Opgaven bij het college Kwantummechanica 3
Week 8

Opgave 14: **Kanoniek ensemble voor een spin-0 deeltje in een doos**
Kwantummechanische aanpak versus klassieke aanpak: de overeenkomsten

Beschouw een kanoniek ensemble waarvan de systemen bestaan uit één enkel "vrij" spin-0 deeltje met massa m dat opgesloten zit in een grote kubus met volume $V = L^3$. De volledig gespecificeerde energieniveaus van het deeltje worden gegeven door

$$E_\nu \;=\; \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,\nu^2 \;, \qquad \text{met} \quad \nu^2 \;=\; \nu_x^2+\nu_y^2+\nu_z^2 \qquad \text{en} \qquad \nu_{x,y,z} \;=\; 1,2,\cdots \;.$$

Omdat L groot is liggen de energieniveaus zodanig dicht bij elkaar dat een continuümlimiet kan worden gebruikt en dat de volgende overgang geldt van sommen naar integralen:

$$\sum_{\nu_x=1}^{\infty} \exp(-C\nu_x^2) \;\xrightarrow{k_x=\nu_x\pi/L}\; \frac{L}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k_x\,\exp\Big(-\frac{CL^2}{\pi^2}\,k_x^2\Big) \;=\; \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{C}} \qquad (C>0)\;,$$

met overeenkomstige continuümlimieten voor ν_y en ν_z.

(i) Laat zien dat de kanonieke partitiefunctie van dit ensemble wordt gegeven door

$$Z_1(T) \;=\; V/\lambda_T^3\;, \qquad \text{met} \quad \lambda_T \;\equiv\; \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_{\rm B}T}} \;=\; \underline{\text{thermische de Broglie-golflengte}}\;.$$

(ii) Bepaal de gemiddelde energie per deeltje.

(iii) Gebruik nu het klassieke principe van equipartitie van energie om het aantal kinetische en elastische vrijheidsgraden per deeltje te bepalen.

(iv) Feitelijk zijn we hier bezig om een kwantummechanisch voorbeeld door te rekenen. Desondanks is het toch te verwachten dat klassiek gedrag de boventoon zal voeren. Geef hiervoor een verklaring.

Aan de hand van dit expliciete voorbeeld kunnen we aflezen dat de door ons gebruikte kwantummechanische definities van de entropie, temperatuur en constante van Boltzmann in ieder geval consistent zijn met de klassieke thermodynamische definities.

Opgave 15: **Kanoniek ensemble voor een lineaire harmonische oscillator**
Kwantummechanische aanpak versus klassieke aanpak: de verschillen

Beschouw een kanoniek ensemble waarvan de systemen bestaan uit één enkele lineaire harmonische oscillator met energieniveaus $\{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),\ n = 0, 1, \cdots\}$ voor $\omega > 0$.

(i) Laat zien dat de kanonieke partitiefunctie van dit ensemble wordt gegeven door

$$Z_1(T) \;=\; \frac{\exp(-\beta\hbar\omega/2)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)} \ .$$

(ii) Leid hieruit af dat de gemiddelde energie per oscillator wordt gegeven door

$$\bar{E} \;=\; \frac{1}{2}\hbar\omega\,\frac{1 + \exp(-\beta\hbar\omega)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)} \;=\; \frac{\hbar\omega/2}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \ .$$

(iii) Toon aan dat dit overeenkomt met een gemiddelde waarde

$$\bar{n} \;=\; \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1}$$

voor het kwantumgetal n.

(iv) Welke veeldeeltjesinterpretatie zou je kunnen toekennen aan het resultaat dat je in onderdeel (iii) hebt gevonden?

(v) Beschouw de hoge-temperatuurlimiet $k_{\rm B}T \gg \hbar\omega$. Pas deze limiet toe op het resultaat van onderdeel (ii) en gebruik het klassieke principe van equipartitie van energie om te bepalen hoeveel kinetische en elastische vrijheidsgraden zo'n lineaire harmonische oscillator effectief heeft.

(vi) Beschouw de lage-temperatuurlimiet $k_{\rm B}T \ll \hbar\omega$. Pas deze limiet toe op het resultaat van onderdeel (ii).

(vii) – Wat voor invloed zal dit lage-temperatuurfenomeen dus hebben op de thermische respons (zoals warmtegeleiding) van zo'n oscillatorsysteem?
– Geef aan wat er gebeurd is met de klassieke vrijheidsgraden uit onderdeel (v).

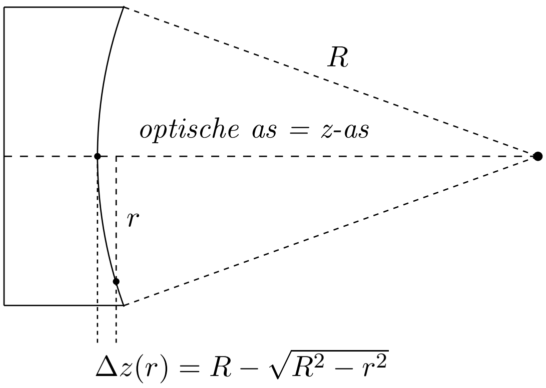
(viii) Stel we hebben een collectie van oscillatoren met frequentiebereik $\omega \in (\omega_c, \infty)$. Is het mogelijk om het thermisch aanslaan van oscillatormodes effectief te voorkomen
– als $\omega_c = 0$, zoals voor een ideaal fotongas binnen een zwart lichaam (zie later)
– als $\omega_c > 0$, zoals voor een fotongas binnen een "microresonator" (zie experimentele set-up op de volgende pagina)?

Dit voorbeeld bevat de essentiële eigenschappen van de kwantumstatistiek van golffenomenen, zoals roostertrillingen en elektromagnetische golven. Het zal nog expliciet gebruikt gaan worden bij de afleiding van de stralingswet van Planck.

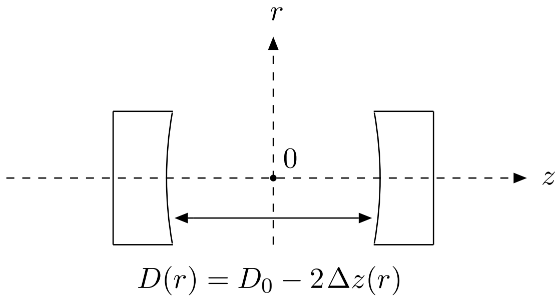
De "curved-mirror microresonator" *(Klaers et al., Universiteit Bonn, 2010)*

We gaan de kwantisatiecondities bekijken voor een microresonator bestaande uit twee sferisch gekromde, perfect reflecterende, di-elektrische spiegels. Deze spiegels leggen een harde-wand randvoorwaarde op aan de toegestane fotonmodes die zich binnen de resonator kunnen bevinden (zie later). Om de implicaties van de randvoorwaarde te analyseren worden eerst de geometrische aspecten van de spiegels en de resonator bekeken aan de hand van het onderstaande 2-dimensionale plaatje. De sferische spiegels hebben een kromtegraad $R = \mathcal{O}(1\,\mathrm{m})$ en een optische as die in de z-richting is gelegd. De (transversale) afstand t.o.v. de optische as wordt aangegeven met r. De afstand tussen de twee spiegels in de microresonator is zeer klein: $D_0 \approx 1.56\,\mu\mathrm{m} \ll R$.

Sferische spiegel



Microresonator



De resulterende golfvectorkwantisatie in de z-richting wordt dan (zie §2.5):

$$k_z(r) \;=\; \nu\,\frac{\pi}{D(r)} \qquad (\nu = 1, 2, \cdots) \quad \Rightarrow \quad k_{z_{\min}}(r) \;=\; \frac{\pi}{D(r)} \;\geq\; \frac{\pi}{D_0} \;=\; k_{z_{\min}}(0)\;.$$

Het spectrum van transversale golfvectoren k_r is continu. Binnen de microresonator geldt dat $r \ll R$, zodat $\Delta z(r) \approx \frac{1}{2}\,r^2/R$, en voor de laagst-energetische modes kunnen we $\nu = 1$ en $k_r \ll k_{z_{\min}}(r)$ nemen, zodat de bijbehorende energie bij benadering wordt gegeven door

$$E_{\mathrm{laag}} \;=\; \hbar c\sqrt{k^2_{z_{\min}}(r) + k_r^2} \;=\; \hbar c\sqrt{\pi^2/D^2(r) + k_r^2} \;\approx\; \frac{\hbar c\pi}{D_0 - r^2/R}\left[1 + \frac{k_r^2(D_0 - r^2/R)^2}{2\pi^2}\right]$$

$$\approx\; \frac{\hbar c\pi}{D_0} + \frac{\hbar c k_r^2 D_0}{2\pi} + \frac{\hbar c\pi r^2}{R D_0^2} \;\equiv\; \boxed{m_\gamma c^2 + \frac{(\hbar k_r)^2}{2m_\gamma} + \frac{1}{2}m_\gamma\Omega^2 r^2 \;\approx\; E_{\mathrm{laag}}}\;.$$

De laagst-energetische fotonmodes vormen een transversaal 2-dimensionaal gas van massieve bosonen met massa m_γ in een harmonische val met frequentie Ω. Hierbij hebben de perfect reflecterende spiegels voor een eindige frequentie-ondergrens $\omega_c = m_\gamma c^2/\hbar$ gezorgd en de kromming voor de harmonische val.