Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 19.07.2017

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti contenute in una regione quadrata di lato L con i lati paralleli agli assi di un sistema di riferimento (x, y) e centro nell'origine degli assi, e sia l'Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p^2}{2m} + 2A|x|, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2, \ -L/2 \le x, y \le L/2,$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, $\mathbf{q} = (x, y)$, ed A è una costante positiva.

1. Assumendo il sistema in equilibrio a temperatura T e cha valga la statistica classica di Boltzmann:
   1.a) Calcolare il valore medio $\langle |x| \rangle$ in funzione della temperatura T.
   1.b) Indicata con $P(x)$ la pressione alla distanza $|\mathbf{q}| = x$ dall'asse y, calcolare $P(x = 0)$ e $P(x = L/2)$.
   1.c) Calcolare la probabilità $\mathcal{P}_n(|x| \le R)$ che a temperatura T nella regione $|x| \le R \le L/2$ vi siano n particelle.
   1.d) Determinare il valore minimo di R tale che la probabilità che vi siano più di $N/2$ particelle nella regione $R < |x| \le L/2$ sia trascurabile ad ogni temperatura.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   2.a) Discutere l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   3.a) Calcolare il numero massimo $N_{\max}$ di particelle tali che a $T = 0$ tutte le particelle si trovano nella regione $|x| \le L/4$.
   3.b) Calcolare il valore medio $\langle |x| \rangle$ a $T = 0$ in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F per $\epsilon_F \le AL$.

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

- **Risposte**

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

1.a) La densità di probabilità $\mathcal{P}_x(x)$ della coordinata x di una singola particella per un sistema di N particelle classiche non interagenti vale:

$$\mathcal{P}_x(x') = \frac{\int d^2p\, d^2q\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})}\, \delta(x-x')}{\int d^2p\, d^2q\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})}} = \frac{e^{-2\beta A|x'|}}{\int_{-L/2}^{L/2} dx\, e^{-2\beta A|x|}}\, \theta(L/2-|x'|).$$

Quindi

$$\begin{aligned}\langle |x|\rangle = \int dx\, \mathcal{P}_x(x)\, |x| &= -\frac{1}{2\beta}\frac{\partial}{\partial A}\ln \int_{-L/2}^{L/2} dx\, e^{-2\beta A|x|} \\ &= -\frac{1}{2\beta}\frac{\partial}{\partial A}\ln\left[2\int_0^{L/2} dx\, e^{-2\beta A x}\right] \\ &= -\frac{1}{2\beta}\frac{\partial}{\partial A}\ln\left[\frac{1}{\beta A}\left(1-e^{-\beta A L}\right)\right] \\ &= \frac{1}{2\beta A} - \frac{L}{2}\frac{e^{-\beta A L}}{1-e^{-\beta A L}},\end{aligned}$$

ovvero

$$\boxed{\langle |x|\rangle = \frac{T}{2A}\left[1-\frac{\beta A L}{e^{\beta A L}-1}\right].}$$

Allo stesso risultato si può giungere osservando che per un sistema di N particelle classiche non interagenti:

$$E(T)/N = -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln Z_1 = \langle H(\mathbf{p},\mathbf{q})\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle + 2A\langle |x|\rangle,$$

dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella:

$$Z_1 = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{1}{h^2}\int d^2p\, e^{-\beta p^2/2m}\int_{-L/2}^{L/2} dy \int_{-L/2}^{L/2} dx\ a^{-2\beta A|x|} = \frac{2\pi m L}{\beta^2 h^2 A}\left(1-e^{-\beta A L}\right).$$

Da cui, usando il teorema di equipartizione, si ha

$$T + 2A\langle |x|\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1, \qquad \Rightarrow \qquad \langle |x|\rangle = -\frac{1}{2A}\left[T + \frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1\right].$$

1.b) L'Hamiltoniana di singola particella è della forma $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = p^2/2m + U(x)$. Dato che il potenziale non dipende dalla coordinata y possiamo decomporre il sistema in strisce S_x di altezza L e spessore dx all'interno delle quali il potenziale è costante. Ciascuna striscia è in equilibrio, ma il numero N_x di particelle nella striscia S_x dipende dalla sua coordinata x. Indicata con $Z_{x,1}$ la funzione di partizione della striscia S_x di coordinata x la funzione di gran partizione della striscia vale:

$$\Omega_x = \sum_{N_x=0}^{\infty} z^{N_x} Z_{N_x} = \sum_{N_x=0}^{\infty} z^{N_x} Z_{x,1}^{N_x}/N_x! = e^{z Z_{x,1}},$$

dove $z = e^{\beta\mu}$, con μ potenziale chimico. Si ricorda che per un sistema di N particelle identiche non interagenti si ha $Z_N = Z_1^N/N!$. La pressione nella striscia vale quindi:

$$P(x)V_x = T\ln\Omega_x \qquad \Rightarrow \qquad P(x) = \frac{T z Z_{x,1}}{V_x},$$

dove $V_x = Ldx$ è il volume della striscia. Utilizzando

$$Z_{x,1} = \frac{1}{h^2}\int d^2p \int_{-L/2}^{L/2} dy\, dx\, e^{-\beta p^2/2m - \beta A|x|} = \frac{2\pi m L\, dx}{\beta h^2}\, e^{-2\beta A|x|},$$

otteniamo

$$P(x) = \frac{2\pi m}{\beta^2 h^2} z\, e^{-2\beta A|x|} = \frac{2\pi m}{\beta^2 h^2} e^{-2\beta A|x| + \beta\mu}.$$

In equilibrio il potenziale chimico μ, al pari della temperatura, è costante in tutto il sistema. Possiamo quindi calcolarlo dall'energia libera del sistema totale:

$$\mu = \left.\frac{\partial}{\partial N}\right|_{T,V} F(T,V,N) = -T \left.\frac{\partial}{\partial N}\right|_{T,V} \ln Z_N = -T \left.\frac{\partial}{\partial N}\right|_{T,V} N \ln(Z_1 e/N) = -T \ln(Z_1/N)$$

dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella dell'intero sistema. Di conseguenza,

$$z = e^{\beta\mu} = \frac{N}{Z_1},$$

che sostituita nell'espressione della pressione $P(x)$, ed utilizzando l'espressione di Z_1 calcolata al punto precedente, fornisce:

$$P(x) = \frac{2\pi m N}{\beta^2 h^2}\, e^{-2\beta A|x|} \frac{\beta^2 h^2 A}{2\pi m L} \left(1 - e^{-\beta A L}\right)^{-1} = \frac{NA}{L} \frac{e^{-2\beta A|x|}}{1 - e^{-\beta A L}}.$$

Ne segue:

$$\boxed{P(x=0) = \frac{NA}{L} \frac{1}{1 - e^{-\beta A L}},}$$

mentre

$$\boxed{P(x = L/2) = \frac{NA}{L} \frac{e^{-\beta A L}}{1 - e^{-\beta A L}} = \frac{NA}{L} \frac{1}{e^{\beta A L} - 1}.}$$

1.c) Data una particella, questa si troverà con probabilità p nella regione $|x| \leq R$ e fuori con probabilità $q = 1 - p$. Dato che le particelle sono non interagenti, e quindi indipendenti, la probabilità di trovare n particelle su N nella regione $|x| \leq R$ è data dalla distribuzione binomiale

$$P_N(n) = \frac{N!}{(N-n)!\, n!}\, p^n (1-p)^{N-n}.$$

Utilizzando la decomposizione in strisce del punto precedente:

$$p = \int_{|x| \leq R} \mathcal{P}_1(x \in S_x)\, dx,$$

dove $\mathcal{P}_1(x \in S_x)\, dx$ è la probabilità che una particella si trovi nella striscia S_x di coordinata x e spessore dx. Per un sistema di particelle indipendenti questa è data dal rapporto del numero N_x di particelle nella striscia S_x sul numero N totale di particelle. Utilizzando i risultati del punto precedente:

$$N_x = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Omega_x = z Z_{x,1},$$

da cui segue:

$$\mathcal{P}_1(x \in S_x)\, dx = \frac{N_x}{N} = \frac{Z_{x,1}}{Z_1} = \beta A \frac{e^{-2\beta A|x|}}{1 - e^{-\beta A L}}\, dx.$$

Allo stesso risultato si può giungere osservando che possiamo scrivere:

$$\mathcal{P}_1(x \in S_x)\,dx = \frac{\rho_x\,V_x}{N},$$

dove ρ_x la densità di particelle nella striscia S_x legata alla pressione $P(x)$ dalla relazione:

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

ed utilizzando l'espressione della pressione trovata al punto precedente.
Sostituendo nell'espressione di p si ha:

$$p = \beta A \int_{|x|\le R} \frac{e^{-2\beta A|x|}}{1-e^{-\beta AL}}\,dx = \frac{2\beta A}{1-e^{-\beta AL}}\int_0^R e^{-2\beta Ax}\,dx = \frac{1-e^{-2\beta AR}}{1-e^{-\beta AL}}.$$

In conclusione

$$\boxed{\mathcal{P}_n(|x|\le R) = \frac{N!}{(N-n)!\,n!}\,p^n(1-p)^{N-n} = \frac{N!}{(N-n)!\,n!}\,\frac{\big(1-e^{-2\beta AR}\big)^n\big(e^{-2\beta AR}-e^{-\beta AL}\big)^{N-n}}{\big(1-e^{-\beta AL}\big)^N}.}$$

1.d) Dal risultato del punto precedente segue che il numero medio $\overline{n}$ di particelle che si trovano nella regione $|x| \le R$ è $\overline{n} = N\,p$. La probabilità p è una funzione decrescente della temperatura, e varia tra

$$\lim_{T\to 0} p = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \overline{n}/N = 1,$$

e

$$\lim_{T\to \infty} p = \frac{2R}{L} \qquad \Rightarrow \qquad \overline{n}/N = \frac{2R}{L}.$$

Di conseguenza, dato che per la legge dei grandi numeri la probabilità che $n \ne \overline{n}$ è esponenzialmente piccola in N per $N \gg 1$, se $2R/L > 1/2$ la frazione di particelle fuori della regione $|x| \le R$ sarà minore di $1/2$ per ogni temperatura. Il valore minimo di R richiesto è quindi

$$\boxed{R \ge R^* = L/4.}$$

2.a) Se il sistema è composto da Bosoni di spin 0 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:

$$G(\epsilon) = \int \frac{d^2p\,d^2q}{h^2}\,\delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q})\big) = \int \frac{d^2p\,d^2q}{h^2}\,\delta\big(\epsilon - p^2/2m - 2A|x|\big)$$

ed $\epsilon_{\min} = \min H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = 0$.
Utilizzando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$ si ha:

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{L}{h^2}\int_{-L/2}^{L/2} dx\,\frac{\partial}{\partial\epsilon}\int d^2p\,\theta\big(\epsilon - p^2/2m - 2A|x|\big) \\ &= \frac{L}{h^2}\int_{-L/2}^{L/2} dx\,2m\pi\frac{\partial}{\partial\epsilon}\big(\epsilon-2A|x|\big)\theta\big(\epsilon-2A|x|\big) \\ &= \frac{2mL\pi}{h^2}\int_{-L/2}^{L/2} dx\,\theta\big(\epsilon-2A|x|\big), \end{aligned}$$

da cui:

$$G(\epsilon) = \begin{cases} \dfrac{2\pi mL}{Ah^2}\,\epsilon, & \epsilon \le AL; \\ \\ \dfrac{2\pi mL^2}{h^2}, & \epsilon > AL; \end{cases}$$

Alla temperatura critica $\mu = \epsilon_{\min} = 0$, per cui notando che

$$\frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon}-1} \sim \frac{\epsilon}{\epsilon} = O(1) \qquad \text{as } \epsilon \to 0,$$

segue che

$$\boxed{\int_0^\infty d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon}-1} < \infty, \qquad \Rightarrow \text{Esiste condensazione BE.}}$$

3.a) L'energia del sistema non dipende dal valore dello spin delle particelle, quindi il numero totale di particelle è:

$$N = 2\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon),$$

dove $G(\epsilon)$ è la stessa calcolata al punto precedente.

Affinchè tutte le particelle a $T=0$ siano contenute nella regione $|x| < L/4$ è necessario che l'energia di Fermi sia $\epsilon_\mathrm{F} < AL/2$. Il numero massimo di particelle si ha per $\epsilon_\mathrm{F} = AL/2$ e vale:

$$N = 2\,\frac{2\pi mL}{Ah^2}\int_0^{AL/2} d\epsilon\,\epsilon = \frac{2\pi mL}{Ah^2}\big(AL/2\big)^2$$

ovvero:

$$\boxed{N = \frac{\pi m A L^3}{2h^2}.}$$

3.b) Il valore medio $\langle |x| \rangle$ a $T=0$ è dato da

$$\langle |x| \rangle = \frac{2}{N}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon \int_{-L/2}^{L/2} dx\, G(\epsilon, x)\, x,$$

dove

$$\begin{aligned} G(\epsilon, x') = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\,\delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q})\big)\,\delta(x-x') &= \frac{L}{h^2}\int d^2p\,\delta\big(\epsilon - p^2/2m - 2A|x'|\big) \\ &= \frac{2mL\pi}{h^2}\theta\big(\epsilon - 2A|x'|\big), \end{aligned}$$

è la densità degli stati di singola particella con energia ϵ e coordinata $x = x'$. Sostituendo si ha

$$\langle |x| \rangle = \frac{4mL\pi}{Nh^2}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon \int_0^{L/2} dx\, x\,\theta\big(\epsilon - 2Ax\big).$$

Supponiamo $\epsilon_\mathrm{F} \le AL$, allora

$$\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon \int_0^{L/2} dx\, x\,\theta\big(\epsilon - 2Ax\big) = \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon \int_0^{\epsilon/2A} dx\, x \;= \frac{1}{2}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,(\epsilon/2A)^2 = \frac{1}{24A^2}\,\epsilon_\mathrm{F}^3.$$

Inoltre

$$N = 2\,\frac{2\pi m L}{A h^2} \int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon\, \epsilon = \frac{2\pi m L}{A h^2} \epsilon_{\mathrm{F}}^2,$$

per cui

$$\langle |x| \rangle = \frac{A h^2}{2\pi m L} \epsilon_{\mathrm{F}}^{-2} \frac{4 m L \pi}{h^2} \frac{1}{24 A^2}\, \epsilon_{\mathrm{F}}^3 = \frac{1}{12 A}\, \epsilon_{\mathrm{F}}.$$

Eliminando ϵ_{F} in funzione di N otteniamo:

$$\boxed{\langle |x| \rangle = \frac{1}{12 A}\, \epsilon_{\mathrm{F}} = \frac{L}{12}\sqrt{\frac{N}{N_{\mathbf{c}}}}, \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} \leq AL,\ N \leq N_{\mathbf{c}} = \frac{2\pi m A L^3}{h^2}.}$$

Se invece $\epsilon_{\mathrm{F}} > AL$ si ha:

$$\begin{aligned}
\int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \int_0^{L/2} dx\, x\, \theta\big(\epsilon - 2Ax\big) &= \int_0^{AL} d\epsilon \int_0^{\epsilon/2A} dx\, x + \int_{AL}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \int_0^{L/2} dx\, x \\
&= \frac{AL^3}{24} + \frac{L^2}{8}(\epsilon_{\mathrm{F}} - AL) \\
&= \frac{L^2}{8}\left(\epsilon_{\mathrm{F}} - \frac{2}{3} AL\right).
\end{aligned}$$

Analogamente

$$N = 2\,\frac{2\pi m L}{h^2}\left[\frac{1}{A}\int_0^{AL} d\epsilon\, \epsilon + L \int_{AL}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon\right] = \frac{4\pi m L^2}{h^2}\left(\epsilon_{\mathrm{F}} - \frac{1}{2} AL\right),$$

per cui

$$\langle |x| \rangle = \frac{L}{8}\, \frac{\epsilon_{\mathrm{F}} - 2AL/3}{\epsilon_{\mathrm{F}} - AL/2}.$$

Eliminando ϵ_{F} in funzione di N si ha

$$\boxed{\langle |x| \rangle = \frac{L}{8}\, \frac{\epsilon_{\mathrm{F}} - 2AL/3}{\epsilon_{\mathrm{F}} - AL/2} = \frac{L}{8}\Big(1 - \frac{N_{\mathbf{c}}}{3N}\Big), \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} > AL,\ N > N_{\mathbf{c}} = \frac{2\pi m A L^3}{h^2}.}$$