Corso di Meccanica Statistica - Compito dell'8/2/2023
Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, che si muovono lungo una retta, con Hamiltoniana di singola particella

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

dove

$$V(q) = \begin{cases} V_0 > 0, & |q| \leq L, \\ 0, & L < |q| < 2L, \\ \infty, & |q| \geq 2L. \end{cases}$$

Il sistema è all'equilibrio termodinamico.

1. [4 punti] Calcolare l'energia libera del sistema in funzione della temperatura T, nel caso di particelle classiche.
2. [3 punti] Calcolare la densità di particelle per unità di lunghezza $\rho(q)$ in ogni punto dello spazio in funzione della temperatura, nel caso di particelle classiche.
3. [3 punti] Calcolare la probabilità $\mathcal{P}(M, N)$ di trovare $M \leq N$ particelle con $q > L$, nel caso di particelle classiche.
4. [3 punti] Calcolare la media e la varianza della distribuzione ottenuta al punto precedente, quindi scrivere la distribuzione gaussiana che meglio approssima la probabilità $\mathcal{P}(M, N)$.
5. [4 punti] Calcolare la pressione P in funzione della posizione q per $k_B T \ll V_0$ e $k_B T \gg V_0$, nel caso di particelle classiche. Si ricordi che in un sistema unidimensionale la pressione, dimensionalmente un'energia diviso una lunghezza elevata alla dimensione spaziale, ha le dimensioni fisiche di una forza.
6. [4 punti] Calcolare la densità degli stati di singola particella $g(\epsilon)$.
7. [3 punti] Discutere se esiste o meno la condensazione di Bose-Einstein, nel caso in cui le particelle sono bosoni di spin 0 e determinare la temperatura di condensazione T_0 (se diversa da zero).
8. [3 punti] Calcolare il valore dell'energia E del sistema a $T = 0\,\mathrm{K}$, nel caso di bosoni di spin 0 e nel caso di fermioni di spin $\frac{1}{2}$, in questo ultimo caso quando l'energia di Fermi è $\epsilon_F = V_0$.
9. [3 punti] Determinare il numero massimo di particelle $N_{\max}$, assunte fermioni di spin $\frac{1}{2}$, che possono essere presenti nel sistema affinché, per tutte le particelle, sia $|q| > L$ a $T = 0\,\mathrm{K}$.

Risoluzione

1. Posto $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$, iniziamo con il calcolare la funzione di partizione di singola particella
$$Q_1 = \frac{1}{h}\int_{-2L}^{2L} \mathrm{d}q \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{e}^{-\beta H} = \frac{1}{h}\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}\left(2\int_0^L \mathrm{d}q + 2\int_L^{2L} \mathrm{e}^{-\beta V_0}\,\mathrm{d}q\right)$$
$$= \frac{2L}{h}\sqrt{2\pi m k_B T}\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta V_0}\right).$$
La funzione di partizione del sistema e l'energia libera di Helmholz sono
$$Q_N = \frac{Q_1^N}{N!}, \qquad A = -Nk_BT\ln Q_1 + Nk_BT\ln N - Nk_BT = Nk_BT\ln\frac{N}{eQ_1},$$
ovvero
$$A = Nk_BT\ln\frac{Nh}{2L\mathrm{e}\sqrt{2\pi m k_B T}\,(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}.$$

2. Per calcolare la densità in ogni punto dello spazio al variare della temperatura partiamo dalla probabilità di trovare una particella in q, p, $\mathcal{P}(q,p)$ e integriamo sugli impulsi
$$\rho(q) = N\int \mathrm{d}p\,\mathcal{P}(q,p) = \begin{cases} \frac{N}{2L}\frac{\mathrm{e}^{-\beta V_0}}{1+\mathrm{e}^{-\beta V_0}}, & |q| \le L, \\ \frac{N}{2L}\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta V_0}}, & L < |q| < 2L, \\ 0, & |q| \ge 2L. \end{cases}$$

3. Per calcolare la probabilità $\mathcal{P}(M,N)$ di trovare $M \le N$ particelle con $q > L$, calcoliamo prima la probabilità P_1 di trovare una specifica particella con $q > L$. La otteniamo integrando la $P(q,p)$ su tutti i p e su q nell'intervallo $L < q < 2L$
$$P_1 = \frac{1}{Q_1}\frac{1}{h}\int_L^{2L}\mathrm{d}q\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{-\beta H} = \frac{1}{2(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}.$$
Poiché le particelle sono indipendenti, la probabilità di trovarne M tra 0 e L è data dalla binomiale
$$\mathcal{P}(M,N) = \frac{N!}{(N-M)!M!}P_1^M(1-P_1)^{N-M} = \frac{N!}{(N-M)!M!}\frac{(1+2\mathrm{e}^{-\beta V_0})^{N-M}}{(2+2\mathrm{e}^{-\beta V_0})^N}.$$

4. La media e la varianza della binomiale valgono, rispettivamente, NP_1 e $NP_1(1-P_1)$. La distribuzione gaussiana che meglio approssima la probabilità precedentemente calcolata ha la medesima media e varianza. Dunque
$$\mathcal{P}_G(M,N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N P_1(1-P_1)}}\,\mathrm{e}^{-\frac{(M-NP_1)^2}{2NP_1(1-P_1)}}.$$

5. La pressione, trattandosi di un gas di particelle non interagenti, è data dalla legge del gas perfetto in ogni punto. Quindi
$$P(q) = k_BT\rho(q)$$

dove $\rho(q)$ è la densità calcolata al punto 2. Ad alta T, la densità è omogenea e

$$P(q) = \frac{k_B T N}{4L}$$

A bassa T le particelle popolano solo la regione $L < |q| < 2L$ e

$$P(q) = \begin{cases} 0, & |q| \leq L, \\ \frac{k_B T N}{2L}, & L < |q| < 2L. \end{cases}$$

6. La densità degli stati di singola particella è data da

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q \, \delta(H - \epsilon) = \frac{4}{h} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}p \int_0^{+\infty} \mathrm{d}q \, \delta\left(\frac{p^2}{2m} + V(q) - \epsilon\right)$$
$$= \frac{2\sqrt{2m}}{h} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}q \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t \, t^{-\frac{1}{2}} \delta(t + V(q) - \epsilon),$$

dove abbiamo definito $t = \frac{p^2}{2m}$. Dunque

$$g(\epsilon) = \frac{2\sqrt{2m}}{h} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}q \, [\epsilon - V(q)]^{-\frac{1}{2}} \, \theta(\epsilon - V(q))$$
$$= \frac{2\sqrt{2m}}{h} \left[\int_0^L \mathrm{d}q \, (\epsilon - V_0)^{-\frac{1}{2}} \theta(\epsilon - V_0) + \int_L^{2L} \mathrm{d}q \, \epsilon^{-\frac{1}{2}} \theta(\epsilon) \right]$$
$$= \frac{2L\sqrt{2m}}{h} \left[(\epsilon - V_0)^{-\frac{1}{2}} \theta(\epsilon - V_0) + \epsilon^{-\frac{1}{2}} \theta(\epsilon) \right].$$

Occorrerà poi moltiplicare questa funzione per la degenerazione di spin g_s.

7. Dalla $g(\epsilon)$ vediamo che lo stato di più bassa energia ha $\epsilon = 0$. Quindi per determinare se esiste o meno la condensazione di Bose-Einstein occorre capire se l'integrale

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

diverge. Nell'estremo inferiore di integrazione, $g(\epsilon) \sim \epsilon^{-1/2}$ e il denominatore $\sim \epsilon$. Quindi l'integrale diverge e non esiste una temperatura finita di condensazione.

8. Nel caso di bosoni a $T = 0\,\mathrm{K}$ tutte le particelle sono nello stato fondamentale e dunque $E = 0$. Nel caso di fermioni con $g_s = 2$ verranno occupati tutti i livelli da 0 a $\epsilon_F = V_0$, per cui

$$E = g_s \int_0^{\epsilon_F} \epsilon \, g(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon = \frac{4L\sqrt{2m}}{h} \int_0^{V_0} \epsilon^{\frac{1}{2}} \, \mathrm{d}\epsilon = \frac{8L\sqrt{2m}}{3h} V_0^{\frac{3}{2}}.$$

9. Il numero massimo di fermioni di spin $\frac{1}{2}$ che possono essere presenti nel sistema affinché, per tutte le particelle, $|q| > L$ a $T = 0\,\mathrm{K}$ corrisponde al numero di particelle quando $\epsilon_F = V_0$. Quindi

$$N_{\max} = g_s \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon = \frac{4L\sqrt{2m}}{h} \int_0^{V_0} \epsilon^{-\frac{1}{2}} \, \mathrm{d}\epsilon = \frac{8L}{h} \sqrt{2mV_0}.$$