Opg. 20) Grootkanoniek ensemble van systemen bestaande uit een groot aantal niet-int. identieke deeltjes (zie §2.6 v/h collegedictaat):

(QM distributies v/d bezettingsgetallen)

$$\hat\rho\, \hat a_k^\dagger = e^{-\beta E_k-\gamma}\, \hat a_k^\dagger \hat\rho \quad (1) \quad \Rightarrow \quad [\hat n_k] = \bar n_k = \frac{1}{e^{\beta E_k+\gamma} \mp 1} \quad (2).$$

($-$: B, $+$: F)

We gaan nu de bijbehorende statistische spreiding bepalen.

(i) *) $[\hat n_k \hat n_{j\neq k}] = Tr(\hat\rho\, \hat n_k \hat n_j) = Tr(\hat\rho\, \hat a_k^\dagger \hat a_k \hat a_j^\dagger \hat a_j) \overset{(1)}{=} e^{-\beta E_k-\gamma}\, Tr(\hat a_k^\dagger \hat\rho\, \hat a_k \hat a_j^\dagger \hat a_j)$

$$\overset{j\neq k}{=} e^{-\beta E_k-\gamma}\, Tr(\hat\rho\, \underbrace{\hat a_k \hat a_k^\dagger}_{\hat 1 \pm \hat n_k} \hat a_j^\dagger \hat a_j) = e^{-\beta E_k-\gamma}\,(\bar n_j \pm [\hat n_k \hat n_j])$$

$$\Rightarrow \quad [\hat n_k \hat n_{j\neq k}] = \frac{\bar n_j}{e^{\beta E_k+\gamma} \mp 1} \overset{(2)}{=} \bar n_k \bar n_j .$$

*) $[\hat n_k^2] = Tr(\hat\rho\, \hat n_k^2) = Tr(\hat\rho\, \hat a_k^\dagger \hat a_k \hat a_k^\dagger \hat a_k) \overset{(1)}{=} e^{-\beta E_k-\gamma}\, Tr(\hat a_k^\dagger \hat\rho\, \hat a_k \hat a_k^\dagger \hat a_k)$

$$= e^{-\beta E_k-\gamma}\, Tr(\hat\rho\, \underbrace{\hat a_k \hat a_k^\dagger}_{\hat 1 \pm \hat n_k}\, \underbrace{\hat a_k \hat a_k^\dagger}_{\hat 1 \pm \hat n_k}) = e^{-\beta E_k-\gamma}\,(1 \pm 2\bar n_k + [\hat n_k^2])$$

$$\Rightarrow \quad [\hat n_k^2] = \frac{1 \pm 2\bar n_k}{e^{\beta E_k+\gamma}-1} \overset{(2)}{=} \frac{1 \pm 2\bar n_k}{1/\bar n_k \pm 1 - 1} = \begin{cases} (B) & \bar n_k(1+2\bar n_k) \\ (F) & \bar n_k \end{cases} = \bar n_k(\bar n_k + 1 \pm \bar n_k).$$

(ii) Voor fermionen geldt dat $\hat n_k$ een projectie-operator is: $\hat n_k^2 = \hat n_k \Rightarrow [\hat n_k^2] = \bar n_k$

(iii) $\hat N = \sum_k \hat n_k$, $\bar N = \sum_k \bar n_k \Rightarrow \hat N^2 = \sum_k \hat n_k^2 + \sum_{k,j\neq k} \hat n_k \hat n_j$, $\bar N^2 = \sum_k \bar n_k^2 + \sum_{k,j\neq k} \bar n_k \bar n_j$

en $(\Delta N)^2 \equiv [\hat N^2] - \bar N^2 = \sum_k \underbrace{([\hat n_k^2] - \bar n_k^2)}_{\equiv (\Delta n_k)^2} + \sum_{k,j\neq k} ([\hat n_k \hat n_j] - \bar n_k \bar n_j)$

(statistische spreiding rond $\bar N$)

$$\overset{(i)}{=} \boxed{\sum_k \bar n_k(1 \pm \bar n_k) = \sum_k (\Delta n_k)^2 = (\Delta N)^2} .$$

(statistische spreiding rond $\bar n_k$)

(iv) De statistische spreiding in het totale aantal deeltjes v/h systeem wordt dus gegeven door $\Delta N = \sqrt{\sum_k \bar n_k(1 \pm \bar n_k)} = \sqrt{\bar N \pm \sum_k \bar n_k^2}$.

Klassiek: $e^{\beta E+\gamma} \gg 1 \Rightarrow \forall_k\ \bar n_k \ll 1 \Rightarrow \forall_k\ \Delta n_k \approx \sqrt{\bar n_k}$ en $\Delta N \approx \sqrt{\bar N}$, zoals verwacht.

QM: (F) $\Delta N \le \sqrt{\bar N}$ en toestanden met $\bar n_k \approx 1$ hebben $\Delta n_k \approx \sqrt{1-\bar n_k} \ll \sqrt{\bar n_k}$

$\Rightarrow$ voor $T \approx 0$ wordt $\Delta N \ll \sqrt{\bar N}$, omdat voor de meeste k-waarden geldt dat $\bar n_k \approx 0$ of 1 en dus $\Delta n_k \approx 0$.

(B) $\Delta N \ge \sqrt{\bar N}$ en toestanden met $\bar n_k \gg 1$ hebben $\Delta n_k \approx \bar n_k \gg \sqrt{\bar n_k}$

$\Rightarrow$ **BE condensaat**: $\exists_{k_0}\ \bar n_{k_0} =$ fractie $* \bar N \Rightarrow$ $\Delta N \ge \Delta n_{k_0} \approx$ fractie $* \bar N = \mathcal{O}(\bar N) \gg \sqrt{\bar N}$!

Opg. 21) Vrije identieke deeltjes met geheeltallige spin s binnen een macroscopische d-dimensionale omsluiting met constante zijden L ($\Rightarrow$ "volume" $V_d = L^d$) en ondoordringbare wanden. Aantal deeltjes: $N \gg 1$, constant.

(i) 1-deeltjes energie-eigenw.: $E_\nu = C_1 (\overbrace{\hbar\pi\nu/L}^{\hbar|\vec{k}| = |\vec{p}|})^q$ (positieve macht) ($C_1 > 0$ constant),

met $\nu \equiv \sqrt{\nu_1^2 + \dots + \nu_d^2} = |\vec{\nu}|$ ($\nu_{1,\dots,d} = 1, 2, \dots$).

$N(K)$ = aantal 1-deeltjestoestanden met golfvector kleiner dan $K = \pi\nu/L$

$$\overset{\text{cont.}}{\underset{\text{limiet}}{=}} \underbrace{(2s+1)}_{\text{spin}} * \underbrace{2^{-d}}_{\nu_{1,\dots,d} > 0} * \underbrace{\text{volume d-dim. bol met straal } \nu = LK/\pi}_{\propto \nu^d} \quad \left[\pi^{d/2}\nu^d/\Gamma(1+d/2) \text{ om precies te zijn}\right]$$

$$\overset{L^d = V_d}{=} \boxed{(2s+1)\, C_2 V_d K^d = N(K)} \quad (C_2 > 0 \text{ constante afhankelijk van } d).$$

Voorbeelden: $d = 3 \Rightarrow N(K) = \frac{2s+1}{6\pi^2} V_3 K^3$ m.b.v. $\Gamma(5/2) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$,

$d = 2 \Rightarrow N(K) = \frac{2s+1}{4\pi} V_2 K^2$ m.b.v. $\Gamma(2) = 1$.

(ii) Gebruik nu dat $E(K) = C_1(\hbar K)^q \Rightarrow K = (E/\hbar^q C_1)^{1/q}$ en $dK/dE = \frac{1}{q}\frac{1}{\hbar^q C_1}(E/\hbar^q C_1)^{1/q - 1}$.

Dan geldt $D(E) = \left(\frac{dK}{dE}\right) D(K) = \left(\frac{dK}{dE}\right)\frac{dN(K)}{dK} \underset{(i)}{=} \frac{1}{q}\frac{1}{\hbar^q C_1}(E/\hbar^q C_1)^{1/q-1}\, d\,(2s+1)\, C_2 V_d\, (E/\hbar^q C_1)^{\frac{d-1}{q}}$

$$\equiv \boxed{(2s+1)\, C V_d E^{d/q - 1} = D(E), \quad \text{met } C = \frac{d}{q}\frac{C_2}{(\hbar^q C_1)^{d/q}} > 0}.$$

(golven, ultrarel. deeltjes) (voortplantings/lichtsnelheid)

Voorbeelden: $q = 1 \Rightarrow C_1 = c_s$; $q = 2 \Rightarrow C_1 = \frac{1}{2m}$.

↳ $D(E) \propto E^{d-1}$ ↳ $D(E) \propto E^{\frac{1}{2}d - 1}$ ← $D(E) = \text{const.}$ als $d = 2$

(iii) Thermisch evenwicht met een zeer groot warmtebad bij temperatuur T.

N zeer groot $\Rightarrow$ kanoniek ensemble resultaten $\approx$ grootkanoniek ensemble resultaten [relatief verschil i.h.a. $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$].

Het grootkanoniek ensemble rekent makkelijker, omdat dan de QM distributies ($\bar{n}(E)$) kunnen worden gebruikt zonder met het vaste deeltjesaantal rekening te hoeven houden.

(iv) Geheeltallige spin $\Rightarrow$ bosonen: $n(E,T)\,dE$ = aantal deeltjes met energie $\in [E, E+dE]$

$\Rightarrow n(E,T) = \bar{n}(E)\, D(E)$, met $\bar{n}(E) = (e^{\beta E + \gamma} - 1)^{-1}$ het gemiddelde bezettingsgetal per volledig gespecificeerd 1-boson energieniveau.

$$N \overset{(iii)}{\approx} \bar{N} = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, n(E,T) \xrightarrow[D(E<0)=0]{(ii)} (2s+1)\, C V_d \int_0^{\infty} dE \frac{E^{d/q-1}}{e^{\beta E+\varphi}-1} \xrightarrow[\beta = 1/k_BT]{x=\beta E} (2s+1)\, C V_d (k_BT)^{d/q} \underbrace{\int_0^{\infty} dx \frac{x^{d/q-1}}{e^{x+\varphi}-1}}_{I(\varphi)},$$

$$\bar{E}_{tot} = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, E\, n(E,T) \xrightarrow{\text{evenzo}} (2s+1)\, C V_d (k_BT)^{d/q+1} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{d/q}}{e^{x+\varphi}-1}.$$

Er moet gelden : $\forall_{E\geq 0}\ \bar{n}(E) \geq 0 \xrightarrow[\text{limiet}]{\text{cont.}} \forall_{x \geq 0}\ e^{x+\varphi} \geq 1 \Rightarrow \varphi$ mag niet negatief zijn.

(v) De integraal $I(\varphi)$ in de uitdrukking voor N is monotoon dalend voor toenemende $\varphi \overset{(iv)}{\Longrightarrow} I(\varphi)$ is maximaal als $\varphi \downarrow 0$.

Bose-Einstein condensatie, d.w.z. een macroscopische bezetting v/d 1-deeltjes grondtoestand bij eindige temperaturen, treedt op als $I(0)$ eindig is, zodat er een kritieke temperatuur $T_0 > 0$ bestaat waarvoor de vergelijking $N = (2s+1)\, C V_d (k_BT)^{d/q} I(\varphi)$ als oplossing $\varphi = 0$ heeft. Voor $T < T_0$ moeten er $\mathcal{O}(N)$ deeltjes in de grondtoestand zitten, hetgeen verkregen moet worden door $D(E)$ te corrigeren voor het feit dat $D(0) \neq 0$.

BE cond. $\Rightarrow D(E_{grond}) \neq 0$

Hier : $I(0)$ is eindig als $\int_0^{\epsilon \ll 1} dx \frac{x^{d/q-1}}{\underbrace{e^x - 1}_{\approx x}} \approx \int_0^{\epsilon} dx\, x^{d/q-2}$ eindig is

$\Rightarrow$ alleen mogelijk als $d/q - 2 > -1$, oftewel $\boxed{d > q}$. Dit klopt netjes met het feit dat $D(E) \propto E^{d/q-1}$ geen correcties nodig heeft voor $D(0) \neq 0$ als $d \leq q$.

Bijvoorbeeld : er treedt geen BE condensatie op als $d = q = 2$, d.w.z. voor een 2-dimensionaal Bose-gas ("film") van massieve deeltjes. In dat geval geldt dat $D(E) = D(0) =$ constant en zijn er genoeg laag-energetische energieniveaus om alle deeltjes met een minimum aan energietoename buiten de grondtoestand onder te brengen !

(vi) Stel er is sprake van Bose-Einstein condensatie voor $T < T_0$, dan dienen we $D(E)$ te corrigeren tot $D(E) + (2s+1)\delta(E) \Rightarrow N = (2s+1)\, C V_d (k_BT)^{d/q} I(\varphi) + \bar{N}_0$, met $\bar{N}_0 = (2s+1)/(e^{\varphi}-1)$ het gemiddelde aantal bosonen in de grondtoestand. Voor de kritieke temperatuur T_0 geldt $N = (2s+1)\, C V_d (k_BT_0)^{d/q} I(0)$. Voor $T < T_0$ kunnen dan maximaal $(2s+1)\, C V_d (k_BT)^{d/q} I(0) \overset{\downarrow}{=} (T/T_0)^{d/q} N < N$ deeltjes buiten de grondtoestand zitten. De resterende deeltjes moeten in de grondtoestand zitten, zodat $\varphi = \mathcal{O}(1/N) \approx 0$ en $N - \bar{N}_0 \approx \underbrace{(T/T_0)^{d/q} N}$ in zeer goede benadering !

Fractie deeltjes buiten grondtoestand