Corso di Meccanica Statistica
Compito del 25/1/2023

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

Si consideri un gas costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, che si muovono sul piano xy, con Hamiltoniana di singola particella

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = \frac{p^2}{2m} + Ar^6,$$

dove $p \equiv |\boldsymbol{p}|$, $r \equiv |\boldsymbol{q}|$ e $A > 0$ è un parametro dimensionale. Il sistema è in equilibrio termico con un termostato a temperatura T.

1. Assumendo che sia applicabile la statistica classica:

1.a) determinare l'entropia microcanonica $S(E)$ in funzione dell'energia E del gas [5 punti];
1.b) determinare la frazione $n_{\geq}$ di particelle con modulo dell'impulso $p \geq \sqrt{mk_BT}$. [2 punti];
1.c) determinare la distanza media $\overline{r}$ di una particella dall'origine delle coordinate, in funzione della temperatura T del gas [3 punti].

2. Assumendo che il sistema sia composto da bosoni di spin 0:

2.a) dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein e calcolare la temperatura di condensazione T_0 [7 punti];
2.b) calcolare la frazione di particelle che si trovano fuori dal condensato a $T = \frac{1}{8}T_0$ [3 punti].

3. Assumendo che il sistema sia composto da fermioni di spin $\frac{1}{2}$ e si trovi a $T = 0$:

3.a) determinare l'energia di Fermi ε_{F} del gas in funzione del numero N di particelle [4 punti];
3.b) determinare la distanza media $\overline{r}$ e la distanza massima $r_{\max}$ di una particella dall'origine delle coordinate, in funzione del numero di particelle N [6 punti].

• Si ricordi che $\int_0^\infty \mathrm{d}z\, z^a\, \mathrm{e}^{-z} = \Gamma(a+1)$, dove $\Gamma(\cdot)$ è la funzione gamma di Eulero, e $\int_0^\infty \mathrm{d}z\, z^a\, (\mathrm{e}^z - 1)^{-1} = \Gamma(a+1)\zeta(a+1)$, dove $\zeta(\cdot)$ è la funzione zeta di Riemann. In particolare $\Gamma(\frac{1}{3}) \approx 2.68$; $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \approx 1.77$; $\Gamma(\frac{4}{3}) = \frac{1}{3}\Gamma(\frac{1}{3}) \approx 0.893$; $\zeta(\frac{4}{3}) \approx 3.60$.

Risposte

1.a) L'entropia in funzione della temperatura può essere calcolata a partire dall'energia libera F mediante la relazione termodinamica $S(T) = -\frac{\partial F}{\partial T}$. Per determinare l'entropia microcanonica bisogna calcolare l'energia interna $U = \frac{\partial \beta F}{\partial \beta}$, con $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$, che va identificata con l'energia E del sistema microcanonico, quindi invertire la relazione per esprimere la temperatura in funzione dell'energia, $T(E)$, e infine calcolare $S_{\text{microcanonica}}(E) = S_{\text{canonica}}(T(E))$.

Per un sistema di N particelle classiche non interagenti la funzione di partizione canonica è $Z_N = Z_1^N/N! \approx (Z_1 \mathrm{e}/N)^N$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella. Quindi $F = -k_B T \ln Z_N = -k_B T N \ln(Z_1 \mathrm{e}/N)$. Nel caso considerato

$$\begin{aligned} Z_1 &= \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{p}\,\mathrm{d}^2\boldsymbol{q}}{h^2}\,\mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{q},\mathbf{p})} = \frac{2\pi^2}{3h^2}\frac{m}{\beta}\frac{1}{(A\beta)^{1/3}}\int_0^\infty \mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{-\eta}\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\,\nu^{-2/3}\,\mathrm{e}^{-\nu} \\ &= \frac{2\pi^2\,\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) m}{3h^2 A^{1/3}\beta^{4/3}}, \end{aligned}$$

dove si è posto $\eta \equiv \beta p^2/(2m)$ e $\nu \equiv \beta A r^6$. Quindi, siccome

$$U = \frac{\partial \beta F}{\partial \beta} = -N\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \beta},$$

usando l'espressione di Z_1, si ottiene $U = \frac{4}{3} N k_B T$. L'entropia è

$$S(T) = -\frac{\partial F}{\partial T} = N k_B \ln\left[\frac{2\pi^2 \mathrm{e}\,\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) m}{3h^2 A^{1/3} N}\,(k_B T)^{4/3}\right] + \frac{4}{3} N k_B$$

$$= N k_B \ln\left[\frac{2\pi^2 \mathrm{e}^{7/3}\,\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) m}{3h^2 A^{1/3} N}\,(k_B T)^{4/3}\right] \approx N k_B \ln\left[\frac{182\,m\,(k_B T)^{4/3}}{h^2 A^{1/3} N}\right]$$

e, poiché $k_B T = \frac{3}{4}\frac{E}{N}$, si trova infine l'entropia microcanonica

$$S(E) = N k_B \ln\left[\frac{3^{1/3}\pi^2 \mathrm{e}^{7/3}\,\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) m}{2^{5/3} h^2 A^{1/3} N^{7/3}} E^{4/3}\right] \approx N k_B \ln\left[\frac{124\,m E^{4/3}}{h^2 A^{1/3} N^{7/3}}\right].$$

1.b) La frazione cercata è

$$n_{\geq} = \frac{\int_{m k_B T}^\infty \mathrm{d}p^2\,\mathrm{e}^{-\beta p^2/(2m)}}{\int_0^\infty \mathrm{d}p^2\,\mathrm{e}^{-\beta p^2/(2m)}} = \frac{\int_{\frac{1}{2}}^\infty \mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{-\eta}}{\int_0^\infty \mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{-\eta}} = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{e}}} \approx 0.607,$$

dove si è nuovamente posto $\eta \equiv \beta p^2/(2m)$.

1.c) La distanza media cercata vale

$$\begin{aligned} \overline{r} &= \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,r^2\,\mathrm{e}^{-\beta A r^6}}{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,r\,\mathrm{e}^{-\beta A r^6}} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\,\nu^{-1/2}\,\mathrm{e}^{-\nu}}{\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\,\nu^{-2/3}\,\mathrm{e}^{-\nu}}\,(\beta A)^{-1/6} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}\left(\frac{k_B T}{A}\right)^{1/6} \approx 0.661\,\left(\frac{k_B T}{A}\right)^{1/6}, \end{aligned}$$

dove si è nuovamente posto $\nu \equiv \beta A r^4$.

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 e $\widetilde{N}$ è il numero medio di particelle fuori dal condensato, dato da

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

dove $G(\varepsilon)$ è la densità degli stati, $\mu \leq \varepsilon_{\min}$ (l'uguaglianza ha luogo in presenza del condensato) e $\varepsilon_{\min}$ è il valore minimo dell'energia di una particella. Nel caso in esame, $\varepsilon_{\min} = 0$. La condizione affinché esista la condensazione a $T = T_0$ è che

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

dove $\beta_0 \equiv (k_B T_0)^{-1}$ e la densità degli stati è data da

$$G(\varepsilon) = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{p}\,\mathrm{d}^2\boldsymbol{q}}{h^2} \, \delta\left[H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) - \varepsilon\right]$$

$$= \frac{2\pi^2}{h^2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\, r \int_0^{\infty} \mathrm{d}p^2 \delta\left(\frac{p^2}{2m} + Ar^6 - \varepsilon\right) = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\, r\, \theta(\varepsilon - Ar^6)$$

$$= \frac{4\pi^2 m}{h^2} \int_0^{\left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{1/6}} \mathrm{d}r\, r\, \theta(\varepsilon) = \frac{2\pi^2 m}{h^2} \left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{1/3} \theta(\varepsilon).$$

Di conseguenza, la condizione di condensazione diventa

$$N = \frac{2\pi^2 m}{h^2 A^{1/3}} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\varepsilon^{1/3}}{\mathrm{e}^{\beta_0 \varepsilon} - 1} = \frac{2\pi^2\, \Gamma(\frac{4}{3})\zeta(\frac{4}{3})\, m}{h^2 A^{1/3}} (k_B T_0)^{4/3} < \infty.$$

Quindi, esiste la condensazione e

$$T_0 = \frac{1}{k_B} \left[\frac{h^2 A^{1/3} N}{2\pi^2\, \Gamma(\frac{4}{3})\zeta(\frac{4}{3})\, m}\right]^{3/4} \approx \frac{0.0445}{k_B} \left(\frac{h^2 A^{1/3} N}{m}\right)^{3/4}.$$

2.b) Dal punto precedente si ottiene che, per $T < T_0$,

$$\widetilde{N}(\mu = 0, T) = N \left(\frac{T}{T_0}\right)^{4/3},$$

per cui

$$\frac{\widetilde{N}(\mu = 0, T = \frac{1}{8} T_0)}{N} = \frac{1}{16} \approx 0.063.$$

3.a) Nel caso dei fermioni, la densità degli stati ottenuta al punto precedente va moltiplicata per 2, per tenere conto della degenerazione di spin, per cui

$$G(\varepsilon) = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{1/3} \theta(\varepsilon)$$

e

$$N = \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon\, G(\varepsilon) = \frac{4\pi^2 m}{h^2 A^{1/3}} \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon^{1/3} = \frac{3\pi^2 m}{h^2 A^{1/3}}\, \varepsilon_{\mathrm{F}}^{4/3},$$

con $\varepsilon_{\mathrm{F}} \geq \varepsilon_{\min} = 0$. Invertendo, otteniamo il risultato richiesto,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = \left(\frac{h^2 A^{1/3} N}{3\pi^2 m}\right)^{3/4} \approx 0.0788 \left(\frac{h^2 A^{1/3} N}{m}\right)^{3/4}.$$

3.b) Per determinare $\overline{r}$, si deve utilizzare la distribuzione

$$G(\varepsilon, r) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} r\, \theta(\varepsilon - A r^6),$$

che si può ricavare (a meno del fattore 2 che dà la degenerazione di spin) utilizzando i passaggi svolti al punto precedente, tramite la relazione $G(\varepsilon) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, G(\varepsilon, r)$ ed è tale che $\int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \int_0^\infty \mathrm{d}r\, G(\varepsilon, r) = N$. Allora,

$$\begin{aligned}\overline{r} &= \frac{1}{N} \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r\, G(\varepsilon, r) = \frac{8\pi^2 m}{h^2 N} \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon \int_0^{\left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{1/6}} \mathrm{d}r\, r^2 \\ &= \frac{8\pi^2 m}{3h^2 N A^{1/2}} \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon^{1/2} = \frac{16\pi^2 m}{9h^2 N A^{1/2}}\, \varepsilon_{\mathrm{F}}^{3/2}.\end{aligned}$$

Sostituendo l'espressione di ε_{F} in funzione di N, si ottiene infine

$$\overline{r} = \frac{16 h^{1/4} N^{1/8}}{3^{25/8} \pi^{1/4} m^{1/8} A^{1/8}} \approx 0.388 \left(\frac{h^2 N}{mA}\right)^{1/8}.$$

La distanza massima cercata è quella delle particelle con impulso nullo, per le quali

$$r_{\max} = \left(\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{A}\right)^{1/6} = \left(\frac{h^2 N}{3\pi^2 m A}\right)^{1/8} \approx 0.655 \left(\frac{h^2 N}{mA}\right)^{1/8}.$$