes energie-eigentoestanden met golfvector kleiner dan $k = \pi\nu/L$ in de continuümlimiet wordt gegeven door

$$N(k) \;\propto\; (2s+1)V_d k^d \;,$$

met $V_d = L^d$ het “volume” van de d-dimensionale omsluiting.

(ii) Leid de volgende uitdrukking af voor de bijbehorende 1-deeltjes toestandsdichtheid:

$$D(E) \;=\; (2s{+}1)CV_d E^{d/q-1} \qquad (C > 0 \text{ is een constante afhankelijk van } d \text{ en } q) \;.$$

Neem aan dat het systeem zich in thermisch evenwicht bevindt met een zeer groot warmtebad bij temperatuur $T = (k_{\rm B}\beta)^{-1}$. Beantwoord dan de volgende vragen.

(iii) Waarom is het in het algemeen in orde om hier het grootkanoniek-ensembleconcept te gebruiken ondanks het feit dat het aantal deeltjes constant is?

(iv) Laat zien dat het totale aantal deeltjes en de gemiddelde totale energie van het systeem als volgt te schrijven zijn:

$$\bar{N} \;=\; (2s{+}1)CV_d(k_{\rm B}T)^{d/q} \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{-1+d/q}}{\exp(x+\alpha)-1} \;\equiv\; N \;, \tag{1}$$

$$\bar{E}_{\rm tot} \;=\; (2s{+}1)CV_d(k_{\rm B}T)^{1+d/q} \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{d/q}}{\exp(x+\alpha)-1} \;, \tag{2}$$

en leg uit waarom α niet negatief kan zijn.

(v) Wat moet voor de integraal in vergelijking (1) gelden wil er Bose–Einstein condensatie kunnen optreden?

Uitdaging: laat zien dat er alleen voor $d > q$ Bose–Einstein condensatie mogelijk is.

(vi) Stel er is sprake van Bose–Einstein condensatie beneden de kritieke temperatuur T_0. Leg uit dat een fractie $(T/T_0)^{d/q}$ van de bosonen buiten het condensaat zit als $T < T_0$.