Opgaven bij het college Kwantummechanica 3
Week 11

Opgave 22: **ideale gassen opgesloten in een harmonische val**

Dit voorbeeld staat model voor de 3-dimensionale gassystemen waarvoor men Bose–Einstein condensatie heeft aangetoond

Beschouw een 3-dimensionaal veeldeeltjessysteem bestaande uit een zeer groot, constant aantal N niet-interagerende identieke spin-s deeltjes met massa m. De deeltjes zitten opgesloten in een harmonische val met potentiaal $V(x,y,z) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$. De bijbehorende ruimtelijke 1-deeltjes energie-eigenwaarden zijn dan

$$E_{\nu_x,\nu_y,\nu_z} \;=\; E_0 \,+\, \hbar\big(\nu_x\omega_x + \nu_y\omega_y + \nu_z\omega_z\big) \qquad (\nu_{x,y,z} \;=\; 0,1,2,\cdots)\;,$$

met E_0 en $\omega_{x,y,z}$ positieve reële constanten. Inclusief spin heeft de toestandsdichtheid van 1-deeltjes kwantumtoestanden bij energie E daarmee de volgende delta-functie vorm:

$$D(E) \;=\; (2s+1)\sum_{\nu_x=0}^{\infty}\sum_{\nu_y=0}^{\infty}\sum_{\nu_z=0}^{\infty}\delta(E - E_{\nu_x,\nu_y,\nu_z})\;.$$

(i) Als het aantal bezette toestanden groot genoeg is kunnen deze sommen worden vervangen door integralen (continuümlimiet). Leid aan de hand daarvan af dat de volledig gespecificeerde toestandsdichtheid in de continuümlimiet wordt gegeven door

$$\begin{aligned} D(E) \;&\equiv\; (2s+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}\nu_x\int_0^{\infty}\mathrm{d}\nu_y\int_0^{\infty}\mathrm{d}\nu_z\;\delta(E - E_{\nu_x,\nu_y,\nu_z}) \\ &=\; \begin{cases} \dfrac{2s+1}{2\hbar^3\bar{\omega}^3}\,(E-E_0)^2 & \text{als} \quad E \geq E_0 \\[2ex] 0 & \text{als} \quad E < E_0 \end{cases} \;, \qquad \text{met} \quad \bar{\omega} \;=\; (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}. \end{aligned}$$

De hoeveelheid energie $E - E_0$ dat een deeltje meer heeft dan de nulpuntsenergie E_0 noemen we kortweg de excitatie-energie van het deeltje. Neem aan dat het systeem zich in thermisch evenwicht bevindt met een zeer groot warmtebad bij temperatuur $T = (k_{\mathrm{B}}\beta)^{-1}$. In tegenstelling tot het geval van deeltjes in een doosje speelt het volume V hier geen enkele rol bij de bepaling van het energie-eigenwaardenspectrum van het systeem. Derhalve kan het volume volledig buiten de beschouwing worden gelaten en kan er gewoon gebruik worden gemaakt van de kanonieke en grootkanonieke ensembles die in het collegedictaat zijn afgeleid. Gebruik nu het grootkanoniek-ensembleconcept om de volgende vragen te beantwoorden.

Scenario 1: de deeltjes hebben $s = 1/2$ en voor de temperatuur geldt dat $T = 0$.

(ii) Bepaal de maximale waarde voor de excitatie-energie $E - E_0$ van zo'n deeltje.

(iii) Toon aan dat de gemiddelde excitatie-energie per deeltje een fractie $3/4$ hiervan is.

Scenario 2: de deeltjes hebben $s = 0$ en gegeven is dat $\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^2/[\exp(x) - 1] \,=\, 2.404$.

(iv) Stel dat voor de temperatuur geldt dat $k_{\mathrm{B}}T > \hbar\bar{\omega}\,\big(N/1.202\big)^{1/3}$. Laat dan zien dat het totale aantal deeltjes te schrijven is als

$$\bar{N} \;=\; \frac{1}{2}\Big(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\Big)^3 \int\limits_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x^2}{\exp(x + \alpha + \beta E_0) - 1} \;\equiv\; N$$

en leg uit waarom $\alpha > -\,\beta E_0$.

(v) Stel dat voor de temperatuur geldt dat $k_{\mathrm{B}}T < \hbar\bar{\omega}\,\big(N/1.202\big)^{1/3}$.

– Welk kwantummechanisch fenomeen treedt nu op?

– Leg uit wat je nu weet over α en bepaal de fractie deeltjes met 1-deeltjesenergie E_0.

Experimentele realisatie van Bose−Einstein condensaten: *het realiseren van een Bose−Einstein condensaat in een nagenoeg ideaal gas heeft ongeveer 70 jaar op zich laten wachten. Het probleem zat in het koelen van zo'n gas zonder dat daarbij een vloeistof of vaste stof zou ontstaan en zonder dat er daarbij molecuulvorming zou optreden. Om dit te realiseren moesten verdunde, neutrale gassen worden gebruikt, die geen contact hadden met wanden om vastvriezen te voorkomen. Verder moest het verdunde gas gekoeld worden tot extreem lage temperaturen zonder fysiek contact met de buitenwereld. Hiertoe werd het gas in een magneto-optische val (harmonische val) opgesloten en met behulp van laserkoeling en "evaporative cooling" tot het nanokelvin bereik afgekoeld (zie § 5.3 van het college Kwantummechanica 2 voor een beschrijving). Uiteindelijk ontstaat dan een veeldeeltjessysteem van het bovenstaande type.*

Bose−Einstein condensatie voor fotonen (groepsuitdaging): *beschouw nu het fotongas binnen de microresonator van opgave 15, waarvoor geldt dat $D(E) \propto E - E_0$. Beredeneer welke twee door de perfect reflecterende spiegels veroorzaakte aspecten van dit fotongas de vorming van een Bose−Einstein condensaat mogelijk maken.*

<u>Opgave 23</u>: Klein−Gordon vergelijking versus waarschijnlijkheidsinterpretatie

De reden waarom de Klein−Gordon theorie ongeschikt is als 1-deeltjes QM

Beschouw de vlakke-golf oplossingen van de Klein−Gordon vergelijking voor een vrij deeltje met rustmassa m:

$$\psi_p(x) \;=\; \exp(-ip\cdot x/\hbar) \;,$$

waarbij de contravariante impulsvector p^μ moet voldoen aan

$$p\cdot p \;=\; p^2 \;=\; m^2c^2 \quad\Rightarrow\quad p^0 \;=\; E/c \;=\; \pm\sqrt{m^2c^2+\vec{p}^{\,2}} \;.$$

(i) Bewijs dat $\psi_p(x)$ inderdaad een oplossing is van de Klein−Gordon vergelijking als aan de conditie $p^2 = m^2c^2$ is voldaan.

(ii) Laat zien dat de "waarschijnlijkheidsdichtheid"

$$\rho(x) \;=\; \frac{i\hbar}{2mc^2}\Big[\,\psi^*(x)\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x) \;-\; \psi(x)\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*(x)\Big] \;=\; \mathrm{Re}\Big[\,\frac{i\hbar}{mc^2}\,\psi^*(x)\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x)\Big]$$

negatieve waarden aanneemt voor de vlakke-golf oplossingen met negatieve energie.

(iii) Beschouw deze negatieve-energie oplossingen als zijnde onfysisch en verwijder ze uit de kwantummechanische theorie. Bekijk vervolgens twee fysisch acceptabele vlakke-golf oplossingen $\psi_{p_1}(x)$ en $\psi_{p_2}(x)$ met $p_1^0 > p_2^0 > 0$. Toon aan dat voor een lineaire combinatie van deze oplossingen de "waarschijnlijkheidsdichtheid" $\rho(x)$ nog steeds niet automatisch positief definiet is.

Hint: laat zien dat er een geschikte lineaire combinatie met reële coëfficiënten te vinden is zodanig dat $\rho(x)$ toch negatief kan worden voor bepaalde x-waarden.

(iv) Kunnen zulke lineaire combinaties met $\rho(x) \,<\, 0$ ongestraft als onfysisch uit de kwantummechanische theorie worden verwijderd?

Op basis van deze problemen met de waarschijnlijkheidsinterpretatie moest men tot de conclusie komen dat de Klein−Gordon vergelijking ongeschikt is als startpunt voor het opzetten van een relativistische 1-deeltjes kwantummechanica.