Opg. 14) Kanoniek ensemble: de systemen bestaan uit één vrij spin-0 deeltje met massa m dat opgesloten zit in een grote kubus met ribben L.

Energiespectrum: $E_\nu = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(\nu_x^2+\nu_y^2+\nu_z^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\nu^2 \quad , \quad \nu_{x,y,z} = 1,2,\cdots$

(i) $$Z_1(T) = Tr(e^{-\beta\hat{H}}) = \sum_{\nu_x=1}^{\infty}\sum_{\nu_y=1}^{\infty}\sum_{\nu_z=1}^{\infty} e^{-\frac{\hbar^2\pi^2\beta}{2mL^2}(\nu_x^2+\nu_y^2+\nu_z^2)} = \left(\sum_{\nu_x=1}^{\infty} e^{-\frac{\hbar^2\pi^2\beta}{2mL^2}\nu_x^2}\right)^3$$

$$\xrightarrow{\text{cont. limiet}} \left(\frac{L}{\pi}\int_0^\infty dk_x\, e^{-\frac{\hbar^2\beta}{2m}k_x^2}\right)^3 = \left(\frac{L}{2\pi}\sqrt{\frac{2m\pi}{\hbar^2\beta}}\right)^3 \overset{V=L^3}{=\!=} V\underbrace{\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2}}_{2\pi m k_B T/h^2 = \lambda_T^{-2}} = V/\lambda_T^3 .$$

(ii) $\bar{E} = [\hat{H}] = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_1(T)) = \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2}k_B T$: gemiddelde energie per deeltje.

(iii) Equipartitie van energie: elke kinetische en elastische vrijheidsgraad v/h deeltje levert een bijdrage $\frac{1}{2}k_B T$ tot de gemiddelde energie

$\Rightarrow$ 3 (kinetische) vrijheidsgraden in dit geval.

(iv) Er is hier sprake van
*) een effectief continu energiespectrum
$\Rightarrow$ QM discretisatie-effecten spelen geen rol
*) slechts één deeltje in het doosje, met een zwak energiecontact met de buitenwereld
$\Rightarrow$ QM veeldeeltjeseffecten spelen geen rol

Gevolg: we verwachten dat klassiek gedrag zal domineren.

Opg. 15) Kanoniek ensemble: de systemen bestaan uit één lineaire harmonische oscillator. Energiespectrum: $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $n=0,1,\cdots$

(i) $$Z_1(T) = Tr(e^{-\beta\hat{H}}) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_{n=0}^{\infty}(\underbrace{e^{-\beta\hbar\omega}}_{<1})^n = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2}\sinh^{-1}(\beta\hbar\omega/2)$$

geometrische reeks

(ii) $$\bar{E} = [\hat{H}] = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_1(T)) = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1+e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\tanh^{-1}(\beta\hbar\omega/2)$$: gemiddelde energie per oscillator.

(iii) $$\bar{E} \equiv \hbar\omega(\bar{n}+1/2) \overset{(ii)}{\Longrightarrow} \bar{n} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$:

gemiddelde waarde v/h oscillatorkwantumgetal.

(iv) Een lineaire harmonische oscillator gedraagt zich als een identiek veeldeeltjessysteem bestaande uit niet-interagerende bosonen (energiekwanta) met energie $\hbar\omega \Rightarrow \bar{n}$ = gemiddeld aantal bosonen v/h veeldeeltjessysteem.

(v) Hoge-temperatuurlimiet : $k_B T \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$ (klassieke limiet).
Gevolg : $\bar{E} \overset{(iii)}{\approx} \frac{1}{2}\hbar\omega \frac{2}{\beta\hbar\omega} = \frac{1}{\beta} = k_B T \Rightarrow$ 2 vrijheidsgraden, nl. 1 kinetisch en 1 elastisch.

(exponentieel onderdrukt)

(vi) Lage-temperatuurlimiet : $k_B T \ll \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \gg 1$ (pure QM).
Gevolg : $\bar{E} \overset{(iii)}{\approx} \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega} \approx \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$ = constante nulpuntsenergie.

(vii) De klassieke vrijheidsgraden kunnen bij zulke lage temperaturen niet meer bijdragen aan de thermische respons, immers een kleine verandering v/d temperatuur heeft in eerste benadering geen invloed op de gemiddelde energie. We zeggen dan dat de betreffende vrijheidsgraden zijn "uitgevroren".

(viii) Stel we hebben een collectie van oscillatoren met frequentiebereik $\omega \in (\omega_c, \infty)$.
Als $\omega_c = 0$, dan kunnen we o.g.v. onderdelen (vi)-(vii) niet voorkomen dat er oscillatiemodes thermisch worden aangeslagen aangezien er voor eindige temperatuur T altijd modes met $\hbar\omega \leq \mathcal{O}(k_B T)$ bestaan die niet zijn uitgevroren. Voorbeeld: elektromagnetische straling (fotonen) binnen een zwart lichaam, waarvan de wanden fotonen met alle energieën kunnen absorberen/emitteren. Gevolg: het aantal fotonen is niet behouden, omdat er altijd fotonmodes thermisch zijn aan te slaan!
Als $\omega_c > 0$, dan zijn alle oscillatormodes effectief uitgevroren als $k_B T \ll \hbar\omega_c$ en is het aanslaan van modes tenminste onderdrukt met een exponentiële factor $e^{-\beta\hbar\omega_c}$. Voorbeeld: elektromagnetische straling binnen een wit lichaam, waarvan de wanden bestaan uit gekromde spiegels die ervoor zorgen dat er een ondergrens is op de frequentie van het ingesloten licht. Gevolg: het aantal fotonen is effectief behouden als $k_B T \ll \hbar\omega_c$, omdat er geen fotonmodes thermisch zijn aan te slaan!

De aanwezigheid/afwezigheid van een fotonbehoudswet zal aanleiding geven tot het wel/niet mogelijk zijn van de vorming van een Bose-Einstein condensaat van fotonen (zie later) !!