Corso di Meccanica Statistica Compito del 11/07/2022
Proff. S. Caprara, I. Giardina e M. Grilli

Si consideri un sistema bidimensionale costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, che si muovono nella regione piana A: $[-\infty < x < \infty; 0 \leq y \leq 2L]$, con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}ax^2 + V(y) \ ,$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, a è un parametro dimensionale positivo e il potenziale $V(y)$ è dato da:

$$V(y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq y < L, \\ V_0 & L \leq y < 2L, \end{cases}$$

con $V_0 > 0$. 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 il sistema sia in equilibrio alla temperatura T:
a. [4 punti] calcolare l'energia media per particella $u = U/N$ in funzione di T;
b. [4 punti] calcolare il calore specifico per particella c_V in funzione di T, e calcolare i limiti per $T \to \infty$ e $T \to 0$;
c. [4 punti] calcolare la frazione media di particelle con $\{y < L;\ \frac{1}{2}ax^2 < k_B T\}$.
Si ricorda la definizione $\mathrm{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{-t^2}$.

2. **Bosoni**
Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
a. [5 punti] dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein e calcolare la temperatura di transizione T_0 nel limite $V_0 \gg k_B T_0$;
b. [4 punti] calcolare la frazione media di particelle che si trovano nello stato fondamentale a $T = T_0/2$ nel limite $V_0 \gg k_B T_0$.
Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\, \mathrm{e}^{-t}$; $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$.

3. **Fermioni**
Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2 e si trovi a $T = 0$:
a. [5 punti] determinare l'energia media del sistema in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F;
b. [4 punti] calcolare il valore medio di x^2 delle particelle a temperatura nulla per $\epsilon_F = V_0/2$;

• Nota: La costante di Botzmann k_B è presa uguale a 1, di conseguenza $\beta = 1/T$ e T ha le dimensioni di un'energia.

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 media per particella assume dunque l'espressione $u = U/N = -\partial(\ln Z_1)/\partial\beta$. Abbiamo

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \int \frac{\mathrm{d}^2\mathbf{q}\,\mathrm{d}^2\mathbf{p}}{h^2}\,\mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{1}{h^2}\int \mathrm{d}^2\mathbf{p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2m}p^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}x^2}\int_0^{2L}\mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta V(y)} \\
&= \left(\frac{2\pi m}{h^2\beta}\right)\sqrt{\frac{2\pi}{\beta a}}\left(\int_0^L \mathrm{d}y + \int_L^{2L}\mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta V_0}\right) \\
&= \frac{mL}{h^2 a^{1/2}}\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{3/2}\left(1+e^{-\beta V_0}\right).
\end{aligned} \tag{1}$$

Quindi,

$$u = -\left.\frac{\partial \ln(Z_1)}{\partial\beta}\right|_{V,N} = \frac{3}{2}T + \frac{V_0}{1+\mathrm{e}^{V_0/T}}$$

1.b) Il calore specifico per particella si calcola come

$$\begin{aligned}
c_V = \left.\frac{\partial u}{\partial T}\right|_{V,N} &= \frac{3}{2} - \beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{V_0}{1+\mathrm{e}^{\beta V_0}}\right) \\
&= \frac{3}{2} + \frac{(\beta V_0)^2\,\mathrm{e}^{\beta V_0}}{(1+\mathrm{e}^{\beta V_0})^2}.
\end{aligned}$$

I limiti sono semplici:
$T\to\infty$ equivale a $\beta\to 0$, in tal caso gli esponenziali tendono a 1 e $c_V \approx \frac{3}{2} + O(\beta^2 V_0^2)$;
$T\to 0$ equivale a $\beta\to\infty$, e $c_V \approx \frac{3}{2} + O(\beta^2 V_0^2\,\mathrm{e}^{-\beta V_0})$.

1.c) Per calcolare la frazione media di particelle che soddisfano la condizione data, occorre innanzitutto calcolare la densità di probabilità che una particella si trovi in una posizione x, y dello spazio. Essa è data da

$$\begin{aligned}
P(x,y) &= \int \mathrm{d}x'\delta(x-x')\int \mathrm{d}y'\delta(y-y')\int\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{p}'}{h^2}\frac{\mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{p}',\mathbf{q}')}}{Z_1} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{-\beta\left[\frac{a}{2}x^2+V(y)\right]}}{\sqrt{\frac{2\pi}{\beta a}}L(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}.
\end{aligned}$$

La frazione di particelle contenuta nella regione $\mathcal{R}:\ \{y<L;\ \frac{1}{2}ax^2 < k_BT\}$ è dunque

$$\begin{aligned}
\frac{N^{\mathcal{R}}}{N} &= \int_{-\sqrt{2/\beta a}}^{\sqrt{2/\beta a}}\mathrm{d}x\int_0^L \mathrm{d}y\,P(x,y) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{\beta a}}L(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}\int_{-\sqrt{2/\beta a}}^{\sqrt{2/\beta a}}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}x^2}\int_0^L\mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\beta V(y)} \\
&= \frac{2L}{\sqrt{\frac{2\pi}{\beta a}}L(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}\int_0^{\sqrt{2/\beta a}}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}x^2} = \\
&= \frac{\mathrm{erf}(1)}{(1+\mathrm{e}^{-\beta V_0})}.
\end{aligned} \tag{2}$$

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 $\widetilde{N}$ 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 min è l'energia minima di una particella e $\mu \leq \epsilon_{\min}$. 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 $\epsilon_{min} = 0$. $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella:

$$\begin{aligned}
G(\epsilon) &= g_s \int \frac{\mathrm{d}^2\mathbf{p}\,\mathrm{d}^2\mathbf{q}}{h^2} \delta\left[H(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \epsilon\right] = \frac{g_s}{h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_0^{2L} \mathrm{d}y \; \pi \int_0^{\infty} \mathrm{d}p^2 \, \delta\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{ax^2}{2} + V(y) - \epsilon\right] = \\
&= \frac{2\pi m g_s}{h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_0^{2L} \mathrm{d}y \, \theta\left[\epsilon - \frac{ax^2}{2} - V(y)\right] = \\
&= \frac{2\pi m g_s}{h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left[\int_0^{L} \mathrm{d}y \, \theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2}\right) + \int_L^{2L} \mathrm{d}y \, \theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2} - V_0\right)\right] = \\
&= \frac{2\pi m L g_s}{h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left[\theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2}\right) + \theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2} - V_0\right)\right],
\end{aligned}$$

dove il parametro g_s indica la degenerazione di spin (in questo caso 1). Prima di concludere il calcolo notiamo che l'espressione finora ottenuta e non integrata in x rappresenta la densità di stati di particella singola con energia ϵ e coordinata x, $G(\epsilon, x)$, che utilizzeremo in seguito per risolvere il problema 3.b).
Il primo integrale nell'espressione di $G(\epsilon)$ si calcola notando che la funzione θ impone $x < \sqrt{2\epsilon/a}$ (possibile solo a energie positive). Nel secondo integrale invece la θ impone la condizione $|x| < \sqrt{2(\epsilon - V_0)/a}$ (possibile solo a energie $\epsilon > V_0$). Si ottiene dunque

$$G(\epsilon) = \frac{4\pi m L g_s}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\epsilon^{1/2}\, \theta(\epsilon) + (\epsilon - V_0)^{1/2}\, \theta(\epsilon - V_0)\right].$$

Di conseguenza, la condizione di condensazione diventa

$$N = \frac{4\pi m L g_s}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\sqrt{\epsilon}}{\mathrm{e}^{\beta_0 \epsilon} - 1} + \int_{V_0}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\sqrt{\epsilon - V_0}}{\mathrm{e}^{\beta_0 \epsilon} - 1}\right].$$

Il primo integrale presenta una funzione integranda con una divergenza all'estremo inferiore $\epsilon = 0$, tale divergenza è però integrabile (la funzione integranda si comporta come $1/\sqrt{\epsilon}$ per $\epsilon \to 0^+$), dunque l'integrale converge. Il secondo integrale è banalmente finito. Operando dei semplici cambi di variabile ($\epsilon \to t = \beta_0 \epsilon$ e $\epsilon \to t = \beta_0(\epsilon - V_0)$ otteniamo infatti:

$$\begin{aligned}
N &= \frac{4\pi m L g_s}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \beta_0^{-3/2} \left[\int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{\sqrt{t}}{\mathrm{e}^t - 1} + \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{\sqrt{t}}{\mathrm{e}^t \, \mathrm{e}^{\beta_0 V_0} - 1}\right] = \\
&= \frac{4\pi m L g_s}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \beta_0^{-3/2} \left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{\sqrt{t}}{\mathrm{e}^t \, \mathrm{e}^{\beta_0 V_0} - 1}\right] \qquad (3)
\end{aligned}$$

Nel limite $\beta_0 V_0 \gg 1$ possiamo espandere il denominatore nel secondo integrale e otteniamo

$$N = \frac{4\pi m L g_s}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \beta_0^{-3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left[1 + \frac{\mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} + O(\mathrm{e}^{-2\beta_0 V_0})\right].$$

Invertendo e risolvendo iterativamente troviamo

$$T_0 = \widetilde{T}_0 \left[1 - \frac{2}{3} \frac{\mathrm{e}^{-V_0/\widetilde{T}_0}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right] + O\left(\mathrm{e}^{-2V_0/\tilde{T}_0}\right)$$

dove

$$\widetilde{T}_0 = \left[\frac{Nh^2\sqrt{a}}{4\pi mL\sqrt{2}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\right]^{2/3}$$

è una costante con le dimensioni di una temperatura (e abbiamo posto $g_s = 1$)

2.b) Per $T < T_0$, il potenziale chimico rimane fissato al suo valore massimo $\mu = \epsilon_{min} = 0$ e abbiamo

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

da cui, riprendendo il calcolo svolto al punto precedente nel limite $\beta_0 V_0 \gg 1$, troviamo

$$N_0(T) = N\left[1 - \frac{T^{3/2}}{T_0^{3/2}}\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{e}^{-\beta V_0}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}}\right]$$

Per $T = T_0/2$ troviamo dunque

$$\frac{N_0(T_0/2)}{N} = 1 - 2^{-3/2}\left[1 - \frac{\mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} + O(\mathrm{e}^{-2\beta_0 V_0})\right].$$

3.a) L'energia media del sistema a temperatura nulla è data dalla seguente espressione:

$$E = \int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon\, G(\epsilon)\epsilon$$

dove la densitá degli stati è quella calcolata al punto precedente, in cui porremo però degenerazione di spin corrispondente al caso fermionico, ossia $g_s = 2$. Sostituendo otteniamo

$$\begin{aligned}
E &= \int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon\, G(\epsilon)\epsilon = \\
&= \frac{8\pi mL}{h^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^{\epsilon_F}\mathrm{d}\epsilon\,\epsilon\left[\epsilon^{1/2}\,\theta(\epsilon) + (\epsilon - V_0)^{1/2}\,\theta(\epsilon - V_0)\right] = \\
&= \frac{8\pi mL}{h^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\left[\frac{2}{5}\epsilon_F^{5/2}\,\theta(\epsilon_F) + \theta(\epsilon_F - V_0)\int_0^{\epsilon_F - V_0}\mathrm{d}y\, y^{1/2}(y + V_0)\right] = \\
&= \frac{8\pi mL}{h^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\left\{\frac{2}{5}\epsilon_F^{5/2}\,\theta(\epsilon_F) + \left[\frac{2}{5}(\epsilon_F - V_0)^{5/2} + \frac{2}{3}V_0(\epsilon_F - V_0)^{3/2}\right]\theta(\epsilon_F - V_0)\right\}.
\end{aligned} \tag{4}$$

3.b) l valore medio di x^2 a temperatura nulla è dato da

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{N}\int_0^{\epsilon_F}\mathrm{d}\epsilon\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, G(\epsilon, x)\, x^2,$$

dove

$$G(\epsilon, x) = \int\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{p}'\,\mathrm{d}^2\mathbf{q}'}{h^2}\delta\left[H(\mathbf{p}', \mathbf{q}') - \epsilon\right]\,\delta(x' - x) = \frac{2\pi mLg_s}{h^2}\left[\theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2}\right) + \theta\left(\epsilon - \frac{ax^2}{2} - V_0\right)\right]$$

[vedi punto 2.a)]. Per $\epsilon_F = V_0/2$ soltanto la prima parte della $G(\epsilon, x)$ contribuisce al calcolo di $\langle x^2\rangle$, poiché la seconda funzione θ richiede $ax^2/2 < \epsilon - V_0 < \epsilon_F - V_0 = -V_0/2 < 0$ e non è dunque mai soddisfatta per nessun valore di x.

Otteniamo dunque (ponendo $g_s = 2$)

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \frac{4\pi m L}{h^2 N} \int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 \theta \left(\epsilon - \frac{a x^2}{2} \right) = \frac{4\pi m L}{h^2 N} \int_0^{V_0/2} \mathrm{d}\epsilon\, 2 \int_0^{\sqrt{2\epsilon/a}} \mathrm{d}x\, x^2 = \\
&= \frac{8\pi m L}{h^2 N} \frac{1}{3} \left(\frac{2}{a} \right)^{3/2} \int_0^{V_0/2} d\epsilon\; \epsilon^{3/2} = \\
&= \frac{8\pi m L}{h^2 N} \frac{2}{15} \left(\frac{2}{a} \right)^{3/2} \left(\frac{V_0}{2} \right)^{5/2} . \qquad (5)
\end{aligned}$$

Possiamo a questo punto calcolare e sostituire l'espressione di N,

$$N = \int_0^{\epsilon_F = V_0/2} \mathrm{d}\epsilon\, G(\epsilon) = \frac{8\pi m L}{h^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^{\epsilon_F = V_0/2} \mathrm{d}\epsilon\, \theta(\epsilon) \sqrt{\epsilon} = \frac{8\pi m L}{3 h^2 \sqrt{a}} V_0^{3/2}$$

e otteniamo infine

$$\langle x^2 \rangle = \frac{V_0}{5a}.$$