Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 08.05.2018

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti contenute in una sfera S_{3R} con centro nell'origine degli assi e raggio $3R$. Sia l'Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{x}) = c|\boldsymbol{p}|^3 + V(|\boldsymbol{q}|) \qquad \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^3,\ \boldsymbol{q} \in S_{3R}$$

dove, indicato con $r = |\boldsymbol{q}|$,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & 0 \le r < R; \\ V_0, & R \le r < \sqrt[3]{33}R; \\ -V_0, & \sqrt[3]{33}R \le r \le 4R; \end{cases}$$

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'energia $E(T)$ in funzione della temperatura T.
   - 1.b) Determinare il valore del calore del calore specifico $C_V(T)/N$ nel limite $T = 0$ e $T \to \infty$, e sua prima correzione.
   - 1.c) Calcolare la pressione $P(T)$ sulla superficie della sfera.
   - 1.d) Calcolare la probabilità $p(\epsilon \le 3T, r \le R)$ che alla temperatura T una particella abbia energia cinetica $\epsilon \le 3T$ si trovi ad una distanza dal centro della sfera $r \le R$.
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.b) Calcolare il potenziale chimico $\mu(T)$ in funzione della temperatura.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Calcolare l'energia di Fermi in funzione del numero di particelle N del sistema.
   - 3.b) Calcolare $E(T = 0)$ in funzione del numero di particelle N per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 0$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 4, 1.b: 3, 1.c: 4, 1.d: 4
  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'energia media del sistema $E = E(T,V,N)$ si ottiene dalla funzione di partizione canonica $Z_N(T,V)$ mediante la relazione $E(T,V,N) = -(\partial/\partial\beta)\ln Z_N(T,V)$. 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:

$$
\begin{aligned}
Z_1(T,V) &= \int \frac{d^3p\,d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{1}{h^3}\int_0^{+\infty} 4\pi p^2 dp\, e^{-\beta c p^3} \int_0^{4R} 4\pi r^2 dr\, e^{-\beta V(r)} \\
&= \frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3}\int_0^{+\infty} dp^3\, e^{-\beta c p^3}\, 4\pi \left[e^{\beta V_0}\int_0^R r^2 dr \,+ e^{-\beta V_0}\int_R^{\sqrt[3]{33}R} r^2 dr \,+ e^{\beta V_0}\int_{\sqrt[3]{33}R}^{4R} r^2 dr \right] \\
&= \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{R^3}{h^3 c\beta}\, 32\left[e^{\beta V_0} + e^{-\beta V_0}\right] = 64\left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{R^3}{h^3 c\beta}\,\cosh(\beta V_0).
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Ne segue che

$$E/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1(T,V) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big[-\ln\beta + \ln\cosh(\beta V_0)\Big]$$

ovvero:

$$\boxed{E(T,V,N)/N = T - V_0\,\tanh(\beta V_0).}$$

1.b) Nel limite $T \to 0$ l'energia per particella vale

$$E/N = T - V_0\,\frac{1 - e^{-2\beta V_0}}{1 + e^{-2\beta V_0}} \underset{T\ll 1}{=} -V_0 + T + 2\,V_0\,e^{-2\beta V_0} + \dots\,.$$

Di conseguenza

$$\boxed{C_V/N = \frac{\partial}{\partial T}E/N \underset{T\ll 1}{=} 1 + 4\,\beta^2 V_0^2\,e^{-2\beta V_0} + \dots\,.}$$

Nel limite $T \to \infty$ l'energia per particella vale

$$E/N = T - V_0\,\frac{e^{\beta V_0} - e^{-\beta V_0}}{e^{\beta V_0} + e^{-\beta V_0}} \underset{T\gg 1}{=} T - \frac{V_0^2}{T} + \dots\,.$$

Di conseguenza

$$\boxed{C_V/N = \frac{\partial}{\partial T}E/N \underset{T\gg 1}{=} 1 + \beta^2 V_0^2 + \dots\,.}$$

1.c) La pressione sulla superficie della sfera può essere calcolata direttamente dalla funzione di partizione mediante la relazione termodinamica

$$P = -\frac{\partial}{\partial V}\Big|_{T,N} F(T,V,N) = T\frac{\partial}{\partial V}\Big|_{T,N}\ln Z_N(T,V),$$

dove V è il volume della sfera. Per un sistema di particelle classiche non interagenti questa diventa

$$P = NT\frac{\partial}{\partial V}\Big|_{T,N}\ln Z_1(T,V).$$

Per poter utilizzare questa relazione è necessario determinare la dipendenza di $Z_1(T,V)$ dal volume $V = (4\pi/3)(4R)^3$ della sfera. Dalla (1) si ha

$$
\begin{aligned}
Z_1(T,V) &= \frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3c\beta} \times 4\pi\left[e^{\beta V_0}\int_0^R r^2 dr \,+ e^{-\beta V_0}\int_R^{\sqrt[3]{33}R} r^2 dr \,+ e^{\beta V_0}\int_{\sqrt[3]{33}R}^{4R} r^2 dr \right] \\
&= \frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3c\beta} \times \frac{4\pi}{3}\Big[e^{\beta V_0}R^3 + e^{-\beta V_0}\big[33R^3 - R^3\big] + e^{\beta V_0}\big[(4R)^3 - 33R^3\big]\Big] \\
&= \frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3c\beta} \times \left[\frac{4\pi R^3}{3}32\big[-e^{\beta V_0} + e^{-\beta V_0}\big] + V e^{\beta V_0}\right].
\end{aligned}
$$

Da questa segue facilmente

$$P = NT \frac{e^{\beta V_0}}{\frac{4\pi R^3}{3} 32\big[-e^{\beta V_0} + e^{-\beta V_0}\big] + V e^{\beta V_0}}$$

ovvero,

$$\boxed{P = \frac{NT}{V} \frac{e^{\beta V_0}}{\cosh(\beta V_0)} = \frac{3NT}{256\pi R^3} \frac{e^{\beta V_0}}{\cosh(\beta V_0)}.}$$

Allo stesso risultato si può giungere calcolando la pressione sulla superficie di una sfera di raggio $R_0 > \sqrt[3]{33}R$, e sostituendo nell'espressione della pressione $R_0 = 4R$.

1.d) Essendo le particelle indipendenti la probabilità richiesta è data da

$$\begin{aligned} P(\epsilon \le 3T, r \le R) &= \frac{1}{Z_1(T,V)} \int_{\epsilon \le 3T, r \le R} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{1}{Z_1 h^3} \int_{cp^3 \le 3T} 4\pi p^2 dp\, e^{-\beta c p^3} \int_0^R 4\pi r^2 dr\, e^{-\beta V(r)} \\ &= \frac{1}{Z_1 h^3} \frac{4\pi}{3c\beta} \int_0^3 dt\, e^{-t}\, 4\pi e^{\beta V_0} \int_0^R r^2 dr = \frac{1}{Z_1} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{R^3}{h^3 c\beta} (1 - e^{-3})\, e^{\beta V_0}, \end{aligned}$$

ovvero, usando la (1),

$$\boxed{P(\epsilon \le 3T, r \le R) = \frac{1 - e^{-3}}{64} \frac{e^{\beta V_0}}{\cosh(\beta V_0)}.}$$

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:

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, \delta\big[\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big] \\ &= \frac{1}{h^3} \int_0^{4R} 4\pi r^2 dr \int_0^{+\infty} 4\pi p^2 dp\, \delta\big[\epsilon - cp^3 - V(r)\big] \\ &= \frac{(4\pi)^2}{3h^3 c} \int_0^{4R} dr\, r^2\ \theta\big[\epsilon - V(r)\big] \\ &= 32 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{R^3}{h^3 c} \Big[\theta(\epsilon + V_0) + \theta(\epsilon - V_0)\Big]. \end{aligned}$$

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 è determinato da:

$$N = \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} = 32 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{R^3}{h^3 c} \left[\int_{-V_0}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} + \int_{V_0}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}\right].$$

Usando

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

ed introducendo la fugacità $z = e^{\beta\mu}$, si ha:

$$N = -\frac{512\pi^2}{9} \frac{R^3}{h^3 c\beta} \left[\ln\big(1 - z e^{\beta V_0}\big) + \ln\big(1 - z e^{-\beta V_0}\big)\right] = -\frac{512\pi^2}{9} \frac{R^3}{h^3 c\beta} \ln\big[z^2 - 2z\cosh(\beta V_0) + 1\big],$$

da cui segue:

$$z^2 - 2z\cosh(\beta V_0) + 1 = e^{-\beta N/\beta_0}, \quad \beta_0 = \frac{512\pi^2}{9} \frac{R^3}{h^3 c}.$$

Risolvendo questa equazione si ha:

$$z = \cosh(\beta V_0) - \sqrt{\cosh(\beta V_0)^2 - 1 + e^{-\beta N/\beta_0}},$$

ovvero

$$\boxed{\mu = \frac{1}{\beta} \ln\Big[\cosh(\beta V_0) - \sqrt{\cosh(\beta V_0)^2 - 1 + e^{-\beta N/\beta_0}}\Big].}$$

É facile verificare che $\lim_{T\to 0} \mu(T) = -V_0$.

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 2.a) ed $\epsilon_{\min} = -V_0$. Sostituendo l'espressione di $G(\epsilon)$ si ha:

$$\begin{aligned} N &= 2 \times \frac{512\pi^2}{9} \frac{R^3}{h^3 c} \left[\int_{-V_0}^{\epsilon_F} d\epsilon \, \theta(\epsilon_F + V_0) + \int_{V_0}^{\epsilon_F} d\epsilon \, \theta(\epsilon_F - V_0)\right] \\ &= 2\beta_0 \Big[(\epsilon_F + V_0)\, \theta(\epsilon_F + V_0) + (\epsilon_F - V_0)\, \theta(\epsilon_F - V_0)\Big]. \end{aligned}$$

Se $\epsilon_F \le V_0$ allora:

$$N = 2\beta_0(\epsilon_F + V_0) \qquad \Rightarrow \qquad \epsilon_F = \frac{N}{2\beta_0} - V_0 \text{ valida per } N \le 4\beta_0 V_0.$$

Se $\epsilon_F > V_0$ allora:

$$N = 2\beta_0\Big[\epsilon_F + V_0 + \epsilon_F - V_0\Big] \qquad \Rightarrow \qquad \epsilon_F = \frac{N}{4\beta_0} \text{ valida per } N > 4\beta_0 V_0.$$

Quindi

$$\boxed{\epsilon_F = \begin{cases} \frac{N}{2\beta_0} - V_0, & N \le 4\beta_0 V_0; \\ \frac{N}{4\beta_0}, & N > 4\beta_0 V_0; \end{cases}}$$

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

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

dove $G(\epsilon)$ è stata calcolata al punto 2.a). Per $\epsilon_\mathrm{F} = 0$ si ha

$$E(T=0) = 2\beta_0 \int_{-V_0}^{0} d\epsilon\,\epsilon = -\beta_0 V_0^2.$$

Dal risultato del punto 3.a) si ha che $\epsilon_\mathrm{F} = 0$ per $V_0 = N/2\beta_0$, per cui l'energia richiesta vale:

$$\boxed{E(T=0) = -\frac{N^2}{4\beta_0} = -\frac{NV_0}{2}.}$$