Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 07.11.2017

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche di massa m non interagenti contenute in un cilindro di altezza L e raggio R, con l'asse del cilindro coincidente con l'asse z di un sistema di riferimento cartesiano (x, y, z), e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p^2}{2m} + Az \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3,\ \sqrt{x^2+y^2} \le R,\ 0 \le z \le L,$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, $\mathbf{q} = (x, y, z)$ e $A > 0$ è una costante positiva arbitraria.

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann:
   - 1.a) Calcolare l'energia media per particella E/N.
   - 1.b) Calcolare la pressione nel punto ad altezza $z = h < L$ e distanza $R/2$ dall'asse del cilindro.
   - 1.c) Calcolare la probabilità $P_N(n; T)$ che nella regione $D : [\sqrt{x^2+y^2} \le R/2;\ 0 \le z \le h < L]$ vi siano n particelle a temperatura T.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Mostrare l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.b) Nel caso affermativo scrivere, senza risolvere, l'equazione che determina la temperatura critica di condensazione T_c.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Determinare il massimo valore di N tale che a $T = 0$ tutte le particelle si trovino nella regione $z < L/2$.
   - 3.b) Calcolare l'energia $E(T = 0)$ per $\epsilon_F = 2AL$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 4, 1.b: 5, 1.c: 4
  2.a: 4, 2.b: 5
  3.a: 4, 3.b: 4

Nota: Al punto 2.b lasciare indicati gli integrali eventualmente non esprimibili con funzioni elementari.

- **Risposte**

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

1.a) 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:

$$Z_1 = \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})}.$$

Ne segue che

$$E/N = -\frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1.$$

Nello caso del problema

$$Z_1 = \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta p^2/2m - \beta A z} = \left(\frac{2\pi m}{h^2\beta}\right)^{3/2} \frac{\pi R^2}{\beta A}\left(1 - e^{-\beta A L}\right).$$

Sostituendo si ha:

$$E/N = \frac{5}{2}T - AL\frac{e^{-\beta AL}}{1 - e^{-\beta AL}}.$$

ovvero:

$$\boxed{E/N = \frac{5}{2}T - \frac{AL}{e^{\beta AL} - 1}.}$$

1.b) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti la pressione P nel punto $\mathbf{q}$ vale:

$$P(\mathbf{q}) = \rho(\mathbf{q})\, T$$

dove $\rho(\mathbf{q})$ è la densità nel punto $\mathbf{q}$. Nel nostro caso $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = p^2/2m + U(z)$ e di conseguenza

$$P(z) = \rho(z)\, T, \qquad 0 \le z \le L.$$

La densità $\rho(\mathbf{q})$ può essere calcolata dalla probabilità $p_1(\mathbf{q} \in dV)\, dV$ che una particella si trovi in un volumetto dV intorno al punto $\mathbf{q}$. Usando $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = p^2/2m + U(\mathbf{q})$ si ha:

$$p_1(\mathbf{q} \in dV)\, dV = \rho(\mathbf{q})\frac{dV}{N} = \frac{dN}{N} = \frac{1}{Z_1}\int_{\mathbf{q}\in dV} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{dV\, e^{-\beta U(\mathbf{q})}}{\int d^3q\, e^{-\beta U(\mathbf{q})}},$$

da cui

$$\rho(\mathbf{q}) = N\frac{e^{-\beta U(\mathbf{q})}}{\int d^3q\, e^{-\beta U(\mathbf{q})}}.$$

Nel nostro caso $U(\mathbf{q}) = Az$ e quindi:

$$\int d^3q\, e^{-\beta U(\mathbf{q})} = \pi R^2 \int_0^L dz\, e^{-\beta A z} = \frac{\pi R^2}{\beta A}\Big(1 - e^{-\beta A L}\Big),$$

per cui:

$$\rho(\mathbf{q}) = \rho(z) = \frac{\beta A N}{\pi R^2}\frac{e^{-\beta A z}}{1 - e^{-\beta A L}}$$

e quindi

$$P(z) = \frac{AN}{\pi R^2}\frac{e^{-\beta A z}}{1 - e^{-\beta A L}}.$$

La pressione nel punto richiesto vale quindi:

$$\boxed{P(z = h) = \frac{AN}{\pi R^2}\frac{e^{-\beta A h}}{1 - e^{-\beta A L}}, \qquad 0 \le h \le L.}$$

1.b) La probabilità $P_1(\mathbf{q} \in D)$ che una particella si trovi nella regione $D : [\sqrt{x^2+y^2} \le R/2;\ 0 \le z \le h < L]$ è data da

$$P_1(\mathbf{q} \in D) = \int_{\mathbf{q}\in D} p_1(\mathbf{q} \in dV)\, dV.$$

Usando risultati del punto precedente:

$$\begin{aligned} P_1(\mathbf{q} \in D) &= \frac{1}{N}\int_{r\mathbf{q}\in D} \rho(\mathbf{q})\, dV \\ &= \frac{\beta A}{\pi R^2}\frac{\pi R^2/4}{1-e^{-\beta A L}} \int_0^h dz\, e^{-\beta A z} \\ &= \frac{1}{4}\frac{1-e^{-\beta A h}}{1-e^{-\beta A L}}. \end{aligned}$$

Siccome le particelle sono indipendenti ed una particella si troverà nella regione D con probabilità $p = P_1(\mathbf{q} \in D)$ e non vi si troverà con probabilità $1-p$, la probabilità $P_N(n)$ che n particelle siano nella regione è data da

$$\boxed{P_N(n) = \frac{N!}{(N-n)!\, n!}\, p^n (1-p)^{N-n}.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni di spin 0 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 ($\epsilon = \epsilon_{\rm min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\rm min}$) dato da,

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

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella che, trascurando le possibili correzioni introdotte dalla parete del cilindro sugli autovalori dell'energia, è data da

$$G(\epsilon) = \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, \delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q})\big) = \frac{\pi R^2}{h^3}\int d^3p \int_0^L dz\, \delta\big(\epsilon - p^2/2m - Az\big),$$

ed $\epsilon_{\rm min} = 0$. Usando

$$\int d^3p\, \delta(\tilde\epsilon - p^2/2m) = 4\pi\int_0^{+\infty} dp\, p^2\, \delta\big(\tilde\epsilon - p^2/2m\big) = 4\pi m\sqrt{2m}\int_0^\infty dt\, \sqrt{t}\, \delta(\tilde\epsilon - t) = 2\pi(2m)^{3/2}\sqrt{\tilde\epsilon}\,\theta(\tilde\epsilon),$$

otteniamo

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{2\pi^2R^2}{h^3}(2m)^{3/2}\int_0^L dz\, \sqrt{\epsilon - Az}\,\theta\big(\epsilon - Az\big) \\ &= \frac{2\pi^2R^2}{h^3}(2m)^{3/2}\left(-\frac{2}{3A}\right)\big(\epsilon - Az)\big)^{3/2}\Big|_0^{\min(\epsilon/A,L)} \end{aligned}$$

ovvero

$$G(\epsilon) = \frac{4\pi^2R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\Big[\epsilon^{3/2}\,\theta(\epsilon) - (\epsilon - AL)^{3/2}\,\theta(\epsilon - AL)\Big].$$

Notando che

$$G(\epsilon) \sim \epsilon^{3/2}\,\theta(\epsilon), \qquad \text{as } \epsilon \to 0,$$

segue che

$$\boxed{\int_0^\infty d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon}-1} < \infty, \qquad \Rightarrow \text{Esiste condensazione BE.}}$$

2.b L'equazione che determina la temperatura di condensazione T_c è:

$$N = \int_0^\infty d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon}-1}.$$

Sostituendo l'espressione di $G(\epsilon)$ trovata al punto precedente e ponendo $\beta\epsilon = y$ si ha

$$N = \frac{4\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\beta_\mathrm{c}^{-5/2}\left[\int_0^\infty dy \frac{y^{3/2}}{e^y-1} - \int_{\beta_\mathrm{c}AL}^\infty dy \frac{(y-\beta_\mathrm{c}AL)^{3/2}}{e^y-1}\right], \qquad T_\mathrm{c} = \beta_\mathrm{c}^{-1}.$$

che usando

$$\int_0^\infty dy \frac{y^{3/2}}{e^y-1} = \Gamma(1+3/2)\,\zeta(1+3/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\zeta(5/2)$$

fornisce l'equazione richiesta

$$\boxed{N = \frac{4\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\beta_\mathrm{c}^{-5/2}\left[\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\zeta(5/2) - \int_{\beta_\mathrm{c}AL}^\infty dy \frac{(y-\beta_\mathrm{c}AL)^{3/2}}{e^y-1}\right].}$$

3.a L'energia del sistema non dipende dal valore dello spin delle particelle, quindi il numero totale di particelle è:

$$N = 2\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon),$$

dove $G(\epsilon)$ è stato calcolato precedentemente. Il numero massimo di particelle che a $T = 0$ possono essere sistemate nella regione $z < L/2$ si ha per

$$\epsilon_\mathrm{F} = AL/2,$$

e vale:

$$N = 2\frac{4\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^{AL/2} d\epsilon\; \epsilon^{3/2} = 2\frac{4\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\frac{2}{5}\left(\frac{AL}{2}\right)^{5/2}.$$

Ovvero

$$\boxed{N = \frac{8\pi^2 R^2 L}{15}\left(\frac{mAL}{h^2}\right)^{3/2}.}$$

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

$$E(T=0) = 2\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, G(\epsilon)\, \epsilon.$$

Sostituendo $G(\epsilon)$ calcolato precedentemente.

$$\begin{aligned}
E(T=0) &= 2\frac{4\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^{2AL} d\epsilon\, \epsilon\left[\epsilon^{3/2} - (\epsilon - AL)^{3/2}\;\theta(\epsilon - AL)\right] \\
&= \frac{8\pi^2 R^2}{3A}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(AL)^{5/2}\left[\int_0^2 dy\, y^{5/2} - \int_1^2 dy\, y\;(y-1)^{3/2}\right] \\
&= \frac{8\pi^2 R^2 L}{3}\left(\frac{2mAL}{h^2}\right)^{3/2}\left[\frac{2}{7}y^{7/2}\Big|_0^2 - \frac{2}{5}\left(y(y-1)^{5/2} - \frac{2}{7}(y-1)^{7/2}\right)\Big|_1^2\right]
\end{aligned}$$

ovvero

$$\boxed{E(T=0) = \frac{64\pi^2 R^2 L}{21}\left(\frac{2mAL}{h^2}\right)^{3/2}\left(2\sqrt{2} - 3/5\right).}$$