Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 25.06.2021

Si consideri un gas perfetto ultrarelativistico costituito da N particelle identiche e non interagenti libere di muoversi su un piano soggette ad un potenziale centrale. La Hamiltoniana di singola particella è data da:

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = c|\boldsymbol{p}| + V(|\boldsymbol{q}|), \qquad \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^2,$$

con

$$V(q) = \begin{cases} -V_0 & 0 \le q < a; \\ K(q/a - 1) & q > a \end{cases}$$

dove $q = |\boldsymbol{q}|$ è la distanza dall'origine del potenziale centrale, ed V_0, K 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 E/N in funzione della temperatura e dei parametri del sistema. Si chiede inoltre l'andamento di E/N nel limite di alta temperatura $T \gg 1$.

   1.b) Calcolare la probabilità $\mathcal{P}(n; N)$ che vi siano n particelle con energia potenziale negativa. Si chiede inoltre di mostrare che nel limite $N \gg 1$ la probabilità che la frazione n/N di particelle con energia potenziale negativa differisca dalla probabilità p_0 di trovare una particella con energia potenziale negativa è esponenzialmente piccola in N.

2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin 0:

   2.a) Mostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.

   2.b) Scrivere l'espressione dell'energia media E per temperature inferiori alla temperatura di condensazione. Utilizzare l'espressione trovata per determinare l'andamento della capacità termica a volume costante C_{V} nel limite $T \ll V_0$.

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) Determinare l'energia del sistema a temperatura nulla in funzione dell'energia di Fermi ϵ_{F}. Utilizzare l'espressione trovata per calcolare l'energia media per particella per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 0$.

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

1.a) L'energia media del sistema in funzione della temperatura si può ottenere dalla relazione $E(T, V, N) = -(\partial/\partial\beta)|_{V,N} \ln Z(T, V, N)$, dove $Z(T, V, N)$ è 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 di singola particella:

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

Di conseguenza:

$$E(T, V, N)/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big|_V \left[\ln\beta^{-2} + \ln\Big[e^{\beta V_0} + \frac{2}{\beta K}\Big(\frac{1}{\beta K} + 1\Big)\Big]\right]$$

ovvero

$$\boxed{E(T, V, N)/N = 2T + \frac{2T^2/K + 4T^3/K^2 - V_0 e^{\beta V_0}}{2T/K + 2T^2/K^2 + e^{\beta V_0}}.}$$

Nel limite di alta temperatura si ha

$$\boxed{E(T, V, N)/N \sim 2T + \frac{4T^3/K^2}{2T^2/K^2} = 4T, \qquad T \gg 1,}$$

in accordo con il teorema di equipartizione.

1.b) Essendo le particelle indipendenti la probabilità $\mathcal{P}(n; N)$ è data dalla distribuzione binomiale:

$$\mathcal{P}(n; N) = \frac{N!}{n!(N-n)!}\, p_0^n (1 - p_0)^{N-n},$$

dove p_0 è la probabilità che una particella abbia energia potenziale negativa:

$$p_0 = \frac{1}{Z_1}\int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})}\, \theta(-V(\boldsymbol{q})) = \frac{\int_0^{+\infty} dq\, q\, e^{-\beta V(q)}\, \theta(-V(q))}{\int_0^{+\infty} dq\, q\, e^{-\beta V(q)}} = \frac{e^{\beta V_0}}{e^{\beta V_0} + \frac{2}{\beta K}\big(1 + \frac{1}{\beta K}\big)}.$$

Sostituendo otteniamo

$$\boxed{\mathcal{P}(n; N) = \frac{N!}{n!(N-n)!}\, \frac{e^{n\beta V_0}\left[\frac{2}{\beta K} + \frac{2}{\beta^2 K^2}\right]^{N-n}}{\left[e^{\beta V_0} + \frac{2}{\beta K} + \frac{2}{\beta^2 K^2}\right]^N}.}$$

Nel limite $N \gg 1$ la distribuzione binomiale è fortemente concentrata intorno al valore medio $\overline{n} = Np_0$ e può essere approssimata da una distribuzione Gaussiana con valor medio $\overline{n}$ e varianza $\sigma_n^2 = \overline{n}$. Ne segue che

$$\boxed{\mathcal{P}(n/N) \sim \sqrt{\frac{N}{2\pi p_0}}\, \exp\left[-\frac{N}{2p_0}(n/N - p_0)^2\right], \qquad N \gg 1.}$$

2.a) Per un sistema di 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 ($\epsilon = \epsilon_{\rm min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\rm min}$):

$$\tilde{N}(T, V, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}, \qquad \mu \le \epsilon_{\rm min} = -V_0,$$

dove $G(\epsilon)$ è la densità degli stati di singola particella:

$$
\begin{aligned}
G(\epsilon) &= \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) \\
&= \frac{2\pi^2 a^2}{h^2c^2}\Big[(\epsilon+V_0)\,\theta(\epsilon+V_0) + \frac{\epsilon^2}{K}\Big(1+\frac{\epsilon}{3K}\Big)\theta(\epsilon)\Big].
\end{aligned}
$$

La condizione affinchè esista la condensazione di Bose-Einstein è:

$$\tilde{N}(T, V, \epsilon_{\min}) < \infty,$$

ovvero

$$\tilde{N}(T,V,-V_0) = \frac{2\pi^2a^2}{h^2c^2}\left[\int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon+V_0}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} + \frac{1}{K}\int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^2+\epsilon^3/3K}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1}\right] < +\infty.$$

L'integrando del secondo integrale è regolare in tutto il dominio di integrazione. L'integrando del primo integrale presenta invece una singolarità integrabile all'estremo inferiore,

$$\frac{\epsilon+V_0}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} \sim \beta^{-1} \qquad \epsilon \to -V_0^+.$$

di conseguenza l'integrale è finito e ne concludiamo che

$$\boxed{\lim_{\mu\to -V_0^-} \tilde{N}(T,V,\mu) = \lim_{\mu\to -V_0^-} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} < \infty \quad \Rightarrow \text{Esiste condensazione BE.}}$$

2.b) L'energia del sistema sotto la temperatura di condensazione è data da

$$E = -N_0V_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{\epsilon\, G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1},$$

dove il primo termine è il contributo delle particelle nello stato condensato ed il secondo il contributo delle particelle nello stato normale. Usando li risultati del punto precedente

$$
\begin{aligned}
E &= -NV_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)\,(\epsilon+V_0)}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} \\
&= -NV_0 + \frac{2\pi^2a^2}{h^2c^2}\left[\int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{(\epsilon+V_0)^2}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} + \frac{1}{K}\int_0^{+\infty} d\epsilon\, \frac{(\epsilon+V_0)(\epsilon^2+\epsilon^3/3K)}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1}\right].
\end{aligned}
$$

ovvero

$$\boxed{E = -NV_0 + \frac{2\pi^2a^2}{h^2c^2}\,T^3\left[2\,\zeta(3) + \frac{e^{-\beta V_0}}{K}\Big[V_0\, I_2(\beta V_0) + T\Big(1+\frac{V_0}{3K}\Big)\, I_3(\beta V_0) + \frac{T^2}{3K} I_4(\beta V_0)\Big]\right],}$$

dove

$$I_n(\beta V_0) = \int_0^{+\infty} dy\, \frac{y^n\, e^{-y}}{1-e^{-y-\beta V_0}}.$$

Nel limite $T \ll V_0$ si ha $e^{-\beta V_0} \ll 1$, di conseguenza il contributo del secondo integrale è $O(e^{-\beta V_0})$ per cui:

$$E \sim -NV_0 + \frac{4\pi^2a^2}{h^2c^2} T^3\left[\zeta(3) + O(e^{-\beta V_0})\right]. \qquad T \ll V_0,$$

da cui segue facilmente

$$\boxed{C_{\mathrm{V}} = \frac{\partial}{\partial T}\Big|_{V,N} E \sim \frac{12\pi^2a^2}{h^2c^2}\zeta(3)\, T^2 + O(e^{-\beta V_0}) \qquad T \ll V_0.}$$

3.a) Per un sistema fermionico il numero di particelle a $T = 0$ è dato da

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

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

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})\big) \\ &= 2 \times \frac{2\pi^2 a^2}{h^2 c^2} \Big[(\epsilon + V_0)\, \theta\big(\epsilon + V_0\big) + \frac{\epsilon^2}{K}\Big(1 + \frac{\epsilon}{3K}\Big)\theta(\epsilon)\Big]. \end{aligned}$$

Di conseguenza

$$N = \frac{4\pi^2 a^2}{h^2 c^2} \left[\frac{1}{2}(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2 \theta(\epsilon_\mathrm{F} + V_0) + \frac{\epsilon_\mathrm{F}^3}{3K}\Big(1 + \frac{\epsilon_\mathrm{F}}{4K}\Big)\, \theta(\epsilon_\mathrm{F})\right].$$

ovvero:

$$\boxed{N = \begin{cases} \dfrac{2\pi^2 a^2}{h^2 c^2}(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2, & -V_0 \le \epsilon_\mathrm{F} \le 0; \\[2ex] \dfrac{2\pi^2 a^2}{h^2 c^2}\Big[(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2 + \dfrac{2\epsilon_\mathrm{F}^3}{3K} + \dfrac{\epsilon_\mathrm{F}^4}{6K^2}\Big], & \epsilon_\mathrm{F} \ge 0. \end{cases}}$$

3.b) Usando i risultati del punto precedente l'energia del sistema fermionico a temperatura nulla è data da

$$\begin{aligned} E &= \int_{-\infty}^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon\, \epsilon\, G(\epsilon) \\ &= \frac{2\pi^2 a^2}{3h^2 c^2} \left[(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2 (2\epsilon_\mathrm{F} - V_0)\theta\big(\epsilon_\mathrm{F} + V_0\big) + \frac{\epsilon_\mathrm{F}^4}{K}\Big(\frac{3}{2} + \frac{2\epsilon_\mathrm{F}}{5K}\Big)\theta(\epsilon_\mathrm{F})\right], \end{aligned}$$

ovvero:

$$\boxed{E = \begin{cases} \dfrac{2\pi^2 a^2}{3h^2 c^2}\,(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2 (2\epsilon_\mathrm{F} - V_0) & -V_0 \le \epsilon_\mathrm{F} \le 0; \\[2ex] \dfrac{2\pi^2 a^2}{3h^2 c^2}\,\Big[(\epsilon_\mathrm{F} + V_0)^2 (2\epsilon_\mathrm{F} - V_0) + \dfrac{\epsilon_\mathrm{F}^4}{K}\Big(\dfrac{3}{2} + \dfrac{2\epsilon_\mathrm{F}}{5K}\Big)\Big], & \epsilon_\mathrm{F} \ge 0. \end{cases}}$$

Per $\epsilon_\mathrm{F} = 0$ si ha

$$E = -\frac{2\pi^2 a^2}{3h^2 c^2}\, V_0^3,$$

mentre dal risultato del punto precedente

$$N = \frac{2\pi^2 a^2}{h^2 c^2} V_0^2,$$

di conseguenza

$$\boxed{E/N = -\frac{V_0}{3}, \qquad \epsilon_\mathrm{F} = 0.}$$