Corso di Meccanica Statistica - Compito del 22/04/2024
Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, in tre dimensioni, confinate in un parallelepipedo di lato $2L$ lungo x ($-L < x < L$) e di lati L lungo y ($0 < y < L$) e z ($0 < z < L$). La Hamiltoniana di singola particella è

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

dove $p \equiv |\vec{p}|$ e $\vec{r}$ è il vettore di componenti cartesiane x, y, z. Nel cubo di sinistra ($x < 0$) si ha $V(\vec{r}) = 0$. Nel cubo di destra ($x > 0$) si ha $V(\vec{r}) = -V_0$ (con $V_0 > 0$).

Nel caso di particelle classiche, un setto, posto in $x = 0$, divide il contenitore in due cubi di uguale volume, ciascuno pari a L^3.

1. [3 punti] Supponendo che all'inizio le N particelle siano tutte nel cubo di sinistra, di quanto varia l'energia libera se il setto viene eliminato (considerate il sistema all'equilibrio termodinamico a temperatura T sia prima che dopo l'apertura del setto)?

2. [4 punti] Qual è la variazione di energia e quale quella di entropia? Come interpretate la variazione di entropia nel caso $\beta V_0 \ll 1$ e nel caso $\beta V_0 \gg 1$ [con $\beta \equiv 1/(\kappa_{\mathrm{B}} T)$]?

3. [3 punti] Dopo l'apertura del setto, qual è la pressione nel volume di destra e quale in quello di sinistra?

Nel caso di particelle quantistiche di spin $S = 1$ (con setto aperto), assumendo che sia $\beta V_0 \gg 1$ e si possano qundi trascurare termini $O(\mathrm{e}^{-\beta V_0})$:

4. [3 punti] Determinare la temperatura di condensazione T_0.

5. [4 punti] Calcolare il rapporto tra la temperatura $T_{N/2}$ a cui sono presenti nel condensato metà delle particelle e T_0.

6. [3 punti] Sempre assumendo che sia $\beta V_0 \gg 1$, calcolare la energia media per particella a $T = T_{N/2}$.

Nel caso di particelle quantistiche di spin $S = \frac{1}{2}$ (con setto aperto):

7. [4 punti] Calcolare quante particelle sono presenti nel sistema se l'energia di Fermi $\epsilon_F = 0$.

8. [3 punti] Calcolare il valore medio della ascissa x di una particella, $\langle x \rangle$, a $T = 0\,\mathrm{K}$, quando $\epsilon_F = 0$.

9. [3 punti] Calcolare il valore medio dell'energia per particella $\langle E \rangle / N$ a $T = 0\,\mathrm{K}$, quando $\epsilon_F = 0$.

Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\, \mathrm{e}^{-t}$; $\zeta(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$.

Risoluzione

particelle classiche

1. Prima della apertura del setto, le particelle sono tutte nel volume di sinistra, dove $V(\vec{r}) = 0$. Quindi (senza confondere il volume $V = L^3$ con $V(\vec{r})$) e indicando con λ la lunghezza di de Broglie)
$$Z_{prima} = \frac{1}{N!}\left(\frac{L^3}{\lambda^3}\right)^N$$
Dopo l' apertura del setto
$$Z_{dopo} = \frac{1}{N!}\left(\frac{L^3}{\lambda^3}\left[1 + e^{\beta V_0}\right]\right)^N$$
La variazione di energia libera e'
$$\Delta F = -k_B T[\ln Z_{dopo} - \ln Z_{prima}] = -N k_B T \ln\left[1 + e^{\beta V_0}\right]$$

2. Per calcolare i contributi ΔE e ΔS, possiamo usare
$$\Delta E = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z_{dopo} - \ln Z_{prima}) = -\frac{\partial \ln(\left[1 + e^{\beta V_0}\right]^N)}{\partial\beta} = -N\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{1 + e^{\beta V_0}}$$
e
$$T\Delta S = \Delta E - \Delta F = -N\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{1 + e^{\beta V_0}} + N k_B T \ln\left[1 + e^{\beta V_0}\right]$$
Nei limiti $\beta V_0 \gg 1$ e $\beta V_0 \ll 1$, $\Delta S = 0$ e $\Delta S = k_B \ln 2$. Infatti nel primo caso tutte le particelle si trasferiscono dal cubo di sinistra a quello di destra (quindi esplorando lo stesso volume L^3). Nel secondo caso, ogni particella campiona un volume per particella doppio.

3. La probabilità che una particella sia a sinistra è
$$p_{x<0} = \frac{L^3/\lambda^3}{L^3/\lambda^3(1 + e^{\beta V_0})} = \frac{1}{1 + e^{\beta V_0}}$$
La pressione e' data dalla legge del gas ideale sia a destra che a sinistra. La densità a sinistra e a destra sono
$$\rho_{x<0} = \frac{N p_{x<0}}{V} \qquad \rho_{x>0} = \frac{N(1 - p_{x<0})}{V}$$
per cui
$$P_{x<0} = \frac{N p_{x<0}}{V} k_B T \qquad P_{x>0} = \frac{N(1 - p_{x<0})}{V} k_B T$$

Bosoni

4. Calcoliamo per iniziare la densità degli stati (con $g_s = 3$)

$$g(\epsilon) = g_s \frac{1}{h^3} \int d\vec{r} d\vec{p} \delta(H - \epsilon)$$

e con il solito cambio $t = p^2/2m$, $dt = pdp/m$, $p = \sqrt{2mt}$

$$g(\epsilon) = g_s \frac{1}{h^3} 4\pi m \sqrt{2m} \int d\vec{r} \int dt \sqrt{t} \delta(t + V(\vec{r}) - \epsilon)$$

che con la condizione $\epsilon - V(\vec{r}) > 0$ diventa

$$g(\epsilon) = g_s \frac{1}{h^3} 4\pi m \sqrt{2m} L^3 \left[\sqrt{\epsilon + V_0} \theta(\epsilon + V_0) + \sqrt{\epsilon} \theta(\epsilon) \right]$$

e definendo la costante $A = g_s \frac{4\pi m \sqrt{2m} L^3}{h^3}$

$$g(\epsilon) = A \left[\sqrt{\epsilon + V_0} \theta(\epsilon + V_0) + \sqrt{\epsilon} \theta(\epsilon) \right]$$

Per trovare la temperatura di condensazione T_0 (β_0) scriviamo

$$N = \int \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta_0(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon = A \left[\int_{-V_0}^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon + V_0}}{e^{\beta_0(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon + \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta_0(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon \right] =$$

e definendo $\epsilon^* = \epsilon + V_0$,

$$= A \left[\int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon^*}}{e^{\beta_0 \epsilon^*} - 1} d\epsilon^* + \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta_0(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon \right] =$$

Nel limite $V_0 \gg 0$, il secondo integrale e' trascurabile e definendo $\beta_0 \epsilon^* = x$

$$N = A\beta^{-3/2} \left[\int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx \right] = A\beta_0^{-3/2} \Gamma[3/2] \zeta[3/2]$$

da cui

$$k_B T_0 = \left[\frac{N}{A \Gamma[3/2] \zeta[3/2]} \right]^{2/3}$$

5. Applicando la stessa formula per $N = N/2$, troviamo

$$k_B T_{N/2} = \left[\frac{N}{2A \Gamma[3/2] \zeta[3/2]} \right]^{2/3} = k_B T_0 \left[\frac{1}{2} \right]^{2/3}$$

6. Per calcolare l' energia media a $T = T_{1/2}$ consideriamo che meta' delle particelle (nel condensato) hanno energia $-V_0$.

$$E_{condensato} = -\frac{N}{2} V_0$$

Per le altre,

$$E_{non-condensato} = A\int_{-V_0}^{\infty} \epsilon \frac{\sqrt{\epsilon + V_0}}{e^{\beta_{N/2}(\epsilon+V_0)} - 1} d\epsilon = A\int_0^{\infty} (\epsilon^* - V_0)\frac{\sqrt{\epsilon^*}}{e^{\beta_{N/2}\epsilon^*} - 1} d\epsilon^* =$$

$$= A\beta_{N/2}^{-5/2}\Gamma[5/2]\zeta[5/2] - V_0 A\beta_{N/2}^{-3/2}\Gamma[3/2]\zeta[3/2]$$

Per cui

$$E = -\frac{N}{2}V_0 + A\beta_{N/2}^{-5/2}\Gamma[5/2]\zeta[5/2] - \frac{N}{2}V_0 = -NV_0 + A\beta_{N/2}^{-5/2}\Gamma[5/2]\zeta[5/2] =$$

$$= -NV_0 + \frac{N}{2}\frac{\Gamma[5/2]\zeta[5/2]}{\Gamma[3/2]\zeta[3/2]}k_B T_{N/2}$$

Fermioni

In questo caso $g_s = 2$. Se $\epsilon_F = 0$,

7.
$$N = \int_{-V_0}^{0} g(\epsilon)d\epsilon = A\int_0^{V_0} \sqrt{\epsilon^*}d\epsilon^* = \frac{2}{3}AV_0^{3/2}$$

8. Quando $\epsilon_F = 0$, le particelle sono tutte nel volume di destra. Quindi $< x >= L/2$.

9. A $T = 0$ K,

$$< E >= \int_{-V_0}^{0} \epsilon g(\epsilon)d\epsilon = A\int_0^{V_0} (\epsilon^* - V_0)\sqrt{\epsilon^*}d\epsilon^* = \frac{2}{5}AV_0^{5/2} - V_0\frac{2}{3}AV_0^{3/2} = \frac{2}{5}\frac{3}{2}NV_0 - NV_0$$

da cui

$$< E >= -\frac{2}{5}NV_0 \qquad < E > /N = -\frac{2}{5}V_0$$