Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 03.05.2021

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle identiche e non interagenti contenute in una sfera di raggio $2R$. Fissato un sistema di riferimento con origine nel centro della sfera, la Hamiltoniana di singola particella è data da:

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

con

$$V(r) = \begin{cases} V_0\big[1 - (r/R)^3\big] & 0 \le r < 2^{1/3}\, R; \\ -V_0 & 2^{1/3} R \le r < 2R; \\ +\infty & q \ge 2R; \end{cases}$$

dove $r = |\boldsymbol{q}|$ è la distanza dal centro della sfera, ed V_0 e 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 il potenziale chimico $\mu(T, V, N)$ in funzione della temperatura e dei parametri del sistema.
   - 1.b) Indicato con N_a ed N_b rispettivamente il numero di particelle con $r < 2^{1/3}R$ ed il numero di particelle con $r \ge 2^{1/3}R$, calcolare il rapporto N_a/N_b in funzione della temperatura e determinare il valore minimo e massimo che può assumere.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:
   - 2.a) Discutere l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
   - 2.b) Scrivere l'espressione dell'energia media per particella E/N nel limite di alta temperatura. Utilizzare l'espressione trovata per determinare il limite $\lim_{T\to\infty} c_{\mathrm{V}}$ del calore specifico a volume costante c_{V} per $T \to \infty$.
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 rapporto N_a/N_b, con N_a ed N_b definiti al punto 1.b), 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) Il potenziale chimico $\mu(T,V,N)$ del sistema si può ottenere utilizzando la relazione $\mu = (\partial/\partial N)|_{T,V} F(T,V,N)$, dove $F(T,V,N) = -T \ln Z(T,V,N)$, con $Z(T,V,N)$ la funzione di partizione canonica, è l'energia libera. 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 di singola particella. Di conseguenza,

$$\mu(T,V,N) = -T \ln \frac{Z_1(T,V)}{N},$$

con

$$Z_1 = \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{16\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0 \beta^2}\, e^{\beta V_0} \left[1 - e^{-2\beta V_0} + 6\beta V_0\right].$$

Otteniamo così:

$$\boxed{\mu(T,V,N) = -T \ln \left[\frac{16\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0 \beta^2 N}\, e^{\beta V_0} \left[1 - e^{-2\beta V_0} + 6\beta V_0\right]\right].}$$

1.b) Scomponendo il sistema in due sotto-sistemi aperti in equilibrio termodinamico tra di loro, il primo costituito dalla sfera di raggio $2^{1/3}R$ di volume V_a contenente

$$N_a = e^{\beta\mu} Z_{a,1}(T,V_a),$$

particelle, ed il secondo costituito dalla corona sferica di raggio interno $2^{1/3}R$ e raggio esterno $2R$ di volume V_b, contenente

$$N_b = e^{\beta\mu} Z_{b,1}(T,V_b),$$

particelle, si ha

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{Z_{a,1}(T,V_a)}{Z_{b,1}(T,V_b)}.$$

Utilizzando i risultati del punto precedente, segue

$$Z_{a,1} = \int_{\boldsymbol{q}\in V_a} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{16\pi^2 R^3}{9h^3 a\beta} \left[\frac{e^{\beta V_0} - e^{-\beta V_0}}{\beta V_0}\right],$$

e

$$Z_{b,1} = \int_{\boldsymbol{q}\in V_b} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{16\pi^2 R^3}{9h^3 a\beta} \left[6\, e^{\beta V_0}\right],$$

per cui:

$$\boxed{\frac{N_a}{N_b} = \frac{1 - e^{-2\beta V_0}}{6\,\beta V_0}.}$$

Il rapporto N_a/N_b è una funzione monotona crescente della temperatura con

$$\boxed{\min \frac{N_a}{N_b} = \lim_{\beta\to\infty} \frac{1 - e^{-2\beta V_0}}{6\,\beta V_0} = 0.}$$

e

$$\boxed{\max \frac{N_a}{N_b} = \lim_{\beta\to 0} \frac{1 - e^{-2\beta V_0}}{6\,\beta V_0} = \frac{1}{3},}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) \\ &= \frac{16\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0}\Big[(\epsilon + 7V_0)\,\theta(\epsilon+V_0) - (\epsilon - V_0)\,\theta(\epsilon - V_0)\Big]. \end{aligned}$$

Di conseguenza

$$\boxed{\lim_{\mu\to -V_0^-} \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon+7V_0}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} - \int_{V_0}^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon - V_0}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}. = \infty \quad \Rightarrow \text{ Non Esiste condensazione BE.}}$$

poichè l'integrando del primo integrale ha una singolarità non integrabile all'estremo inferiore se $\mu = -V_0$.

2.b) In assenza di condensazione di BE il numero medio di particelle e l'energia media del sistema sono dati per ogni temperatura T da

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

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

dove $z = e^{\beta\mu}$ è la fugacità. Nel limite di alta temperatura $z \ll 1$, per cui al primo ordine in z otteniamo:

$$N \sim z\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}, \quad E \sim z\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}, \qquad z \ll 1,$$

Di conseguenza

$$E/N \sim \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon}, \qquad z \ll 1.$$

Sostituendo l'espressione di $G(\epsilon)$ nel limite $\beta \ll 1$ si ha

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} \sim \frac{128\pi^2 R^3}{9h^3 a}\, \beta^{-1}\,\big[1 + O(\beta)\big], \qquad \beta \ll 1,$$

per cui

$$\boxed{E/N \sim T + O(1). \qquad T \gg 1,}$$

e quindi

$$\boxed{\lim_{T\to\infty} c_{\mathrm{V}} = \lim_{T\to\infty} \frac{\partial}{\partial T}\Big|_{V,N} E/N = 1.}$$

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),

$$G(\epsilon) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) = \frac{32\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0} \Big[(\epsilon + 7V_0)\, \theta(\epsilon + V_0) - (\epsilon - V_0)\, \theta(\epsilon - V_0)\Big].$$

Di conseguenza

$$N = \frac{32\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0} \left[\left[\frac{\epsilon_F^2}{2} + 7V_0\epsilon_F + \frac{13V_0^2}{2}\right]\theta(\epsilon_F + V_0) - \left[\frac{\epsilon_F^2}{2} - V_0\epsilon_F + \frac{V_0^2}{2}\right] \theta(\epsilon_F - V_0)\right],$$

ovvero:

$$\boxed{N = \begin{cases} \dfrac{32\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0} \left[\dfrac{\epsilon_F^2}{2} + 7V_0\epsilon_F + \dfrac{13V_0^2}{2}\right], & -V_0 \le \epsilon_F \le V_0; \\[2ex] \dfrac{32\pi^2 R^3}{9h^3 a V_0} \Big[8V_0\epsilon_F + 6V_0^2\Big], & \epsilon_F \ge V_0. \end{cases}}$$

3.b) Usando $N_a + N_b = N$ abbiamo

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{N - N_b}{N_b} = \frac{N}{N_b} - 1.$$

dove a $T = 0$

$$N_b = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon\, G_b(\epsilon),$$

con

$$G_b(\epsilon) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int_{\boldsymbol{q}\in V_b} \frac{d^3p\, d^3q'}{h^3}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) = \frac{192\pi^2 R^3}{9h^3 a}\, \theta(\epsilon + V_0).$$

Per cui, usando l'espressione di N trovata al punto 3.a), si ha

$$\boxed{\frac{N_a}{N_b} = \begin{cases} \dfrac{1}{12V_0}\big(\epsilon_F + V_0\big), & -V_0 \le \epsilon_F \le V_0; \\[2ex] \dfrac{\epsilon_F}{3\,(\epsilon_F + V_0)}, & \epsilon_F \ge V_0. \end{cases}}$$