Compito di Meccanica Statistica del 9 febbraio 2022
Proff. S. Caprara, I. Giardina, M. Grilli

Si consideri il gas perfetto bidimensionale descritto dalla Hamiltoniana di singola particella

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

con $V(|\boldsymbol{q}|) = V_0$, per $|\boldsymbol{q}| \leq R$, e $V(|\boldsymbol{q}|) = V_0|\boldsymbol{q}|^2/R^2$, per $|\boldsymbol{q}| > R$, dove m, V_0, R sono parametri reali strettamente positivi e $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^2$ sono, rispettivamente, l'impulso e la coordinata di una particella.

1. Meccanica Statistica Classica.
Assumendo che il sistema sia composto da N particelle indistinguibili che obbediscono la statistica classica, e sia mantenuto a temperatura costante T mediante l'accoppiamento con un opportuno termostato:
1. [4 punti] si determini l'energia interna per particella u in funzione della temperatura del gas;
2. [4 punti] si determini l'espressione asintotica di u per $T \gg V_0/\kappa_{\rm B}$ e $T \ll V_0/\kappa_{\rm B}$;
3. [2 punti] si determini la probabilità che una particella si trovi a distanza dall'origine maggiore di R, in funzione della temperatura del gas.

2. Bosoni.
Assumendo che il gas sia composto di bosoni di spin $\mathcal{S} = 0$:
1. [4 punti] si discuta l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein;
2. [3 punti] si esprima il numero medio di particelle N in funzione del potenziale chimico μ del gas, lasciando indicata la primitiva non nota $\varphi(\xi) = \int_\xi^\infty {\rm d}\zeta\, \zeta/({\rm e}^\zeta - 1)$;
3. [3 punti] assumendo che sia $\beta(V_0 - \mu) \gg 1$, co $\beta = 1/(\kappa_{\rm B}T)$, si ricavi il potenziale chimico in funzione del numero medio di particelle.

3. Fermioni.
Assumendo che il gas sia composto di fermioni di spin $\mathcal{S} = \frac{1}{2}$ e si trovi a temperatura $T = 0$:
1. [4 punti] si determini la dipendenza del numero di particelle N dall'energia di Fermi $\varepsilon_{\rm F}$;
2. [4 punti] si determini probabilità che una particella si trovi a distanza dall'origine minore di R, in funzione di $\varepsilon_{\rm F}$;
3. [2 punti] si determini la probabilità che l'energia di una particella sia minore di $\frac{1}{2}\varepsilon_{\rm F}$.

Soluzione del Compito di Meccanica Statistica del 9 febbraio 2022
Proff. S. Caprara, I. Giardina, M. Grilli

1.1 La funzione di partizione di una particella è

$$Z_1 = \frac{1}{h^2}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{p}\,\mathrm{e}^{-\beta|\boldsymbol{p}|^2/2m}\int d^2\boldsymbol{q}\,\mathrm{e}^{-\beta V(|\boldsymbol{q}|)} = \frac{4\pi^2}{h^2}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}p\,p\,\mathrm{e}^{-\beta p^2/2m}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}q\,q\,\mathrm{e}^{-\beta V(|\boldsymbol{q}|)} =$$

$$= \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2\beta}\left(1+\frac{1}{\beta V_0}\right)\mathrm{e}^{-\beta V_0}.$$

La funzione di partizione del gas è $Z_N = (Z_1)^N/N! \approx (\mathrm{e}\,Z_1/N)^N$, dove si è usata la formula di Stirling per il valore asintotico di $N!$. Quindi, energia interna per particella è

$$u(T) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z_1 = V_0 + \left(1+\frac{\kappa_\mathrm{B}T}{V_0+\kappa_\mathrm{B}T}\right)\kappa_\mathrm{B}T.$$

1.2 Per $T \gg V_0/\kappa_\mathrm{B}$ si ha

$$u(T) = \kappa_\mathrm{B}T\left[\frac{V_0}{\kappa_\mathrm{B}T}+1+\frac{1}{1+\dfrac{V_0}{\kappa_\mathrm{B}T}}\right] \approx 2\kappa_\mathrm{B}T\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{V_0}{\kappa_\mathrm{B}T}\right)^2\right],$$

Il termine principale corrisponde all'equipartizione (ad alta temperatura, i gradi di libertà spaziali sono praticamente tutti quadratici). Per $T \ll V_0/\kappa_\mathrm{B}$ si ha

$$u(T) = V_0\left[1+\left(1+\frac{\dfrac{\kappa_\mathrm{B}T}{V_0}}{1+\dfrac{\kappa_\mathrm{B}T}{V_0}}\right)\frac{\kappa_\mathrm{B}T}{V_0}\right] \approx V_0\left(1+\frac{\kappa_\mathrm{B}T}{V_0}\right).$$

1.3 La probabilità cercata è

$$\mathcal{P}(|\boldsymbol{q}|>R;T) = \frac{\int_R^\infty \mathrm{d}q\,q\,\mathrm{e}^{-\beta V(|\boldsymbol{q}|)}}{\int_0^\infty \mathrm{d}q\,q\,\mathrm{e}^{-\beta V(|\boldsymbol{q}|)}} = \frac{1}{1+\dfrac{V_0}{\kappa_\mathrm{B}T}}.$$

2.1 La densità degli stati è

$$G(\varepsilon) = \frac{4\pi^2 g}{h^2}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}p\,p\int_0^{+\infty}\mathrm{d}q\,q\,\delta\left(\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-V(q)\right) = \frac{4\pi^2 m g}{h^2}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}q\,q\,\Theta\left(\varepsilon-V(q)\right),$$

dove $g = 2\mathcal{S}+1$ è la degenerazione di spin. Nel caso dei bosoni, $g=1$. Con il cambio di variabile $x = V_0 q^2/R^2$ si ha

$$G(\varepsilon) = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 V_0}\left[\int_0^{V_0}\mathrm{d}x\,\Theta\left(\varepsilon-V_0\right)+\int_{V_0}^{\infty}\mathrm{d}x\,\Theta\left(\varepsilon-x\right)\right] = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 V_0}\,\varepsilon\,\Theta\left(\varepsilon-V_0\right).$$

È evidente che l'energia minima di una particella è $\varepsilon_{\min} = V_0$. Poiché l'integrale

$$\int_{V_0}^{+\infty}\mathrm{d}\varepsilon\,\frac{G(\varepsilon)}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-V_0)}-1}$$

diverge nell'estremo inferiore, dove la funzione integranda si comporta come $V_0/(\varepsilon-V_0)$, la condensazione di Bose-Einstein non avviene.

2.2 Si ha

$$N = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{G(\varepsilon)}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 V_0} \int_{V_0}^{+\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}.$$

Con il cambio di variabile $\zeta = \beta(\varepsilon - \mu)$, si ha

$$N = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 \beta^2 V_0} \left[\varphi(\beta(V_0 - \mu)) - \beta\mu \log\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta(V_0-\mu)}\right) \right].$$

2.3 Per $\beta(V_0 - \mu) \gg 1$ si ha

$$N \approx \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 V_0} \int_{V_0}^{+\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \varepsilon \, \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)} = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 \beta^2 V_0} e^{\beta\mu} \int_{\beta V_0}^{+\infty} \mathrm{d}\zeta \, \zeta \, \mathrm{e}^{-\zeta},$$

con $\zeta = \beta\varepsilon$. L'integrale a secondo membro è elementare, $\int_{\beta V_0}^{+\infty} \mathrm{d}\zeta \, \zeta \, \mathrm{e}^{-\zeta} = \mathrm{e}^{-\beta V_0}(1 + \beta V_0)$, quindi

$$\mu \approx V_0 + \kappa_B T \log\left[\frac{N h^2 V_0}{2\pi^2 m R^2 \kappa_B T(\kappa_B T + V_0)}\right].$$

È evidente che

$$\beta(V_0 - \mu) \approx \log\left(\frac{2\pi^2 m R^2 \kappa_B T}{N h^2}\right) + \log\left(\frac{\kappa_B T}{V_0} + 1\right) \gg 1,$$

se la temperatura è sufficientemente elevata,

$$\kappa_B T \gg \frac{N h^2}{2\pi^2 m R^2}.$$

3.1 Per i fermioni $g = 2$ e la densità degli stati vale

$$G(\varepsilon) = \frac{4\pi^2 m R^2}{h^2 V_0} \, \varepsilon \, \Theta\left(\varepsilon - V_0\right).$$

Allora, $N = 0$, per $\varepsilon_{\mathrm{F}} < V_0$, e

$$N = \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, G(\varepsilon) = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 V_0} (\varepsilon_{\mathrm{F}}^2 - V_0^2),$$

per $\varepsilon_{\mathrm{F}} \geq V_0$.
3.2 La probabilità che il modulo della coordinata di una particella sia compreso tra q e $q + \mathrm{d}q$ è

$$\mathrm{d}P = \frac{\mathrm{d}q \, q \, \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, \Theta\left(\varepsilon - V(q)\right)}{\int_0^{\infty} \mathrm{d}q \, q \, \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, \Theta\left(\varepsilon - V(q)\right)},$$

per cui la probabilità cercata è nulla per $\varepsilon_{\mathrm{F}} < V_0$, e per $\varepsilon_{\mathrm{F}} > V_0$ vale

$$\mathcal{P}(|\boldsymbol{q}| < R; \varepsilon_{\mathrm{F}}) = \frac{\int_0^R \mathrm{d}q \, q \, \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, \Theta\left(\varepsilon - V(q)\right)}{\int_0^{\infty} \mathrm{d}q \, q \, \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, \Theta\left(\varepsilon - V(q)\right)},$$

ovvero, con il cambio di variabile $x = V_0 q^2 / R^2$,

$$\mathcal{P}(|\boldsymbol{q}| < R; \varepsilon_{\mathrm{F}}) = \frac{2V_0}{V_0 + \varepsilon_{\mathrm{F}}}.$$

3.3 La probabilità cercata è nulla se $\varepsilon_{\mathrm{F}} < 2V_0$ e per $\varepsilon_{\mathrm{F}} > 2V_0$ vale

$$\mathcal{P}\left(\varepsilon < \frac{1}{2}\varepsilon_{\mathrm{F}}\right) = \frac{\int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}/2} \mathrm{d}\varepsilon \, G(\varepsilon)}{\int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \, G(\varepsilon)} = \frac{\frac{1}{4}\varepsilon_{\mathrm{F}}^2 - V_0^2}{\varepsilon_{\mathrm{F}}^2 - V_0^2}.$$