Corso di Meccanica Statistica
Proff. M. Falcioni, A. Vulpiani
Compito del 20/02/2015

Scrivere in stampatello, in alto a sinistra,
COGNOME e N. (iniziale del nome) // Esempio: ROSSI M.

Si consideri un gas unidimensionale costituito da N particelle identiche, non interagenti, vincolate a muoversi nell' intervallo $0 \leq x \leq L$, con Hamiltoniana di singola particella data da

$$\mathcal{H} = a\,|p| + V_0\,\sigma\ , \tag{1}$$

dove a e V_0 sono due costanti positive, σ è una variabile discreta che può assumere due valori: $\sigma = \pm 1$.

A) Supponendo che valga la statistica classica e che il gas sia in equilibrio a temperatura T, si calcoli:

1) l' energia media per particella, $U(T)/N$;

2) la probabilità che una data particella abbia energia $\epsilon < 0$.

B) Nel caso che le particelle siano fermioni di spin 1/2 a $T = 0$,

3) si determini il numero massimo di particelle, $\widetilde{N}$, che può contenere il sistema affinché si abbia $\langle \sigma \rangle = -1$;

4) si calcoli l' energia del sistema $U(T = 0)$ per $N = 2\widetilde{N}$.

C) Nel caso che le particelle siano bosoni di spin 0, si determini il massimo valore che può assumere il potenziale chimico del sistema e si discuta l' esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.

SOLUZIONE

A$_1$) Per un gas perfetto

$$U = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln z \ ,$$

dove, in questo caso

$$z = \frac{1}{h} \sum_\sigma \int \mathrm{d}x \, \mathrm{d}p \, e^{-\beta H(x,p,\sigma)} = \frac{1}{h} \sum_\sigma \int_0^L \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \ e^{-\beta a |p|} \ e^{-\beta \sigma \, V_0} \ ,$$

cioè:

$$z = \frac{L}{h} \left(2 \int_0^{+\infty} \mathrm{d}p \ e^{-\beta a \, p} \right) \left(\sum_{\sigma = \pm 1} e^{-\beta \sigma \, V_0} \right)$$

$$z = \frac{L}{h} \left(\frac{2}{\beta \, a} \right) \left(e^{+\beta \, V_0} + e^{-\beta \, V_0} \right) .$$

Infine

$$z = \frac{4L}{ah} \ \beta^{-1} \ \cosh(\beta \ V_0) \ .$$

Derivando $\ln z$ si ottiene

$$\frac{U}{N} = kT - V_0 \ \tanh(V_0/kT) \ .$$

A$_2$) Dalla distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$\rho(x,p,\sigma) = \frac{e^{-\beta H(x,p,\sigma)}}{\sum_{\sigma'} \int \mathrm{d}x' \mathrm{d}p' e^{-\beta H(x',p',\sigma')}} = \frac{e^{-\beta H(x,p,\sigma)}}{h \ z} \ ,$$

integrando sugli stati con energia ϵ, si ottiene

$$\rho(\epsilon) = \frac{\omega(\epsilon) \ e^{-\beta \epsilon}}{h \ z} \ ,$$

dove

$$\omega(\epsilon) = \frac{\mathrm{d}\Sigma(\epsilon)}{\mathrm{d}\epsilon} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\epsilon} \sum_\sigma \int_{H \leq \epsilon} \mathrm{d}x \ \mathrm{d}p \ ;$$

si ha quindi

$$\Sigma(\epsilon) = \int_{a|p| - V_0 \leq \epsilon} \mathrm{d}x \ \mathrm{d}p + \int_{a|p| + V_0 \leq \epsilon} \mathrm{d}x \ \mathrm{d}p$$

$$\Sigma(\epsilon) = L \int\limits_{|p| \leq (\epsilon + V_0)/a} \mathrm{d}p + L \int\limits_{|p| \leq (\epsilon - V_0)/a} \mathrm{d}p$$

cioè

$$\Sigma(\epsilon) = \frac{2L}{a}(\epsilon + V_0) + \theta(\epsilon - V_0)\,\frac{2L}{a}(\epsilon - V_0)\ ,$$

dove va osservato che le energie partono da $-V_0$ e la funzione gradino θ segnala che il secondo contributo è presente solamente per le energie $\epsilon > +V_0$. Derivando la Σ si scrive quindi

$$\rho(\epsilon) = \frac{(2L/a)(1+\theta)\ e^{-\beta\epsilon}}{h\ z}\ .$$

Ricordando che la minima energia di singola particella è $-V_0$, la probabilità che una particella abbia energia minore di zero è data da

$$p(\epsilon < 0) = \int_{-V_0}^{0} \rho(\epsilon)\, d\epsilon = \frac{2\,L/a}{h\ z} \int_{-V_0}^{0} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$p(\epsilon < 0) = \frac{1}{2\cosh(\beta V_0)} \Big(-1 + e^{\beta V_0} \Big)\ .$$

B$_3$) Affinché $\langle\sigma\rangle = -1$ non devono essere occupati stati con $\sigma = +1$, che hanno energie $\epsilon > V_0$. Il massimo numero di particelle che soddisfa la condizione data si ottiene ponendo la massima energia di Fermi consentita pari a V_0.

$$\widetilde{N} = \mathcal{N}(\epsilon = V_0 = \epsilon_{F_{max}})\ ,$$

dove $\mathcal{N}(\epsilon)$, il numero di stati con energia fino a ϵ, è dato da

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{g}{h}\,\Sigma(\epsilon),$$

ponendo, per fermioni di spin 1/2, $g = 2$. Si ottiene

$$\widetilde{N} = \frac{2}{h}\,\frac{2L}{a}\,(2V_0) = \frac{8\,L}{a\,h}\,V_0$$

B$_4$) Se il sistema contiene $N = 2\,\widetilde{N}$ particelle, la sua energia di Fermi si ricava dalla relazione

$$\frac{16\,L}{a\,h}\,V_0 = N = \frac{2}{h}\,\Sigma(\epsilon_F) = \frac{4L}{ha}\,(\epsilon_F + V_0) + \frac{4L}{ha}\,(\epsilon_F - V_0) = \frac{8L}{ha}\,\epsilon_F\ ;$$

ovvero $\epsilon_F = 2V_0$, per cui, essendo

$$U(T=0) = \int_{-V_0}^{\epsilon_F} \epsilon \, G(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon \, ,$$

dove

$$G(\epsilon) = \frac{\mathrm{d}\mathcal{N}}{\mathrm{d}\epsilon}$$

è la densità degli stati, si ha

$$U(T=0) = \int_{-V_0}^{2V_0} \epsilon \, \frac{4L}{ha}\Big(1 + \theta(\epsilon - V_0)\Big) \, \mathrm{d}\epsilon \, = \frac{4L}{ha}\Big(\int_{-V_0}^{2V_0} \epsilon \, \mathrm{d}\epsilon + \int_{+V_0}^{2V_0} \epsilon \, \mathrm{d}\epsilon\Big)$$

$$U(T=0) = \frac{12L}{ha} V_0^2 \, .$$

$\mathbf{C}_5$) Il massimo valore del potenziale chimico è dato dal minimo dell'energia di singola particella, che in questo caso è $-V_0$. Il numero medio di bosoni presenti nel sistema è dato da

$$N = \int_{\epsilon_{min}}^{\infty} \frac{G(\epsilon)}{(1/f)\exp(\beta\,\epsilon) - 1} \, \mathrm{d}\epsilon = \int_{-V_0}^{V_0} \frac{(2L/ha)\mathrm{d}\epsilon}{(1/f)\exp(\beta\,\epsilon) - 1} + \int_{V_0}^{\infty} \frac{(4L/ha)\mathrm{d}\epsilon}{(1/f)\exp(\beta\,\epsilon) - 1} \, ,$$

dove si è usata la relazione $G(\epsilon) = \omega(\epsilon)/h$, f indica la fugacità ed è $f < f_{max} = \exp(-\beta\, V_0)$. Interessa l'andamento dell' integrale per $f \to f_{max}$. Nell' espressione risultante ponendo $f = f_{max}$

$$N = \frac{2L}{ha} \int_{-V_0}^{V_0} \frac{\mathrm{d}\epsilon}{\exp[\beta\,(\epsilon + V_0)] - 1} + \frac{4L}{ha} \int_{V_0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\epsilon}{\exp[\beta\,(\epsilon + V_0)] - 1}$$

il secondo contributo è finito per ogni temperatura finita, mentre il primo è divergente: ponendo $\epsilon + V_0 = t$, in prossimità dell'estremo inferiore d' integrazione ($t = 0$), l'esponenziale $\exp(\beta t)$ al denominatore può essere sviluppato al primo ordine e risulta un andamento del tipo $\int \mathrm{d}t/t$, cioè logaritmicamente divergente. Concludiamo che il sistema non mostra condensazione.