Appello di Meccanica Statistica - Compito del 15/07/2025
Prof. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas costituito da N particelle identiche, di massa m , non interagenti, in equilibrio con un termostato alla temperatura T , vincolate a muoversi su un piano (2 dimensioni), con Hamiltoniana di singola particella

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

dove $p = |\vec{p}|$, $q = |\vec{q}|$, e il potenziale centrale è

$$V(q) = \begin{cases} 0, & \text{per } 0 \leq q \leq R, \\ -V_0, & \text{per } R < q < 2R, \\ \infty, & \text{per } q \geq 2R. \end{cases}$$

con V_0 costante e positiva.

Si assuma che le particelle siano descritte dalla fisica classica.

1. [4 punti] Calcolare l'entropia canonica $S(T)$ e determinarne i limiti per $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$.
2. [3 punti] Calcolare la pressione P (in 2 dimensioni, una forza per unità di lunghezza) per $q = R/2$.
3. [3 punti] Determinare la probabilità che n particelle, con $n \leq N$, abbiano energia potenziale negativa. Determinare la media e la varianza di questa distribuzione.

Si assuma ora che le particelle siano bosoni con spin $s = 0$.

4. [3 punti] Discutere l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein e determinare, se esiste, la temperatura di condensazione.
5. [4 punti] Determinare la relazione che lega il numero di particelle al potenziale chimico $\mu(T)$ e discutere i limiti $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$.
6. [3 punti] Calcolare l'energia libera di Gibbs G nei limiti $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$.

Si assuma ora che le particelle siano fermioni con spin $s = \frac{1}{2}$ e il gas si trovi a $T = 0$ K.

7. [3 punti] Calcolare l'energia di Fermi ϵ_F , in funzione di N .
8. [4 punti] Calcolare il valore medio dell'energia cinetica $K \equiv p^2/2m$ di una particella, $\langle K \rangle$, in funzione di ϵ_F .
9. [3 punti] Calcolare il numero di particelle nel sistema $N_{\epsilon_F=0}$ in corrispondenza del quale l'energia di Fermi ϵ_F si annulla. Calcolare l'energia di Fermi quando $N = 2N_{\epsilon_F=0}$

Si ricorda che $\Gamma(z) = \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t}$; $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt \frac{t^{z-1}}{e^t - 1}$; $\int_0^\infty \frac{dt}{a e^t - 1} = -\ln(1 - \frac{1}{a})$

Risoluzione

Particelle classiche

1. Iniziamo dalla funzione di partizione

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N \approx \left(\frac{Z_1 e}{N} \right)^N,$$

con

$$Z_1 = \frac{1}{h^2} \int d\vec{p} \int d\vec{q} e^{-\beta H} = \frac{1}{\lambda^2} \left(\int_0^R 2\pi q dq + \int_R^{2R} 2\pi q dq e^{\beta V_0} \right) = \frac{2\pi R^2}{\lambda^2} \frac{1}{2} (1 + 3e^{\beta V_0}),$$

dove $\lambda^2 = \frac{h^2}{2\pi m k_B T}$, per cui

$$Z_1 = \frac{2\pi^2 m R^2 k_B T}{h^2} (1 + 3e^{\beta V_0}).$$

Adesso, detta A l'energia libera di Helmholtz, si ha

$$\beta A = -\ln Z_N = N \ln \frac{N}{e Z_1}$$

e quindi

$$A = N k_B T \ln \frac{N}{e Z_1}.$$

Da qui

$$\begin{aligned} S(T) &= -\frac{\partial A}{\partial T} = N k_B \ln \frac{e Z_1}{N} + N k_B T \frac{\partial \ln Z_1}{\partial T} = \\ &= N k_B \ln \frac{e Z_1}{N} + N k_B T \left[\frac{\partial \ln T}{\partial T} + \frac{\partial \ln(1 + 3e^{\beta V_0})}{\partial T} \right] \\ &= N k_B \left(\ln \frac{Z_1}{N} + 2 - \frac{3\beta V_0 e^{\beta V_0}}{1 + 3e^{\beta V_0}} \right). \end{aligned}$$

Per $T \rightarrow 0$, i termini divergenti come βV_0 provenienti dal primo e dal terzo termine tra le parentesi tonde si cancellano esattamente, per cui

$$\frac{S(T)}{N k_B} \approx \ln \frac{m R^2 k_B T}{N h^2} + O(1) \rightarrow -\infty.$$

Per $T \rightarrow \infty$, βV_0 tende a zero, e si trova

$$\frac{S(T)}{N k_B} \approx \ln \frac{m R^2 k_B T}{N h^2} + O(1) \rightarrow +\infty.$$

2. Per calcolare la pressione per $q = R/2$ dobbiamo determinare la densità corrispondente
La densità di probabilità che una particella sia a distanza q è

$$\mathcal{P}(q) = \begin{cases} \frac{q}{\frac{R^2}{2}(1 + 3e^{\beta V_0})} & 0 \leq q \leq R, \\ \frac{q e^{\beta V_0}}{\frac{R^2}{2}(1 + 3e^{\beta V_0})} & R < q < 2R. \end{cases} \quad (1)$$

Il numero di particella tra q e $q + dq$ è dato da

$$dN(q) = N\mathcal{P}(q) dq$$

e la corrispondente densità è

$$\rho(q) = \frac{dN(q)}{2\pi q dq}.$$

Per $q = R/2$

$$\rho\left(\frac{R}{2}\right) = \frac{N}{\pi R^2(1 + 3e^{\beta V_0})}$$

e la pressione

$$P\left(\frac{R}{2}\right) = k_B T \rho\left(\frac{R}{2}\right) = \frac{N k_B T}{\pi R^2(1 + 3e^{\beta V_0})}.$$

3. Le particelle che hanno energia potenziale negativa sono quelle con $R < q < 2R$. La probabilità p che una particella a caso abbia $R < q < 2R$ è

$$p = \int_R^{2R} \mathcal{P}(q) dq = \frac{e^{\beta V_0}}{\frac{R^2}{2}(1 + 3e^{\beta V_0})} \frac{3}{2} R^2 = \frac{3e^{\beta V_0}}{1 + 3e^{\beta V_0}}.$$

La probabilità che n particelle, con $n \leq N$, abbiano energia potenziale negativa è data dalla distribuzione binomiale

$$P(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}.$$

La media e la varianza della binomiale sono rispettivamente

$$\langle n \rangle = Np, \quad \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = Np(1-p).$$

4. Detta $g_s = 2s+1$ la degenerazione di spin, calcoliamo la densità degli stati di singola particella

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \frac{g_s}{h^2} \int 2\pi q dq \int \pi dp^2 \delta\left(\frac{p^2}{2m} + V(q) - \epsilon\right) = \frac{4\pi^2 m g_s}{h^2} \int_0^\infty q dq \int_0^\infty dK \delta(K + V(q) - \epsilon) = \\ &= \frac{4\pi^2 m g_s}{h^2} \int_0^\infty dq q \theta(\epsilon - V(q)) = \frac{4\pi^2 m g_s R^2}{h^2} \frac{1}{2} [\theta(\epsilon) + 3\theta(\epsilon + V_0)] \equiv C[\theta(\epsilon) + 3\theta(\epsilon + V_0)] \end{aligned}$$

dove $C \equiv \frac{2\pi^2 m R^2 g_s}{h^2}$.

Per capire se esiste la condensazione di BE, dobbiamo guardare l'integrale per N , dopo aver sostituito μ con $\epsilon_{\min} = -V_0$ e posto $g_s = 1$,

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon = 3C \int_{-V_0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon + C \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon.$$

Il primo integrale diverge logicamente nell'estremo inferiore, indicando che non è presente la condensazione di BE.

5. Per trovare la relazione che lega il potenziale chimico al numero di particelle nel sistema occorre scrivere l'espressione per N in cui la fugacità $z \equiv e^{\beta\mu}$ appare in maniera esplicita,

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} z^{-1} - 1} d\epsilon = 3C \int_{-V_0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\epsilon} z^{-1} - 1} d\epsilon + C \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\epsilon} z^{-1} - 1} d\epsilon.$$

Cambiando variabile $\beta\epsilon = t$ e sfruttando l'integrale suggerito nella nota al testo

$$N = 3Ck_B T \int_{-\beta V_0}^{\infty} \frac{1}{e^t z^{-1} - 1} dt + Ck_B T \int_0^{\infty} \frac{1}{e^t z^{-1} - 1} dt,$$

e con il cambio ulteriore $t = y - \beta V_0$ nel primo integrale

$$\begin{aligned} N &= 3Ck_B T \int_0^{\infty} \frac{1}{e^y e^{-\beta V_0} z^{-1} - 1} dy + Ck_B T \int_0^{\infty} \frac{1}{e^t z^{-1} - 1} dt = \\ &= -3Ck_B T \ln(1 - z e^{\beta V_0}) - Ck_B T \ln(1 - z), \end{aligned}$$

da cui

$$e^{-\frac{N}{Ck_B T}} = (1 - z e^{\beta V_0})^3 (1 - z)$$

che fornisce la relazione cercata (con $z = e^{\beta\mu}$).

Guardiamo ora i limiti per $T \rightarrow \infty$ e $T \rightarrow 0$. Nel primo caso, ricordandoci che $z \rightarrow 0$,

$$e^{-\frac{N}{Ck_B T}} \approx (1 - z)^4, \quad -\frac{N}{Ck_B T} \approx 4 \ln(1 - z) \approx -4e^{\beta\mu},$$

$$\beta\mu = \ln \frac{N}{4Ck_B T} \quad \mu = k_B T \ln \frac{N}{4Ak_B T}.$$

Per $T \rightarrow 0$, il potenziale chimico tende alla energia dello stato fondamentale e quindi

$$\mu \approx -V_0.$$

Matematicamente, ciò si vede dal fatto che $e^{-\frac{N}{Ck_B T}}$ tende a zero per $T \rightarrow 0$. L'unica maniera per annullare anche il membro di destra è che $(1 - z e^{\beta V_0})$ si annulli, il che richiede che $\mu \rightarrow -V_0$.

6. L'energia libera di Gibbs è $G = \mu N$, in cui vanno sostituite le espressioni per il potenziale chimico trovate al punto precedente.

7. Posto ora $g_s = 2$, l'energia di Fermi è implicitamente definita dalla relazione

$$\begin{aligned} N &= \int_{-\infty}^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = 3C \theta(\epsilon_F + V_0) \int_{-V_0}^{\epsilon_F} d\epsilon + C \theta(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \\ &= 3C(\epsilon_F + V_0) \theta(\epsilon_F + V_0) + C\epsilon_F \theta(\epsilon_F), \end{aligned}$$

da cui

$$\epsilon_F = \frac{1}{4} \left(\frac{N}{C} - 3V_0 \right), \quad \text{per } N > 3CV_0,$$

e

$$\epsilon_F = \frac{N}{3C} - V_0, \quad \text{per } 0 \leq N \leq 3CV_0.$$

8. Per calcolare l'energia cinetica media $\langle K \rangle$, calcoliamo prima $g(K, \epsilon)$, definita da

$$\int g(K, \epsilon) dK = g(\epsilon)$$

Tornando al calcolo della $g(\epsilon)$ osserviamo che

$$g(K, \epsilon) = \frac{4\pi^2 m g_s R^2}{h^2} [\delta(K - \epsilon) + 3\delta(K - V_0 - \epsilon)] = C[\delta(K - \epsilon) + 3\delta(K - V_0 - \epsilon)]$$

e

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-V_0}^{\epsilon_F} \int_0^{\infty} K g(K, \epsilon) dK d\epsilon = \frac{C}{N} \int_{-V_0}^{\epsilon_F} [\epsilon \theta(\epsilon) + 3(\epsilon + V_0) \theta(\epsilon + V_0)] d\epsilon \\ &= C \theta(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_F} \epsilon d\epsilon + 3C \theta(\epsilon_F + V_0) \int_{-V_0}^{\epsilon_F} (\epsilon + V_0) d\epsilon \\ &= \frac{C\epsilon_F^2}{2N} \theta(\epsilon_F) + \frac{3C(\epsilon_F + V_0)^2}{2N} \theta(\epsilon_F + V_0) = \frac{\epsilon_F^2 \theta(\epsilon_F) + 3(\epsilon_F + V_0)^2 \theta(\epsilon_F + V_0)}{2[\epsilon_F \theta(\epsilon_F) + 3(\epsilon_F + V_0) \theta(\epsilon_F + V_0)]}. \end{aligned}$$

È istruttivo porre $\epsilon_F \equiv (\alpha - 1)V_0$, con $\alpha \geq 0$. Allora,

$$\langle K \rangle = \frac{\alpha}{2} V_0, \quad \text{per } 0 \leq \alpha \leq 1; \quad \langle K \rangle = \frac{4\alpha^2 - 2\alpha + 1}{8\alpha - 2} V_0, \quad \text{per } \alpha > 1.$$

9. $\epsilon_F = 0$ implica

$$N_{\epsilon_F=0} = 3CV_0.$$

Analogamente, quando $N = 2N_{\epsilon_F=0} = 6CV_0$,

$$\epsilon_F = \frac{1}{4} \left(\frac{6CV_0}{C} - 3V_0 \right) = \frac{3}{4} V_0.$$