Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 08.09.2020

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle ultrarelativistiche identiche non interagenti di massa m vincolate a muoversi sull'asse reale. Fissato un sistema di riferimento lungo l'asse con origine nel punto O, la Hamiltoniana di singola particella è data da:

$$H(p,q) = c|p| + V(q), \qquad p,q \in \mathbb{R},$$

dove q è la distanza dal punto O, ed

$$V(q) = \begin{cases} -V_0 & 0 < q \le a; \\ V_0\big[q/a - 1\big] & a \le q < 2a; \\ +\infty & q < 0, q \ge 2a; \end{cases}$$

con V_0 ed a costanti positive di opportune dimensioni. Il sistema è in equilibrio termodinamico con una bagno termico a temperatura T.

1. Assumendo che si possa applicare la statistica classica:
   - 1.a) Calcolare l'energia media per particella in funzione della temperatura e dei parametri del sistema.
   - 1.b) Calcolare l'entropia S in funzione della temperatura e dei parametri del sistema.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 1:
   - 2.a) Mostrare l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.b) Determinare il numero medio di particelle contenute rispettivamente nella regione $0 < q < a$ e nella regione $a < q < 2a$ nel limite di alta temperatura e bassa densità.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2:
   - 3.a) Calcolare il numero di particelle in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F.
   - 3.b) Calcolare il valore medio $\langle q \rangle$ a temperatura nulla in funzione dell'energia di Fermi ϵ_F.

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

- **Risposte**

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

1.a) L'energia media del sistema si può ottenere dalla funzione di partizione canonica $Z(T,V,N)$ utilizzando la relazione $E = -(\partial/\partial\beta)_{V,N} \ln Z(T,V,N)$.

Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z(T,V,N) = Z_1(T,V)^N/N!$, dove:

$$Z_1(T,V) = \int \frac{dp\,dq}{h}\, e^{-\beta H(p,q)} = \frac{2a}{h\beta^2 c V_0}\left[1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}\right].$$

Ne segue:

$$\boxed{E/N = 2\beta^{-1} - V_0 \frac{e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}}{1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}}.}$$

1.b) L'entropia $S(T,V,N)$ si può ottenere dalla relazione $S = -(\partial F/\partial T)_{V,N}$, dove $F(T,V,N) = -T\ln Z(T,V,N)$ è l'energia libera del sistema e $Z(T,V,N)$ la funzione di partizione canonica.

Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z(T,V,N) = Z_1(T,V)^N/N!$, dove $Z_1(T,V)$ è la funzione di partizione canonica di singola particella. Utilizzando i risultati del punto precedente si ha:

$$\boxed{S(T,V,N)/N = -\beta V_0 \frac{e^{-\beta V_0} + e^{\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}}{1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}} + \ln\left[\frac{2ae^3}{Nh\beta^2 c V_0}\left[1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0\, e^{\beta V_0}\right]\right].}$$

2.a) La condizione affinchè esista la condensazione di Bose-Einstein è:

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

dove $\epsilon_\mathrm{min} = -V_0$ e

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \sum_{\sigma=0,\pm1} \int \frac{dp\,dq}{h}\, \delta\big(\epsilon - H(p,q,\sigma)\big) \\ &= \frac{6a}{hc}\Big[\theta(\epsilon+V_0) + \frac{\epsilon}{V_0}\,\theta(\epsilon) - \big(\epsilon/V_0 - 1\big)\,\theta(\epsilon - V_0)\Big]. \end{aligned}$$

Di conseguenza

$$\boxed{\lim_{\mu\to -V_0^-} \int_{-V_0}^{\infty} d\epsilon\, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} = \infty \quad \Rightarrow \text{Non esiste condensazione BE.}}$$

poichè l'integrando ha una singolarità non integrabile all'estremo inferiore. In contributo degli altri due integrali è finito.

2.b) In assenza di condensazione di Bose-Einstein il numero medio di particelle del sistema è dato da:

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

mentre in numero medio di particelle contenute nelle regioni $A: 0 < q \le a$ e $B: a \le q < 2a$ è dato rispettivamente da:

$$N_A = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \int_0^a dq\, \frac{G(\epsilon,q)}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1},$$

$$N_B = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \int_a^{2a} dq\, \frac{G(\epsilon,q)}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} = N - N_A,$$

dove

$$G(\epsilon, q) = \sum_{\sigma=0,\pm1} \int \frac{dp\,dq'}{h}\,\delta\big(\epsilon - H(p, q', \sigma)\big)\,\delta(q' - q) = 3 \times \frac{2}{hc}\theta(\epsilon - V(q)).$$

Nel limite di alta temperatura e bassa densità si ha $z \ll 1$, di conseguenza

$$N \simeq z \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} + O(z^2) = \frac{6az}{hc\beta^2 V_0}\left[1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0 e^{\beta V_0}\right] + O(z^2), \qquad z \ll 1,$$

$$N_A \simeq z \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\; e^{-\beta\epsilon} \int_0^a dq\, G(\epsilon, q) + O(z^2) = \frac{6za}{hc\beta}\, e^{\beta V_0}, \qquad z \ll 1,$$

da cui segue:

$$\boxed{N_A \simeq N\, \frac{\beta V_0\, e^{\beta V_0}}{1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0 e^{\beta V_0}} + O(z), \qquad z \ll 1,}$$

e

$$\boxed{N_B = N - N_A \simeq N\, \frac{1 - e^{\beta V_0}}{1 - e^{-\beta V_0} + \beta V_0 e^{\beta V_0}} + O(z), \qquad z \ll 1.}$$

3.a) A $T = 0$ si ha

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

dove, usando i risultati del punto 2.a),

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \sum_{\sigma=\pm1/2} \int \frac{dp\,dq}{h}\,\delta\big(\epsilon - H(p, q, \sigma)\big) \\ &= \frac{4a}{hc}\Big[\theta(\epsilon + V_0) + \frac{\epsilon}{V_0}\,\theta(\epsilon) - \big(\epsilon/V_0 - 1\big)\,\theta(\epsilon - V_0)\Big]. \end{aligned}$$

Di conseguenza:

$$\boxed{N = \frac{4a}{hc}\left[(\epsilon_{\mathrm{F}} + V_0)\,\theta(\epsilon_{\mathrm{F}} + V_0) + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}^2}{2V_0}\,\theta(\epsilon_{\mathrm{F}}) - \frac{(\epsilon_{\mathrm{F}} - V_0)^2}{2V_0}\,\theta(\epsilon_{\mathrm{F}} - V_0)\right].}$$

3.b) Il valore medio $\langle q\rangle$ a $T = 0$ è dato da

$$\langle q\rangle = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dq\, G(\epsilon, q)\, q,$$

dove

$$G(\epsilon, q) = \frac{4}{hc}\theta(\epsilon - V(q)),$$

ed N è dato al punto precedente.

Dobbiamo considerare tre casi:

- $\epsilon_{\mathrm{F}} \le 0$:

$$\boxed{\langle q\rangle = \frac{4}{hcN}\int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon\, \theta(\epsilon + V_0) \int_0^a dq\, q = \frac{a}{2}, \qquad -V_0 < \epsilon_{\mathrm{F}} \le 0.}$$

- $0 \leq \epsilon_{\mathrm{F}} \leq V_0$:

$$\langle q \rangle = \frac{4}{hcN} \left[\int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, \theta(\epsilon + V_0) \int_0^a dq \, q + \int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, \theta(\epsilon) \int_a^{a(\epsilon_{\mathrm{F}}/V_0+1)} dq \, q \right]$$

da cui

$$\boxed{\langle q \rangle = \frac{a}{2} \frac{\epsilon_{\mathrm{F}} + V_0 + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}^3}{V_0^2} + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}^2}{V_0}}{\epsilon_{\mathrm{F}} + V_0 + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}^2}{2V_0}}, \qquad 0 \leq \epsilon_{\mathrm{F}} \leq V_0.}$$

- $\epsilon_{\mathrm{F}} \geq V_0$:

$$\langle q \rangle = \frac{4}{hcN} \left[\int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, \theta(\epsilon + V_0) \int_0^a dq \, q + \int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \, \theta(\epsilon) \int_a^{2a} dq \, q \right]$$

per cui sostituendo $\epsilon_{\mathrm{F}} = V_0$ nel risultato precedente, cosicchè l'estremo superiore diventi uguale a $2a$, si ha

$$\boxed{\langle q \rangle = \frac{4}{5} a, \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} \geq V_0.}$$