Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 15.07.2016

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti confinate sul segmento $|x| \leq L$ e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(p, x, \sigma) = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sigma b \qquad p \in \mathbb{R},\ |x| \leq L,$$

dove σ è una variabile e

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a, \\ 0 & a \leq |x| \leq L, \end{cases}$$

con $V_0 > b$ costanti positive.

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann e che $\sigma = \pm 1$:

   1.a) Calcolare la densità di probabilità $p(\epsilon)$ dell'energia di singola particella.

   1.b) Calcolare la pressione $P(x)$ nei punti $x = 0$ e $x = L$.

   1.c) Calcolare $\langle \sigma \rangle$ in funzione della temperatura.

   1.d) Calcolare la temperatura alla quale nell'intervallo $|x| < a$ si trovano in media metà particelle.

   1.e) Indicato con $N_\sigma(|x| < a)$ il numero medio di particelle per σ fissato contenute nell'intervallo $|x| < a$, calcolare il rapporto $N_+(|x| < a)/N_-(|x| < a)$ alla temperature del punto precedente.

2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni con $\sigma = 0, \pm 1$:

   2.a) Discutere l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.

3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni con $\sigma = \pm 1$:

   3.a) Calcolare $\langle \sigma \rangle$ a $T = 0$ per $\epsilon_F = b - V_0$.

   3.b) Calcolare l'energia $E(T = 0)$ per $\epsilon_F = b$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 5, 1.b: 3, 1.c: 3, 1.d: 4, 1.e: 3
  2.a: 4
  3.a: 4, 3.b: 4

- **Risposte**

Nota: La costante di Botzmann k_B è presa uguale a 1, di conseguenza $\beta^{-1} = T$.

1.a) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N!$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella:

$$Z_1 = \sum_\sigma \int \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x,\sigma)} = \int d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon}\, G(\epsilon), \tag{1}$$

dove

$$G(\epsilon) = \sum_\sigma \int \frac{dp\,dx}{h}\, \delta\big(\epsilon - H(p,x,\sigma)\big) = \sum_\sigma G(\epsilon,\sigma)$$

è la densità di stati di singola particella. Dalla (1) segue che la densità di probabilità $P(\epsilon)$ dell'energia di singola particella è

$$p(\epsilon) = \frac{1}{Z_1} G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}.$$

Per il calcolo di $G(\epsilon)$ è utile osservare che $G(\epsilon) = \sum_\sigma G(\epsilon,\sigma)$ con

$$G(\epsilon,\sigma) = \int \frac{dp\,dx}{h}\, \delta\big(\epsilon - H(p,x,\sigma)\big) = \frac{1}{h}\int_{-L}^{L} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \delta\big(\epsilon - p^2/2m - V(x) - \sigma b\big), \tag{2}$$

densità di stati di singola particella per σ fissato. Usando l'identità

$$\delta\big(f(t)\big) = \sum_k \frac{1}{|f'(t_k)|}\, \delta(t - t_k), \qquad \text{con } t_k:\ f(t_k) = 0,$$

otteniamo

$$\delta\big(\tilde\epsilon - p^2/2m\big) = \frac{m}{p_0}\big[\delta(t-p_0) + \delta(t+p_0)\big], \qquad \text{con } p_0 = \sqrt{2m\tilde\epsilon},$$

con la condizione $\tilde\epsilon > 0$. Ne segue

$$\int dp\, \delta(\tilde\epsilon - p^2/2m) = \sqrt{\frac{2m}{\tilde\epsilon}}\, \theta(\tilde\epsilon).$$

Allo stesso risultato si arriva usando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$:

$$\int dp\, \delta(\tilde\epsilon - p^2/2m) = \frac{d}{d\tilde\epsilon}\int dp\, \theta(\tilde\epsilon - p^2/2m) = \frac{d}{d\tilde\epsilon}\int_{-\sqrt{2m\tilde\epsilon}}^{+\sqrt{2m\tilde\epsilon}} dp = \frac{d}{d\tilde\epsilon} 2\sqrt{2m\tilde\epsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\tilde\epsilon}}\, \theta(\tilde\epsilon).$$

Sostituendo nella (2) otteniamo

$$G(\epsilon,\sigma) = \frac{\sqrt{2m}}{h}\int_{-L}^{L} dx \frac{\theta(\epsilon - V(x) - \sigma b)}{\sqrt{\epsilon - V(x) - \sigma b}} = 2\frac{\sqrt{2m}}{h}\left[a\frac{\theta(\epsilon + V_0 - \sigma b)}{\sqrt{\epsilon + V_0 - \sigma b}} + (L-a)\frac{\theta(\epsilon - \sigma b)}{\sqrt{\epsilon - \sigma b}}\right] \tag{3}$$

da cui

$$\boxed{G(\epsilon) = 2\frac{\sqrt{2m}}{h}\left[a\frac{\theta(\epsilon + V_0 + b)}{\sqrt{\epsilon + V_0 + b}} + a\frac{\theta(\epsilon + V_0 - b)}{\sqrt{\epsilon + V_0 - b}} + (L-a)\frac{\theta(\epsilon + b)}{\sqrt{\epsilon + b}} + (L-a)\frac{\theta(\epsilon - b)}{\sqrt{\epsilon - b}}\right].} \tag{4}$$

L'espressione di Z_1 si ottiene integrando $e^{-\beta\epsilon}G(\epsilon)$, ovvero

$$Z_1 = \sum_\sigma \int \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x,\sigma)} = \frac{1}{h}\int dp\, e^{-\beta p^2/2m}\int_{-L}^{L} dx\, e^{-\beta V(x)} \sum_\sigma e^{-\beta b\sigma}$$

da cui

$$\boxed{Z_1 = 4\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta h^2}}\left[ae^{\beta V_0} + L - a\right]\cosh\beta b.} \tag{5}$$

Usando le espressioni (4) e (5), otteniamo

$$\boxed{p(\epsilon) = \sqrt{\frac{\beta}{4\pi}}\left[a\frac{\theta(\epsilon+V_0+b)}{\sqrt{\epsilon+V_0+b}} + a\frac{\theta(\epsilon+V_0-b)}{\sqrt{\epsilon+V_0-b}} + (L-a)\frac{\theta(\epsilon+b)}{\sqrt{\epsilon+b}} + (L-a)\frac{\theta(\epsilon-b)}{\sqrt{\epsilon-b}}\right]\frac{e^{-\beta\epsilon}}{\left[ae^{\beta V_0}+L-a\right]\cosh\beta b}}$$

1.b) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N!$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella. Ne segue che la pressione P nel punto x vale:

$$P(x) = \rho(x)\,T$$

dove $\rho(x)$ è la densità nel punto x.

La densità $\rho(x)$ può essere ottenuta dalla probabilità $p_1(x \in dL)\,dx$ che una particella si trovi nel segmento dL di lunghezza dx intorno al punto x data dal rapporto tra il numero dN di particelle contenute in dL ed il numero totale di particelle:

$$p_1(x \in dL)\,dx = \frac{dN}{N} = \rho(x)\frac{dx}{N} == \frac{1}{Z_1}\sum_\sigma \int_{x\in dL}\frac{dp\,dx}{h}\,e^{-\beta H(p,x,\sigma)} = \frac{e^{-\beta V(x)}}{2\left[ae^{\beta V_0}+L-a\right]}\,dx, \tag{6}$$

da cui

$$p(x) = NT\frac{e^{-\beta V(x)}}{2\left[ae^{\beta V_0}+L-a\right]}.$$

Di conseguenza:

$$\boxed{P(x=0) = NT\frac{e^{\beta V_0}}{2\left[ae^{\beta V_0}+L-a\right]}.}$$

mentre

$$\boxed{p(x=L) = NT\frac{1}{2\left[ae^{\beta V_0}+L-a\right]}.}$$

1.c) La distribuzione di probabilità di σ vale

$$p(\sigma) = \frac{1}{Z_1}\int\frac{dp\,dx}{h}\,e^{-\beta H(p,x,\sigma)} = \frac{e^{-\beta b\sigma}}{2\cosh\beta b}.$$

Ne segue che

$$\langle\sigma\rangle = \sum_\sigma \sigma\,p(\sigma) = \frac{e^{-\beta b} - e^{\beta b}}{2\cosh\beta b}.$$

ovvero

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = -\tanh\beta b.}$$

1.d) Il numero medio di particelle contenute nell'intervallo $|x| < a$ è:

$$\overline{N} = N\int_{-a}^{a} p_1(x\in dL)\,dx = N\frac{ae^{\beta V_0}}{ae^{\beta V_0}+L-a}$$

La condizione $\overline{N} = N/2$ richiede che

$$\frac{ae^{\beta V_0}}{ae^{\beta V_0} + L - a} = \frac{1}{2} \qquad \Rightarrow \qquad ae^{\beta V_0} = L - a.$$

Da cui si ottiene la temperatura richiesta

$$\boxed{T = \frac{V_0}{\ln\big[(L-a)/a\big]}.}$$

1.e) La probabilità di trovare una particella con il valore di σ fissato in un segmento dL di lunghezza dx intorno al punto x è, cfr. (6):

$$p_1(x \in dL, \sigma)\, dx = \frac{1}{Z_1} \int_{x \in dL} \frac{dp\, dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x,\sigma)} = \frac{e^{-\beta V(x) - \beta b \sigma}}{4\big[ae^{\beta V_0} + L - a\big] \cosh \beta b}\, dx.$$

Di conseguenza

$$N_\sigma(|x| < a) = N \int_{-a}^{a} p_1(x \in dL, \sigma)\, dx = N \frac{ae^{\beta V_0 - \beta b \sigma}}{2[ae^{\beta V_0} + L - a] \cosh \beta b},$$

da cui segue:

$$\frac{N_+(|x| < a)}{N_-(|x| < a)} = e^{-2\beta b}$$

Dalla condizione al punto 1.d) si ha

$$e^{\beta V_0} = \frac{L-a}{a} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\frac{N_+(|x| < a)}{N_-(|x| < a)} = \left(\frac{L-a}{a}\right)^{-2b/V_0}.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni il numero di particelle a temperature T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$; dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato ($\epsilon = \epsilon_{\min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\min}$) dato da,

$$\tilde{N} = \int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1},$$

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella (4). La condizione di condensazione è quindi:

$$\int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \epsilon_{\min})} - 1} = N < \infty.$$

Nel problema in questione $\epsilon_{\min} = -V_0 - b$, e dalla (4) si vede che il termine rilevante è il primo. Otteniamo così

$$\int_{-V_0 - b}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{\theta(\epsilon + V_0 + b)}{\sqrt{\epsilon + V_0 + b}}\, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon + V_0 + b)} - 1} = \int_0^{+\infty} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon}}\, \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1} \to \infty,$$

perchè l'integrando diverge come $\epsilon^{-3/2}$ per $\epsilon \to 0$. Ne concludiamo quindi che

$$\boxed{\int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \epsilon_{\min})} - 1} \to \infty, \qquad \Rightarrow \text{Non esiste condensazione BE.}}$$

3.a Come nel caso precedente $\epsilon_{\rm min} = -V_0 - h$, per cui il valore medio di σ a $T = 0$ è dato da

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\sigma=\pm1}\int_{-V_0-h}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \sigma\, G(\epsilon,\sigma) = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-},$$

dove $G(\epsilon,\sigma)$ è la densità di stati di singola particella per σ fissato data dalla (3) ed $N_\pm$ il numero di particelle, a $T = 0$, con rispettivamente $\sigma = \pm1$. Dalla (3) si vede facilmente che $G(\epsilon,+1) = 0$ per $\epsilon < b - V_0$. Di conseguenza se $\epsilon_{\rm F} = b - V_0$ allora $N_+ = 0$ e quindi

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = -1 \qquad \text{per } T = 0,\ \epsilon_{\rm F} = b - V_0.}$$

3.b L'energia del sistema a temperatura $T = 0$ è data da

$$E(T=0) = \int_{-V_0-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon)\, \epsilon,$$

done $G(\epsilon)$ data dalla (4). Per $\epsilon_{\rm F} = b$ solo i prime tre termini contribuiscono, due per $\sigma = -1$ ed uno per $\sigma = +1$. Usando ripetutamente

$$\int d\epsilon \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon-\epsilon_0}} = \frac{2}{3}\big(\epsilon + 2\epsilon_0\big)\sqrt{\epsilon-\epsilon_0},$$

otteniamo

$$\int_{-V_0-b}^{b} d\epsilon\, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon+V_0+b}}\,\theta(\epsilon+V_0+b) = -\frac{2}{3}\big(2V_0+b\big)\sqrt{V_0+2b},$$

$$\int_{-V_0-b}^{b} d\epsilon\, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon+V_0-b}}\,\theta(\epsilon+V_0-b) = -\frac{2}{3}\big(V_0-3b\big)\sqrt{V_0},$$

$$\int_{-V_0-b}^{b} d\epsilon\, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon+b}}\,\theta(\epsilon+b) = -\frac{2}{3}b\sqrt{2b}.$$

L'energia richieste è quindi

$$\boxed{E(T=0) = -\frac{4}{3h}\sqrt{2m}\left[a\big(2V_0+b\big)\sqrt{V_0+2b} + a\big(V_0-3b\big)\sqrt{V_0} + (L-a)\,b\sqrt{2b}\right].}$$