Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 24.06.2016

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche 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); la Hamiltoniana di singola particella è

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

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 la pressione sulla parete laterale del cilindro e nel punto $\mathbf{q}^* = (0, 0, L)$ in funzione della temperatura T.
   - 1.b) Calcolare la probabilità $P_N(n; T)$ che a temperatura T nella regione $\sqrt{x^2 + y^2} < R/\sqrt{3}$ vi siano n particelle.
   - 1.c) Determinare per quali temperature la probabilità di trovare più di $N/2$ particelle nella regione $\sqrt{x^2 + y^2} < R/\sqrt{3}$ è trascurabile per $N \gg 1$.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Mostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.b) Scrivere, senza risolvere, l'equazione che determina la temperatura critica di condensazione T_c.
   - 2.c) Calcolare la frazione di particelle nello stato condensato a temperatura $T = T_c/2$ nel limite $R \to \infty$.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Determinare il massimo valore di N tale che tutte le particelle si trovino nella regione $\sqrt{x^2 + y^2} < R/2$ a $T = 0$.
   - 3.b) Calcolare l'energia $E(T = 0)$ per $\epsilon_F = AR^2$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 6, 1.b: 3, 1.c: 4
  2.a: 3, 2.b: 4, 2.c: 3
  3.a: 3, 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 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 $H(\mathbf{p},\mathbf{q}) = p^2/2m + U(r)$ con $r = \sqrt{x^2+y^2}$. Conseguenza

$$P(r) = \rho(r)\, T, \qquad 0 \le r \le R.$$

La densità $\rho(\mathbf{q})$ può essere ottenuta considerando un volumetto dV intorno al punto $\mathbf{q}$ e calcolando la probabilità $p_1(\mathbf{q} \in dV)\, dV$ che una particella si trovi nel volumetto:

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

da cui

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

Nel nostro caso:

$$\int d^3q\, e^{-\beta U(\mathbf{q})} = 2\pi L \int_0^R dr\, r\, e^{-\beta A r^2/2} = \frac{2\pi L}{\beta A}\left(1 - e^{-\beta U_R}\right), \qquad U_R = \frac{AR^2}{2},$$

per cui:

$$\rho(r) = \frac{\beta A N}{2\pi L}\frac{e^{-\beta U(r)}}{1 - e^{-\beta U_R}} = \beta\rho U_R \frac{e^{-\beta U(r)}}{1 - e^{-\beta U_R}}, \qquad \rho = \frac{N}{V},\ V = \pi R^2 L$$

e quindi

$$P(r) = \rho U_R \frac{e^{-\beta U(r)}}{1 - e^{-\beta U_R}}. \tag{2}$$

Allo stesso risultato si può giungere considerando un cilindro di raggio $r \le R$ e calcolando la pressione sulla sua superficie dalla formula:

$$P(r) = NT\left(\frac{\partial}{\partial V_r}\right)_{T,N} \ln Z_1(T, V_r), \qquad Z_1(T, V_r) = \int_{\mathbf{q}\in V_r} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})}, \qquad V_r = \pi r^2 L.$$

Dalla (2) segue che la pressione sulla superficie del cilindro vale:

$$\boxed{P(R) = \rho U_R \frac{e^{-\beta U_R}}{1 - e^{-\beta U_R}},}$$

mentre nel punto $\mathbf{q}^* = (0, 0, L)$ vale

$$\boxed{P(\mathbf{q}^*) = \rho U_R \frac{1}{1 - e^{-\beta U_R}}.}$$

1.b) La probabilità $P_1(r \leq R/\sqrt{3})$ che una particella si trovi nella regione $\sqrt{x^2+y^2} < R/\sqrt{3}$ è data da

$$P_1(r \leq R/\sqrt{3}) = \int_{r \leq R/\sqrt{3}} p_1(\mathbf{q} \in dV)\, dV,$$

che usando la (1) fornisce:

$$\begin{aligned} P_1(r \leq R/\sqrt{3}) &= \frac{1}{N} \int_{r \leq R/\sqrt{3}} \rho(\mathbf{q})\, dV \\ &= \frac{\beta\rho}{N} \frac{U_R}{1-e^{-\beta U_R}}\, 2\pi L \int_0^{R/\sqrt{3}} dr\, r\, e^{-\beta U(r)} \\ &= \frac{1-e^{-\beta U(R/\sqrt{3})}}{1-e^{-\beta U_R}} \\ &= \frac{1-e^{-\beta U_R/3}}{1-e^{-\beta U_R}}. \end{aligned} \tag{3}$$

Siccome una particella si troverà nella regione $\sqrt{x^2+y^2} < R/\sqrt{3}$ con probabilità $p = P_1(r \leq R/\sqrt{3})$ e non vi si troverà con probabilità $1-p$, la probabilità $P_N(n)$ che n particelle siano nella regione è data da

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

1.c) Il numero medio $\overline{n}$ di particelle che si trovano nella regione $\sqrt{x^2+y^2} < R/\sqrt{3}$ è

$$\overline{n} = N\, P_1(r \leq R/\sqrt{3}).$$

Per la legge dei grandi numeri la probabilità che $n \neq \overline{n}$ è esponenzialmente piccola in N per $N \gg 1$.
Dalla (3) si ha che

$$\lim_{T\to 0} P_1(r \leq R/\sqrt{3}) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \overline{n}/N = 1,$$

$$\lim_{T\to \infty} P_1(r \leq R/\sqrt{3}) = \frac{U_R/3}{U_R} = \frac{1}{3} \qquad \Rightarrow \qquad \overline{n}/N = \frac{1}{3}.$$

Ne segue che esiste una temperatura T^* tale che $\overline{n}/N = 1/2$. Ponendo $x = e^{-\beta^* U_R/3}$, la temperatura T^* è determinata dall'equazione

$$\frac{1}{2} = \frac{1-e^{-\beta^* U_R/3}}{1-e^{-\beta^* U_R}} = \frac{1-x}{1-x^3} = \frac{1}{1+x+x^2} \qquad \Rightarrow \qquad x^2+x-1=0.$$

La soluzione che ci interessa è $x^* = (-1+\sqrt{5})/2 < 1$. Ne concludiamo che la probabilità di trovare più di $N/2$ particelle nella regione $\sqrt{x^2+y^2} < R/\sqrt{3}$ è trascurabile per $N \gg 1$ per temperature

$$\boxed{T > T^* = -\frac{U_R/3}{\ln x^*} = -\frac{AR^2}{6\ln[(\sqrt{5}-1)/2]}.}$$

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

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

ed $\epsilon_{\min} = 0$. Usando l'identità

$$\delta\big(f(t)\big) = \sum_k \frac{1}{|f'(t_k)|}\, \delta(t - t_k), \qquad \text{con } t_k :\ f(t_k) = 0,$$

otteniamo

$$\delta\big(\tilde{\epsilon} - at^2\big) = \frac{1}{2at_0}\big[\delta(t - t_0) + \delta(t + t_0)\big], \qquad \text{con } t_0 = \sqrt{\tilde{\epsilon}/a}.$$

Ne segue

$$\int d^3p\, \delta(\tilde{\epsilon} - p^2/2m) = 4\pi \int_0^{+\infty} dp\, p^2\, \delta\big(\tilde{\epsilon} - p^2/2m\big) = 4\pi\, m\, p_0\, \theta(\tilde{\epsilon}) = 2\pi(2m)^{3/2}\sqrt{\tilde{\epsilon}}\,\theta(\tilde{\epsilon}),$$

per cui

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{4\pi^2 L}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^R dr\, r\, \sqrt{\epsilon - Ar^2/2}\,\theta\big(\epsilon - Ar^2/2\big) \\ &= \frac{4\pi^2 L}{Ah^3}(2m)^{3/2} \int_0^{V(R)} dt\, \sqrt{\epsilon - t}\,\theta\big(\epsilon - t\big) \\ &= \frac{4\pi^2 L}{Ah^3}(2m\epsilon)^{3/2} \int_0^{V(R)/\epsilon} dt\, \sqrt{1 - t}\,\theta\big(\epsilon - t\big) \end{aligned}$$

ovvero

$$G(\epsilon) = \frac{V}{U_R}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\Big[\epsilon^{3/2} - (\epsilon - U_R)^{3/2}\ \theta(\epsilon - U_R)\Big]\ \theta(\epsilon). \tag{4}$$

Alternativamente utilizzando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$ si ha:

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{2\pi L}{h^3}\frac{d}{d\epsilon}\int d^3p \int_0^R dr\, r\, \theta\big(\epsilon - p^2/2m - Ar^2/2\big) \\ &= \frac{2\pi L}{h^3}\frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2}\frac{d}{d\epsilon}\int_0^R dr\, r\, \big[\epsilon - Ar^2/2\big]^{3/2}\theta\big(\epsilon - Ar^2/2\big) \\ &= \frac{V}{U_R}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\frac{2}{5}\frac{d}{d\epsilon}\Big[\epsilon^{5/2} - (\epsilon - U_R)^{5/2}\ \theta(\epsilon - U_R)\Big]\ \theta(\epsilon). \end{aligned}$$

da cui segue facilmente la (4).
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 (4) e ponendo $\beta\epsilon = y$ si ha

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

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

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

2.c Nel limite $R \to \infty$ si ha $U_R \to \infty$ ed il secondo termine nella (4) scompare. Dalla risposta al punto precedente segue allora che

$$\tilde{N} = \frac{V}{U_R}\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{3/2}\zeta(5/2)\,\beta^{-5/2}$$

da cui

$$N_0/N = 1 - \tilde{N}/N = 1 - (T/T_{\rm c})^{5/2}$$

Quindi per $T/T_{\rm c} = 1/2$ si ha

$$\boxed{N_0/N = 1 - 2^{-5/2}.}$$

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

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

dove $G(\epsilon)$ è data dalla (4). Il numero massimo di particelle che a $T=0$ possono essere sistemate nella regione $\sqrt{x^2+y^2} < R/2$ si ha per

$$\epsilon_{\rm F} = U(R/2) = \frac{1}{4}U_R,$$

e vale:

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

Ovvero

$$\boxed{N = \frac{\pi V}{30}\left(\frac{2mU_R}{h^2}\right)^{3/2}.}$$

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

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

con $G(\epsilon)$ data dalla (4). Per $\epsilon_{\mathrm{F}} = AR^2 = 2U_R$ non possiamo trascurare il secondo termine nella (4), per cui si ha

$$\begin{aligned}
E(T=0) &= 2\frac{V}{U_R}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^{2U_R} d\epsilon\,\epsilon\,\left[\epsilon^{3/2} - (\epsilon - U_R)^{3/2}\,\theta(\epsilon - U_R)\right] \\
&= \frac{V}{U_R}\frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\left[\int_0^{2U_R} d\epsilon\,\epsilon^{5/2} - \int_{U_R}^{2U_R} d\epsilon\,\epsilon\,(\epsilon - U_R)^{3/2}\right] \\
&= \frac{V}{U_R}\frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} U_R^{7/2}\left[\frac{2}{7}y^{7/2} - \frac{2}{5}\left(y(y-1)^{5/2} - \frac{2}{7}(y-1)^{7/2}\right)\right]\Bigg|_{y=2}
\end{aligned}$$

ovvero

$$\boxed{U(T=0) = \frac{64\pi V}{21}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} U_R^{5/2}\left(2\sqrt{2} - 3/5\right).}$$