Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 31.01.2018

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti di massa m contenute in un disco di raggio R con centro in un sistema di riferimento (x, y), e sia l'Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p^2}{2m} - Aq^2, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, $q = |\mathbf{q}|$, ed A è una costante positiva.

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann:
   - 1.a) Calcolare l'energia media $E(T)$ in funzione della temperatura T.
   - 1.b) Indicata con $P(r)$ la pressione a distanza r dal centro del disco, calcolare $P(R)$ e $P(0)$.
   - 1.c) Calcolare la densità di probabilità $p(\epsilon)$ dell'energia ϵ di singola particella.
   - 1.d) Calcolare la temperatura T^* alla quale la probabilità di trovare una particella con energia negativa è il doppio di quella di trovarla con energia positiva.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Discutere l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.b) Nel caso di risposta affermativa al punto precedente, scrivere, senza risolvere, l'equazione che determina la temperatura critica T_c di condensazione.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Determinare il valore massimo di N tale che a $T = 0$ tutte le particelle abbiano energia negativa.
   - 3.a) Calcolare l'energia $E(T = 0)$ per $\epsilon_F = 2AR^2$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 3, 1.b: 3, 1.c: 3, 1.d:3
  2.a: 5, 2.b: 4
  3.a: 5, 3.b: 4

Nota: Al punto 1.d) scrivere l'equazione che determina T^* senza risolverla.

- **Risposte**

Nota: La costante di Botzmann k_B è presa uguale a 1, di conseguenza $\beta^{-1} = T$.

1.a) L'energia media $E(T)$ puè essere calcolata direttamente dalla funzione di partizione canonica Z_N mediante la relazione $E = -(\partial/\partial\beta)\ln Z_N(T,V)$. Per un sistema di N particelle classiche non interagenti si ha $Z_N(T,V) = Z_1(T,V)^N/N!$ dove $Z_1(T,V)$ è la funzione di partizione di singola particella:

$$Z_1(T,V) = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta p^2/2m + \beta A q^2}$$
$$= \frac{2\pi m}{\beta h^2} \int_0^R e^{\beta A r^2}\, 2\pi r dr = \frac{2\pi^2 m}{\beta^2 h^2 A}\left(e^{\beta A R^2} - 1\right).$$

Si ha quindi:

$$\boxed{E(T)/N = 2T - \frac{AR^2}{1 - e^{-\beta A R^2}}.}$$

1.b) Il potenziale $U(\mathbf{q}) = -Aq^2$ è a simmetria centrale, consideriamo quindi una corona circolare di raggio $r \leq R$ e spessore dr, con volume $\delta V_r = 2\pi r dr$ e contenente un numero δN_r di particelle, all'interno del quale il potenziale è costante. La pressione nel volume δV_r si ottiene dalla relazione

$$P(r) = \left.\frac{\partial}{\partial \delta V_r}\right|_{T,\delta N_r} T \ln Z_{\delta N_r}(T, \delta V_r) = T\delta N_r \left.\frac{\partial}{\partial \delta V_r}\right|_{T} \ln Z_1(T, \delta V_r).$$

dove $Z_1(T, \delta V_r)$ è la funzione di partizione di singola particella:

$$Z_1 = \int_{\mathbf{q}\in\delta V_r} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{2\pi m}{\beta h^2}\, e^{\beta A r^2}\, \delta V_r.$$

Ne segue che:

$$P(r) = \rho(r)\, T, \qquad 0 \leq r \leq R.$$

dove $\rho(r) = \delta N_r/\delta V_r$ è la densità nella corona circolare.

$$P(r) = \rho(r)\, T, \qquad 0 \leq r \leq R.$$

La densità $\rho(r)$ può essere ottenuta dalla probabilità $p_1(\mathbf{q} \in \delta V_r)\,\delta V_r = \delta N_r/N$ che una particella si trovi in δV_r:

$$\rho(r)\frac{\delta V_r}{N} = p_1(\mathbf{q} \in \delta V_r)\,\delta V_r = \frac{1}{Z_1(T,V)} \int_{\mathbf{q}\in\delta V_r} \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} = \frac{\beta A}{\pi} \frac{e^{\beta A r^2}}{e^{\beta A R^2} - 1}\, \delta V_r,$$

da cui:

$$\rho(r) = \frac{\beta A N}{\pi} \frac{e^{\beta A r^2}}{e^{\beta A R^2} - 1},$$

e quindi

$$P(r) = \frac{AN}{\pi} \frac{e^{\beta A r^2}}{e^{\beta A R^2} - 1}. \tag{1}$$

Di conseguenza:

$$\boxed{P(R) = \frac{AN}{\pi} \frac{e^{\beta A R^2}}{e^{\beta A R^2} - 1},}$$

mentre

$$\boxed{P(0) = \frac{AN}{\pi} \frac{1}{e^{\beta A R^2} - 1}.}$$

1.c) La densità di probabilità $p(\epsilon)$ che una particella abbia un'energia ϵ è data da

$$p(\epsilon) = \frac{1}{Z_1(T,V)} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})}\, \delta\big(H(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \epsilon\big) = \frac{1}{Z_1(T,V)}\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}$$

dove:

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q})} \delta\big(H(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \epsilon\big) \\ &= \frac{2\pi}{h^2} \int_0^R r dr \frac{\partial}{\partial\epsilon} \int d^2p\, \theta(\epsilon - p^2/2m + Ar^2) \\ &= \frac{4\pi^2 m}{h^2} \int_0^R r dr \frac{\partial}{\partial\epsilon} (\epsilon + Ar^2)\, \theta(\epsilon + Ar^2) \\ &= \frac{2\pi^2 m}{h^2} \int_0^{R^2} dt\, \theta(\epsilon + At). \end{aligned}$$

Se $\epsilon \geq 0$ otteniamo:

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2}, \qquad \epsilon \geq 0,$$

mentre per $\epsilon < 0$,

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi^2 m}{h^2} \int_{-\epsilon/A}^{R^2} dt\, \theta(\epsilon + AR^2) = \frac{2\pi^2 m}{Ah^2} (\epsilon + AR^2)\, \theta(\epsilon + AR^2), \qquad \epsilon < 0.$$

Utilizzando l'espressione di $Z_1(T,V)$ trovata al punto 1.a), si ha quindi

$$\boxed{p(\epsilon) = \frac{\beta^2 AR^2}{e^{\beta AR^2} - 1}\, e^{-\beta\epsilon}, \qquad \epsilon \geq 0.}$$

e

$$\boxed{p(\epsilon) = \frac{\beta^2 (\epsilon + AR^2)}{e^{\beta AR^2} - 1}\, e^{-\beta\epsilon}\, \theta(\epsilon + AR^2), \qquad \epsilon < 0.}$$

1.d) La probabiltà P_+ che una particella abbia energia positiva vale:

$$P_+ = \int_0^{+\infty} d\epsilon\, p(\epsilon) = \frac{\beta^2 AR^2}{e^{\beta AR^2} - 1} \int_0^{+\infty} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon} = \frac{\beta AR^2}{e^{\beta AR^2} - 1},$$

mentre la probabiltà P_- che una particella abbia energia negativa vale $P_- = 1 - P_+$. Di conseguenza

$$P_- = 2P_+ \qquad \Rightarrow \qquad P_+ = 1/3.$$

La temperatura T^* richesta è quindi soluzione dell'equazione

$$\boxed{e^x - 1 = 3x, \qquad x = AR^2/T^*.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni di spin 0 il numero di particelle a temperature T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$; dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato ($\epsilon = \epsilon_{\min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\min}$) dato da,

$$\tilde{N} = \int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1},$$

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella calcolata al punto 1.c), ed $\epsilon_{\min} = -AR^2$.

Alla temperatura critica di condensazione $\mu = \epsilon_{\min}$, per cui la condensazione di Bose-Einstein esiste se

$$\int_{-AR^2}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1} = \frac{2\pi^2 m}{Ah^2}\int_{-AR^2}^{0} d\epsilon \, \frac{\epsilon + AR^2}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1} + \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2}\int_{0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1}$$

è finito. Il secondo integrale non presenta singolarità ed è finito. Il primo integrale ha una singolarità sull'estremo inferiore ma ànch'esso finito poichè:

$$\frac{(\epsilon + AR^2)}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1} \sim \frac{1}{\beta} \qquad \text{per } \epsilon + AR^2 \sim 0.$$

segue che

$$\boxed{\int_{-AR^2}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1} < \infty, \qquad \Rightarrow \text{Esiste condensazione BE.}}$$

2.b Alla condensazione temperatura di condensazione $\mu = \epsilon_{\min}$ e $\tilde{N} = N$, per cui l'equazione che determina T_c è:

$$N = \int_{-AR^2}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1},$$

che sostituendo l'espressione di $G(\epsilon)$ trovata al punto 1.c) fornisce l'equazione richiesta

$$N = \frac{2\pi^2 m}{Ah^2}\int_{-AR^2}^{0} d\epsilon \, \frac{\epsilon + AR^2}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1} + \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2}\int_{0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+AR^2)}-1},$$

ovvero

$$\boxed{N = \frac{2\pi^2 m}{Ah^2}\int_{0}^{AR^2} d\epsilon \, \frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon}-1} + \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2}\int_{AR^2}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1}.}$$

3.a L'energia del sistema non dipende dal valore dello spin delle particelle, quindi il numero totale di particelle è:

$$N = 2\int_{\epsilon_{\min}}^{\epsilon_F} d\epsilon \, G(\epsilon),$$

dove $G(\epsilon)$ è stata calcolata al punto 1.c) ed $\epsilon_{\min} = -AR^2$. Il numero massimo di particelle tale che a $T = 0$ tutte abbiano energia negativa è quindi

$$N = 2\int_{-AR^2}^{0} d\epsilon \, G(\epsilon) = 2\frac{2\pi^2 m}{Ah^2}\int_{-AR^2}^{0} d\epsilon \, (\epsilon + AR^2) = \frac{2\pi^2 m}{Ah^2}(AR^2)^2,$$

Ovvero

$$\boxed{N = \frac{2\pi^2 m A R^4}{h^2}.}$$

3.b L'energia del sistema a temperatura $T = 0$ è data da

$$E(T=0) = 2\int_{\epsilon_{\min}}^{\epsilon_F} d\epsilon \, G(\epsilon)\, \epsilon$$

Per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 2AR^2$ si ha:

$$\begin{aligned}
E(T=0) &= 2\frac{2\pi^2 m}{Ah^2}\int_{-AR^2}^{0} d\epsilon\,(\epsilon + AR^2)\,\epsilon + 2\frac{2\pi^2 m R^2}{h^2}\int_{0}^{2AR^2} d\epsilon\,\epsilon \\
&= \frac{4\pi^2 m}{h^2}\left[-\frac{1}{3A}(-AR^2)^3 - \frac{1}{2A}(AR^2)(AR^2)^2 + \frac{R^2}{2}(2AR^2)^2\right] \\
&= \frac{4\pi^2 m A^2 R^6}{h^2}\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2} + 2\right]
\end{aligned}$$

ovvero

$$\boxed{E(T=0) = \frac{22\pi^2 m A^2 R^6}{3h^2}.}$$