Corso di Meccanica Statistica - Compito del 21/6/2024

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

Si consideri un gas perfetto unidimensionale composto da N particelle identiche ultrarelativistiche non interagenti, con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(p,q) = c|p| + V(q) \ ,$$

con

$$V(q) = \begin{cases} V_0 & 0 \le q < a, \\ V_0\left(2 - \dfrac{q}{a}\right) & a \le q \le 2a, \\ +\infty & q < 0, q > 2a, \end{cases}$$

dove V_0 e a sono costanti strettamente positive. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

1. **Meccanica Statistica Classica**
Assumendo che sia applicabile la statistica classica:
a. [2 punti] Calcolare l'entropia per particella S/N in funzione della temperatura.
b. [4 punti] Calcolare il valore medio di q, $\langle q \rangle$, in funzione della temperatura. Calcolare i limiti per $\beta V_0 \ll 1$ e $\beta V_0 \gg 1$.
c. [4 punti] Calcolare la probabilità $P(\epsilon > V_0)$ che l'energia ϵ di una particella sia maggiore di V_0.

2. **Bosoni**
Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
a. [3 punti] Dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
b. [4 punti] Assumendo che $T_0 \ll V_0/k_B$ calcolare esplicitamente la temperatura di condensazione T_0. Determinare la condizione per la densità media $\rho \equiv N/(2a)$ sotto cui l'ipotesi di partenza è valida.
c. [3 punti] Calcolare il valore medio di q, $\langle q \rangle$, a temperatura nulla.

3. **Fermioni**
Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2 e si trovi a $T = 0$:
a. [4 punti] Determinare la densità media del gas, $\rho \equiv N/(2a)$, in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F.
b. [4 punti] Calcolare il valore medio di q, $\langle q \rangle$, per $\epsilon_F = V_0$.
c. [2 punti] Paragonare il risultato precedente con il caso classico e con il caso bosonico e commentare.

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) L'entropia in funzione della temperatura si ottiene utilizzando la relazione che lega entropia, energia interna e energia libera, ossia $S/k_B = \beta\,(U - F)$, dove U è l'energia interna del sistema, F l'energia libera di Helmholtz e $\beta = 1/(k_B T)$.
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 assume dunque l'espressione $U = -N\partial(\ln Z_1)/\partial\beta$. Abbiamo

$$\begin{aligned} Z_1 = \tfrac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\ \mathrm{e}^{-\beta H(p,q)} &= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{-\beta c|p|} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-\beta V(q)} \\ &= \frac{1}{h}\frac{2}{\beta c}\left[\int_0^a \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-\beta V_0} + \int_a^{2a} \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-\beta V_0(2-q/a)}\right] \\ &= \frac{1}{h}\ \frac{2}{\beta c}\ \frac{a}{\beta V_0}\left[1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}\right] \ . \end{aligned}$$

Quindi,

$$\frac{U}{N} = -\left.\frac{\partial\ln(Z_1)}{\partial\beta}\right|_{V,N} = 2k_B T - \frac{V_0\ \mathrm{e}^{-\beta V_0}(2-\beta V_0)}{[1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}]} \ .$$

L'energia libera di Helmholtz per particella è data da

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

da cui si ottiene

$$\boxed{\frac{S(T)}{k_B N} = 2 - \frac{\beta V_0\ \mathrm{e}^{-\beta V_0}(2-\beta V_0)}{[1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}]} + \ln\left\{\frac{2a\mathrm{e}}{\beta^2 c h V_0 N}\ \left[1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}\right]\right\} \ .}$$

1.b) Per calcolare il valore medio $\langle q\rangle$ utilizziamo la densità di probabilità della posizione di una singola particella

$$P(q) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta V(q)}}{I_q} \ ,$$

dove $I_q = \int \mathrm{d}q e^{-\beta V(q)}$ è il fattore di normalizzazione che è stato già calcolato al punto precedente (vedi calcolo di Z_1), e vale

$$I_q = \frac{a}{\beta V_0}\left[1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}\right] \ .$$

Avremo dunque,

$$\begin{aligned} \langle q\rangle = \frac{1}{I_q}\int_{-\infty}^{\infty} q\,\mathrm{e}^{-\beta V(q)}\,\mathrm{d}q &= \frac{1}{I_q}\left[\int_0^a q\,\mathrm{e}^{-\beta V_0}\,\mathrm{d}q + \int_a^{2a} q\,\mathrm{e}^{-\beta V_0(2-q/a)}\,\mathrm{d}q\right] = \\ &= \frac{1}{I_q}\frac{a^2}{\beta^2 V_0^2}\left[\mathrm{e}^{-\beta V_0}\frac{\beta^2 V_0^2}{2} + (2\beta V_0 - 1) - \mathrm{e}^{-\beta V_0}(\beta V_0 - 1)\right] \end{aligned}$$

e dunque, sostituendo I_q,

$$\boxed{\langle q\rangle = \frac{a}{\beta V_0}\frac{\left(1-\beta V_0+\frac{\beta^2 V_0^2}{2}\right)\mathrm{e}^{-\beta V_0} - (1-2\beta V_0)}{1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}} \ .}$$

Nel limite di alte temperature, $\beta V_0 \ll 1$, gli esponenziali tendono a 1. Sviluppando per βV_0 piccoli si ottiene

$$\boxed{\langle q\rangle \approx a\left[1+\mathrm{O}(\beta V_0)\right], \qquad \beta V_0 \ll 1,}$$

come ci aspettiamo, in quanto ad alte temperature domina il contributo entropico e le particelle tendono ad esplorare in modo omogeneo lo spazio accessibile.
Nel limite di basse temperature, $\beta V_0 \gg 1$, gli esponenziali negativi tendono a zero. Si ottiene

$$\boxed{\langle q\rangle \approx 2a+\mathrm{O}(\beta V_0 \mathrm{e}^{-\beta V_0}), \qquad \beta V_0 \gg 1,}$$

come ci aspettiamo: a basse temperature domina infatti il contributo energetico e le particelle tendono a occupare gli stati a
energia più bassa che hanno $q \approx 2a$.

1.c) La probabilità richiesta è data da

$$P(\epsilon > V_0) = \int_{V_0}^{\infty} P(\epsilon)\,\mathrm{d}\epsilon\ ,$$

dove $P(\epsilon)$ è la densità di probabilità dell'energia di una singola particella. Essa può essere espressa come

$$P(\epsilon) = \frac{1}{Z_1}\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\, G(\epsilon)\ .$$

Occorre dunque calcolare la densità degli stati di particella singola $G(\epsilon)$ (calcolo che tornerà utile anche nei punti successivi)

$$\begin{aligned}
G(\epsilon) &= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\delta\left(H(p,q)-\epsilon\right) = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\delta\left(c|p|+V(q)-\epsilon\right) = \\
&= \frac{2}{hc}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\,\theta(\epsilon - V(q)) = \\
&= \frac{2}{hc}\left[\int_0^a \mathrm{d}q\,\theta(\epsilon - V_0) + \int_a^{2a}\mathrm{d}q\,\theta\left(\epsilon - 2V_0 + V_0\frac{q}{a}\right)\right] = \\
&= \frac{2a}{hcV_0}\left[\theta(\epsilon)\epsilon - \theta(\epsilon - V_0)(\epsilon - 2V_0)\right]\ .
\end{aligned}$$

Inserendo questa espressione nella formula iniziale, troviamo

$$P(\epsilon > V_0) = \frac{1}{Z_1}\int_{V_0}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon\,\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\frac{2a}{hcV_0}(\epsilon - \epsilon + 2V_0)$$

e infine, sostituendo l'espressione di Z_1,

$$\boxed{P(\epsilon > V_0) = \frac{2\beta V_0\ \mathrm{e}^{-\beta V_0}}{1-(1-\beta V_0)\mathrm{e}^{-\beta V_0}}\ .}$$

2.a) Se il sistema è composto da Bosoni, il numero medio di particelle a temperatura T è pari a $N = N_0 + \widetilde{N}$, 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

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

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella, $\epsilon_{\min}$ è l'energia minima di una particella e $\mu \leq \epsilon_{\min}$. La condizione affinché esista la condensazione a $T = T_0$ è che

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

dove nel nostro caso $\epsilon_{min} = 0$. Poiché la Hamiltoniana del sistema non dipende dallo spin, la densità degli stati quantistica è data da quella classica calcolata al punto 1.c, moltiplicata per il fattore di degenerazione di spin g_s. Di conseguenza, la condizione di condensazione diventa (ponendo $g_s = 1$ per bosoni di spin 0)

$$N = \frac{2a}{hcV_0}\left[\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon}{\mathrm{e}^{\beta_0\epsilon} - 1} - \int_{V_0}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon - 2V_0}{\mathrm{e}^{\beta_0\epsilon} - 1}\right] = \frac{2a}{hcV_0}[I_1 - I_2].$$

Entrambi questi integrali sono finiti. I_2 lo è in modo banale, essendo la funzione integranda chiaramente priva di singolarità nel range di integrazione, ed esponenzialmente decrescente a grandi valori. Per quel che riguarda I_1, abbiamo

$$I_1 = \int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon}{\mathrm{e}^{\beta_0\epsilon} - 1} = \frac{1}{\beta_0^2}\int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{t}{\mathrm{e}^{t} - 1} = \frac{1}{\beta_0^2}\,\zeta(2)\,\Gamma(2) < \infty.$$

$$\boxed{\text{Esiste dunque condensazione di Bose Einstein.}}$$

2.b) Assumendo $T_0 \ll V_0/k_B$ possiamo stimare il secondo integrale. Avremo

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{V_0}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon - 2V_0}{\mathrm{e}^{\beta_0\epsilon} - 1} = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{t - V_0}{\mathrm{e}^{\beta_0(V_0+t)} - 1} \\ &\approx \mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}\int_0^{\infty} \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{-\beta_0 t}(t - V_0) = \frac{1}{\beta_0^2}\,\mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}(1 - \beta_0 V_0). \end{aligned}$$

Avremo dunque

$$N = \frac{2a}{hcV_0}\frac{1}{\beta_0^2}\left[\zeta(2)\,\Gamma(2) - \mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}(1 - \beta_0 V_0)\right].$$

Trascurando i termini esponenzialmente piccoli, e invertendo, troviamo infine

$$\boxed{T_0 = \frac{1}{k_B}\sqrt{\frac{hcV_0N}{2a\zeta(2)}} + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-\beta_0 V_0}).}$$

Possiamo a questo punto verificare l'ipotesi di partenza

$$T_0 \ll V_0/k_B \rightarrow \quad \sqrt{\frac{hcV_0N}{2a\zeta(2)}} \ll V_0$$

e dunque, ricordando che $\rho = N/(2a)$,

$$\boxed{\rho \ll \frac{V_0\zeta(2)}{hc}.}$$

2.c) A temperatura nulla tutte le particelle condensano nello stato a energia minima con $\epsilon_{min} = 0$. Dalla forma del potenziale vediamo che tale stato corrisponde a $q = 2a$. Avremo dunque

$$\boxed{\langle q \rangle = 2a \qquad T = 0.}$$

3.a) Il numero di particelle del sistema a temperatura nulla è dato dalla seguente espressione:

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

dove ϵ_F è l'energia di Fermi.
La densità degli stati è la stessa calcolata ai punti precedenti, dove occorre utilizzare $g_s = 2$ poichè il sistema è adesso costituito da Fermioni con spin 1/2. Sostituendo l'espressione ottenuta e svolgendo gli integrali, troviamo facilmente

$$N = \frac{4a}{hcV_0} \left[\epsilon_F^2 \; \theta(\epsilon_F) - \left(\epsilon_F^2 + 3V_0^2 - 4V_0\epsilon_F \right) \theta(\epsilon_F - V_0) \right],$$

e dunque

$$\boxed{\rho = \frac{N}{2a} = \frac{2}{hcV_0} \left[\epsilon_F^2 \; \theta(\epsilon_F) - \left(\epsilon_F^2 + 3V_0^2 - 4V_0\epsilon_F \right) \theta(\epsilon_F - V_0) \right].}$$

3.b) ll valore medio di q è dato da

$$\langle q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \, P(q) \, q,$$

dove, a temperatura nulla, e per $\epsilon_F = V_0$,

$$P(q) = \frac{N(q)}{N} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \, G(\epsilon, q) = \frac{2g_s}{Nhc} \int_{-\infty}^{\epsilon_F = V_0} \mathrm{d}\epsilon \, \theta(\epsilon - V(q)) = \frac{4}{Nhc} \left(V_0 - V(q) \right) \theta(V_0 - V(q)),$$

dove l'espressione della $G(\epsilon, q)$, ossia della densità degli stati di particella singola con energia ϵ e posizione q può essere dedotta dal calcolo della $G(\epsilon)$ effettuato nel punto 1.c (seconda linea). Avremo dunque

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= \frac{4}{Nhc} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \, q \, (V_0 - V(q)) \theta(V_0 - V(q)) = \\ &= \frac{4V_0}{Nhca} \int_a^{2a} \mathrm{d}q \, q \, (q - a) = \frac{5}{6} \, \frac{4V_0 a^2}{Nhc} \end{aligned}$$

Infine, dal punto precedente troviamo, per $\epsilon_F = V_0$, $N = 2V_0 a/(hc)$. Sostituendo, otteniamo infine

$$\boxed{\langle q \rangle = \frac{5}{3} a.}$$

3.c) Notiamo come, al contrario del caso classico e del caso bosonico, i fermioni non possono disporsi tutti al livello minimo di energia, dunque il valore medio di q dovrà necessariamente essere minore di $2a$. D'altra parte, poiché $\epsilon_F = V_0$ la posizione q deve essere più grande di a.