Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 08.02.2017

Si consideri un sistema di N particelle identiche di massa m vincolate a muoversi lungo l'asse x. Le particelle sono non interagenti e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

dove

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x < L; \\ 2V_0, & L \leq x \leq 2L; \\ -V_0, & 2L < x \leq 3L; \\ +\infty & x < 0, x > 3L; \end{cases}$$

con V_0 costante positiva arbitraria.

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann:
   - 1.a) Calcolare la pressione nei punti $x = 0$ e $x = 3L$.
   - 1.b) Calcolare la densità di probabilità $p(\epsilon)$ dell'energia di singola particella.
   - 1.c) Calcolare il rapporto tra il numero medio di particelle contenute nell'intervallo $0 < x < L$ ed il numero medio di particelle contenute nell'intervallo $2L < x < 3L$.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Discutere l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 3/2:
   - 3.a) Determinare il numero massimo di particelle tale che a $T = 0$ tutte le particelle si trovino nell'intervallo $2L < x < 3L$.
   - 3.b) Calcolare l'energia del sistema a temperatura nulla $E(T = 0)$ sapendo che l'energia di Fermi vale $\epsilon_{\mathrm{F}} = 3V0$.

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

- **Risposte**

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

1.a) La pressione può essere calcolata a partire dalla funzione di partizione canonica mediante la relazione termodinamica:

$$P = -\left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_{T,N} F(T,V,N) = T\left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_{T,N} \ln Z(T,V,N) = NT\left(\frac{\partial}{\partial V}\right)_{T} \ln Z_1(T,V), \tag{1}$$

dove, essendo le N particelle non interagenti, $Z(T,V,N) = Z_1(T,V)^N/N!$ con:

$$\begin{aligned} Z_1(T,V) &= \int \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-\beta p^2/2m} \int_0^{3L} dx\, e^{-\beta V(x)} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi m}{h^2\beta}} L\left[e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0\right], \end{aligned} \tag{2}$$

funzione di partizione di una singola particella. Nel problema in questione il potenziale $V(x)$ non è costante nell'intervallo $[0, 3L]$ e quindi la pressione dipende dal punto $x \in [0, 3L]$. Inoltre il parametro L entra nella definizione del potenziale, per cui l'applicazione diretta della (1) con $V = 3L$ può facilmente condurre ad un risultato errato.

Consideriamo quindi un volumetto $dV_x = dx$ intorno al punto x, contenente dN_x particelle, in cui il potenziale può essere considerato costante. Per questo sottosistema si ha

$$Z_1(T, dV_x) = \int_{x\in dV_x} \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} = \sqrt{\frac{2\pi m}{h^2\beta}} \int_{x\in dV_x} dx\, e^{-\beta V(x)} = \sqrt{\frac{2\pi m}{h^2\beta}} e^{-\beta V(x)}\, dV_x,$$

che utilizzando la (1), fornisce

$$P(x) = dN_x T\left(\frac{\partial}{\partial dV_x}\right)_T \ln Z_1(T, dV_x) = \rho(x) T,$$

dove $\rho(x) = dN_x/dV_x$ è la densià di particelle nel volumetto dV_x.

Essendo le particelle indipendenti si ha $dN_x = N p_1(x) dV_x$, dove $p_1(x)$ è la probabilità di trovare una particella in dV_x. Di conseguenza,

$$dN_x = N\frac{Z_1(T, dV_x)}{Z_1(T,V)} = N\frac{e^{-\beta V(x)}\, dV_x}{\int_0^{3L} dx\, e^{-\beta V(x)}}, = \frac{N}{L}\frac{e^{-\beta V(x)}\, dV_x}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0}, \tag{3}$$

da cui

$$P(x) = \frac{NT}{L}\frac{e^{-\beta V(x)}}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0}, \qquad 0 \le x \le 3.$$

Da questa segue

$$\boxed{P(0) = \frac{NT}{L}\frac{e^{-\beta V_0}}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0},}$$

e

$$\boxed{P(3L) = \frac{NT}{L}\frac{e^{\beta V_0}}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0},}$$

1.b) La densità di probabilità dell'energia di singola particella è data da:

$$p(\epsilon) = \frac{1}{Z_1(T,V)}\int \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)}\, \delta\big(\epsilon - H(p,x)\big) = \frac{G(\epsilon)}{Z_1(T,V)}\, e^{-\beta\epsilon},$$

dove,

$$G(\epsilon) = \int \frac{dp\,dx}{h}\,\delta\big(\epsilon - H(p,x)\big) = \frac{1}{h}\int_0^{3L} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\delta\big(\epsilon - p^2/2m - V(x)\big)$$
$$= \frac{2}{h}\sqrt{2m}\int_0^{3L} dx \sqrt{\epsilon - V(x)}\,\theta\big(\epsilon - V(x)\big)$$

Usando l'identità

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

otteniamo

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{2}{h}\sqrt{\frac{m}{2}}\int_0^{3L} dx \frac{\theta\big(\epsilon - V(x)\big)}{\sqrt{\epsilon - V(x)}} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{h^2}}\,L\left[\frac{\theta(\epsilon - V_0)}{\sqrt{\epsilon - V_0}} + \frac{\theta(\epsilon - 2V_0)}{\sqrt{\epsilon - 2V_0}} + \frac{\theta(\epsilon + V_0)}{\sqrt{\epsilon + V_0}}\right]. \end{aligned} \tag{4}$$

Alternativamente si può utilizzare l'identità

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

Sostituendo l'espressione (2)di $Z_1(T,V)$ calcolata al punto precedente si trova:

$$\boxed{p(\epsilon) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\,\frac{(\epsilon - V_0)^{-1/2}\theta(\epsilon - V_0) + (\epsilon - 2V_0)^{-1/2}\theta(\epsilon - 2V_0) + (\epsilon + V_0)^{-1/2}\theta(\epsilon + V_0)}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0}\,e^{-\beta\epsilon}.}$$

Osserviamo che $\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\,p(\epsilon) = 1$.

1.c) Il numero medio di particelle dN_x contenute nell'intervallo $[x, x+dx]$ è data dalla (3). Di conseguenza il numero medio di particelle nell'intervallo $[0,L]$ è dato da

$$\overline{N}_{[0,L]} = \int_{x\in[0,L]} dN_x = N\frac{e^{-\beta V_0}}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0},$$

mentre quello nell'intervallo $[2L,3L]$ è dato da

$$\overline{N}_{[2L,3L]} = \int_{x\in[2L,3L]} dN_x = N\frac{e^{+\beta V_0}}{e^{-2\beta V_0} + 2\cosh\beta V_0}.$$

Il rapporto richiesto vale

$$\boxed{\overline{N}_{[0,L]}/\overline{N}_{[2L,3L]} = e^{-2\beta V_0}.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni di spin 0 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 $\epsilon > \epsilon_{\mathrm{min}}$. Per il sistema in questione $\epsilon_{\mathrm{min}} = -V_0$ e $G(\epsilon)$, la densità degli stati di singola particella, è data dalla (4). Ne segue che

$$\begin{aligned}\tilde{N} = \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} &= \int_{0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon-V_0)}{e^{\beta(\epsilon-\mu-V_0)}-1} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{h^2}}\, L \int_0^{\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu-V_0)}-1} \left[\frac{\theta(\epsilon-2V_0)}{\sqrt{\epsilon-2V_0}} + \frac{\theta(\epsilon-3V_0)}{\sqrt{\epsilon-3V_0}} + \frac{\theta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}}\right].\end{aligned}$$

Se $\mu = -V_0$ l'ultimo integrale

$$\int_0^{\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta\epsilon}-1} \frac{\theta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}}$$

è divergente e quindi

$$\boxed{\lim_{\mu\to -V_0^-} \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} = \infty, \qquad \Rightarrow \text{Non esiste condensazione BE.}}$$

3.a Se il sistema è composto da Fermioni di spin $3/2$, ed essendo l'energia del sistema indipendente dal valore dello spin delle particelle, il numero di particelle a temperatura $T = 0$ è pari a:

$$N = 4 \int_{\epsilon_{\mathrm{min}}}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, G(\epsilon),$$

dove la densità degli stati di singola particella $G(\epsilon)$ è data dalla (4), ed $\epsilon_{\mathrm{min}} = -V_0$. Dalla forma del potenziale se $\epsilon_{\mathrm{min}} < V_0$ le particelle a $T = 0$ sono confinate nell'intervallo $[2L, 3L]$. Ne segue che il numero massimo richiesto si ottiene per $\epsilon_{\mathrm{min}} = -V_0$ e vale:

$$N = 4 \int_{-V_0}^{V_0} d\epsilon \, G(\epsilon) = 4\sqrt{\frac{2m}{h^2}}\, L \int_{-V_0}^{V_0} d\epsilon \, \frac{\theta(\epsilon+V_0)}{\sqrt{\epsilon+V_0}} = 8L\sqrt{\frac{2m}{h^2}}\; \sqrt{\epsilon+V_0}\Big|_{-V_0}^{V_0},$$

ovvero

$$\boxed{N = 16L\sqrt{\frac{mV_0}{h^2}}.}$$

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

$$E(T=0) = 4 \int_{\epsilon_{\mathrm{min}}}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, \epsilon \, G(\epsilon),$$

Se $\epsilon_{\mathrm{F}} = 3V_0$, dalla (4) si ha:

$$\begin{aligned}E(T=0) &= 4L\sqrt{\frac{2m}{h^2}} \left[\int_{V_0}^{3V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon-V_0}} + \int_{2V_0}^{3V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon-2V_0}} + \int_{-V_0}^{3V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon+V_0}}\right] \\ &= 4L\sqrt{\frac{2m}{h^2}} \left[\int_0^{2V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon+V_0}{\sqrt{\epsilon}} + \int_0^{V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon+2V_0}{\sqrt{\epsilon}} + \int_0^{4V_0} d\epsilon \, \frac{\epsilon-V_0}{\sqrt{\epsilon}}\right] \\ &= 4L\sqrt{\frac{2m}{h^2}} \left[\frac{2}{3}\left(\epsilon^{3/2}\Big|_0^{2V_0} + \epsilon^{3/2}\Big|_0^{V_0} + \epsilon^{3/2}\Big|_0^{4V_0}\right) + 2V_0\left(\epsilon^{1/2}\Big|_0^{2V_0} + 2\,\epsilon^{1/2}\Big|_0^{V_0} - \epsilon^{3/2}\Big|_0^{4V_0}\right)\right]\end{aligned}$$

ovvero

$$\boxed{E(T=0) = \frac{8}{3}\big(8+9\sqrt{2}\big)L\sqrt{\frac{mV_0^3}{h^2}}.}$$