Corso di Meccanica Statistica - Compito del 06/09/2024
Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas costituito da $N$ particelle identiche classiche, di massa $m$, non interagenti, confinate in un volume $L^D$, dove $D$ (intero positivo) è la dimensione dello spazio. Ogni particella ha un grado di libertà interno $\sigma$, che può assumere valori 0 e $\pm 1$ (3 stati). L'Hamiltoniana di singola particella è

$$H(\vec{p}, \vec{r}, \sigma) = \frac{p^2}{2m} + \sigma \epsilon_0,$$

dove $\vec{p}$ e $\vec{r}$ sono vettori di uno spazio di dimensione $D$ e $\epsilon_0 \geq 0$.

1. [3 punti] Calcolare l'energia libera del gas.

2. [3 punti] Indicando con $N_\sigma$ il numero di particelle con grado di libertà interno $\sigma$, quanto vale il rapporto $\frac{N_{\sigma=1}}{N_{\sigma=-1}}$? Esiste una temperatura a cui $N_{\sigma=1} = N_{\sigma=-1}$?

3. [4 punti] Se $\epsilon_0 = 0$, l'entropia del gas è maggiore, minore o uguale all'entropia di un sistema di particelle con un solo stato $\sigma = 0$? Dimostrare la risposta.

   Assumiamo ora che le particelle siano bosoni, che $\sigma = 0, \pm 1$ indichi gli stati di spin (3 stati).

4. [4 punti] Determinare il valore $D_0$ tale che esiste condensazione di Bose-Einstein per $D \geq D_0$.

5. [3 punti] Qual è la temperatura di condensazione nel limite $\exp(-\beta \epsilon_0) \ll 1$?

6. [3 punti] Per $D = D_0$ qual è il valore medio di $\sigma$ a $T = 0\,\mathrm{K}$? Qual è il valore dell'energia per particella a $T = 0\,\mathrm{K}$?

   Assumiamo ora che le particelle siano fermioni, che $D = 3$, che $\sigma$ indichi gli stati di spin e che esistano solo gli stati $\sigma = \pm 1$ (2 stati).

7. [4 punti] Calcolare quante particelle sono presenti nel sistema se l'energia di Fermi $\epsilon_F = 0$.

8. [3 punti] Calcolare il valore medio di $\sigma$ quando $\epsilon_F = 0$.

9. [3 punti] Fissato a $N_0$ il numero di particelle, per quale valore di $\epsilon_0$ si popola il primo stato con $\sigma = 1$ a $T = 0\,\mathrm{K}$? Quanto vale $\epsilon_F$ in questa condizione?

Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\, \mathrm{e}^{-t}$; $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$.
Si suggerisce di indicare con $\Omega_D$ l'angolo solido in $D$ dimensioni ($\Omega_1 = 2, \Omega_2 = 2\pi, \Omega_3 = 4\pi$, ...)

Risoluzione

**particelle classiche**

1. La funzione di partizione di una particella nel canonico si scrive (indicando con $\mathrm{d}^D r$ e $\mathrm{d}^D p$ gli elementi di volume nello spazio a $D$ dimensioni)

$$Z_1 = \frac{1}{h^D} \sum_{\sigma=-1}^{1} \int \mathrm{d}^D r \int \mathrm{d}^D p \, \mathrm{e}^{-\beta H} = \frac{1}{h^D} L^D \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{D/2} \left[\mathrm{e}^{\beta \epsilon_0} + 1 + \mathrm{e}^{-\beta \epsilon_0}\right]$$

   e l'energia libera come ($\beta \equiv 1/k_B T$)

$$\beta F = -\ln \left(\frac{Z_1^N}{N!}\right) \approx -N \ln \left(\frac{\mathrm{e} Z_1}{N}\right).$$

2. 

$$\frac{N_{\sigma=+1}}{N_{\sigma=-1}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_0}}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon_0}}$$

   Se $\epsilon_0 > 0$, $N_{\sigma=+1} = N_{\sigma=-1}$ solo a temperatura infinita. Se $\epsilon_0 = 0$, $N_{\sigma=+1} = N_{\sigma=-1}$ a tutte le temperature.

3. L'entropia è maggiore, poiché la particella ha 3 stati invece che uno. Infatti, nel caso di 3 stati (e $\epsilon_0 = 0$)

$$Z_1(3) = \frac{1}{h^D} \sum_{\sigma=-1}^{1} \int \mathrm{d}^D r \int \mathrm{d}^D p \mathrm{e}^{-\beta H} = \frac{1}{h^D} L^D \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{D} [3]\,,$$

   mentre nel caso di 1 stato

$$Z_1(1) = \frac{1}{h^D} \int \mathrm{d}^D r \int \mathrm{d}^D p \mathrm{e}^{-\beta H} \frac{1}{h^D} L^D \left(\frac{m}{\beta}\right)^{D} [1]\,.$$

   Quindi la variazione di energia libera è

$$\beta \Delta F = -N \ln \frac{Z_1(3)}{Z_1(2)} = -N \ln 3.$$

   Dunque

$$\Delta S = N k_B \ln 3$$

**Bosoni**

Dobbiamo calcolare la densità degli stati. Prima, però, guardiamo come si esprime l'integrale sulle variabili angolari di $\mathrm{d}^D p$, espresso nella variabile $t = p^2/2m$. Indicando con $\Omega_D$ l'angolo solido in $D$ dimensioni ($\Omega_1 = 2, \Omega_2 = 2\pi, \Omega_3 = 4\pi$), si ha

$$\int_\Omega \mathrm{d}^D p = \Omega_D p^{D-1} \mathrm{d}p = m\Omega_D p^{D-2} \mathrm{d}\frac{p^2}{2m} = m\Omega_D (2mt)^{\frac{D-2}{2}} \mathrm{d}t.$$

Da qui

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h^D} \sum_{\sigma=-1}^{1} \int \mathrm{d}^D r \int \mathrm{d}^D p \, \delta(H - \epsilon) =$$

$$= \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}t \, t^{\frac{D-2}{2}} \left[\delta(t - \epsilon_0 - \epsilon) + \delta(t - \epsilon) + \delta(t + \epsilon_0 - \epsilon)\right] =$$

$$= \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \left[(\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon + \epsilon_0) + \epsilon^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon - \epsilon_0)\right].$$

I tre termini indicano rispettivamente i contributi di $\sigma = -1$, $\sigma = 0$ e $\sigma = +1$. Lo stato con energia minore ha $\epsilon = -\epsilon_0$.

Per capire se esiste condensazione di BE calcoliamo

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+\epsilon_0)} - 1} \mathrm{d}\epsilon$$

e, focalizzandoci solo sul termine con una eventuale divergenza per $\epsilon = -\epsilon_0$

$$\frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_{-\epsilon_0}^{\infty} \frac{(\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}}}{e^{\beta(\epsilon+\epsilon_0)} - 1} \mathrm{d}\epsilon,$$

osserviamo che l'integrando per $\epsilon \approx \epsilon_0$ scala come $(\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2} - 1}$

Quindi, in $D = 1$ scala come $(\epsilon + \epsilon_0)^{-3/2}$, in $D = 2$ scala come $(\epsilon + \epsilon_0)^{-1}$ ed in $D = 3$ scala come $(\epsilon + \epsilon_0)^{-1/2}$. Concludiamo dunque che $D_0 = 3$.

4. Nel limite $\exp(-\beta\epsilon_0) \ll 1$ ($k_B T \ll \epsilon_0$), solo gli stati $\sigma = -1$ sono popolati. Quindi possiamo approssimare

$$g(\epsilon) \approx \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} (\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon + \epsilon_0)$$

e

$$N = \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_{-\epsilon_0}^{\infty} \frac{(\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}}}{e^{\beta(\epsilon+\epsilon_0)} - 1} \mathrm{d}\epsilon.$$

Cambiando variabile, $x = \beta(\epsilon + \epsilon_0)$, si ha

$$N = \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \beta^{-\frac{D-2}{2} - 1} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{D-2}{2}}}{e^x - 1} \mathrm{d}x = \frac{L^D}{h^D} m\Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \beta^{-\frac{D-2}{2} - 1} \Gamma\left(\frac{D}{2}\right) \zeta\left(\frac{D}{2}\right),$$

che consente di risolvere per la $T_{BE}$ di BE (con $D \geq D_0$)

$$k_B T_{BE} = \left[ \frac{h^D N}{L^D m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \Gamma\left(\frac{D}{2}\right) \zeta\left(\frac{D}{2}\right)} \right]^{2/D}$$

5. A $T = 0\,\mathrm{K}$ tutte le particelle staranno nello stato di più bassa energia, quindi $< \sigma >= -1$ e $< E > /N = -\epsilon_0$.

**Fermioni**

Nel caso dei fermioni, $g(\epsilon)$ non ha il termine $\sigma = 0$, quindi

$$g(\epsilon) = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \left[ (\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon + \epsilon_0) + (\epsilon - \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon - \epsilon_0) \right]$$

6. Se $\epsilon_F = 0$, sono popolati solo gli stati con $\sigma = -1$. Quindi

$$g(\epsilon) = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \left[ (\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}} \theta(\epsilon + \epsilon_0) \right]$$

e

$$N = \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_F} g(\epsilon)\, \mathrm{d}\epsilon = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_{-\epsilon_0}^{0} (\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}}\, \mathrm{d}\epsilon = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_0^{\epsilon_0} x^{\frac{D-2}{2}}\, \mathrm{d}x,$$

da cui per $D = D_0 = 3$

$$N = \frac{L_0^D}{h_0^D} m \Omega_{D_0} (2m)^{\frac{D_0-2}{2}} \frac{\epsilon_0^{\frac{D_0-2}{2}+1}}{\frac{D_0-2}{2}+1} = \frac{4\pi L^3}{3h^3} (2m)^{3/2} \epsilon_0^{3/2}.$$

7. Anche qui, $< \sigma >= -1$, poiché per $\epsilon_F = 0$ solo gli stati con energia negativa sono popolati.

8. Il primo stato con $\sigma = 1$ si popola quando $\epsilon_F = \epsilon_0$. Quindi,

$$N_0 = \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_F} g(\epsilon)\, \mathrm{d}\epsilon = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} (\epsilon + \epsilon_0)^{\frac{D-2}{2}}\, \mathrm{d}\epsilon = \frac{L^D}{h^D} m \Omega_D (2m)^{\frac{D-2}{2}} \int_0^{2\epsilon_0} x^{\frac{D-2}{2}} \mathrm{d}x,$$

da cui, per $D = 3$,

$$N_0 = \frac{4\pi L^3}{3h^3} (2m)^{3/2} (2\epsilon_0)^{3/2},$$

che fissa il valore di $\epsilon_0$ cercato:

$$\epsilon_0 = \frac{h^2}{4mL^2} \left( \frac{3N_0}{4\pi} \right)^{2/3}.$$