APPUNTI PER IL CORSO DI MECCANICA STATISTICA

Temperatura di degenerazione e temperatura di discretizzazione

M. Falcioni, *2011*

Per una particella libera ($H = \mathbf{p}^2/2m$) contenuta in un volume $V = L^3$ gli autostati dell' Hamiltoniana sono individuati da tre numeri interi, maggiori di zero: $|n_x, n_y, n_z\rangle$ e gli autovalori corrispondenti sono

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \ . \tag{1}$$

La somma di partizione di singola particella

$$z = \sum_{n_x,n_y,n_z} \mathrm{e}^{-\beta \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} \tag{2}$$

è il prodotto di tre sommatorie uguali:

$$z = \sigma^3 \quad \text{con} \quad \sigma = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta \frac{h^2}{8mL^2} n^2} = \sum_{n=1}^{\infty} f(n) \ . \tag{3}$$

Essendo $f(n)$ una funzione positiva, continua e monotona decrescente, applicando la formula di Eulero Maclaurin, si può scrivere:

$$\sigma = \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{-\beta \frac{h^2}{8mL^2} x^2} - R = \frac{L}{h}\sqrt{2\pi mkT} - R = \frac{L}{\lambda} - R \ ,$$

dove $0 \le R \le f(0) = 1$ e $\lambda = h/\sqrt{2\pi mkT}$ è la lunghezza d' onda termica.

Se $L \gg \lambda$ si può scrivere

$$z = \left(\frac{L}{\lambda}\right)^3 = \frac{V}{\lambda^3} \ .$$

Ma è anche

$$\frac{V}{\lambda^3} = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{p}}{h^3} \mathrm{e}^{-\beta\left(\mathbf{p}^2/2m\right)} \ ; \tag{4}$$

questo significa che, quando la temperatura è abbastanza alta da far sì che risulti $\lambda \ll L$, la somma sugli autovalori dell' operatore quantistico $\exp(-\beta H)$ si può sostituire con un integrale nello spazio delle fasi classico della corrispondente funzione classica, cioè si può usare l' *approssimazione del continuo*:

$$\sum_{n_x,n_y,n_z} \mathrm{e}^{-\beta \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} \approx \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{p}}{h^3} \mathrm{e}^{-\beta\left(\mathbf{p}^2/2m\right)} \ . \tag{5}$$

Si osservi che la condizione

$$L \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

può essere riscritta

$$kT \gg \frac{h^2}{2\pi mL^2} \approx \frac{h^2}{8mL^2} \equiv \epsilon_t$$

essendo ϵ_t il quanto d'energia che caratterizza il moto traslatorio, come risulta dalla (1). Si può quindi definire una temperatura intorno alla quale non è più lecito usare l'approssimazione del continuo per il moto traslatorio

$$T_t = \frac{\epsilon_t}{k} = \frac{h^2}{8mL^2k} \ .$$

Per esempio, per un protone in un cubo di lato $L = 10cm$ si ottiene $T_t = 2.3\ 10^{-16}K$. Tenendo conto della dipendenza di T_t dall'inverso della massa si può concludere che l'energia cinetica molecolare può essere trattata sempre classicamente.

Si noti che in un gas di particelle identiche la discretizzazione dei livelli energetici è solo uno degli effetti quantistici; l'altro effetto importante è la simmetria o antisimmetria dei ket di stato, di cui si può *non tener conto* se la temperatura del gas è alta rispetto alla temperatura di degenerazione T_d. Nel caso $H = \mathbf{p}^2/2m$, per un gas di N particelle, T_d è individuata dalla condizione

$$\left(\frac{h}{\sqrt{2\pi mkT_d}}\right)^3 = \frac{V}{N} \quad \text{ovvero} \quad \frac{h^2}{2\pi mkT_d} = \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{2}{3}}$$

che implica

$$T_d = N^{\frac{2}{3}}\ T_t \ ,$$

cioè: la temperatura di degenerazione è enormemente più alta della temperatura di discretizzazione dei livelli.