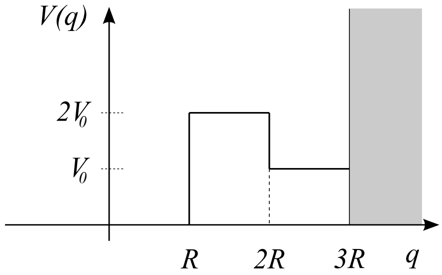
Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 22.02.2016



Es. 1

Es. 1

Si consideri un gas classico bidimensionale costituito da N particelle identiche di massa m non interagenti con Hamiltoniana di singola particella

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2m}\,|\mathbf{p}|^2 + V\big(|\mathbf{q}|\big), \qquad \mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$$

e potenziale

$$V(q) = \begin{cases} 0 & q \le R, \\ 2V_0 & R < q \le 2R, \\ V_0 & 2R < q \le 3R, \\ +\infty & q > 3R, \end{cases}$$

dove $V_0 > 0$ è una costante e $q = |\mathbf{q}|$.

Supponendo che il gas sia in equilibrio termodinamico a temperatura T, si calcoli

1. L'energia media per particella $U(T)/N$;
2. La pressione P sul bordo del disco $|\mathbf{q}| = 3R$;
3. La temperatura T_0 alla quale il numero medio di particelle contenute nella regione di spazio $2R < |\mathbf{q}| < 3R$ è la metà del numero medio di particelle contenute nella regione di spazio $|\mathbf{q}| < R$.

Es. 2

Si consideri un gas quantistico bidimensionale costituito da N particelle identiche non interagenti di massa m e spin σ, vincolate a muoversi in una regione di spazio di area A con Hamiltoniana di singola particella

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma) = c\,(1 + a\sigma)\,|\mathbf{p}|, \qquad \mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$$

dove $c > 0$ e $|a| < 1$ sono costanti.

Assumendo che il gas sia in equilibrio a temperatura T, si chiede:

1. Nel caso le particelle siano bosoni con $\sigma = -1, 0, +1$:
   (a) Mostrare che esiste la condensazione di Bose-Einstein e calcolare la temperatura critica T_c;
   (b) Calcolare la frazione di particelle nel condensato per $T = T_c/2$.
2. Nel caso le particelle siano fermioni con spin $\sigma = -1, 1$:
   (a) Calcolare il valore medio $\langle\sigma\rangle$ a $T = 0$;
   (b) L'energia totale $U(T = 0)$ del gas in funzione di N.

- **Risposte**

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

1.1 L'energia media può essere calcolata dalla funzione di partizione canonica Z_N come $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N$. 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:

$$Z_1 = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2} e^{-\beta H} = \frac{1}{h^2}\int d^2p\, e^{-\beta p^2/2m} \int d^2q\, e^{-\beta V(|\mathbf{q}|)} = \frac{2\pi m}{h^2\beta}\int d^2q\, e^{-\beta V(|\mathbf{q}|)}.$$

Nel caso specifico del problema

$$\begin{aligned}\int d^2q\, e^{-\beta V(|\mathbf{q}|)} &= \int_0^{+\infty} e^{-\beta V(q)}\, 2\pi q\, dq = 2\pi\left[\int_0^R dq\, q + \int_R^{2R} dq\, q\, e^{-2\beta V_0} + \int_{2R}^{3R} dq\, q\, e^{-\beta V_0}\right] \\ &= \pi R^2\left[1 + 3e^{-2\beta V_0} + 5e^{-\beta V_0}\right].\end{aligned}$$

Otteniamo così:

$$Z_1 = \frac{2\pi^2 R^2 m}{h^2\beta}\left[1 + 3e^{-2\beta V_0} + 5e^{-\beta V_0}\right].$$

Sostituendo:

$$\boxed{U(T)/N = \frac{\langle|\mathbf{p}|^2\rangle}{2m} + \big\langle V(|\mathbf{q}|)\big\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 = T + V_0\,\frac{6\,e^{-2\beta V_0} + 5\,e^{-\beta V_0}}{1 + 3e^{-2\beta V_0} + 5e^{-\beta V_0}}.}$$

1.2 La pressione può essere calcolata dall'energia libera $F(T, V, N)$ mediante la relazione

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = T\left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_{T,N}\ln Z_N = NT\left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_{T,N}\ln Z_1,$$

dove, vedi punto precedente,

$$Z_1 = \frac{2\pi m}{h^2\beta}\int d^2q\, e^{-\beta V(|\mathbf{q}|)} = \frac{(2\pi)^2 m}{h^2\beta}\int_0^{3R} dq\, q\, e^{-\beta V(q)},$$

e $V = \pi(3R)^2$. Ne segue che

$$\begin{aligned}P &= NT\left[\int_0^{3R} dq\, q\, e^{-\beta V(q)}\right]^{-1}\left[\frac{\partial r}{\partial\pi r^2}\frac{\partial}{\partial r}\int_0^r dq\, q\, e^{-\beta V(q)}\right]_{r=3R} \\ &= \frac{NT}{\frac{R^2}{2}\left[1 + 3e^{-2\beta V_0} + 5e^{-\beta V_0}\right]}\left[\frac{1}{2\pi r}\, r\, e^{-\beta V(r)}\right]_{r=3R},\end{aligned}$$

per cui la pressione vale

$$\boxed{P = \frac{NT}{\pi R^2}\frac{e^{-\beta V_0}}{1 + 3e^{-2\beta V_0} + 5e^{-\beta V_0}}.}$$

1.3 Il rapporto tra il numero di particelle $N(A_2)$ contenute nella regione di spazio $A_2 : 2R < |\mathbf{q}| < 3R$ ed il numero $N(A_1)$ di quelle contenute nella regione di spazio $A_1 : |\mathbf{q}| < R$ è pari a

$$\frac{N(A_2)}{N(A_1)} = \frac{P(A_2)}{P(A_1)}$$

dove

$$P(A) = \frac{1}{Z_1}\int_{\mathbf{q}\in A}\frac{d^2p\, d^2q}{h^2} e^{-\beta H} = \frac{\int_{\mathbf{q}\in A} d^2q\, e^{-\beta V(\mathbf{q})}}{\int d^2q\, e^{-\beta V(\mathbf{q})}},$$

è la probabilità di trovare una particella nella regione $\mathbf{q} \in A$. Ne seque che

$$\frac{N(A_2)}{N(A_1)} = \frac{\int_{\mathbf{q}\in A_2} d^2q\, e^{-\beta V(\mathbf{q})}}{\int_{\mathbf{q}\in A_1} d^2q\, e^{-\beta V(\mathbf{q})}} = \frac{\int_{2R}^{3R} dq\, 2\pi q\, e^{-\beta V_0}}{\int_0^R dq\, 2\pi q} = \frac{\frac{5R^2}{2}}{\frac{R^2}{2}} e^{-\beta V_0} = 5e^{-\beta V_0},$$

da cui si ricava

$$T = \frac{V_0}{\ln\left[5N(A_1)/N(A_2)\right]}.$$

Nel caso $N(A_2)/N(A_1) = 1/2$ si ha

$$\boxed{T_0 = \frac{V_0}{\ln 10}.}$$

2.1.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 ($\epsilon = \epsilon_{\text{min}}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\text{min}}$) dato da,

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

con $G(\epsilon;\sigma)$ densità degli stati di singola particella con spin σ:

$$G(\epsilon;\sigma) = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2} \delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)\big) = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - c_\sigma|\mathbf{p}|\big), \qquad c_\sigma = c\,(1 + a\sigma).$$

Usando l'identità

$$\delta\big(\epsilon - c_\sigma p\big) = \frac{1}{c_\sigma}\, \delta(p - \epsilon/c_\sigma),$$

otteniamo

$$G(\epsilon;\sigma) = \frac{A}{h^2} \int_0^\infty dp\, 2\pi p\, \delta\big(\epsilon - c_\sigma p\big) = \frac{2\pi A}{h^2}\, \frac{\epsilon}{c_\sigma^2}\, \theta(\epsilon).$$

Alternativamente utilizzando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$,

$$G(\epsilon;\sigma) = \frac{A}{h^2} \frac{d}{d\epsilon} \int d^2p\, \theta\big(\epsilon - c_\sigma|\mathbf{p}|\big), = \frac{A}{h^2} \frac{d}{d\epsilon} \left[\pi(\epsilon/c_\sigma)^2\theta(\epsilon)\right] = \frac{2\pi A}{h^2}\, \frac{\epsilon}{c_\sigma^2}\, \theta(\epsilon).$$

Sostituendo otteniamo

$$\tilde{N} = \frac{2\pi A}{h^2\, \overline{c^2}} \int_0^{+\infty} d\epsilon\, \frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}, \qquad 1/\overline{c^2} = \sum_\sigma \frac{1}{c_\sigma^2}.$$

Per $\mu = 0$

$$\boxed{\int_0^{+\infty} \frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} < \infty \quad \Rightarrow \quad \text{Esiste condensazione Bose-Einstein.}}$$

Per calcolare la temperatura critica poniamo $\mu = 0$ e $y = \beta\epsilon$, e ricordando che

$$\int_0^{+\infty} dy\, \frac{y^{x-1}}{e^y - 1} = \Gamma(x)\, \zeta(x),$$

con $\Gamma(x)$ funzione Gamma di Eulero e $\zeta(x)$ funzione di zeta Riemann, si ha

$$\tilde{N} = \frac{2\pi A}{h^2\,\overline{c^2}} T^2 \int_0^{+\infty} dy\, \frac{y}{e^y - 1} = \frac{2\pi A}{h^2\,\overline{c^2}} \zeta(2) T^2.$$

Da cui

$$\boxed{T_\mathrm{c} = \sqrt{\frac{h^2\,\overline{c^2}}{2\pi\zeta(2)}\,\frac{N}{A}}.}$$

2.1.b Dalle relazioni ottenute al punto precedente segue facilmente che $\tilde{N}/N = (T/T_\mathrm{c})^2$ per $T < T_\mathrm{c}$, quindi

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_\mathrm{c}}\right)^2\bigg|_{T=T_\mathrm{c}/2} = 1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4}.}$$

2.2.a Per definizione

$$\langle\sigma\rangle = \sum_\sigma P(\sigma)\,\sigma,$$

dove $P(\sigma)$ è la probabilità di osservare il valore σ. Se $N(\sigma)$ è il numero di particelle con spin σ, allora

$$P(\sigma) = \frac{N(\sigma)}{N} = \frac{1}{N}\int_{\epsilon_\mathrm{min}}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon), \qquad n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\epsilon-\mu}+1},$$

con $G(\epsilon;\sigma)$ densità degli stati di singola particella. Osservando che $N = \sum_\sigma N(\sigma)$, si ha [$\epsilon_\mathrm{min} = 0$]:

$$P(\sigma) = \frac{\int_0^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon)}{\sum_\sigma \int_0^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon)} \qquad \xrightarrow[T=0]{} \qquad P(\sigma) = \frac{\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)}{\sum_\sigma \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)}.$$

Usando la $G(\epsilon;\sigma)$ calcolata al punto precedente si ottiene,

$$\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma) = \frac{\pi A}{h^2}\frac{\epsilon_\mathrm{F}^2}{c_\sigma^2}, \qquad c_\sigma = c\,(1+a\sigma).$$

per cui

$$P(\sigma) = \frac{1/(1+a\sigma)^2}{\sum_{\sigma=\pm1} 1/(1+a\sigma)^2} = \frac{(1-a^2)^2}{2(1+a^2)(1+a\sigma)^2}.$$

Sostituendo:

$$\langle\sigma\rangle = \frac{(1-a^2)^2}{2(1+a^2)} \sum_{\sigma=\pm1} \frac{\sigma}{(1+a\sigma)^2} = \frac{(1-a^2)^2}{2(1+a^2)}\left[\frac{1}{(1+a)^2} - \frac{1}{(1-a)^2}\right],$$

ovvero

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = -\frac{2a}{1+a^2}.}$$

È facile mostrare che per questo sistema il risultato vale per qualsiasi temperatura, e non solo per $T = 0$, e quindi anche nel limite classico.

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

$$U(T=0) = \sum_{\sigma=\pm1}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\,\epsilon = \frac{2\pi A}{h^2c^2}\sum_{\sigma=\pm1}\frac{1}{(1+a\sigma)^2}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,\epsilon^2 = \frac{2\pi A}{h^2c^2}\frac{2(1+a^2)}{(1-a^2)^2}\frac{\epsilon_\mathrm{F}^3}{3}.$$

La relazione the l'energia di Fermi $\epsilon_{\rm F}$ ed N si ricava da:

$$N = \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma) = \frac{2\pi A}{h^2c^2} \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{1}{(1+a\sigma)^2} \int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \epsilon = \frac{2\pi A}{h^2c^2} \frac{2(1+a^2)}{(1-a^2)^2} \frac{\epsilon_{\rm F}^2}{2},$$

che invertita fornisce

$$\epsilon_{\rm F} = \sqrt{\frac{h^2c^2}{2\pi} \frac{(1-a^2)^2}{(1+a^2)} \frac{N}{A}},$$

Sostituendo nell'espressione per $U(T=0)$ si ha

$$\boxed{U(T=0) = \frac{2}{3} N\epsilon_{\rm F} = \frac{hc\,(1-a^2)}{\sqrt{2\pi A\,(1+a^2)}}\, N^{3/2}.}$$