Corso di Meccanica Statistica - Compito del 27/6/2025

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

Si consideri un gas perfetto tridimensionale composto da N particelle identiche non interagenti, contenuto nella regione $0 < x < L_x$, $0 < y < L$, $0 < z < L$, con Hamiltoniana di singola particella:

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

dove $p = |\mathbf{p}|$,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x \leq x_0, \\ a(x - x_0) & x_0 < x < L_x, \\ +\infty & x \leq 0; x \geq L_x, \end{cases}$$

e a è una costante dimensionale strettamente positiva. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

1. **Meccanica Statistica Classica**
Assumendo che sia applicabile la meccanica statistica classica:
a. [3 punti] Calcolare l'energia interna per particella in funzione della temperatura.
b. [3 punti] Assumendo che $L_x \gg x_0$, calcolare la temperatura per cui metà delle particelle si trovano nel volume con $x \leq x_0$, e metá in quello con $x > x_0$.
c. [4 punti] Calcolare la pressione del gas per $x = x_0$ e quella sulla superficie esterna, $x = L_x$. Che cosa succede a temperature alte, $k_\mathrm{B}T \gg a(L_x - x_0)$? Perché? Che cosa succede a temperature basse, $k_\mathrm{B}T \ll a(L_x - x_0)$? Perché?

2. **Bosoni**
Si consideri nel seguito $L_x = \infty$. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
a. [4 punti] Dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
b. [3 punti] Scrivere l'equazione che determina la temperatura di condensazione T_0.
c. [3 punti] Assumendo che $T_0 \ll a x_0/k_\mathrm{B}$, calcolare la frazione di particelle nel condensato in funzione della temperatura.

3. **Fermioni**
Si consideri nel seguito $L_x = \infty$. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin $\frac{1}{2}$ e si trovi a $T = 0$:
a. [3 punti] Determinare il numero di particelle del gas in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F.
b. [5 punti] Calcolare il valore medio di x, $\langle x \rangle$, per $\epsilon_\mathrm{F} = a x_0$.
c. [2 punti] Calcolare il valore massimo di x, $x_{\max}$, per $\epsilon_\mathrm{F} = a x_0$. Usare il risultato per spiegare perché il valore di $\langle x \rangle$ ottenuto al punto precedente è minore di x_0.

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)
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

$$\begin{aligned} Z_1 &= \tfrac{1}{h^3}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\mathbf{p} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\mathbf{q}\; \mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{1}{h^3}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{e}^{-\beta\frac{p^2}{2m}}\; L^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \\ &= \frac{L^2}{h^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\left[\int_0^{x_0} \mathrm{d}x + \int_{x_0}^{L_x} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\beta a(x-x_0)}\right] \\ &= \frac{L^2}{h^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\left[x_0 + \frac{1}{\beta a}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right)\right]\,. \end{aligned}$$

Quindi,

$$\boxed{\frac{U}{N} = -\left.\frac{\partial \ln(Z_1)}{\partial\beta}\right|_{V,N} = \tfrac{5}{2}k_{\mathrm{B}}T - \frac{ax_0 + a(L_x-x_0)\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}}{\beta a x_0 + \left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]}\,.}$$

1.b) Il numero di particelle con $x < x_0$ è dato da $N_< = NP(x < x_0) = N\int_0^{x_0} P(x)\,\mathrm{d}x$. Per trovare la temperatura richiesta occorre dunque trovare la temperatura per cui $P(x < x_0) = \frac{1}{2}$. La densità di probabilità $P(x)$ si trova facilmente marginalizzando la distribuzione spaziale sulle coordinate y, z,

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

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

$$I_x = x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right].$$

Avremo dunque

$$P(x < x_0) = \int_0^{x_0} dx P(x) = \frac{x_0}{x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]}$$

e l'equazione che determina la temperatura cercata è

$$\frac{x_0}{x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]} = \tfrac{1}{2},$$

da cui

$$T = \frac{a x_0}{k_{\mathrm{B}}}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]^{-1}.$$

Per $L_x \gg x_0$, all'ordine zero nelle grandezze esponenzialmente piccole, la temperatura richiesta è data da

$$\boxed{T^\star \approx \frac{a x_0}{k_{\mathrm{B}}}.}$$

Le prime correzioni si trovano iterativamente, sostituendo nell'esponenziale la soluzione all'ordine zero,

$$T^\star \approx \frac{a x_0}{k_{\mathrm{B}}}\left[1 + \mathrm{e}^{-(L_x-x_0)/x_0}\right].$$

1.c) Per calcolare la pressione richiesta, consideriamo un piccolo volume $\delta V_x = L^2\,\mathrm{d}x$ con coordinata x data. Poiché il potenziale dipende solo da x, in tale volume $V(x)$ è costante e possiamo applicare la legge dei gas perfetti, dunque avremo

$$\mathcal{P}(x)\ \delta V_x = \delta N_x\ k_\mathrm{B}T,$$

dove δN_x è il numero di particelle contenute nel volumetto considerato. Avremo

$$\delta N_x = NP(x)\ \mathrm{d}x = N\frac{\mathrm{e}^{-\beta V(x)}}{I_x}\ \mathrm{d}x$$

e infine,

$$\mathcal{P}(x) = \frac{k_\mathrm{B}TN}{L^2}\frac{\mathrm{e}^{-\beta V(x)}}{x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]}\ .$$

Le pressioni alle due posizioni $x = x_0$ e $x = L_x$ sono dunque

$$\boxed{\mathcal{P}(x_0) = \frac{k_\mathrm{B}TN}{L^2}\frac{1}{x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]}\ ; \qquad \mathcal{P}(L_x) = \frac{k_\mathrm{B}TN}{L^2}\frac{\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}}{x_0 + \frac{1}{\beta a}\left[1-\mathrm{e}^{-\beta a(L_x-x_0)}\right]}\ .}$$

Nel limite di alta temperatura, $k_\mathrm{B}T \gg a(L_x - x_0)$, espandendo gli esponenziali si trova:

$$\mathcal{P}(x_0) = \frac{k_\mathrm{B}TN}{L^2L_x}\left[1 + \frac{\beta a}{2}(L_x - x_0)\left(1 - \frac{L_x}{x_0}\right)\right] + \mathrm{O}\left[(\beta a(L_x - x_0))^2\right],$$

$$\mathcal{P}(L_x) = \mathcal{P}(x_0)\left[1 - \beta a(L_x - x_0)\right] + \mathrm{O}\left[(\beta a(L_x - x_0))^2\right].$$

Vediamo dunque che, man mano che la temperatura aumenta, le due pressioni diventano sempre più simili tra loro e tendono al valore che otterremmo nel caso di un gas perfetto contenuto nel volume $V = L_xL^2$. Ad alta temperatura dominano infatti le configurazioni in cui energia cinetica ed entropia sono grandi, che sono distribuite piú uniformemente nello spazio.
Nel limite di bassa temperatura, $k_\mathrm{B}T \ll a(L_x - x_0)$, gli esponenziali danno un contributo che tende a zero. Avremo dunque (a meno di termini esponenzialmente piccoli)

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(x_0) &\to \frac{k_\mathrm{B}TN}{L^2x_0[1 + 1/(\beta a x_0)]},\\ \mathcal{P}(L_x) &\to 0.\end{aligned}$$

A basse temperature infatti dominano le configurazioni che hanno energia piú bassa, che sono concentrate nella zona $x < x_0$, e la densità locale in prossimità di L_x diventa trascurabile.

2.a) Per studiare la condensazione di Bose, occorre innanzitutto calcolare la densità degli stati di particella singola $G(\epsilon)$. Nel nostro caso (per $L_x = \infty$), abbiamo

$$\begin{aligned}G(\epsilon) &= \frac{g_s}{h^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\mathbf{q}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\mathbf{p}\,\delta\left(H(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \epsilon\right) = \frac{4\pi L^2 g_s}{h^3}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\int_0^{\infty}\mathrm{d}p\ p^2\,\delta\left(\frac{p^2}{2m} + V(x) - \epsilon\right) =\\ &= \frac{2\pi L^2 g_s(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\,(\epsilon - V(x))^{1/2}\theta(\epsilon - V(x)) =\\ &= \frac{2\pi L^2 g_s(2m)^{3/2}}{h^3}\left[\epsilon^{1/2}\theta(\epsilon)\int_0^{x_0}\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{\infty}\mathrm{d}x\ (\epsilon - a(x - x_0))^{1/2}\,\theta\left(\epsilon - a(x - x_0)\right)\right] =\\ &= \frac{2\pi L^2 g_s(2m)^{3/2}}{h^3}\left[x_0\epsilon^{1/2} + \frac{2}{3a}\epsilon^{3/2}\right]\theta(\epsilon),\end{aligned}$$

dove g_s è la degenerazione di spin. Nella seconda riga del calcolo possiamo leggere la densità di stati di particella singola a energia e x date, ossia

$$G(\epsilon, x) = \frac{2\pi L^2 g_s (2m)^{3/2}}{h^3} \left(\epsilon - V(x)\right)^{1/2} \theta(\epsilon - V(x)) \ ,$$

che sarà utile in seguito.
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 fuori dal condensato, dato da

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

dove $\epsilon_{\min}$ è l'energia minima di una particella e $\mu \leq \epsilon_{\min}$. La condizione affinché esista la condensazione a $T = T_0$ è che

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

Nel nostro caso $\epsilon_{min} = 0$. Di conseguenza, la condizione di condensazione diventa (ponendo $g_s = 1$ per bosoni di spin 0)

$$N = \frac{2\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3} \left[\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0 \epsilon} - 1} + \frac{2}{3 a x_0} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \, \frac{\epsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta_0 \epsilon} - 1} \right] \ ,$$

dove $\beta_0 = 1/(k_{\mathrm{B}} T_0)$. Entrambi questi integrali sono finiti (come si può verificare facilmente espandendo la funzione integranda per $\epsilon \approx 0$), dunque

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

2.b) L'equazione che determina la temperatura di condensazione T_0 si ottiene risolvendo esplicitamente gli integrali che compaiono nell'espressione di N sopra ricavata. Un cambio di variabili permette di esprimere tali integrali in termini delle funzioni gamma di Eulero e zeta di Riemann,

$$\boxed{N = \frac{2\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3} \left[\frac{1}{\beta_0^{3/2}} \zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) + \frac{2}{3 a x_0} \frac{1}{\beta_0^{5/2}} \zeta\left(\tfrac{5}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right) \right].}$$

2.c) Se $T_0 \ll (a x_0)/k_{\mathrm{B}}$, ossia $a \beta_0 x_0 \gg 1$, si può trascurare il secondo contributo nell'espressione sopra ottenuta, trovando dunque

$$N \approx \frac{2\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3 \beta_0^{3/2}} \zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right).$$

Per calcolare la frazione di particelle nel condensato usiamo la relazione $N = N_0 + \widetilde{N}$. Per $T \leq T_0$ il potenziale chimico rimane fisso al suo valore massimo $\mu = \epsilon_{min} = 0$ e il calcolo di $\widetilde{N}$ è simile a quello appena compiuto,

$$\widetilde{N}(T) = \frac{2\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3} \frac{1}{\beta^{3/2}} \left[\zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) + \frac{2}{3 \beta a x_0} \zeta\left(\tfrac{5}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right) \right].$$

Per $T < T_0$ a maggior ragione vale la condizione $a \beta x_0 > a \beta_0 x_0 \gg 1$; possiamo dunque trascurare anche qui il contributo del secondo integrale. Avremo dunque, per la frazione di particelle fuori dal condensato,

$$\frac{\widetilde{N}(T)}{N} \approx \frac{2\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3 N} \frac{1}{\beta^{3/2}} \zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) \Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) = \left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)^{3/2},$$

dove abbiamo sfruttato l'espressione di N ottenuta precedentemente. Avremo dunque infine

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\widetilde{N}}{N} \approx 1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}.}$$

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

$$N = \int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} {\rm d}\epsilon \, G(\epsilon),$$

dove $\epsilon_{\rm F}$ 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 $\frac{1}{2}$, dunque

$$N = \frac{4\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{h^3} \theta(\epsilon_{\rm F}) \left[\int_0^{\epsilon_{\rm F}} {\rm d}\epsilon \; \epsilon^{1/2} + \frac{2}{3ax_0} \int_0^{\epsilon_{\rm F}} {\rm d}\epsilon \; \epsilon^{3/2} \right].$$

Svolgendo gli integrali, troviamo facilmente, per $\epsilon_{\rm F} > 0$,

$$\boxed{N = \frac{8\pi L^2 (2m)^{3/2} x_0}{3h^3} \left[\epsilon_{\rm F}^{3/2} + \frac{2}{5ax_0} \epsilon_{\rm F}^{5/2} \right].}$$

3.b) ll valore medio di x è dato da

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

dove

$$\begin{aligned} P(x) = \frac{N(x)}{N} &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} {\rm d}\epsilon \, G(\epsilon, x) = \\ &= \frac{4\pi L^2 (2m)^{3/2}}{h^3 N} \int_{-\infty}^{\epsilon_{\rm F}} {\rm d}\epsilon \, (\epsilon - V(x))^{1/2} \theta(\epsilon - V(x)) = \\ &= \frac{8\pi L^2 (2m)^{3/2}}{3h^3 N} \, (\epsilon_{\rm F} - V(x))^{3/2} \, \theta\left(\epsilon_{\rm F} - V(x)\right), \end{aligned}$$

e il calcolo della $G(\epsilon, x)$, ossia della densità degli stati di particella singola con energia ϵ e x dati, è stato effettuato nel punto 1.c. Avremo dunque

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{8\pi L^2 (2m)^{3/2}}{3h^3 N} \left[\epsilon_{\rm F}^{3/2} \theta(\epsilon_{\rm F}) \int_0^{x_0} {\rm d}x \, x + \int_{x_0}^{\infty} {\rm d}x \, x \, \left(\epsilon_{\rm F} - a(x - x_0)\right)^{3/2} \theta\left(\epsilon_{\rm F} - a(x - x_0)\right) \right] = \\ &= \frac{8\pi L^2 (2m)^{3/2}}{3h^3 N} \theta(\epsilon_{\rm F}) \left[\frac{x_0^2}{2} \epsilon_{\rm F}^{3/2} + \frac{2}{5a^2} (\epsilon_{\rm F} + a x_0) \epsilon_{\rm F}^{5/2} - \frac{2}{7a^2} \epsilon_{\rm F} 7/2 \right] \\ &= \frac{\frac{x_0^2}{2} \epsilon_{\rm F}^{3/2} + \frac{2}{5a^2} (\epsilon_{\rm F} + a x_0) \epsilon_{\rm F}^{5/2} - \frac{2}{7a^2} \epsilon_{\rm F}^{7/2}}{x_0 \epsilon_{\rm F}^{3/2} + \frac{2}{5a} \epsilon_{\rm F}^{5/2}}, \end{aligned}$$

dove, nell'ultimo passaggio, abbiamo sostituito l'espressione di N ottenuta al punto precedente. Sostituendo infine $\epsilon_{\rm F} = a x_0$, troviamo

$$\boxed{\langle x \rangle = \tfrac{71}{98} \, x_0 \,,}$$

che è minore di x_0.

3.c) Poichè l'energia potenziale nel nostro caso è definita positiva, il valore massimo di x a $T = 0$ si ottiene imponendo che il contributo cinetico all'energia di Fermi sia nullo. Avremo dunque (per $\epsilon_{\rm F} > 0$)

$$\epsilon_{\rm F} = a(x_{\rm max} - x_0) \quad \rightarrow \quad x_{\rm max} = x_0 + \frac{\epsilon_{\rm F}}{a}.$$

Sostituendo $\epsilon_{\rm F} = a x_0$ troviamo dunque

$$\boxed{x_{\rm max} = 2x_0.}$$

Quindi, le particelle sono confinate nell'intervallo $0 < x < x_{\rm max} = 2x_0$, il cui punto medio è $\bar{x} = x_0$. Tuttavia, le particelle tendono a stare maggiormente nella regione $0 < x < x_0$, in cui il potenziale è minore, per cui $\langle x \rangle < \bar{x}$.