Corso di Meccanica Statistica Compito del 10/05/2023

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

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, contenute in una regione tridimensionale di volume V, con Hamiltoniana di singola particella:

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

dove $p = |\mathbf{p}|$, b è un parametro dimensionale positivo e σ è una variabile discreta adimensionale. 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 σ possa assumere i valori $0, \pm 1$:
a. [3 punti] Calcolare l'energia interna per particella $u = U/N$ in funzione di T; calcolare i limiti per $b \ll k_B T$ e $b \gg k_B T$.
b. [3 punti] Calcolare l'entropia per particella $s = S/N$ in funzione di T.
c. [4 punti] Calcolare la frazione media di particelle con energia minore di zero nel limite $b \gg k_B T$.

2. **Bosoni**
Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 1, e che $\sigma = 0, \pm 1$ rappresenti lo spin della particella:
a. [3 punti] Dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
b. [4 punti] Calcolare la temperatura di transizione T_0 nel limite $k_B T_0 \ll b$.
c. [3 punti] Calcolare la frazione media di particelle che si trovano nello stato fondamentale a $T = T_0/2$ nel limite $k_B T_0 \ll b$.

3. **Fermioni**
Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2 e che $\sigma = \pm 1/2$ rappresenti lo spin della particella:
a. [3 punti] Determinare il numero di particelle N a $T = 0$ in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F.
b. [4 punti] Calcolare il valore medio $\langle \sigma \rangle$ a $T = 0$ per $\epsilon_F = b/2$.
c. [3 punti] Calcolare il valore massimo dell'impulso $p_{\max}$ a $T = 0$ per $\epsilon_F = b/2$.

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 $Z_N = Z_1^N/N! \approx (Z_1\,\mathrm{e}/N)^N$ 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 $\beta \equiv (k_B T)^{-1} =$. Abbiamo

$$Z_1 = \sum_{\sigma=0,\pm1} \int \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{q}\,\mathrm{d}^3\mathbf{p}}{h^3}\,\mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)} = \int \mathrm{d}^3\mathbf{q}\,\frac{1}{h^3}\int \mathrm{d}^3\mathbf{p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2m}p^2}\sum_{\sigma=0,\pm1}\mathrm{e}^{-\beta b\sigma} \tag{1}$$

$$= \frac{V}{h^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta b}+\mathrm{e}^{\beta b}\right). \tag{2}$$

Quindi,

$$u = -\left.\frac{\partial \ln Z_1}{\partial\beta}\right|_V = \frac{3}{2}k_B T - b\,\frac{\mathrm{e}^{b/k_BT}-\mathrm{e}^{-b/k_BT}}{1+\mathrm{e}^{-b/k_BT}+\mathrm{e}^{b/k_BT}}. \tag{3}$$

I limiti sono semplici:
Nel limite di alte temperature $b \ll k_B T$, gli esponenziali tendono a 1. Sviluppando per βb piccoli si ottiene

$$u = \frac{3}{2}k_B T\left[1-\frac{4}{9}\left(\frac{b}{k_BT}\right)^2 + \mathrm{O}(\beta^4 b^4)\right].$$

Nel limite di basse temperature $\beta b \gg 1$, gli esponenziali positivi divergono, quelli negativi tendono a zero. Si ottiene

$$u = -b\left[1-\frac{3k_BT}{2b}+\mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta b})\right].$$

1.b) L'entropia in funzione della temperatura si ottiene utilizzando la relazione che lega entropia, energia interna e energia libera, ossia $S = (U-F)/T$. Per un sistema di particelle non interagenti, l'energia libera di Helmholtz è data da

$$F = -Nk_BT\ln\left(\frac{Z_1\mathrm{e}}{N}\right),$$

da cui si ottiene

$$s(T) = \frac{3}{2}k_B - \frac{b}{T}\,\frac{\mathrm{e}^{b/k_BT}-\mathrm{e}^{-b/k_BT}}{1+\mathrm{e}^{-b/k_BT}+\mathrm{e}^{b/k_BT}} + k_B\ln\left[\frac{\mathrm{e}V}{Nh^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}(1+\mathrm{e}^{-b/k_BT}+\mathrm{e}^{b/k_BT})\right].$$

1.c) Per calcolare la frazione media di particelle che soddisfano la condizione data, occorre innanzitutto calcolare la densità di probabilità che una particella abbia una certa energia ϵ. Essa è data da

$$P(\epsilon) = G(\epsilon)\frac{\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}}{Z_1},$$

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di particella singola, e si calcola come

$$
\begin{aligned}
G(\epsilon) &= \sum_{\sigma=0,\pm1} \int \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{p}\,\mathrm{d}^3\mathbf{q}}{h^3} \delta\left[H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)-\epsilon\right] = \frac{V}{h^3} \sum_{\sigma=0,\pm1} \int \mathrm{d}^3\mathbf{p}\,\delta\left(\frac{p^2}{2m}+b\sigma-\epsilon\right) \\
&= \frac{4\pi V}{h^3} \sum_{\sigma=0,\pm1} \int_0^\infty \mathrm{d}p\, p^2 \delta\left(\frac{p^2}{2m}+b\sigma-\epsilon\right) \\
&= \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \sum_{\sigma=0,\pm1} (\epsilon-b\sigma)^{1/2}\theta(\epsilon-b\sigma) \\
&\equiv \sum_{\sigma=0,\pm1} G(\epsilon,\sigma),
\end{aligned}
$$

dove abbiamo definito la densità degli stati con energia ϵ e variabile σ date, $G(\epsilon,\sigma)$, che tornerà utile nei calcoli futuri. Il calcolo può essere completato eseguendo la somma sui possibili valori di σ, arrivando infine a

$$
G(\epsilon) = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\left[\epsilon^{1/2}\theta(\epsilon)+(\epsilon-b)^{1/2}\theta(\epsilon-b)+(\epsilon+b)^{1/2}\theta(\epsilon+b)\right]. \tag{4}
$$

Una volta ottenuta la $P(\epsilon)$, possiamo calcolare la frazione richiesta come

$$
\frac{N(\epsilon<0)}{N} = \frac{N\int_{-\infty}^0 \mathrm{d}\epsilon\, P(\epsilon)}{N} = \int_{-\infty}^0 \mathrm{d}\epsilon\, G(\epsilon)\frac{\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}}{Z_1}
$$

Utilizzando l'espressione di $G(\epsilon)$ appena ottenuta, e considerando che solo un termine contribuisce alle energie minori di zero, troviamo

$$
\begin{aligned}
\frac{N(\epsilon<0)}{N} &= \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3 Z_1} \int_{-b}^0 \mathrm{d}\epsilon\, \mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\,(\epsilon+b)^{1/2} \\
&= \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3 Z_1} \frac{\mathrm{e}^{\beta b}}{\beta^{3/2}} \int_0^{\beta b} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{-t}\, t^{1/2} \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\mathrm{e}^{\beta b}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta b}+\mathrm{e}^{\beta b})} \int_0^{\beta b} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{-t}\, t^{1/2}.
\end{aligned}
$$

Nel limite $\beta b \gg 1$ l'estremo dell'integrale tende a infinito, riproducendo una funzione Γ, quindi, a meno di termini esponenzialmente piccoli $\mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta b})$,

$$
\frac{N(\epsilon<0)}{N} \to \frac{2}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) - \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta b}) = 1 - \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta b}). \tag{5}
$$

2.a) Se il sistema è composto da Bosoni il numero medio di particelle a temperatura T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$, dove N_0 è il numero medio di particelle nello stato condensato ed $\tilde{N}$ il numero medio di particelle nello stato non-condensato, dato da

$$
\tilde{N} = \int_{\epsilon_{\min}}^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1},
$$

dove $\epsilon_{\min}$ è l'energia minima di una particella e $\mu \le \epsilon_{\min}$. La condizione affinché esista la condensazione a $T = T_0$ è che

$$
\int_{\epsilon_{\min}}^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon-\epsilon_{\min})}-1} = N < \infty,
$$

dove nel nostro caso $\epsilon_{\min} = -b$. $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella. Se le particelle sono bosoni di spin 1, il calcolo della $G(\epsilon)$ è esattamente quello compiuto nel punto 1.c. Di conseguenza, la condizione di condensazione diventa

$$N = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\left[\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1} + \int_b^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{(\epsilon-b)^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1} + \int_{-b}^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{(\epsilon+b)^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1}\right] =$$
$$\equiv \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\left(I_1+I_2+I_3\right)$$

I primi due integrali, I_1 e I_2, sono banalmente finiti. Il terzo integrale presenta una funzione integranda con una divergenza all'estremo inferiore $\epsilon = -b$, tale divergenza è però integrabile (la funzione integranda si comporta come $1/\sqrt{\epsilon+b}$ per $\epsilon \to -b^+$), dunque l'integrale converge. Si ha infatti, operando un semplice cambio di variabile,

$$I_3 = \int_{-b}^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{(\epsilon+b)^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1} = \frac{1}{\beta_0^{3/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{1/2}\mathrm{e}^{-t} = \frac{1}{\beta_0^{3/2}}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right).$$

Quindi, esiste la condensazione di Bose-Einstein.

2.b) Nel limite $k_B T_0 \ll b$, ossia $\beta_0 b \gg 1$ possiamo ottenere espressioni semplici anche per gli altri due integrali:

$$I_1 = \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1} \approx \mathrm{e}^{-\beta_0 b}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{1/2}\mathrm{e}^{-\beta_0\epsilon} + \mathrm{O}\left(\mathrm{e}^{-2\beta_0 b}\right) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta_0 b}}{\beta_0^{3/2}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{O}\left(\mathrm{e}^{-2\beta_0 b}\right).$$

Analogamente,

$$I_2 = \int_b^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \frac{(\epsilon-b)^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon+b)}-1} \approx \mathrm{e}^{-2\beta_0 b}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{1/2}\mathrm{e}^{-\beta_0\epsilon} + \mathrm{O}\left(\mathrm{e}^{-4\beta_0 b}\right) = \frac{\mathrm{e}^{-2\beta_0 b}}{\beta_0^{3/2}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{O}\left(\mathrm{e}^{-4\beta_0 b}\right).$$

Mettendo tutto insieme troviamo

$$N = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\frac{1}{\beta_0^{3/2}}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\left[1 + \frac{\mathrm{e}^{-\beta_0 b}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-2\beta_0 b})\right].$$

Invertendo e risolvendo iterativamente troviamo

$$T_0 = \widetilde{T}_0\left[1 - \frac{2}{3}\frac{\mathrm{e}^{-b/k_B\widetilde{T}_0}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right] + \mathrm{O}\left(\mathrm{e}^{-2b/k_B\widetilde{T}_0}\right),$$

dove

$$\widetilde{T}_0 = \left[\frac{Nh^3}{2\pi V(2mk_B)^{3/2}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\right]^{2/3}$$

è una costante con le dimensioni di una temperatura.

2.c) Per $T < T_0$, il potenziale chimico rimane fissato al suo valore massimo $\mu = \epsilon_{\min} = -b$ e abbiamo

$$N_0(T) = N - \tilde{N}(\mu = 0, T) = N\left[1 - \frac{\tilde{N}(\mu=-b,T)}{\tilde{N}(\mu=-b,T_0)}\right]$$

da cui, riprendendo il calcolo svolto al punto precedente nel limite $\beta_0 b \gg 1$, troviamo

$$N_0(T) = N\left[1 - \frac{T^{3/2}}{T_0^{3/2}}\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta b})}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta_0 b})}\right]$$

Per $T = T_0/2$ troviamo dunque

$$\frac{N_0(T_0/2)}{N} = 1 - 2^{-3/2}\left[1 - \frac{\mathrm{e}^{-\beta_0 b}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-2\beta_0 b})\right].$$

3.a) Il numero di particelle del sistema a temperatura nulla è dato da

$$N = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \, G(\epsilon)$$

dove ϵ_F è l'energia di Fermi.
La densità degli stati è diversa da quella utilizzata al punto precedente, poiché stiamo considerando adesso particelle di spin 1/2. Per calcolarla basta considerare la $G(\epsilon, \sigma)$ calcolata al punto 1.c e sommare sui valori ammessi di $\sigma = \pm 1/2$. Otteniamo

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \left[\left(\epsilon - \frac{b}{2} \right)^{1/2} \theta \left(\epsilon - \frac{b}{2} \right) + \left(\epsilon + \frac{b}{2} \right)^{1/2} \theta \left(\epsilon + \frac{b}{2} \right) \right].$$

Integrando troviamo facilmente

$$N = \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{3h^3} \left[\left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right) + \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right) \right]. \tag{6}$$

3.b) l valore medio di σ è dato da

$$\langle \sigma \rangle = \sum_{\sigma = \pm 1/2} P(\sigma) \sigma$$

dove, a temperatura nulla,

$$\begin{aligned} P(\sigma) &= \frac{N(\sigma)}{N} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \, G(\epsilon, \sigma) \\ &= \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{3Nh^3} \left(\epsilon_F - b\sigma \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F - b\sigma \right). \end{aligned}$$

Dunque, sostituendo il valore di N ottenuto in precedenza, otteniamo

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{2} \frac{\left[\left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right) - \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right) \right]}{\left[\left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F - \frac{b}{2} \right) + \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right)^{3/2} \theta \left(\epsilon_F + \frac{b}{2} \right) \right]}. \tag{7}$$

Per $\epsilon_F = b/2$ soltanto il secondo contributo è diverso da zero, sia al numeratore che al denominatore, e otteniamo

$$\langle \sigma \rangle = -\frac{1}{2}.$$

3.b) A temperatura nulla l'energia massima di una particella è data dall'energia di Fermi

$$\epsilon_F = \frac{p^2}{2m} + b\sigma.$$

Il valore massimo dell'impulso si ottiene quando l'energia di spin è minima, ossia per $\sigma = -1/2$. Dunque, per $\epsilon_F = b/2$ avremo

$$p_{\max} = \sqrt{2mb}. \tag{8}$$