

Corso di Meccanica Statistica - Compito del 15/4/2024
Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas costituito da N particelle identiche relativistiche, non interagenti, confinate nella regione cilindrica di spazio $0 \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq R$, $0 \leq z < \infty$, con Hamiltoniana di singola particella data da

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r}) = cp + \frac{1}{2}kz^2,$$

dove $p \equiv |\vec{p}|$, $\vec{r}$ è il vettore di componenti cartesiane x, y, z , nel sistema di riferimento assegnato, c e k sono parametri dimensionali strettamente positivi. Il sistema è in equilibrio a temperatura T .

Particella classica:

1. [3 punti] Determinare l'energia interna per particella u in funzione della temperatura T . Questa energia è maggiore o minore di quella ottenuta per particelle non-relativistiche?
2. [4 punti] Determinare l'altezza media delle particelle $\langle z \rangle$ in funzione della temperatura T .

Particelle quantistiche di spin $S = 0$.

1. [3 punti] Determinare la temperatura di condensazione T_0 in funzione del numero di particelle N .
2. [4 punti] Determinare la temperatura $T_{1/2}$ alla quale la metà delle particelle si trova nel condensato, in funzione di T_0 .

Particelle quantistiche di spin $S = \frac{1}{2}$.

Assumendo che il sistema si trovi a $T = 0$:

1. [3 punti] Determinare l'energia di Fermi ϵ_F in funzione del numero di particelle N .
2. [5 punti] Determinare per quale valore di ϵ_F l'altezza media della particelle è $\langle z \rangle = R$.

Sistemi magnetici

Si consideri un sistema di N spin indipendenti in presenza di un campo magnetico esterno h , con Hamiltoniana $\mathcal{H}(\{s_i\}) = -h \sum_{i=1}^N s_i$. Le variabili di spin assumono i valori $s_i = \pm 1$.

1. [3 punti] Calcolare il valore di h per cui la magnetizzazione $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle$ è pari a $\frac{1}{2}$.
2. [5 punti] Calcolare l'entropia del sistema in funzione della magnetizzazione m . Notiamo che tale calcolo può essere eseguito, a scelta, o come conteggio di microstati (ossia in un contesto microcanonico), o a partire dall'energia libera di Helmholtz $A(T, N, h)$, esprimendo poi l'entropia canonica in funzione di m , dopo aver invertito la relazione $m = \varphi(T, h)$.

Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t}$; $\zeta(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt \frac{t^{z-1}}{e^t - 1}$; $\tanh^{-1}(z) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+z}{1-z} \right)$.
Valori utili: $\Gamma(\frac{7}{2}) = \frac{15}{8}\sqrt{\pi}$, $\zeta(\frac{7}{2}) \approx 1.1267$.

Risoluzione

Particelle classiche

1. Posto $\beta \equiv (\kappa_B T)^{-1}$, la funzione di partizione di una particella è

$$Z_1 = \frac{1}{h^3} \int d^3\vec{p} d^3\vec{r} e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r})} = \frac{4\pi^2 R^2}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 e^{-\beta cp} \int_0^\infty dz e^{-\frac{1}{2}\beta k z^2},$$

dove nell'integrale su $\vec{r}$ si sono adottate coordinate cilindriche e l'area della base del cilindro è banalmente πR^2 . Gli integrali sono elementari e si trova (considerando che $\Gamma(3) = 2$)

$$Z_1 = \frac{4\pi^2 R^2}{h^3 c^3 \beta^3} \Gamma(3) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta k}} = \frac{4\pi^2 R^2}{h^3 c^3} \sqrt{\frac{2\pi}{k}} \frac{1}{\beta^{7/2}}.$$

L'energia interna per particella è

$$u = -\frac{\partial \ln(Z_1)}{\partial \beta} = \frac{7}{2} \kappa_B T.$$

Nel caso di particelle non relativistiche, applicando il teorema di equipartizione, e considerando che l'energia dipende da quattro gradi di libertà quadratici, troviamo immediatamente $u = 2\kappa_B T$. Dunque, nel caso relativistico, l'energia è maggiore che nel caso non relativistico.

2. Per calcolare l'altezza media delle particelle, usiamo la densità di probabilità della variabile z , ossia

$$P(z) = \frac{1}{I_z} e^{-\frac{1}{2}\beta k z^2} = 2\sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\beta k z^2},$$

dove I_z è la normalizzazione (già calcolata al punto 1, nel contesto del calcolo di Z_1). Avremo dunque

$$\langle z \rangle = \int_0^\infty dz z P(z) = 2\sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} \int_0^\infty dz z e^{-\frac{1}{2}\beta k z^2} = 2\sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} \int_0^\infty dt e^{-\beta k t} = \sqrt{\frac{2}{\pi \beta k}}.$$

Bosoni

3. Calcoliamo per iniziare la densità degli stati (con degenerazione di spin $g_s = 1$)

$$\begin{aligned}
 G(\epsilon) &= g_s \frac{1}{h^3} \int d\vec{r} d\vec{p} \delta[\epsilon - \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r})] = \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3} \int_0^\infty dz \int_0^\infty dp p^2 \delta(\epsilon - cp - \tfrac{1}{2} k z^2), \\
 &= \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3 c^3} \int_0^\infty dz (\epsilon - \tfrac{1}{2} k z^2)^2 \theta(\epsilon - \tfrac{1}{2} k z^2) \equiv \int_0^\infty dz G(\epsilon, z) = \\
 &= \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3 c^3} \theta(\epsilon) \int_0^{\sqrt{\frac{2\epsilon}{k}}} dz (\epsilon - \tfrac{1}{2} k z^2)^2 = \frac{32\pi^2 R^2 g_s}{15 h^3 c^3} \sqrt{\frac{2}{k}} \theta(\epsilon) \epsilon^{5/2} \equiv A \theta(\epsilon) \epsilon^{5/2},
 \end{aligned}$$

dove A è una costante dimensionale positiva. Nella seconda linea della derivazione, abbiamo introdotto la densità degli stati di particella singola a energia e altezza date, $G(\epsilon, z)$, che sarà utile nei calcoli futuri.

Dalla forma della $G(\epsilon)$ è evidente che l'energia minima di una particella è $\epsilon_{\min} = 0$. Per trovare la temperatura di condensazione T_0 , ponendo $\beta_0 \equiv (\kappa_B T_0)^{-1}$, scriviamo

$$N = \int \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta_0 \epsilon} - 1} d\epsilon = A \int_0^\infty \frac{\epsilon^{5/2}}{e^{\beta_0 \epsilon} - 1} d\epsilon = \frac{A}{\beta_0^{7/2}} \int_0^\infty \frac{t^{5/2}}{e^t - 1} dt = A (\kappa_B T_0)^{7/2} \zeta(\tfrac{7}{2}) \Gamma(\tfrac{7}{2}).$$

Ricordando che nel caso dei Bosoni di spin $S = 0$ si ha che $g_s = 1$, si trova

$$\kappa_B T_0 = \left[\frac{N}{A \zeta(\frac{7}{2}) \Gamma(\frac{7}{2})} \right]^{2/7} = \left[\frac{15 h^3 c^3 \sqrt{k} N}{32 \pi^2 R^2 \sqrt{2} \zeta(\frac{7}{2}) \Gamma(\frac{7}{2})} \right]^{2/7} = \left[\frac{h^3 c^3 \sqrt{k} N}{4 \pi^2 R^2 \sqrt{2 \pi} \zeta(\frac{7}{2})} \right]^{2/7}$$

4. Per $T < T_0$, il potenziale chimico resta fisso al valore dell'energia minima (nel nostro caso, $\epsilon_{\min} = 0$). Il numero di particelle fuori dal condensato è dunque

$$N_{>} = \int_0^\infty \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta \epsilon} - 1} d\epsilon = \frac{A}{\beta^{7/2}} \int_0^\infty \frac{t^{5/2}}{e^t - 1} dt = N \left(\frac{T}{T_0} \right)^{7/2}.$$

Allora,

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{N_{>}}{N} = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{T_{1/2}}{T_0} \right)^{7/2} = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad T_{1/2} = \frac{T_0}{2^{2/7}} \approx 0.82 T_0.$$

Fermioni

5. In questo caso $g_s = 2$, quindi, invertendo la relazione

$$N = A \theta(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{5/2} d\epsilon = \frac{64\pi^2 R^2 \sqrt{2}}{15h^3 c^3 \sqrt{k}} \frac{2}{7} \epsilon_F^{7/2} \theta(\epsilon_F)$$

si ha (per $\epsilon_F \geq 0$)

$$\epsilon_F = \left[\frac{105h^3 c^3 \sqrt{k} N}{128\pi^2 R^2 \sqrt{2}} \right]^{2/7}.$$

6. La densità degli stati congiunta che serve per rispondere alla domanda posta è

$$G(\epsilon, z) = \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3 c^3} \left(\epsilon - \frac{1}{2} k z^2 \right)^2 \theta \left(\epsilon - \frac{1}{2} k z^2 \right).$$

Il valore medio cercato è

$$\begin{aligned} \langle z \rangle &= \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3 c^3 N} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \int_0^\infty dz z \left(\epsilon - \frac{1}{2} k z^2 \right)^2 \theta \left(\epsilon - \frac{1}{2} k z^2 \right) \\ &= \frac{4\pi^2 R^2 g_s}{h^3 c^3 k N} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \int_{-\infty}^\epsilon dt t^2 \theta(t) = \frac{2\pi^2 R^2}{3h^3 c^3 k N} \epsilon_F^4 = \frac{35}{64} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{2k}}. \end{aligned}$$

Ponendo $\langle z \rangle = R$, si trova quindi

$$\epsilon_F = \left(\frac{64}{35} \right)^2 2kR^2 \approx 6.687 kR^2.$$

Sistemi magnetici

7. Poiché gli spin sono indipendenti, ogni spin è distribuito indipendentemente dagli altri secondo la probabilità

$$P(s_i) = \frac{1}{Z_1} e^{\beta h s_i},$$

dove la funzione di partizione di singolo spin Z_1 è data da

$$Z_1 = \sum_{s_i=\pm 1} e^{\beta h s_i} = 2 \cosh(\beta h) .$$

Il valore medio dello spin è

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z_1} \sum_{s_i=\pm 1} e^{\beta h s_i} s_i = \tanh(\beta h) ,$$

e la magnetizzazione per sito è dunque data da

$$m = \tanh(\beta h) .$$

Il valore del campo magnetico richiesto si ottiene in modo semplice invertendo tale relazione, ossia

$$h_{1/2} = \kappa_B T \tanh^{-1} \left(\frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \kappa_B T \ln(3) \approx 0.5493 \kappa_B T .$$

8. L'entropia del sistema in funzione della magnetizzazione m può essere calcolata in due modi, o contando direttamente il numero di configurazioni che corrispondono a magnetizzazione m (calcolo microcanonico), o usando il calcolo dell'entropia canonico ed esprimendo tutto in funzione di m . Vediamo come procedere:

Calcolo microcanonico: In questo caso calcoliamo l'entropia come logaritmo del numero dei microstati accessibili, a magnetizzazione (e dunque energia) fissata, ossia

$$S(M) = \kappa_B \ln[\mathcal{N}(M)],$$

dove $M = Nm$ indica la magnetizzazione globale del sistema e $\mathcal{N}(M)$ il numero di configurazioni con M data. Notiamo che $M = N^+ - N^-$, dove N^+ indica il numero di spin positivi e N^- quello di spin negativi, con $N^+ + N^- = N$. Avremo dunque

$$\mathcal{N}(M) = \binom{N}{N^+} = \frac{N!}{N^+! N^-!} \quad \text{con} \quad N^+ = \frac{N+M}{2}; \quad N^- = \frac{N-M}{2} .$$

e infine, usando l'approssimazione di Stirling,

$$\begin{aligned} \frac{S(M)}{\kappa_B} &= N \ln N - N - \frac{N+M}{2} \ln \left(\frac{N+M}{2} \right) + \frac{N+M}{2} - \frac{N-M}{2} \ln \left(\frac{N-M}{2} \right) + \frac{N-M}{2} \\ &= \frac{N}{2} \left[\ln 4 - \ln(1-m^2) - m \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) \right] . \end{aligned}$$

Calcolo canonico: In questo caso calcoliamo l'entropia a partire dall'energia libera del sistema. Ricordando che gli spin sono distinguibili, avremo per l'energia libera di Hemlomtzt $A = -\frac{N}{\beta} \ln Z_1$ e dunque

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial A}{\partial T} = \frac{1}{\kappa_B T^2} \frac{\partial A}{\partial \beta} = \frac{N}{\kappa_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta h)] \right\} \\ &= \kappa_B N \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1 - m^2) - m \tanh^{-1}(m) \right] \\ &= \frac{\kappa_B N}{2} \left[\ln 4 - \ln(1 - m^2) - m \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) \right], \end{aligned}$$

dove si è posto $\beta h = \tanh^{-1}(m)$ e si sfruttata la relazione

$$\tanh^{-1}(m) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right).$$