Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 10.05.2017

Es. 1

Un sistema è costituito da N particelle non interagenti contenute in un cerchio $\mathcal{C}_R$ di raggio R e con centro in $(0,0)$ di un sistema di riferimento (x, y). L'Hamiltoniana di singola particella è

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma) = \frac{1}{2m}|\mathbf{p}|^2 + \frac{m\omega^2}{2}|\mathbf{q}|^2 + b\sigma, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2,\ \mathbf{q} \in \mathcal{C}_R,$$

dove $b \geq 0$ è una costante e σ una variabile discreta che può assumere i valori ± 1. Assumendo che valga la statistica classica di Boltzmann, si calcoli al variare della temperatura T:

1.a) L'energia media $E(T, \mathcal{C}_R, N)$ del sistema.

1.b) Il valor medio della funzione $f(\mathbf{p}, \sigma) = (p_x^4 + p_y^4)(2 + \sigma^3)$.

1.c) La probabilità $Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T)$ che una data particella abbia energia cinetica ϵ_k minore di T ed energia potenziale ϵ_V maggiore di $2T$ assumendo $b > m\omega^2 R^2/2$. $[k_\mathrm{B} = 1]$

Es. 2

Si consideri un sistema un sistema costituito da N particelle non interagenti contenute in una regione bidimensionale di area A. L'Hamiltoniana di singola particella è

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma) = a^2|\mathbf{p}|^4 + b\sigma, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2,\ \mathbf{q} \in A,$$

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) Discutere l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.

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

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

- Valutazione risposte:
  1.a: 5, 1.b: 6, 1.c: 7,
  2.a: 5, 2.b: 7

- **Risposte**

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

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

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

dove

$$Z(T, \mathcal{C}_R) = \sum_{\sigma=\pm1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)},$$

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

$$\begin{aligned} Z(T, \mathcal{C}_R) &= \frac{1}{h^2} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2} d^2p\, e^{-\beta|\mathbf{p}|^2/2m} \int_{\mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} d^2q\, e^{-\beta m\omega^2|\mathbf{q}|^2/2} \sum_{\sigma=\pm1} e^{-\beta b\sigma} \\ &= \frac{1}{h^2}\left[\frac{2\pi m}{\beta}\right]\left[2\pi \int_0^R dq\, q\, e^{-\beta m\omega^2 q^2/2}\right]\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right) = \frac{1}{h^2}\frac{2\pi m}{\beta}\frac{2\pi}{m\omega^2\beta}\left(1 - e^{-\beta m\omega^2 R^2/2}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right) \\ &= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\left(1 - e^{-\beta m\omega^2 R^2/2}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

Sostituendo nella (1) si ha

$$\boxed{E(T, \mathcal{C}_R, N) = N\left[2T - \frac{\epsilon_R}{e^{\beta\epsilon_R} - 1} - b \tanh \beta b\right], \qquad \epsilon_R = \frac{m\omega^2 R^2}{2}.}$$

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

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z(T, \mathcal{C}_R)} \sum_{\sigma=\pm1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, f(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma)\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}.$$

Nel caso specifico del problema

$$\begin{aligned} &\sum_{\sigma=\pm1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, (p_x^4 + p_y^4)(2 + \sigma^3)\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)} \\ &\qquad = \frac{1}{h^2} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2} d^2p\, (p_x^4 + p_y^4) e^{-\beta|\mathbf{p}|^2/2m} \int_{\mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} d^2q\, e^{-\beta m\omega^2|\mathbf{q}|^2/2} \sum_{\sigma=\pm1} (2 + \sigma^3)\, e^{-\beta b\sigma} \\ &\qquad = \frac{1}{h^2}\left[2\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, p^4 e^{-\beta p^2/2m}\right]\left[\frac{2\pi}{m\omega^2\beta}\left(1 - e^{-\beta m\omega^2 R^2/2}\right)\right]\left[e^{\beta b} + 3e^{-\beta b}\right] \\ &\qquad = \frac{1}{h^2}\left[2\frac{2\pi m}{\beta} 3\left(\frac{m}{\beta}\right)^2\right]\left[\frac{2\pi}{m\omega^2\beta}\left(1 - e^{-\beta m\omega^2 R^2/2}\right)\right]\left(e^{\beta b} + 3e^{-\beta b}\right) \\ &\qquad = \frac{6}{(\beta\hbar\omega)^2}\left(\frac{m}{\beta}\right)^2\left(1 - e^{-\beta m\omega^2 R^2/2}\right)\left(e^{\beta b} + 3e^{-\beta b}\right), \end{aligned}$$

dove è stata usata l'identità:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, p^4 e^{-ap^2/2} = \left(\frac{2}{a}\right)^{5/2} \Gamma(5/2) = \frac{3}{a^2}\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$$

con $\Gamma(x)$ la funzione Gamma di Eulero. Utilizzando la (2) si ha

$$\boxed{\langle f \rangle = 6\left(\frac{m}{\beta}\right)^2 \frac{e^{\beta b} + 3e^{-\beta b}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}}.}$$

1.c) La probabilità $Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T)$ è data da

$$Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T) = \frac{1}{Z(T,\mathcal{C}_R)} \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \theta(T-\epsilon_k)\, \theta(\epsilon_V - 2T) e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)},$$

dove:

$$\epsilon_k = \frac{1}{2m}|\mathbf{p}|^2, \qquad \epsilon_V = \frac{m\omega^2}{2}|\mathbf{q}|^2 + b\sigma.$$

sono rispettivamente l'energia cinetica e l'energia potenziale di singola particella nel caso specifico del problema. Dato che $H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma) = \epsilon_k + \epsilon_V$, si ha

$$\begin{aligned}
&\sum_{\sigma=\pm 1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}\, \theta(T-\epsilon_k)\, \theta(\epsilon_V - 2T) \\
&\qquad = \frac{1}{h^2}\left[2\pi \int_0^\infty dp\, p\, e^{-\beta p^2/2m}\, \theta(T - p^2/2m)\right] \times \sum_{\sigma=\pm 1}\left[2\pi \int_0^R dq\, q\, e^{-\beta m\omega^2 q^2/2 - \beta b\sigma}\, \theta(m\omega^2 q^2/2 + b\sigma - 2T)\right].
\end{aligned}$$

L'integrale nella prima parentesi quadra vale:

$$2\pi \int_0^\infty dp\, p\, e^{-\beta p^2/2m}\, \theta(T - p^2/2m) = 2\pi m \int_0^T dt\, e^{-\beta t} = \frac{2\pi m}{\beta}(1 - e^{-1}),$$

mentre quello nella seconda parentesi quadra:

$$\begin{aligned}
2\pi \int_0^R dq\, q\, e^{-\beta m\omega^2 q^2/2 - \beta b\sigma}\, \theta(m\omega^2 q^2/2 + b\sigma - 2T) &= \frac{2\pi}{m\omega^2}\int_{2T - b\sigma}^{\epsilon_R} dt\, e^{-\beta(t + b\sigma)}\, \theta(\epsilon_R + b\sigma - 2T) \\
&= \frac{2\pi}{m\omega^2 \beta}\left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R + b\sigma)}\right] \theta(\epsilon_R + b\sigma - 2T).
\end{aligned}$$

dove $\epsilon_R = m\omega^2 R^2/2$. Ne segue che:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\sigma=\pm 1} \int_{\mathbf{p}\in\mathbb{R}^2, \mathbf{q}\in\mathcal{C}_R} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}\, \theta(T-\epsilon_k)\, \theta(\epsilon_V - 2T) \\
&\qquad\qquad = \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}(1 - e^{-1}) \sum_{\sigma=\pm 1}\left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R + b\sigma)}\right] \theta(\epsilon_R + b\sigma - 2T)
\end{aligned}$$

da cui, usando la (2), otteniamo

$$Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T) = (1 - e^{-1}) \frac{\left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R - b)}\right] \theta(\epsilon_R - b - 2T) + \left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R + b)}\right] \theta(\epsilon_R + b - 2T)}{\left(1 - e^{-\beta\epsilon_R}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right)},$$

ovvero:

$$\boxed{Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T) = \begin{cases} (1 - e^{-1}) \dfrac{\left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R + b)}\right]}{\left(1 - e^{-\beta\epsilon_R}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right)}, & T \le (\epsilon_R + b)/2; \\[2ex] 0, & T > (\epsilon_R + b)/2; \end{cases} \qquad : b \ge \epsilon_R.}$$

$$\boxed{Q(\epsilon_k < T, \epsilon_V > 2T) = \begin{cases} (1 - e^{-1}) \dfrac{2e^{-2} - e^{-\beta\epsilon_R}\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right)}{\left(1 - e^{-\beta\epsilon_R}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right)}, & T \le (\epsilon_R - b)/2; \\[2ex] (1 - e^{-1}) \dfrac{\left[e^{-2} - e^{-\beta(\epsilon_R + b)}\right]}{\left(1 - e^{-\beta\epsilon_R}\right)\left(e^{\beta b} + e^{-\beta b}\right)}, & (\epsilon_R - b)/2 < T \le (\epsilon_R + b)/2; \\[2ex] 0, & T > (\epsilon_R + b)/2; \end{cases} \qquad : b < \epsilon_R.}$$

dove $\epsilon_R = m\omega^2 R^2/2$.

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

$$\begin{aligned} G(\epsilon,\sigma) = \int \frac{d^2p \, d^2q}{h^2} \, \delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma)\big) &= \frac{A}{h^2} 2\pi \int_0^{+\infty} dp \, p \, \delta(\epsilon - a^2 p^4 - b\sigma) \\ &= \frac{A}{h^2} \pi \int_0^{+\infty} dt \, \delta(\epsilon - a^2 t^2 - b\sigma). \end{aligned}$$

Posto $t_0 = \sqrt{\epsilon - b\sigma}/a$, ed utilizzando l'identià $\delta(f(t)) = \delta(t - t_0)/|f'(t_0)|$ dove $t_0 : f(t_0) = 0$, si ha

$$G(\epsilon,\sigma) = \frac{A}{h^2} \pi \theta(\epsilon - b\sigma) \int_0^{+\infty} dt \, \frac{1}{2a^2 t_0} \big[\delta(t - t_0) + \delta(t + t_0)\big] = \frac{A\pi}{2h^2 a^2 t_0} \theta(\epsilon - b\sigma) = \frac{A\pi}{2h^2 a} \frac{\theta(\epsilon - b\sigma)}{\sqrt{\epsilon - b\sigma}}. \tag{3}$$

Alternativamente

$$G(\epsilon,\sigma) = \frac{A\pi}{h^2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \int_0^{+\infty} dt \, \theta(\epsilon - a^2 t^2 - b\sigma) = \frac{A\pi}{h^2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[\frac{1}{a} \sqrt{\epsilon - b\sigma} \, \theta(\epsilon - b\sigma)\right] = \frac{A\pi}{2h^2 a} \frac{\theta(\epsilon - b\sigma)}{\sqrt{\epsilon - b\sigma}}. \quad \square$$

Ne segue che

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= \int_{-b}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \\ &= \frac{A\pi}{2h^2 a} \int_{-b}^{\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \sum_{\sigma=-1,0,1} \frac{\theta(\epsilon - b\sigma)}{\sqrt{\epsilon - b\sigma}} \\ &= \frac{A\pi}{2h^2 a} \left[\int_{-b}^{\infty} d\epsilon \, \frac{1}{\big(e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1\big)\sqrt{\epsilon + b}} + \int_0^{\infty} d\epsilon \, \frac{1}{\big(e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1\big)\sqrt{\epsilon}} + \int_b^{\infty} d\epsilon \, \frac{1}{\big(e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1\big)\sqrt{\epsilon - b}}\right]. \end{aligned} \tag{4}$$

Per $\mu = -b$ le funzioni integrande nel secondo e terzo integrale si comportano vicino all'estremo inferiore rispettivamente come $1/\sqrt{\epsilon}$ e $1/\sqrt{\epsilon - b}$. Gli integrali sono quindi finiti per $\mu = -b$. Viceversa per $\mu = -b$ la funzione integranda nel primo integrale si comporta come $1/(\epsilon + b)^{3/2}$ e l'integrale diverge. Di conseguenza:

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

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

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

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

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

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

Chiaramente deve essere $\epsilon_{\rm F} > -b/2 = \epsilon_{\rm min}$, l'energia minima di singola particella. Se $-b/2 < \epsilon_{\rm F} \le b/2$ allora $N(+1/2) = 0$ ed $N(-1/2) = N$, per cui 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:

$$N = \sum_{\sigma=\pm 1/2} N(\sigma) = \frac{A\pi}{h^2 a}\Big[\theta\big(\epsilon_{\rm F} + b/2\big)\sqrt{\epsilon_{\rm F} + b/2} + \theta\big(\epsilon_{\rm F} - b/2\big)\sqrt{\epsilon_{\rm F} - b/2}\Big].$$

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

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

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

$$N = \frac{A\pi}{h^2 a}\left[\sqrt{\epsilon_{\rm F} - b/2} + \sqrt{\epsilon_{\rm F} + b/2}\right],$$

da cui si ricava

$$\epsilon_{\rm F} = \frac{b}{4}\left[\left(\frac{N}{N_{\rm c}}\right)^2 + \left(\frac{N_{\rm c}}{N}\right)^2\right].$$

Di conseguenza

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

che sostituita nella nella (5) fornisce

$$\langle\sigma\rangle = -\frac{1}{2}\left(\frac{N_{\rm c}}{N}\right)^2.$$

In conclusione quindi

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