Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 18.02.2014

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti confinate sul segmento $|x| \leq 2L$ e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(p,x) = c|p| + V(x) \qquad p \in \mathbb{R},\ |x| \leq 2L,$$

dove

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -2L \leq x < -L \\ V_0 & |x| \leq L, \\ -V_0 & L < x \leq 2L, \end{cases}$$

con V_0 costante positiva.

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann:
   - 1.a) Calcolare l'entropia $S(T)$ in funzione della temperatura T.
   - 1.b) Calcolare la pressione $P(x)$ nei punti $x = 0$ e $x = 2L$.
   - 1.c) Calcolare la temperatura alla quale nell'intervallo $|x| < L$ si trovano in media un quarto delle particelle.
   - 1.d) Indicato con $N(x \in D)$ il numero medio di particelle contenute nell'intervallo $x \in D$, calcolare il rapporto $N(-2L < x < -L)/N(L < x < 2L)$ alla temperature del punto precedente.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Discutere l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.a) Calcolare il numero di particelle alla temperatura T in funzione del potenziale chimico.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Calcolare il numero massimo di particelle tale che a $T = 0$ non vi siano particelle nell'intervallo $|x| \leq L$.
   - 3.b) Calcolare $E(T = 0)$ per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 2V_0$.

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

- **Risposte**

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

1.a) L'entropia $S(T)$ può essere calcolata dalla relazione termodinamica $S = \beta(E - F)$ dove $F = F(T, N, V)$ è l'energia libera ed $E = E(T, V, N)$ l'energia media del sistema. Esprimendo queste quantità in termini della funzione dalla funzione di partizione canonica $Z_N(T, V)$ otteniamo:

$$S(T) = -\beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N + \ln Z_N. \tag{1}$$

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:

$$Z_1(T, V) = \int \frac{dp\, dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-\beta c|p|} \int_{-2L}^{+2L} dx\, e^{-\beta V(x)} = \frac{2L}{hc\beta} \Big[1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0} \Big].$$

Ne segue che

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} Z_1(T, V) = T + V_0 \frac{2e^{-\beta V_0} - e^{\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}$$

Si ha quindi:

$$S(T)/N = 1 + \beta V_0 \frac{2e^{-\beta V_0} - e^{\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}} + \ln \left[\frac{2L}{hc\beta} \Big[1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0} \Big] \right] - \ln(N/e).$$

ovvero:

$$\boxed{S(T)/N = \beta V_0 \frac{2e^{-\beta V_0} - e^{\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}} + \ln \left[\frac{2e^2 L}{hc\beta N} \Big[1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0} \Big] \right]}$$

1.b) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N!$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella. Ne segue che la pressione P nel punto x vale:

$$P(x) = \rho(x)\, T$$

dove $\rho(x)$ è la densità di particella nel punto x.

Considerato infatti un intervallo posto a distanza x dall'origine e lunghezza (volume) $\delta V_x = dx$ e contenente δN_x particelle, la pressione in δV_x è data da:

$$P(x) = \frac{\partial}{\partial \delta V_x}\bigg|_{T, \delta N_x} T \ln Z_{\delta N_x}(T, \delta V_x) = T \delta N_x \frac{\partial}{\partial \delta V_x}\bigg|_T \ln Z_1(T, \delta V_x).$$

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

$$Z_1(T, \delta V_x) = \int_{x \in \delta V_x} \frac{dp\, dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} = \frac{2}{hc\beta}\, e^{-\beta V(x)} \delta V_x.$$

Sostituendo dell'espressione di $P(x)$ segue $P(x) = \rho(x) T$ con $\rho(x) = \delta N_x / \delta V_x$.

Essendo le particelle indipendenti $\delta N_x / N = p_1(x \in \delta V_x)\, \delta V_x$ è la probabilità che una particella si trovi in δV_x. Di conseguenza

$$\rho(x) \frac{\delta V_x}{N} = \frac{1}{Z_1(T, V)} \int_{x \in \delta V_x} \frac{dp\, dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} = \frac{Z_1(T, \delta V_x)}{Z_1(T, V)} = \frac{e^{-\beta V(x)}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}\, \frac{\delta V_x}{L},$$

da cui:

$$\rho(r) = \frac{N}{L}\, \frac{e^{-\beta V(x)}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}$$

e quindi

$$P(x) = \frac{NT}{L} \frac{e^{-\beta V(x)}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}.$$

Di conseguenza:

$$\boxed{P(x=0) = \frac{NT}{L} \frac{e^{-\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}},}$$

mentre

$$\boxed{P(x=2L) = \frac{NT}{L} \frac{e^{\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}},}$$

1.c) Il numero medio di particelle contenute nell'intervallo $|x| < L$ a temperatura T vale:

$$N(|x| < L) = N \int_{-L}^{L} p_1(x \in dx)\, dx = \frac{2Ne^{-\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}.$$

La condizione $N(x < |L|) = N/4$ richiede che

$$\frac{2e^{-\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}} = \frac{1}{4} \qquad \Rightarrow \qquad e^{2\beta V_0} + e^{\beta V_0} - 6 = 0.$$

Da cui si ottiene la temperatura richiesta

$$\boxed{T = \frac{V_0}{\ln 2}.}$$

1.d) Il numero medio di particelle contenute nei due intervalli alla temperatura T è dato rispettivamente da:

$$N(-2L < x < -L) = N \int_{-2L}^{-L} p_1(x \in dx)\, dx = \frac{N}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}},$$

e

$$N(L < x < 2L) = N \int_{L}^{2L} p_1(x \in dx)\, dx = \frac{Ne^{\beta V_0}}{1 + 2e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0}}.$$

Di conseguenza:

$$\frac{N(-2L < x < -L)}{N(L < x < 2L)} = e^{-\beta V_0},$$

e quindi per $T = V_0/\ln 2$ si ha:

$$\boxed{\frac{N(-2L < x < -L)}{N(L < x < 2L)} = \frac{1}{2}.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni 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. La condizione affinchè esista la condensazione è:

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

Nel problema in questione $\epsilon_{\min} = -V_0$ e:

$$\begin{aligned}
G(\epsilon) &= \int \frac{dp\,dx}{h}\, e^{-\beta H(p,x)} \delta\big(\epsilon - H(p,x)\big) \\
&= \frac{1}{h}\int_{-2L}^{+2L} dx\, \frac{\partial}{\partial\epsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \theta(\epsilon - c|p| - V(x)) \\
&= \frac{2}{hc}\int_{-2L}^{+2L} dx\, \frac{\partial}{\partial\epsilon}\big(\epsilon - V(x)\big)\,\theta(\epsilon - V(x)) \\
&= \frac{2L}{hc}\big[\theta(\epsilon) + 2\theta(\epsilon - V_0) + \theta(\epsilon + V_0)\big],
\end{aligned}$$

Di conseguenza il temine critico è:

$$\int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} = \int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1} = T\ln(1-e^{-\beta\epsilon})\Big|_0^{+\infty} \to \infty,$$

Ne concludiamo quindi

$$\boxed{\int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\epsilon_{\min})}-1} \to \infty, \qquad \Rightarrow \text{Non esiste condensazione BE.}}$$

2.b In assenza di condensazione di BE il numero di particelle a temperatura T e' determinato da

$$N = \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} = \frac{2L}{hc}\left[\int_0^{+\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} + 2\int_{V_0}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} + \int_{-V_0}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}\right].$$

Usando

$$\int \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} = \frac{1}{\beta}\ln\Big[1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\Big]$$

si ha

$$N = -\frac{2L}{hc\beta}\left[\ln\big(1-e^{\beta\mu}\big) + 2\ln\big(1-e^{-\beta(V_0-\mu)}\big) + \ln\big(1-e^{\beta(V_0+\mu)}\big)\right].$$

ovvero:

$$\boxed{N = -\frac{2L}{hc\beta}\ln\left[\big(1-z\big)\big(1-ze^{-\beta V_0}\big)^2\big(1-ze^{\beta V_0}\big)\right], \qquad z = e^{\beta\mu}.}$$

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

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

dove $G(\epsilon)$ è stata calcolata al punto 2.a) ed $\epsilon_{\min} = -V_0$. Affinchè a $T = 0$ non vi siano particelle nella regione $|x| < L$ queste devono avere tutte energia minore di V_0. Di conseguenza il numero massimo si ha per $\epsilon_{\mathrm{F}} = V_0$:

$$N = 2\int_{-V_0}^{0} d\epsilon\, G(\epsilon) = \frac{4L}{hc}\left[\int_0^{V_0} d\epsilon + \int_{-V_0}^{V_0} d\epsilon\right]$$

Ovvero

$$\boxed{N = \frac{12LV_0}{hc}.}$$

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

$$E(T=0) = 2 \int_{-V_0}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon \, G(\epsilon) \, \epsilon,$$

dove $G(\epsilon)$ è stata calcolata al punto 2.a). Per $\epsilon_{\rm F} = 2V_0 > V_0$ tutti i termini in $G(\epsilon)$ contribuiscono per cui si ha:

$$E(T=0) = \frac{4L}{hc} \left[\int_0^{2V_0} d\epsilon \, \epsilon + 2 \int_{V_0}^{2V_0} d\epsilon \, \epsilon + \int_{-V_0}^{2V_0} d\epsilon \, \epsilon \right] = \frac{2L}{hc} V_0^2 \, [4 + 6 + 3]$$

L'energia richieste è quindi

$$\boxed{E(T=0) = \frac{26 L V_0^2}{hc}.}$$