Corso di Meccanica Statistica Compito del 4/11/2022

Proff. S. Caprara, I. Giardina e M. Grilli

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche, di massa m, non interagenti, con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + ar^3 \ , \qquad \mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, $r = |\mathbf{q}|$ e $a > 0$ è una costante dimensionale. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

1. **Meccanica Statistica Classica**
Assumendo che sia applicabile la statistica classica e che il sistema sia in equilibrio alla temperatura T:
a. [2 punti] calcolare l'entropia S del gas in funzione della temperatura;
b. [4 punti] calcolare il valore medio $< r >$ della distanza delle particelle dall'origine;
c. [4 punti] calcolare la temperatura $T^\star$ per cui il numero medio di particelle con $r < r^\star$ sia il doppio del numero medio di particelle con $r > r^\star$, in funzione di $r^\star$.

2. **Bosoni**
Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
a. [6 punti] dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein e calcolare la temperatura di transizione T_0;
b. [4 punti] calcolare la frazione di particelle nel condensato per $T = T_0/3$.

3. **Fermioni**
Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
a. [4 punti] determinare il numero medio N di particelle a $T = 0$ in funzione di dell'energia di Fermi ϵ_F;
b. [4 punti] calcolare il valore medio $< r^3 >$ a $T = 0$ in funzione di ϵ_F;
c. [2 punti] calcolare il valore massimo di r^3 a $T = 0$ in funzione di ϵ_F.

• Nota: La costante di Botzmann k_B è presa uguale a 1, di conseguenza $\beta = 1/T$.

• Si ricordano le definizioni $\Gamma(z) = \int_o^\infty \mathrm{d}t\ t^{z-1} \mathrm{e}^{-t}$ e $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \mathrm{d}t\ \frac{t^{z-1}}{\mathrm{e}^t - 1}$.

Risposte

1.a) L'entropia del sistema può essere calcolata a partire dalla relazione $S(T) = \beta[E(T) - F(T)]$, dove $E(T)$ è l'energia media del gas e $F(T)$ è l'energia libera. Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N! \approx (\mathrm{e}Z_1/N)^N$ dove

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

è la funzione di partizione di singola particella.
L'energia media del sistema E si ottiene dalla funzione di partizione canonica Z_N utilizzando la relazione

$$
E = -\frac{\partial \ln Z_N}{\partial\beta} = -N\frac{\partial \ln Z_1}{\partial\beta} = \frac{5}{2}NT.
$$

L'energia libera è data da

$$
F = -\frac{1}{\beta}\ln Z_N = -\frac{N}{\beta}\ln\left(\frac{\mathrm{e}Z_1}{N}\right) = -\frac{N}{\beta}\ln\left[\frac{4\pi\mathrm{e}(2\pi m)^{3/2}}{3aNh^3\beta^{5/2}}\right].
$$

L'entropia in funzione della temperatura è dunque data da

$$
S(T) = \frac{5}{2}N + N\ln\left[\frac{\mathrm{e}4\pi(2\pi m)^{3/2}T^{5/2}}{3aNh^3}\right].
$$

1.b) La densità di probabilità $P(r)$ che una particella si trovi a distanza r dall'origine è data da

$$
P(r) = \frac{1}{Z_1}\int\frac{\mathrm{d}^3q\mathrm{d}^3p}{h^3}\mathrm{e}^{-\beta H(\mathbf{q},\mathbf{p})}\delta(|\mathbf{q}| - r) = 3\beta a r^2\mathrm{e}^{-\beta a r^3},
$$

dunque

$$
\langle r\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}r\ rP(r) = 3\beta a\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^3\mathrm{e}^{-\beta a r^3} = \frac{1}{(\beta a)^{1/3}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ y^{1/3}\mathrm{e}^{-y} = \frac{\Gamma(\frac{4}{3})}{(\beta a)^{1/3}},
$$

dove, nello svolgimento dell'integrale, abbiamo operato il cambio di variabile $y = \beta a r^3$, e abbiamo sfruttato la definizione della funzione Γ.

1.c) Il numero medio di particelle $N_<$ con $r < r^\star$ è dato da

$$
N_< = N\int_0^{r^\star}\mathrm{d}r\ P(r) = 3\beta a N\int_0^{r^\star}\mathrm{d}r\ r^2\mathrm{e}^{-\beta a r^3} = N\left[1 - \mathrm{e}^{-\beta a (r^\star)^3}\right].
$$

Poiché il numero totale di particelle è fisso, avremo che il numero medio di particelle $N_>$ con $r > r^\star$ è dato da $N_> = N - N_<$. La condizione $N_< = 2N_>$ diventa

$$
N_< = \frac{2}{3}N \qquad \to \qquad 1 - \mathrm{e}^{-\beta a (r^\star)^3} = \frac{2}{3}
$$

da cui $\mathrm{e}^{-\beta a (r^\star)^3} = \frac{1}{3}$ e infine

$$
T^\star = \frac{a(r^\star)^3}{\ln 3}.
$$

2.a) Se il sistema è composto da Bosoni il numero di particelle a temperatura T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$, dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non condensato, dato da

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

La condizione affinché esista la condensazione a $T = T_0$ è che

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

dove, nel nostro caso, $\epsilon_{min} = 0$ e

$$G(\epsilon) = \int \frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{h^3} \delta\left[H(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \epsilon\right] = \frac{(4\pi)^2}{h^3} \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\ r^2 \int_0^{\infty} \mathrm{d}p\ p^2 \delta\left(\frac{p^2}{2m} + ar^3 - \epsilon\right) =$$

$$= \frac{(4\pi)^2 m\sqrt{2m}}{h^3} \int_0^{\infty} dr\ r^2 \sqrt{\epsilon - ar^3}\theta(\epsilon - ar^3) = \frac{(4\pi)^2 m^{3/2}\sqrt{2}}{3ah^3} \int_0^{\epsilon} dy\ \sqrt{y} = \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{9ah^3}\epsilon^{3/2}\theta(\epsilon)$$

è la densità degli stati. Di conseguenza la condizione di condensazione diventa

$$N = \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{9ah^3} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{e^{\beta_0\epsilon} - 1} = \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{9ah^3} T_0^{5/2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) < \infty\ .$$

Quindi esiste la condensazione e

$$T_0 = \left[\frac{9ah^3N}{(4\pi)^2(2m)^{3/2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}\right]^{2/5}.$$

2.b) Dal punto precedente si ottiene che

$$N_0(T) = N - \tilde{N}(\mu = 0, T) = N - \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{9ah^3} T^{5/2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{5/2}\right],$$

dove, per arrivare al risultato finale, abbiamo espresso N in funzione della temperatura di condensazione T_0. Per cui,

$$\frac{N_0\left(T = \frac{T_0}{3}\right)}{N} = 1 - 3^{-5/2} \approx 0.936.$$

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

$$N = 2\int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon\ G(\epsilon) = \frac{2(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{9ah^3} \int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon\ \epsilon^{3/2}\theta(\epsilon) = \frac{4(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{45ah^3}\epsilon_F^{5/2}\theta(\epsilon_F)\ ,$$

dove il fattore 2 è dovuto alla degenerazione di spin.

3.b) l valore medio di r^3 a temperatura nulla è dato da

$$\langle r^3\rangle = \frac{2}{N}\int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\ G(\epsilon, r) r^3,$$

dove

$$G(\epsilon, r) = \int \frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{h^3} \delta\left[H(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \epsilon\right] \delta(|\mathbf{q}| - r) = \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{2h^3} r^2\sqrt{\epsilon - ar^3}\ \theta(\epsilon - ar^3)$$

(vedi punto 2.a). Si ottiene dunque

$$\begin{aligned}\langle r^3\rangle &= \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{Nh^3}\int_0^{\epsilon_F}\mathrm{d}\epsilon\int_0^{\infty}\mathrm{d}r\; r^5\sqrt{\epsilon-ar^3}\;\theta(\epsilon-ar^3) = \\ &= \frac{(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{3Nh^3a^2}\int_0^{\epsilon_F}d\epsilon\;\theta(\epsilon)\int_0^{\epsilon}dy\;(\epsilon-y)\sqrt{y} = \\ &= \frac{4(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{45Nh^3a^2}\;\frac{2}{7}\epsilon_F^{7/2}\theta(\epsilon_F).\end{aligned}$$

Sostituendo il valore di N trovato al punto precedente troviamo infine

$$\langle r^3\rangle = \frac{2}{7}\frac{\epsilon_F}{a}.$$

3.c) Sulla superficie di Fermi deve essere $\epsilon_F = \frac{p^2}{2m} + ar^3$. Il valore massimo di r^3 si ottiene quando $p = |\mathbf{p}| = 0$, dunque

$$\epsilon_F = ar^3_{max} \quad\rightarrow\quad r^3_{max} = \frac{\epsilon_F}{a}.$$