Corso di Meccanica Statistica Compito del 6/9/2023

Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle identiche di massa m, contenute nella regione piana bidimensionale $0 \leq x, y \leq L$ (x, y sono le coordinate cartesiane, con le dimensioni di una lunghezza), con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\gamma \sigma x}{L},$$

dove $\gamma > 0$ è un parametro dimensionale, $p^2 \equiv |\boldsymbol{p}|^2$, $\boldsymbol{q}$ è il vettore di componenti cartesiane x, y e σ è una variabile discreta adimensionale, corrispondente ad un grado di libertà interno delle particelle. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

1. **Meccanica Statistica Classica**
Assumendo che sia applicabile la statistica classica e che $\sigma = 0, \pm 1$:
a. [3 punti] Calcolare l'energia interna per particella $u = U/N$ in funzione di T.
b. [3 punti] Calcolare le probabilità P_0, P_{+1} e P_{-1} che σ assuma i valori indicati dal pedice, in funzione di T.
c. [4 punti] Calcolare il valor medio di σ in funzione di T e determinare gli andamenti asintotici per $\gamma \ll \kappa_{\mathrm{B}} T$ e $\gamma \gg \kappa_{\mathrm{B}} T$.

2. **Bosoni**
Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin $s = 1$ e che la variabile $\sigma = s_z = 0, \pm 1$ sia associata alla proiezione dello spin lungo l'asse z, in opportune unità di misura:
a. [3 punti] Dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
b. [4 punti] Calcolare il valore approssimato della temperatura di condensazione T_0 nel caso limite $\gamma \gg \kappa_{\mathrm{B}} T_0$, a meno di termini esponenzialmente piccoli $\sim \mathrm{e}^{-\gamma/\kappa_{\mathrm{B}} T_0}$.
c. [3 punti] Determinare il valor medio di σ e di x a $T = 0$.

3. **Fermioni**
Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin $s = 1/2$, si trovi a $T = 0$, e che la variabile $\sigma = 2s_z = \pm 1$ sia associata alla proiezione dello spin lungo l'asse z, in opportune unità di misura:
a. [4 punti] Determinare il numero di particelle N_{+1} e N_{-1} con valore di σ indicato dal pedice, in funzione dell'energia di Fermi ε_{F}.
b. [3 punti] Determinare il valore medio di σ, in funzione di ε_{F}.
c. [3 punti] Calcolare il valore massimo della coordinata x di una particella con $\sigma = +1$, $x_{\max;+1}$, in funzione di ε_{F}.

Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\, \mathrm{e}^{-t}$; $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$.

Risposte

1.a) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti la funzione di partizione canonica è $Z_N = Z_1^N/N! \approx (Z_1\,\mathrm{e}/N)^N$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella. L'energia interna per particella assume dunque l'espressione $u = U/N = -\partial(\ln Z_1)/\partial\beta$, con $\beta \equiv (\kappa_\mathrm{B}T)^{-1}$. Abbiamo

$$Z_1 = \frac{1}{h^2}\sum_\sigma \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\int \mathrm{d}\boldsymbol{q}\,\mathrm{e}^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{2\pi L}{h^2}\sum_{\sigma=0,\pm1}\int_0^\infty \mathrm{d}p\,p\,\mathrm{e}^{-\beta p^2/2m}\int_0^L \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma\sigma x/L}$$

$$= \frac{2\pi m L^2}{h^2\gamma\beta^2}\sum_{\sigma=0,\pm1}\int_0^{\beta\gamma}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\sigma\xi} = \frac{2\pi m L^2}{h^2\gamma\beta^2}\left[\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)\right].$$

dove, nell'ultimo integrale, si è introdotta la variabile adimensionale $\xi = \beta\gamma x/L$. Quindi,

$$u = -\frac{\partial \ln Z_1}{\partial\beta} = 2k_BT - \frac{1+2\cosh(\beta\gamma)}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}\,\gamma.$$

1.b) Abbiamo

$$P_\sigma = \frac{\displaystyle\int_0^{\beta\gamma}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\sigma\xi}}{\displaystyle\sum_{\sigma=0,\pm1}\int_0^{\beta\gamma}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\sigma\xi}} = \frac{\displaystyle\int_0^{\beta\gamma}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\sigma\xi}}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}.$$

Quindi

$$P_0 = \frac{\beta\gamma}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}, \qquad P_{+1} = \frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\gamma}}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}, \qquad P_{-1} = \frac{\mathrm{e}^{\beta\gamma}-1}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}.$$

1.c) Il valor medio cercato è

$$\langle\sigma\rangle = \sum_{\sigma=0,\pm1}\sigma P_\sigma = \frac{2-2\cosh(\beta\gamma)}{\beta\gamma + 2\sinh(\beta\gamma)}.$$

Per $\gamma \ll \kappa_\mathrm{B}T$ abbiamo

$$\langle\sigma\rangle \approx -\frac{1}{3}\beta\gamma + O(\beta^3\gamma^3).$$

Per $\gamma \gg \kappa_\mathrm{B}T$ abbiamo

$$\langle\sigma\rangle \approx -1 + O(\beta\gamma\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma}).$$

2.a) Calcoliamo innanzitutto la densità degli stati

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi L}{h^2}\sum_{\sigma=0,\pm1}\int_0^\infty dp\,p\int_0^L \mathrm{d}x\,\delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - \frac{\gamma\sigma x}{L}\right) = \frac{2\pi m L}{h^2}\sum_{\sigma=0,\pm1}\int_0^L \mathrm{d}x\,\theta\left(\epsilon - \frac{\gamma\sigma x}{L}\right)$$

$$= \frac{2\pi m L^2}{h^2}\left[\theta(\epsilon) + \frac{\epsilon}{\gamma}\,\theta(\epsilon)\theta(\gamma-\epsilon) + \theta(\epsilon-\gamma) + \left(1+\frac{\epsilon}{\gamma}\right)\theta(-\epsilon)\theta(\epsilon+\gamma) + \theta(\epsilon)\right],$$

dove il primo termine tra parentesi quadra è il contributo per $\sigma = 0$, il secondo e il terzo termine danno il contributo per $\sigma = +1$, il quarto e il quinto termine sono il contributo per $\sigma = -1$. È evidente che l'energia minima di una particella è $\epsilon_{\min} = -\gamma$.
Se il sistema è composto da N Bosoni, posto $\beta_0 \equiv (k_B T_0)^{-1}$, la condizione di condensazione è

$$N = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \left[\int_{-\gamma}^{0} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon + \gamma}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} + \int_{0}^{\gamma} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon + 2\gamma}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} + \int_{\gamma}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{3}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} \right]$$

La convergenza del primo integrale (l'unico per il quale può porsi il problema) dimostra che la condensazione di Bose-Einstein esiste.

2.b) Nel caso in cui $\gamma \gg \kappa_B T_0$, il secondo e il terzo integrale nell'espressione di N sono esponenzialmente piccoli (rispettivamente, come $\mathrm{e}^{-\beta_0 \gamma}$ e come $\mathrm{e}^{-2\beta_0 \gamma}$) per cui

$$N \approx \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \int_{-\gamma}^{0} \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon + \gamma}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} \approx \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \int_{-\gamma}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon + \gamma}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta_0^2} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}z \frac{z}{\mathrm{e}^{z} - 1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta_0^2} \zeta(2)\Gamma(2),$$

dove la seconda uguaglianza è approssimata a meno di termini esponenzialmente piccoli (come $\mathrm{e}^{-\beta_0 \gamma}$). Poiché $\Gamma(2) = 1$, si ha

$$\kappa_B T_0 \approx \left(\frac{h^2 \gamma N}{2\pi m L^2 \zeta(2)} \right)^{1/2}.$$

2.c) Per $T = 0$, tutte le particelle sono nel condensato, che è lo stato di minima energia, per il quale $p = 0$, $x = L$ e $\sigma = -1$, quindi $\langle x \rangle = L$ e $\langle \sigma \rangle = -1$.

3.a) Nel caso dei Fermioni, alla densità degli stati calcolata nel caso dei Bosoni, contribuiscono solo gli ultimi quattro termini (contributi per $\sigma = \pm 1$), cioè

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{\epsilon}{\gamma} \, \theta(\epsilon)\theta(\gamma - \epsilon) + \theta(\epsilon - \gamma) + \left(1 + \frac{\epsilon}{\gamma} \right) \theta(-\epsilon)\theta(\epsilon + \gamma) + \theta(\epsilon) \right] \equiv G_{+1}(\epsilon) + G_{-1}(\epsilon).$$

I primi due termini sono il contributo per $\sigma = +1$ e gli ultimi due sono il contributo per $\sigma = -1$. Quindi, a $T = 0$, $N_\sigma = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} G_\sigma(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon$. Abbiamo

$$N_{+1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{\epsilon_F^2}{2\gamma} \, \theta(\epsilon_F)\theta(\gamma - \epsilon_F) + \left(\epsilon_F - \frac{\gamma}{2} \right) \theta(\epsilon_F - \gamma) \right]$$

e

$$N_{-1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{(\epsilon_F + \gamma)^2}{2\gamma} \, \theta(-\epsilon_F)\theta(\epsilon_F + \gamma) + \left(\epsilon_F + \frac{\gamma}{2} \right) \theta(\epsilon_F) \right].$$

3.b) Si ha

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\displaystyle\sum_{\sigma=\pm1} \sigma N_\sigma}{\displaystyle\sum_{\sigma=\pm1} N_\sigma} = \frac{\epsilon_F^2 \, \theta(\epsilon_F)\theta(\gamma - \epsilon_F) + \left(2\gamma\epsilon_F - \gamma^2\right) \theta(\epsilon_F - \gamma) - (\epsilon_F + \gamma)^2 \, \theta(-\epsilon_F)\theta(\epsilon_F + \gamma) + \left(2\gamma\epsilon_F + \gamma^2\right) \theta(\epsilon_F)}{\epsilon_F^2 \, \theta(\epsilon_F)\theta(\gamma - \epsilon_F) + \left(2\gamma\epsilon_F - \gamma^2\right) \theta(\epsilon_F - \gamma) + (\epsilon_F + \gamma)^2 \, \theta(-\epsilon_F)\theta(\epsilon_F + \gamma) + \left(2\gamma\epsilon_F + \gamma^2\right) \theta(\epsilon_F)}.$$

3.c) Per $\epsilon_F < 0$ non ci sono particelle con $\sigma = +1$; per $0 \le \epsilon_F \le \gamma$ si ha $\epsilon_F = \gamma x_{\max;+1}/L$, per cui $x_{\max;+1} = L\epsilon_F/\gamma$; per $\epsilon_F > \gamma$ si ha $x_{\max;+1} = L$.