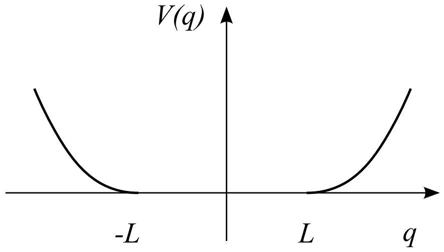
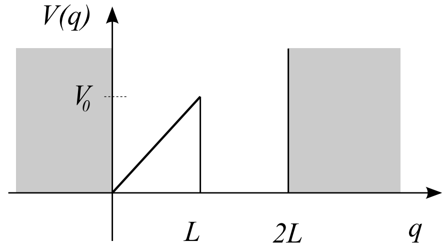
Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 03.02.2016



Es. 1



Es. 2

Es. 1

Si consideri un gas classico unidimensionale costituito da N particelle identiche di massa m non interagenti, libere di muoversi lungo tutto l'asse $-\infty < q < +\infty$ con Hamiltoniana di singola particella

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

dove

$$V(q) = \begin{cases} 0 & |q| < L, \\ \frac{\alpha}{2}\left(|q| - L\right)^2 & |q| > L, \end{cases}$$

con α e L costanti positive.

Supponendo che il gas sia in equilibrio termodinamico a temperatura T, si calcoli

1. L'energia media per particella $U(T)/N$;
2. La densità di probabilità $p(\epsilon)$ dell'energia di singola particella $\epsilon = E/N$;
3. Il numero medio $\overline{N}$ di particelle con impulso $p > 0$ contenute nella semiretta $q < L$.

Es. 2

Si consideri un gas quantistico unidimensionale costituito da N particelle identiche di massa m non interagenti, vincolate a muoversi nell'intervallo $0 \le q \le 2L$ con Hamiltoniana di singola particella

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

dove

$$V(q) = \begin{cases} +\infty & q < 0,\ q > 2L \\ \frac{V_0}{L} q & 0 \le x \le L, \\ 0 & L < x \le 2L, \end{cases}$$

dove V_0 è una costante positiva.

Assumendo che il gas sia in equilibrio a temperatura T:

1. Nel caso che le particelle siano bosoni mostrare che non esiste la condensazione di Bose-Einstein;
2. Nel caso che le particelle siano fermioni di spin $s = 1/2$:
   (a) determinare il numero minimo $N_{\rm min}$ di particelle tale che a $T = 0$ vi siano particelle in tutto l'intervallo $0 \le q \le 2L$;
   (b) L'energia totale $U(T = 0)$ del gas nei due casi: $\epsilon_{\rm F} = V_0/2$ ed $\epsilon_{\rm F} = 2V_0$.

- **Risposte**

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

1.1 L'energia media è data da $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N$, dove Z_N è la funzione di partizione canonica. Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N!$ con

$$Z_1 = \int \frac{dp\,dq}{h} e^{-\beta H} = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-\beta p^2/2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{-\beta V(q)} = \sqrt{\frac{2\pi m}{h^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{-\beta V(q)}.$$

Nel caso specifico del problema

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{-\beta V(q)} = 2\left[\int_0^L dq + \int_L^{+\infty} dq\, e^{-\beta\alpha(q-L)^2/2}\right] = L\left[2 + \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha L^2\beta}}\right].$$

Otteniamo così:

$$Z_1 = \sqrt{\frac{2\pi m}{h^2\beta}}\, L\left[2 + \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha L^2\beta}}\right].$$

Sostituendo:

$$U(T)/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \big\langle V(q)\big\rangle = T\,\frac{1+\sqrt{2\pi T/\alpha L^2}}{2+\sqrt{2\pi T/\alpha L^2}}.$$

1.2 La densità di probabilità richiesta si ottiene dalla marginalizzazione

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

dove

$$G(\epsilon) = \int \frac{dp\,dq}{h}\delta\big(\epsilon - H\big) = \int \frac{dp\,dq}{h}\,\delta\big(\epsilon - p^2/2m - V(q)\big).$$

Usando l'identità

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\delta\big(f(p)\big) = \sum_k \frac{1}{|f'(p_k)|}\,\delta(p - p_k),$$

dove p_k sono le soluzioni di $f(p_k) = 0$, e ponendo $p_0 = \sqrt{2m\tilde{\epsilon}}$, si ha

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\delta\big(\tilde{\epsilon} - p^2/2m\big) = \theta(\tilde{\epsilon})\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\frac{m}{p_0}\big[\delta(p+p_0) + \delta(p-p_0)\big] = \frac{2m}{p_0}\,\theta(\tilde{\epsilon}) = \sqrt{\frac{2m}{\tilde{\epsilon}}}\,\theta(\tilde{\epsilon}).$$

Alternativamente si può utilizzare l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$ e scrivere

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

Sostituendo si ha

$$G(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,\frac{\theta(\epsilon - V(q))}{\sqrt{\epsilon - V(q)}} = \frac{\sqrt{2m}}{h}2\left[\int_0^L dq\,\frac{\theta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}} + \int_L^{+\infty} dq\,\frac{\theta(\epsilon - \alpha(q-L)^2/2)}{\sqrt{\epsilon - \alpha(q-L)^2/2}}\right].$$

Ponendo $q - L = \sqrt{2\epsilon/\alpha}\,x$ il secondo integrale diventa

$$\int_L^{+\infty} dq\,\frac{\theta(\epsilon - \alpha(q-L)^2/2)}{\sqrt{\epsilon - \alpha(q-L)^2/2}} = \theta(\epsilon)\sqrt{\frac{2}{\alpha}}\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \theta(\epsilon)\sqrt{\frac{2}{\alpha}}\,\frac{\pi}{2}.$$

Si ottiene così

$$G(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h} 2L \left[\epsilon^{-1/2} + \sqrt{\frac{\pi^2}{2\alpha L^2}} \right] \theta(\epsilon).$$

Naturalmente allo stesso risultato si può arrivare anche scrivendo

$$\begin{aligned}
G(\epsilon) &= \int \frac{dp\,dq}{h} \delta\big(\epsilon - p^2/2m - V(q)\big) = \frac{d}{d\epsilon} \int \frac{dp\,dq}{h} \theta\big(\epsilon - p^2/2m - V(q)\big) \\
&= \frac{d}{d\epsilon} \frac{2\sqrt{2m}}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, \sqrt{\epsilon - V(q)}\, \theta(\epsilon - V(q)) \\
&= \frac{d}{d\epsilon} \frac{2\sqrt{2m}}{h} 2 \left[\int_0^L dq\, \sqrt{\epsilon}\, \theta(\epsilon) + \int_L^{+\infty} dq\, \sqrt{\epsilon - \alpha(q-L)^2/2}\, \theta(\epsilon - \alpha(q-L)^2/2) \right] \\
&= \frac{d}{d\epsilon} \frac{4\sqrt{2m}}{h} \left[L\sqrt{\epsilon} + \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \epsilon \int_0^1 dx\, \sqrt{1-x^2} \right] \theta(\epsilon) \\
&= \frac{d}{d\epsilon} \frac{4\sqrt{2m}}{h} \left[L\sqrt{\epsilon} + \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{\pi}{4} \right] \theta(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h} 2L \left[\epsilon^{-1/2} + \sqrt{\frac{\pi^2}{2\alpha L^2}} \right] \theta(\epsilon). \quad \square
\end{aligned}$$

Sostituendo $G(\epsilon)$ nell'espressione per $p(\epsilon)$, ed usando l'espressione trovata precedentemente per Z_1, si ottiene infine

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

É facile verificare che $\int_0^\infty d\epsilon\, p(\epsilon) = 1$.

1.3 Il numero cercato è $\overline{N} = N\, P(p > 0; q < L)$ dove

$$P(p>0; q<L) = \frac{1}{Z_1} \int \frac{dp\,dq}{h} e^{-\beta H}\, \theta(p)\, \theta(L-q) = \frac{1}{hZ_1} \int_0^{+\infty} dp\, e^{-\beta p^2/2m} \int_{-\infty}^{L} dq\, e^{-\beta V(q)},$$

è la probabilità che una data particella abbia impulso $p > 0$ e si trovi nel semiasse $q < L$. Usando l'espressione trovata precedentemente per Z_1 si ha

$$P(p>0; q<L) = \frac{1}{2} \frac{\int_{-\infty}^{L} dq\, e^{-\beta V(q)}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{-\beta V(q)}},$$

dove

$$\int_{-\infty}^{L} dq\, e^{-\beta V(q)} = \int_{-L}^{L} dq + \int_{-\infty}^{-L} dq\, e^{-\beta\alpha(-q-L)^2/2} = 2L + \int_0^{+\infty} dq\, e^{-\beta\alpha q^2/2} = 2L + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha\beta}}.$$

Ne segue che

$$\overline{N} = \frac{N}{2} \frac{2 + \sqrt{\pi/2\alpha L^2 \beta}}{2 + \sqrt{2\pi/\alpha L^2 \beta}} = \frac{N}{2} \frac{1 + \sqrt{\pi T/8\alpha L^2}}{1 + \sqrt{\pi T/2\alpha L^2}}.$$

2.1 Se il sistema è composto da Bosoni di spin s, il numero di particelle a temperature T è $N = N_0 + \tilde{N}$, dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato ($\epsilon = \epsilon_{\min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\min}$) dato da

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

dove

$$G(\epsilon) = \int \frac{dp\,dq}{h} \delta\big(\epsilon - H\big) = \int \frac{dp\,dq}{h}\, \delta\big(\epsilon - p^2/2m - V(q)\big),$$

è la densità degli stati di singola particella e $g = 1 + 2s$.

Nel nostro caso $\epsilon_{\rm min} = 0$, per cui si ha condensazione di Bose-Einstein, ossia $N_0 > 0$, se $\tilde{N}$ è finito per $\mu = \epsilon_{\rm min} = 0$, ossia:

$$\int_0^{+\infty} \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} < \infty.$$

Siamo quindi ricondotti a studiare il comportamento di $G(\epsilon)/(e^{\beta\epsilon} - 1)$ per $\epsilon \ll 1$.

Usando [Vedi esercizio precedente]

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

si ha

$$G(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h} \int_0^{2L} dq\, \frac{\theta(\epsilon - V(q))}{\sqrt{\epsilon - V(q)}} = \frac{\sqrt{2m}}{h} \left[\int_0^L dq\, \frac{\theta(\epsilon - V_0 q/L)}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} + \int_L^{2L} dq\, \frac{\theta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}} \right].$$

Per $\epsilon \ll 1$ il primo integrale vale

$$\int_0^L dq\, \frac{\theta(\epsilon - V_0 q/L)}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} = \int_0^{L\epsilon/V_0} \frac{dq}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} \simeq \frac{L\epsilon}{V_0} \times \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} = O(\sqrt{\epsilon}),$$

e quindi

$$G(\epsilon) \sim \frac{\sqrt{2m}}{h} \frac{L}{\sqrt{\epsilon}} + O(\sqrt{\epsilon}), \qquad \epsilon \ll 1.$$

Di conseguenza

$$\frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} \sim \frac{\sqrt{2m}}{h} L\, \frac{\epsilon^{-1/2} + O(\epsilon^{1/2})}{\beta\epsilon + O(\epsilon^2)} = O\big(\epsilon^{-3/2}\big), \qquad \epsilon \ll 1.$$

per cui

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

e non può esservi condensazione di Bose-Einstein.

2.2.a Se il sistema ‘e composto da Fermioni di spin $s = 1/2$ il numero di particelle è

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

dove la densità degli stati di singola particella $G(\epsilon)$ è lo stesso del punto precedente:

$$G(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h} \left[\int_0^L dq\, \frac{\theta(\epsilon - V_0 q/L)}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} + \frac{L}{\sqrt{\epsilon}} \right] \theta(\epsilon).$$

Il primo integrale dipende dal valore di ϵ:

$$\int_0^L dq\, \frac{\theta(\epsilon - V_0 q/L)}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} = \int_0^{L\epsilon/V_0} \frac{dq}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} = -\frac{2L}{V_0} \sqrt{\epsilon - V_0 q/L}\, \Bigg|_0^{L\epsilon/V_0} = \frac{2L}{V_0}\, \sqrt{\epsilon}, \qquad \epsilon < V_0.$$

$$\int_0^L dq\, \frac{\theta(\epsilon - V_0 q/L)}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} = \int_0^L \frac{dq}{\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}} = -\frac{2L}{V_0}\sqrt{\epsilon - V_0 q/L}\Big|_0^L = \frac{2L}{V_0}\left[\sqrt{\epsilon} - \sqrt{\epsilon - V_0}\right] \qquad \epsilon > V_0,$$

Otteniamo così

$$G(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{h} L \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} + \frac{2}{V_0}\sqrt{\epsilon} - \frac{2}{V_0}\sqrt{\epsilon - V_0}\,\theta(\epsilon - V_0)\right]\theta(\epsilon).$$

Il numero minimo richiesto dal problema si ha per $\epsilon_{\mathrm{F}} = V_0$, e vale

$$\begin{aligned} N_{\min} &= 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \int_0^{V_0} d\epsilon \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} + \frac{2}{V_0}\sqrt{\epsilon}\right] = 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \left[2\sqrt{\epsilon} + \frac{2}{V_0}\frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\right]_0^{V_0} \\ &= \frac{20L}{3h}\sqrt{2mV_0}. \end{aligned}$$

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

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

Quindi per $\epsilon_{\mathrm{F}} = V_0/2$ si ha

$$\begin{aligned} U(T=0) &= 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \int_0^{V_0/2} d\epsilon \left[\epsilon^{1/2} + \frac{2}{V_0}\epsilon^{3/2}\right] = 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \left[\frac{2}{3}\epsilon^{3/2} + \frac{2}{V_0}\frac{2}{5}\epsilon^{5/2}\right]_0^{V_0/2} \\ &= \frac{16L}{15h}\sqrt{m}\,V_0^{3/2}, \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} = V_0/2. \end{aligned}$$

Mentre per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 2V_0$

$$U(T=0) = 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \int_0^{2V_0} d\epsilon \left[\epsilon^{1/2} + \frac{2}{V_0}\epsilon^{3/2} - \frac{2}{V_0}\epsilon\,\sqrt{\epsilon - V_0}\,\theta(\epsilon - V_0)\right]$$

Usando

$$\int d\epsilon\,\epsilon\,\sqrt{\epsilon - V_0} = \frac{2}{3}\left[\epsilon\,(\epsilon - V_0)^{3/2} - \frac{2}{5}(\epsilon - V_0)^{5/2}\right]$$

otteniamo

$$\begin{aligned} U(T=0) &= 2\frac{\sqrt{2m}}{h} L \left\{\left[\frac{2}{3}\epsilon^{3/2} + \frac{2}{V_0}\frac{2}{5}\epsilon^{5/2}\right]_0^{2V_0} - \frac{2}{V_0}\frac{2}{3}\left[\epsilon\,(\epsilon - V_0)^{3/2} - \frac{2}{5}(\epsilon - V_0)^{5/2}\right]_{V_0}^{2V_0}\right\} \\ &= \frac{16L}{15h}\sqrt{m}\,V_0^{3/2}\left(17 - 4\sqrt{2}\right), \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} = 2V_0. \end{aligned}$$