Numero medio d'occupazione e condizione di degenerazione

M. Falcioni, *2012*

In un gas perfetto di particelle identiche, il numero di occupazione medio di uno stato di singola particella, con energia ϵ, è dato dalle statistiche di Fermi-Dirac o Bose-Einstein

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} \pm 1} \, . \tag{1}$$

Assumiamo che il minimo delle energie di singola particella sia zero.

Avevamo ottenuto che la statistica di Boltzmann (statistica "classica")

$$\langle n \rangle = \mathrm{e}^{\beta(\mu-\epsilon)} \tag{2}$$

è valida finché si ha $\langle n \rangle \ll 1$, per ogni stato, quindi finché il potenziale chimico, μ, si mantiene negativo con $|\mu| \gg 1$. Infatti in questo caso la (1) è ben approssimata dalla (2).

Mostriamo che la condizione di degenerazione del gas (cioè l'inizio del regime in cui gli effetti quantistici diventano importanti) si può scrivere $\mu \approx 0$. Questo risultato si può ottenere studiando il ruolo che β e μ (pensati come parametri) hanno nel determinare l' andamento di $\langle n \rangle$ come funzione di ϵ, e tenendo presente una relazione generale tra β e μ in un sistema con numero fissato di particelle.

I. FERMIONI

Nel caso di particelle fermioniche, il numero medio di occupazione

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

pensato come una funzione della variabile ϵ, contenente β e μ come parametri, è monotonamente decrescente ($d\langle n \rangle / d\epsilon < 0$) dal valore $+1$ (per $\epsilon \to -\infty$) al valore 0 (per $\epsilon \to +\infty$) e vale $1/2$ per $\epsilon = \mu$. Osservando che

$$\widetilde{n} = \langle n \rangle - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = -\frac{1}{2} \, \mathrm{th}\left(\frac{\beta}{2}(\epsilon - \mu)\right) \tag{3}$$

si capisce che, nel piano $(\langle n \rangle, \epsilon)$, $\langle n \rangle$ è antisimmetrica rispetto al punto $(\langle n \rangle = 1/2, \, \epsilon = \mu)$.

Mentre il parametro μ determina il punto di antisimmetria della funzione, il ruolo di β si può ricavare dall'espressione (3) per $\langle n \rangle$. Questa ci dice che la zona intorno a $\epsilon = \mu$ in cui

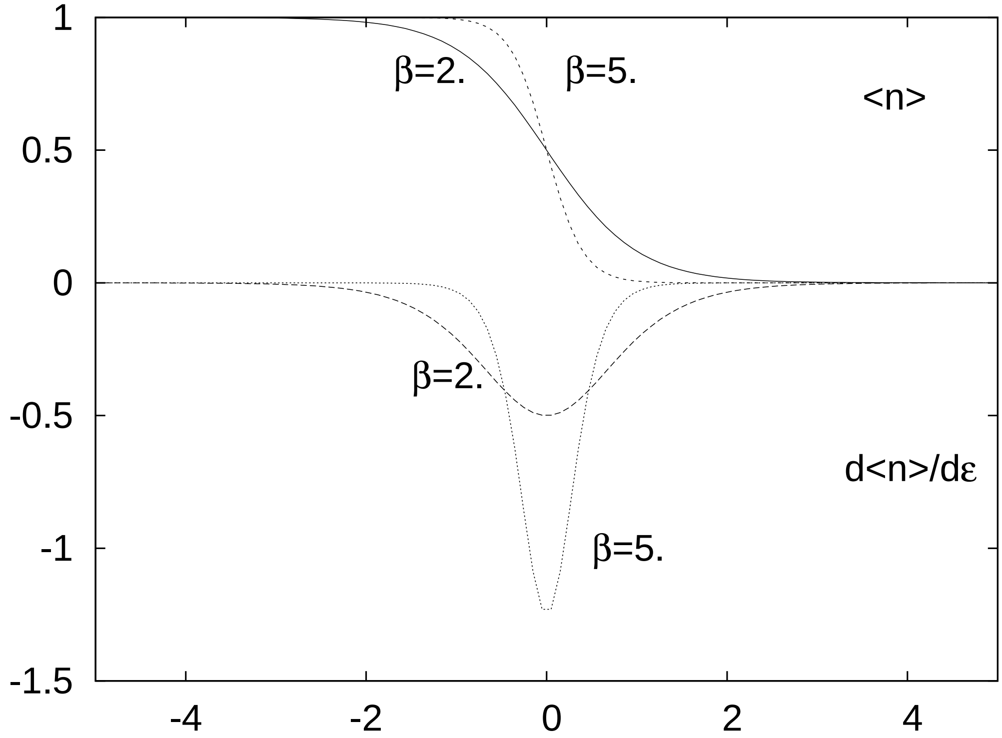

FIG. 1: $\langle n \rangle$ e $d\langle n \rangle / d\epsilon$ per i fermioni, al variare di β ($\beta = 2$ e $\beta = 5$), tenendo fisso μ ($\mu = 0$).

è concentrata la variazione di $\langle n \rangle$ nel passare da $+1$ a 0 è di ordine $1/\beta = kT$. Infatti, dato che

$$\frac{d\langle n \rangle}{d\epsilon} = \frac{d\widetilde{n}}{d\epsilon} = \frac{-\beta}{4\,\mathrm{ch}^2(\beta(\epsilon-\mu)/2)} \tag{4}$$

vediamo che la derivata di $\langle n \rangle$ è una campana (rovesciata) di larghezza di ordine $1/\beta = kT$ intorno a $\epsilon = \mu$. Per esempio, scegliendo $\mu = 0$, la Figura 1 mostra $\langle n \rangle$ e la sua derivata per i due valori $\beta = 2$ e $\beta = 5$. Il parametro β determina quindi quanto rapidamente $\langle n \rangle$ passa da 1 a 0: minore è la temperatura più rapida è la transizione da 1 a 0, che ha luogo intorno a μ. Abbiamo ricordato che per un gas nel regime classico il potenziale chimico è negativo con $|\mu| \gg 1$. Quindi, in questo caso, la regione delle energie positive (corrispondenti a $\epsilon \gg \mu$) si trova nella zona esponenzialmente piccola di $\langle n \rangle$, in cui appunto $\langle n \rangle \ll 1$.

Nei sistemi con fissato numero, N, di particelle, i parametri μ e β non sono indipendenti ma sono legati dalla relazione che determina N:

$$N = \int_0^\infty d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} \,, \tag{5}$$

dove $G(\epsilon)$ indica la densità degli stati. Se $G(\epsilon) = (\mathrm{cost})\ \epsilon^\alpha$, introducendo la fugacità

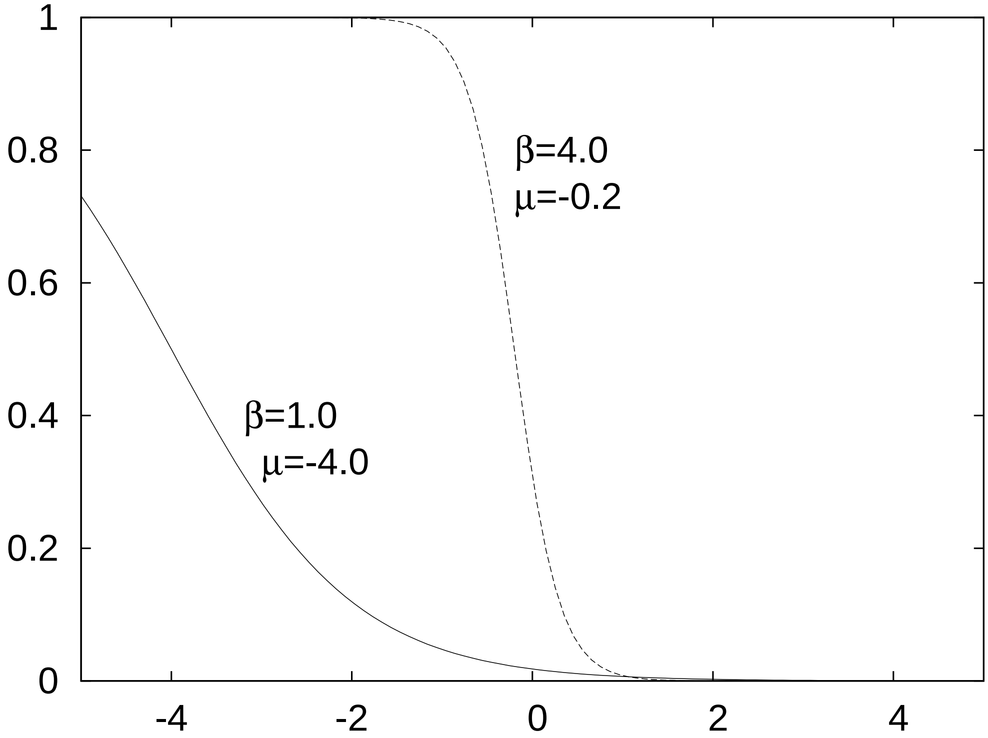

FIG. 2: $\langle n \rangle$ per i fermioni al diminuire di T, e all' aumentare di μ (e di β): ($\mu = -4.0$, $\beta = 1.0$) e ($\mu = -0.2$, $\beta = 4.0$).

$f = \exp(\beta\,\mu)$, la (5) si può riscrivere

$$N = (\mathrm{cost})\ (kT)^{\alpha+1} \int_0^\infty du\ \frac{u^\alpha}{(1/f)\mathrm{e}^u + 1}\ \equiv (\mathrm{cost})\ (kT)^{\alpha+1}\ I_\alpha(f)\ . \tag{6}$$

La funzione $I_\alpha(f)$ è crescente in f (come si verifica facendone la derivata), quindi l' equazione (6) implica che al diminuire della temperatura f deve aumentare. Supponiamo di partire dal regime di Boltzmann in cui le temperature sono alte e $\mu < 0$). Al diminuire della temperatura, la condizione $df > 0$ implica

$$df = d(\mathrm{e}^{\beta\,\mu}) = f\ (\mu\ d\beta + \beta\ d\mu) > 0 \quad \text{cioè} \quad \beta\ d\mu > -\mu\ d\beta\ ;$$

ovvero anche il potenziale chimico deve aumentare mentre la temperatura diminuisce ($d\beta > 0$). Quindi, mentre per alte temperature il punto di antisimmetria (in cui $\langle n \rangle = 1/2$) si ha per i valori non fisici $\epsilon = \mu \ll 0$ (cosicché per $\epsilon > 0$ $\langle n \rangle \ll 1$) al diminuire di T, μ cresce e contemporaneamente $\langle n \rangle$ diventa sempre più ripida intorno a $\epsilon = \mu$. Quando μ è vicino a zero per gli stati con $\epsilon \gtrsim 0$ non è più vero che $\langle n \rangle \ll 1$ e la statistica classica non è più utilizzabile (v. Figura 2).

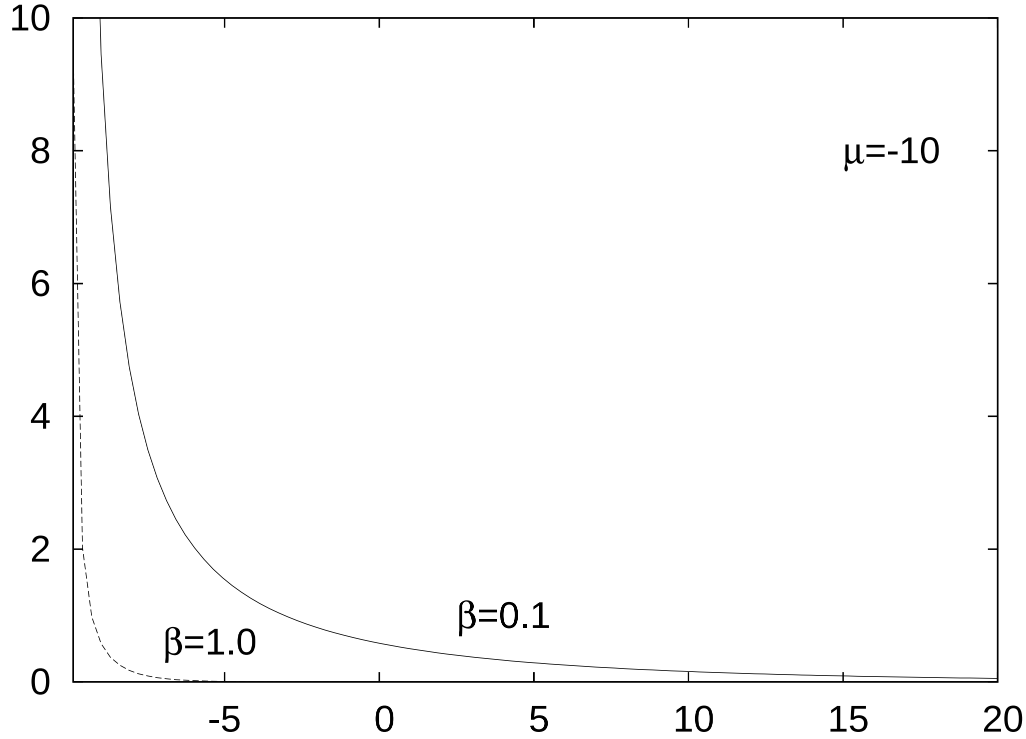

FIG. 3: $\langle n \rangle$ per i bosoni, al variare di β ($\beta = 0.1$ e $\beta = 1.0$), tenendo fisso μ ($\mu = -10$).

È interessante osservare che, per quanto discusso sopra, nel limite $T \to 0$, $\langle n \rangle$ diventa un gradino che passa da 1 a 0 in $\epsilon = \mu_0$, essendo μ_0 il valore del potenziale chimico a $T = 0$. Questo risulta anche considerando che, dalla (4), si ottiene che $d\langle n \rangle/d\epsilon$ calcolata in $\epsilon = \mu$ vale $-\beta/4$ e quindi $\longrightarrow -\infty$ per $T \longrightarrow 0$.

II. BOSONI

Nel caso dei bosoni, la funzione

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

è anch'essa decrescente in ϵ, è positiva per $\epsilon > \mu$, ha valori negativi per $\epsilon < \mu$ e tende a $\pm\infty$ per $\epsilon \to \mu$. Limitiamoci a considerare i valori positivi del numero medio d' occupazione. Il potenziale chimico determina per quali valori di ϵ (quelli $\gtrsim \mu$) la funzione $\langle n \rangle$ è "molto grande" e, anche in questo caso, il valore di β determina quanto rapidamente $\langle n \rangle$ decresce verso 0 mentre ϵ si allontana da μ (v. Figura 3). Con considerazioni analoghe a quelle fatte per i fermioni, anche per i bosoni si può vedere che una diminuzione di temperatura comporta un aumento di μ. Finché $\mu \ll 0$ gli stati con energia positiva sono scarsamente popolati. Quando μ si avvicina a 0 per gli stati con $\epsilon \gtrsim 0$ non vale più la condizione $\langle n \rangle \ll 1$ e non è più applicabile la statistica di Boltzmann.

Si osservi che, avendo fissato il numero di particelle del sistema, la condizione di degenerazione, $\mu \approx 0$ ovvero $f \approx 1$, definisce, attraverso l' Eq. (6) o l'analoga per i bosoni, una "temperatura di degenerazione".

III. IL CASO $H = \mathbf{p}^2/2m$

Nelle considerazioni precedenti nulla è stato assunto sull' Hamiltoniana di singola particella, a parte che il minimo del suo spettro è zero. Se l' Hamiltoniana di singola particella è $H = \mathbf{p}^2/2m$, per un gas contenuto in un volume V, indicando con g la degenerazione di spin, si ha:

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi g V}{h^3}(2m)^{3/2}\epsilon^{1/2} .$$

Per questi sistemi avevamo visto che la condizione di validità della statistica classica si traduce nella relazione

$$\left(\frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}\right)^3 = \lambda^3 \ll g\,\frac{V}{N} . \tag{7}$$

- Consideriamo prima un gas di fermioni. La condizione di degenerazione ($\mu \approx 0$ ovvero $f \approx 1$) significa, come si ottiene dall' Eq. (6) ponendo $f = 1$,

  $$N = \frac{2\pi g V}{h^3}(2\,m)^{3/2}(k\,T)^{3/2}\left(\int_0^\infty \frac{u^{1/2}du}{\mathrm{e}^u + 1}\right) \equiv \frac{2gV}{\lambda^3\sqrt{\pi}}\,\left(I_F\right) ,$$

  cioè

  $$\lambda^3 = \frac{gV}{N}\,\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\,I_F\right)\,\approx \frac{gV}{N} ,$$

  come ci si può aspettare dalla (7). Infatti l' integrale I_F si sa scrivere in termini di funzioni gamma di Eulero, $\Gamma(x)$, e zeta di Riemann, $\zeta(x)$, usando la formula:

  $$\int_0^\infty \frac{u^{x-1}du}{\mathrm{e}^u + 1} = (1 - 2^{1-x})\Gamma(x)\,\zeta(x) ,$$

  valida per $x > 1$. Ponendo $x = 3/2$ si ottiene

  $$I_F = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\zeta(3/2) .$$

Dato che $\zeta(3/2) \cong 2.612$, si ha

$$\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\, I_F\right) \cong \left(0.765\right) ,$$

- Nel caso di bosoni la degenerazione compare quando

$$N = \frac{2\pi g V}{h^3}(2\,m)^{3/2}(k\,T)^{3/2}\left(\int_0^\infty \frac{u^{1/2}du}{\mathrm{e}^u - 1}\right) \equiv \frac{2gV}{\lambda^3\sqrt{\pi}}\,\left(I_B\right) ,$$

cioè

$$\lambda^3 = \frac{gV}{N}\,\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\, I_B\right)\, \approx \frac{gV}{N} ,$$

dato che, dalla formula

$$\int_0^\infty \frac{u^{x-1}du}{\mathrm{e}^u - 1} = \Gamma(x)\,\zeta(x) ,$$

con $x = 3/2$, si ha

$$\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\, I_B\right) = \zeta(3/2) \cong \left(2.612\right) .$$