Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 27.02.2017

Es. 1

Si consideri un sistema di N particelle identiche di massa m contenute in un volume V. Le particelle sono non interagenti e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma) = a|\mathbf{p}|^3 + b\sigma, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3, \ \mathbf{q} \in V,$$

dove a e b sono costanti strettamente positive mentre σ è una variabile discreta che può assumere i valori ± 1. Assumendo che per il sistema, in equilibrio a temperatura T, valga la statistica classica di Boltzmann:

1.a) Calcolare l'energia media $E(T, V, N)$ del sistema.

1.b) Calcolare il valor medio della funzione $f(\mathbf{p}, \sigma) = |\mathbf{p}|^2/(2 + \sigma)$.

1.c) Calcolare la probabilità $Q(\epsilon)$ che una data particella abbia energia $\epsilon < 0$.

Es. 2

Si consideri un sistema di N particelle identiche di massa m non interagenti, vincolate a muoversi su una superficie bidimensionale di area A e con Hamiltoniana di singola particella:

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

dove σ è la variabile di spin mentre a e b sono costanti strettamente positive.

Assumendo che le particelle siano Bosoni di spin 1:

2.a) Mostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein e scrivere, senza risolvere, l'equazione che definisce la temperature di condensazione T_c.

Assumendo che le particelle siano Fermioni di spin 1/2:

2.b) Calcolare il valore medio $\langle\sigma\rangle$ a $T = 0$ in funzione di N ed A.

2.c) Calcolare l'energia del sistema a temperatura nulla $E(T = 0)$ in funzione di N ed A.

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

• **Risposte**

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

1.a) L'energia media può essere calcolata direttamente dalla funzione di partizione canonica $Z(T,V,N)$ mediante la relazione $E(T,V,N) = -(\partial/\partial\beta)\ln Z(T,V,N)$. Per un sistema di particelle identiche non interagenti

$$Z(T,V,N) = Z(T,V)^N/N! \qquad \Rightarrow \qquad E(T,V,N) = -N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z(T,N), \tag{1}$$

dove

$$Z(T,V) = \sum_{\sigma=\pm1}\int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)},$$

è la funzione di partizione canonica di singola particella. Sostituendo la forma esplicita di $H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)$ otteniamo

$$\begin{aligned} Z(T,V) &= \frac{V}{h^3}\int d^3p\, e^{-\beta a|\mathbf{p}|^3}\sum_{\sigma=\pm1} e^{-\beta b\sigma} \\ &= \frac{V}{h^3}4\pi\int_0^{+\infty} dp\, p^2 e^{-\beta a p^3}\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right) = \frac{4\pi}{3}\frac{V}{h^3\beta a}\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

Sostituendo nella (1) si ha

$$\boxed{E(T,V,N) = N\big[T - b\tanh\beta b\big].}$$

1.b) Data una qualsiasi funzione di singola particella $f(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)$ il suo valor medio in equilibrio è dato da

$$\langle f\rangle = \frac{1}{Z(T,V)}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, f(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}.$$

Nel caso specifico del problema

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\frac{|\mathbf{p}|^2}{2+\sigma}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)} &= \frac{V}{h^3}\int d^3p\, |\mathbf{p}|^2 e^{-\beta a|\mathbf{p}|^3}\sum_{\sigma=\pm1}\frac{e^{-\beta b\sigma}}{2+\sigma} \\ &= \frac{V}{h^3}4\pi\int_0^{+\infty} dp\, p^4 e^{-\beta a p^3}\left(e^{\beta b} + \frac{1}{3}e^{-\beta b}\right) \\ &= \frac{V}{h^3}\frac{4\pi}{3}\frac{\Gamma(5/3)}{(\beta a)^{5/3}}\left(e^{\beta b} + \frac{1}{3}e^{-\beta b}\right), \end{aligned}$$

dove $\Gamma(x)$ è la funzione Gamma di Eulero. Utilizzando la (2), e la relazione $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$, si ha

$$\boxed{\langle f\rangle = \frac{2}{9}\frac{\Gamma(2/3)}{(\beta a)^{2/3}}\frac{3e^{\beta b} + e^{-\beta b}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}}.}$$

1.c) La probabilità $Q(\epsilon)$ è data da

$$Q(\epsilon) = \int_{-\infty}^0 d\epsilon\, p(\epsilon),$$

dove $p(\epsilon)\, d\epsilon$ è la probabilità che una singola particella abbia energia compresa nell'intervallo $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$:

$$p(\epsilon)\, d\epsilon = \frac{1}{Z(T,V)}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}\delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)\big)\, d\epsilon.$$

Introducendo la densità degli stati di singola particella

$$G(\epsilon) = \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, \delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma)\big),$$

la $p(\epsilon)$ può essere convenientemente riscritta come:

$$p(\epsilon) = \frac{G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}}{\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}},$$

e quindi:

$$Q(\epsilon) = \frac{\int_{-\infty}^{0} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}}{\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}}.$$

Nel caso specifico del problema

$$G(\epsilon) = \frac{V}{h^3} \sum_{\sigma=\pm 1} \int d^3p\, \delta\big(\epsilon - a|\mathbf{p}|^3 - b\sigma\big) = \frac{V}{h^3} 4\pi \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^{+\infty} dp\, p^2 \delta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big)$$

L'integrale si calcola facilmente con la sostituzione $ap^3 = t$:

$$\int_0^{+\infty} dp\, p^2 \delta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big) = \frac{1}{3a} \int_0^{+\infty} dt\, \delta\big(\epsilon - b\sigma - t\big) = \frac{1}{3a} \theta\big(\epsilon - b\sigma\big).$$

Otteniamo così:

$$G(\epsilon) = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3 a} \Big[\theta\big(\epsilon + b\big) + \theta\big(\epsilon - b\big)\Big].$$

Di conseguenza, siccome $b > 0$:

$$\int_{-\infty}^{0} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3 a} \int_{-b}^{0} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon} = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3 \beta a} \Big(e^{\beta b} - 1\Big),$$

mentre [confrontare con la (2)]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3 a} \left[\int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon} + \int_{b}^{+\infty} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon}\right] = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3 \beta a} \Big(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\Big),$$

La probabilità $Q(\epsilon)$ vale quindi:

$$\boxed{Q(\epsilon) = \frac{e^{\beta b} - 1}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}}.}$$

Osserviamo che $Q(\epsilon) = 1$ per $T \to 0$ mentre $Q(\epsilon) = 0$ per $T \to +\infty$, in accordo con $E(T, V, N)$ calcolata al punto 1.a).

2.a Se il sistema è composto da Bosoni il numero di particelle a temperatura T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$; dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato con energia $\epsilon = \epsilon_{\min}$ ed

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

il numero di particelle nello stato non-condensato con energia $\epsilon > \epsilon_{\min}$. Per Bosoni di spin 1 la variabile di spin prende i valori $\sigma = 0, \pm 1$, e quindi $\epsilon_{\min} = -b$. La densità degli stati di singola particella $G(\epsilon)$ può essere scritta come:

$$G(\epsilon) = \sum_{\sigma=-1,0,1} G(\epsilon, \sigma),$$

dove

$$G(\epsilon,\sigma) = \int \frac{d^2p\,d^2q}{h^2}\,\delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)\big) = \frac{A}{h^2}2\pi\int_0^{+\infty} dp\,p\,\delta(\epsilon - ap - b\sigma) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\,(\epsilon - b\sigma)\,\theta\big(\epsilon - b\sigma\big). \tag{3}$$

Ne segue che

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\Big[(\epsilon+b)\,\theta(\epsilon+b) + \epsilon\,\theta(\epsilon) + (\epsilon-b)\,\theta(\epsilon-b)\Big].$$

e quindi

$$\begin{aligned}\tilde N = \int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\,\frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} &= \int_0^{+\infty} d\epsilon\,\frac{G(\epsilon-b)}{e^{\beta(\epsilon-\mu-b)}-1}\\ &= \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_0^{\infty}\frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu-b)}-1}\Big[\epsilon\,\theta(\epsilon) + (\epsilon-b)\,\theta(\epsilon-b) + (\epsilon-2b)\,\theta(\epsilon-2b)\Big]\\ &= \frac{2\pi A}{h^2a^2}\left[\int_0^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu-b)}-1} + \int_b^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon-b}{e^{\beta(\epsilon-\mu-b)}-1} + \int_{2b}^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon-2b}{e^{\beta(\epsilon-\mu-b)}-1}\right].\end{aligned} \tag{4}$$

Il secondo e terzo integrale sono chiaramente finiti per $\mu = -b$, mentre il primo si riduce a

$$\int_0^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon}-1},$$

ed è anch'esso finito. Di conseguenza:

$$\boxed{\tilde N(T \le T_{\rm c}) = \lim_{\mu\to -b^-}\int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\,\frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} < \infty, \qquad \Rightarrow \text{Esiste condensazione BE.}}$$

La temperatura critica $T_{\rm c}$ di condensazione è la temperatura per la quale $\tilde N(T_{\rm c})\Big|_{\mu=-b} = N$. Dalla (4) segue quindi

$$\boxed{N = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\left[\int_0^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon}{e^{\beta_{\rm c}\epsilon}-1} + \int_0^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon}{e^{\beta_{\rm c}(\epsilon+b)}-1} + \int_0^{\infty} d\epsilon\,\frac{\epsilon}{e^{\beta_{\rm c}(\epsilon+2b)}-1}\right].}$$

2.b Se il sistema è composto da Fermioni di spin 1/2 la variabile di spin assume i valori $\sigma = \pm 1/2$. Di conseguenza

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\sigma=\pm 1/2}\sigma N(\sigma), \tag{5}$$

dove

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

con $G(\epsilon,\sigma)$ data dalla (3), è il numero di particelle con spin σ. Nel limite $T=0$ si ha

$$N(\sigma) = \int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\,G(\epsilon,\sigma) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\,(\epsilon - b\sigma)\,\theta\big(\epsilon - b\sigma\big).$$

dove $\epsilon_{\rm F}$ è l'energia di Fermi. Ne segue che:

$$N(-1/2) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\,(\epsilon + b/2)\,\theta\big(\epsilon + b/2\big) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_0^{\epsilon_{\rm F}+b/2} d\epsilon\,\epsilon\,\theta\big(\epsilon_{\rm F} + b/2\big) = \frac{\pi A}{h^2a^2}\,(\epsilon_{\rm F}+b/2)^2\theta\big(\epsilon_{\rm F}+b/2\big),$$

$$N(+1/2) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_{-\infty}^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,(\epsilon - b/2)\,\theta\big(\epsilon - b/2\big) = \frac{2\pi A}{h^2a^2}\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}-b/2} d\epsilon\,\epsilon\,\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} - b/2\big) = \frac{\pi A}{h^2a^2}\,(\epsilon_\mathrm{F} - b/2)^2\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} - b/2\big).$$

Chiaramente deve essere $\epsilon_\mathrm{F} > -b/2 = \epsilon_\mathrm{min}$, l'energia minima di singola particella. Se $-b/2 < \epsilon_\mathrm{F} \le b/2$ allora $N(+1/2) = 0$ e dalla (5) segue immediatamente che

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{2N}\Big[N(+1/2) - N(-1/2)\Big] = -\frac{1}{2}.$$

Per esprimere in risultato in funzione di N bisogna ricavare l'energia di Fermi in funzione di N dalla condizione:

$$N = \sum_{\sigma=\pm1/2} N(\sigma) = \frac{\pi A}{h^2a^2}\Big[(\epsilon_\mathrm{F} + b/2)^2\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} + b/2\big) + (\epsilon_\mathrm{F} - b/2)^2\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} - b/2\big)\Big]. \tag{6}$$

Se $-b/2 < \epsilon_\mathrm{F} \le b/2$ questa fornisce

$$\epsilon_\mathrm{F} = b\left[\sqrt{\frac{N}{N_\mathrm{c}}} - \frac{1}{2}\right], \qquad N_\mathrm{c} = \frac{\pi A b^2}{h^2a^2}, \tag{7}$$

e quindi $\langle\sigma\rangle = -1/2$ per tutti i valori di $N \le N_\mathrm{c}$.
Se $N > N_c$ l'energia di Fermi è maggiore di $b/2$ ed $N(+1/2) > 0$. In questo caso

$$N(+1/2) - N(-1/2) = \frac{\pi A}{h^2a^2}\Big[(\epsilon_\mathrm{F} - b/2)^2 - (\epsilon_\mathrm{F} + b/2)^2\Big] = -\frac{2\pi A}{h^2a^2}b\epsilon_\mathrm{F} = -2N_\mathrm{c}\frac{\epsilon_\mathrm{F}}{b}.$$

Dalla (6) si ha

$$N = \frac{\pi A}{h^2a^2}\Big[(\epsilon_\mathrm{F} - b/2)^2 + (\epsilon_\mathrm{F} + b/2)^2\Big] = \frac{2\pi A}{h^2a^2}(\epsilon_\mathrm{F}^2 + b^2/4) = \frac{N_\mathrm{c}}{2}\left[(2\epsilon_\mathrm{F}/b)^2 + 1\right],$$

da cui si ricava

$$\epsilon_\mathrm{F} = \frac{b}{2}\sqrt{\frac{2N}{N_\mathrm{c}} - 1}. \tag{8}$$

Sostituendo nella (5) si ottiene

$$\langle\sigma\rangle = -\frac{N_\mathrm{c}}{2N}\sqrt{\frac{2N}{N_\mathrm{c}} - 1}.$$

In conclusione quindi

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = \begin{cases} -\frac{1}{2}, & N \le N_\mathrm{c} \\ \\ -\frac{N_\mathrm{c}}{2N}\sqrt{\frac{2N}{N_\mathrm{c}} - 1}, & N > N_\mathrm{c} \end{cases} \quad ; \qquad N_\mathrm{c} = \frac{\pi A b^2}{h^2a^2}.}$$

3.b L'energia a $T = 0$ vale

$$\begin{aligned} E(T=0) &= \sum_{\sigma=\pm1/2}\int_{\epsilon_\mathrm{min}}^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,\epsilon\,G(\epsilon,\sigma) \\ &= \frac{2N_\mathrm{c}}{b^2}\left[\int_{-\infty}^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,\epsilon(\epsilon + b/2)\,\theta\big(\epsilon + b/2\big) + \int_{-\infty}^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\,\epsilon(\epsilon - b/2)\,\theta\big(\epsilon - b/2\big)\right] \\ &= \frac{2N_\mathrm{c}}{b^2}\left[\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}+b/2} d\epsilon\,(\epsilon - b/2)\epsilon\,\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} + b/2\big) + \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}-b/2} d\epsilon\,(\epsilon + b/2)\epsilon\,\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} - b/2\big)\right] \\ &= \frac{2N_\mathrm{c}}{b^2}\left[\left[\frac{\epsilon^3}{3} - \frac{b\epsilon}{4}\right]_0^{\epsilon_\mathrm{F}+b/2}\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} + b/2\big) + \left[\frac{\epsilon^3}{3} + \frac{b\epsilon}{4}\right]_0^{\epsilon_\mathrm{F}-b/2}\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} - b/2\big)\right], \end{aligned}$$

ovvero

$$E(T=0) = \frac{2N_c}{3b^2}\left[\big(\epsilon_F + b/2\big)^2\big(\epsilon_F - b/4\big)\,\theta\big(\epsilon_F + b/2\big) + \big(\epsilon_F - b/2\big)^2\big(\epsilon_F + b/4\big)\,\theta\big(\epsilon_F - b/2\big)\right].$$

Se $-b/2 < \epsilon_F \le b/2$ il secondo termine non contribuisce ed, usando la (7), si ha:

$$E(T=0) = \frac{2N_c}{3b^2}\big(\epsilon_F + b/2\big)^2\big(\epsilon_F - b/4\big) = \frac{2N_c}{3b^2}\,\frac{b^2 N}{N_c}\,b\left[\sqrt{\frac{N}{N_c}} - \frac{3}{4}\right] = \frac{2}{3}\,N\left[\sqrt{\frac{N}{N_c}} - \frac{3}{4}\right]b.$$

Se invece $\epsilon_F > b/2$ entrambi i termini contribuiscono e quindi, usando la (8), si ha

$$E(T=0) = \frac{2N_c}{3b^2}\left[\big(\epsilon_F + b/2\big)^2\big(\epsilon_F - b/4\big) + \big(\epsilon_F - b/2\big)^2\big(\epsilon_F + b/4\big)\right] = \frac{4N_c}{3b^2}\epsilon_F^3 = \frac{N_c}{6}\left[\frac{2N}{N_c} - 1\right]^{2/3} b.$$

Riassumendo

$$\boxed{E(T=0) = \begin{cases} \frac{2}{3}\,N\left[\sqrt{\frac{N}{N_c}} - \frac{3}{4}\right]b, & N \le N_c \\ \\ \frac{N_c}{6}\left[\frac{2N}{N_c} - 1\right]^{2/3} b, & N > N_c \end{cases} \qquad ; \qquad N_c = \frac{\pi A b^2}{h^2 a^2}.}$$