Corso di Meccanica Statistica

Compito del 7/2/2024

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

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle identiche di massa m che si muovono su un piano, con Hamiltoniana di singola particella:

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

dove $\gamma > 0$ è un parametro dimensionale, $p^2 \equiv |\boldsymbol{p}|^2$, e $\boldsymbol{q}$ è il vettore di componenti cartesiane x, y. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

1. **Meccanica Statistica Classica** – Assumendo che sia applicabile la statistica classica:

a. [4 punti] Calcolare il valore numerico della probabilità $\mathcal{P}$ che per la coordinata x di una particella si abbia $|x| \le (\kappa_\mathrm{B} T \ln 2)/\gamma$.
b. [3 punti] Calcolare il valor medio di $|x| + |y|$ in funzione della temperatura T.
c. [3 punti] Calcolare il potenziale chimico μ del gas in funzione di T e N. Determinare il limite della fugacità $z \equiv \mathrm{e}^{\beta\mu}$ per $T \to 0^+$ e $T \to +\infty$.

2. **Bosoni** – Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin $S = 0$:

a. [4 punti] Determinare la temperatura di condensazione di Bose-Einstein del gas, T_0, in funzione di N.
b. [3 punti] Detta E l'energia interna del gas, calcolare il valore numerico della grandezza adimensionale $E/(N\kappa_\mathrm{B} T_0)$ per $T = \frac{1}{2} T_0$.
c. [3 punti] Detta $z \equiv \mathrm{e}^{\beta\mu}$ la fugacità del gas, con $\beta \equiv (\kappa_\mathrm{B} T)^{-1}$, esprimere il potenziale chimico del gas in funzione di T e N nel caso limite $z \ll 1$, confrontando il risultato ottenuto con la risposta alla domanda 1.c.

3. **Fermioni** – Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin $S = \frac{1}{2}$ e si trovi a $T = 0$:

a. [3 punti] Esprimere l'energia di Fermi ε_F in funzione di N.
b. [3 punti] Determinare l'energia interna per particella, E/N, in funzione di ε_F.
c. [4 punti] Calcolare il valore medio di $|x|$ in funzione di ε_F.

Si ricordi che: $\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\, \mathrm{e}^{-t}$; $\zeta(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$; $\Gamma(3) = 2$, $\Gamma(4) = 6$, $\zeta(3) \approx 1.202$, $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} \approx 1.082$.

Risposte

1.a) Per un sistema di N particelle classiche identiche 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. Posto $\beta \equiv (\kappa_\mathrm{B} T)^{-1}$, abbiamo

$$Z_1 = \frac{1}{h^2}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{p}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{q}\,\mathrm{e}^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{8\pi}{h^2}\int_0^\infty \mathrm{d}p\,p\,\mathrm{e}^{-\beta p^2/2m}\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma x}\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma y} = \frac{8\pi m}{h^2\gamma^2\beta^3},$$

dove, nell'integrale sull'impulso, si è introdotta la variabile adimensionale $\xi = \frac{\beta p^2}{2m}$.
La probabilità richiesta è

$$\mathcal{P} = \frac{\displaystyle\int_0^{(\kappa_\mathrm{B}T\ln 2)/\gamma}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma x}}{\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma x}} = 1 - \mathrm{e}^{-\ln 2} = \frac{1}{2}.$$

1.b) Il valor medio cercato è

$$\langle |x| + |y|\rangle = \frac{\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}y\,(x+y)\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma(x+y)}}{\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma(x+y)}} = \frac{\displaystyle 2\int_0^\infty \mathrm{d}x\,x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma x}\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma y}}{\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma x}\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta\gamma y}} = \frac{2\kappa_\mathrm{B}T}{\gamma}.$$

1.c) Il potenziale chimico è

$$\mu = -\kappa_\mathrm{B}T\frac{\partial}{\partial N}\ln Z_N = \kappa_\mathrm{B}T\ln\frac{N}{Z_1}.$$

Quindi,

$$\mu = \kappa_\mathrm{B}T\ln\frac{Nh^2\gamma^2}{8\pi m(\kappa_\mathrm{B}T)^3}.$$

La fugacità è

$$z \equiv \mathrm{e}^{\beta\mu} = \frac{Nh^2\gamma^2}{8\pi m(\kappa_\mathrm{B}T)^3},$$

per cui

$$\lim_{T\to 0^+} z = +\infty, \qquad \lim_{T\to+\infty} z = 0^+.$$

2.a) Posto $g_S \equiv 2S+1$, calcoliamo innanzitutto la densità degli stati

$$G(\epsilon) = \frac{8\pi g_S}{h^2}\int_0^\infty dp\,p\int_0^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - \gamma x - \gamma y\right) = \frac{8\pi m}{h^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\theta\left(\epsilon - \gamma x - \gamma y\right)$$

$$= \frac{8\pi m g_S}{h^2\gamma}\int_0^\infty \mathrm{d}x\,(\epsilon - \gamma x)\,\theta(\epsilon - \gamma x) = \frac{4\pi m g_S}{h^2\gamma^2}\,\epsilon^2\,\theta(\epsilon),$$

dove nel penultimo passaggio possiamo identificare la distribuzione

$$G(\epsilon, x) = \frac{8\pi m g_S}{h^2\gamma}(\epsilon - \gamma x)\,\theta(\epsilon - \gamma x),$$

tale che $G(\epsilon) = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, G(\epsilon, x)$, che sarà usata in seguito. È evidente che l'energia minima di una particella è $\epsilon_{\min} = 0$. Se il sistema è composto da N Bosoni di spin $S = 0$, posto $g_S = 1$ e $\beta_0 \equiv (k_\mathrm{B} T_0)^{-1}$, la condizione di condensazione è

$$N = \frac{4\pi m}{h^2\gamma^2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^2}{\mathrm{e}^{\beta_0\epsilon} - 1} = \frac{4\pi m \Gamma(3)\zeta(3)}{h^2\gamma^2} (\kappa_\mathrm{B} T_0)^3,$$

da cui

$$\kappa_\mathrm{B} T_0 = \left[\frac{h^2\gamma^2 N}{8\pi\zeta(3)\, m}\right]^{1/3} \approx 0.321 \left(\frac{h^2\gamma^2 N}{m}\right)^{1/3}.$$

2.b) Se $T < T_0$, si ha sempre $\mu = 0$, per cui

$$E = \frac{4\pi m}{h^2\gamma^2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon} - 1} = \frac{4\pi m \Gamma(4)\zeta(4)}{h^2\gamma^2} (\kappa_\mathrm{B} T)^4.$$

Ponendo $T = \frac{1}{2} T_0$ e usando l'espressione per N trovata precedentemente, si trova

$$\frac{E}{N\kappa_\mathrm{B} T_0} = \frac{\Gamma(4)\zeta(4)}{16\,\Gamma(3)\zeta(3)} \approx 0.169.$$

2.c) Per $z \ll 1$, si ha

$$N = \frac{4\pi m}{h^2\gamma^2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^2}{z^{-1}\,\mathrm{e}^{\beta\epsilon} - 1} \approx \frac{4\pi m}{h^2\gamma^2}\, \mathrm{e}^{\beta\mu} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^2\, \mathrm{e}^{-\beta\epsilon} = \frac{8\pi m}{h^2\gamma^2\beta^3}\, \mathrm{e}^{\beta\mu},$$

da cui

$$\mu = \kappa_\mathrm{B} T \ln \frac{N h^2\gamma^2}{8\pi m (\kappa_\mathrm{B} T)^3},$$

che coincide con il risultato classico 1.c.

3.a) Nel caso dei Fermioni di spin $S = \frac{1}{2}$, si ha $g_S = 2$, per cui

$$G(\epsilon) = \frac{8\pi m}{h^2\gamma^2}\, \epsilon^2\, \theta(\epsilon).$$

Quindi,

$$N = \frac{8\pi m}{h^2\gamma^2} \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^2\, \theta(\epsilon_\mathrm{F}) = \frac{8\pi m}{3h^2\gamma^2}\, \epsilon_\mathrm{F}^3\, \theta(\epsilon_\mathrm{F})$$

e

$$\epsilon_\mathrm{F} = \left(\frac{3h^2\gamma^2 N}{8\pi m}\right)^{1/3} \approx 0.492 \left(\frac{h^2\gamma^2 N}{m}\right)^{1/3}.$$

3.b) Per $\epsilon_\mathrm{F} \geq 0$, si ha

$$\frac{E}{N} = \frac{8\pi m}{h^2\gamma^2 N} \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^3 = \frac{3}{4}\, \epsilon_\mathrm{F}.$$

3.c) Per $\epsilon_\mathrm{F} \geq 0$, usando l'espressione per $G(\epsilon, x)$ trovata precedentemente, si ha

$$\langle |x| \rangle = \frac{16\pi m}{h^2\gamma N} \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} \mathrm{d}\epsilon \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x\, (\epsilon - \gamma x)\, \theta(\epsilon - \gamma x) = \frac{6\gamma}{\epsilon_\mathrm{F}^3} \int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} \mathrm{d}\epsilon\, \theta(\epsilon) \int_0^{\epsilon/\gamma} \mathrm{d}x\, x\, (\epsilon - \gamma x) = \frac{\epsilon_\mathrm{F}}{4\gamma}.$$

Tale valore è $\frac{1}{4}$ del valore massimo di $|x|$.