Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 07.09.2021

Si consideri un gas perfetto di costituito da N particelle identiche di massa m non interagenti libere di muoversi su un piano e soggette ad un potenziale centrale, con Hamiltoniana di singola particella:

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

dove $p = |\boldsymbol{p}|$ e $q = |\boldsymbol{q}|$ distanza dall'origine del potenziale centrale:

$$V(q) = \begin{cases} 0 & 0 \le q < R; \\ \alpha(q-R)^2 & q > R. \end{cases}$$

La costante α è positiva e 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) Indicata con $\mathcal{P}(p_x > 0, |\boldsymbol{q}| < R)$ la probabilità che una particella abbia impulso positivo lungo l'asse x e che sia confinata nella regione $|\boldsymbol{q}| < R$, determinare la temperatura T^* tale che $\mathcal{P}(p_x > 0, |\boldsymbol{q}| < R) = 1/4$.

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

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

   2.b) Calcolare il valore medio $\langle q \rangle$ del modulo della distanza dall'origine del potenziale centrale nel limite di alta temperatura $T \gg 1$.

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 $\epsilon_{\rm F}$.

   3.b) Calcolare il valore medio $\langle q \rangle$ del modulo della distanza dall'origine del potenziale centrale in funzione dell'energia di Fermi.

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

<u>Nota</u>: Al punto 2.b) è sufficiente determinare il primo termine del valore medio $\langle q \rangle$ in funzione di T.

- **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 utilizzando la 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:

$$\begin{aligned} Z_1(T,V) = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} &= \frac{1}{h^2} \int dp^2\, e^{-\beta p^2/2m} \int_0^{+\infty} 2\pi q\, dq\, e^{-\beta V(q)} \\ &= \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2 \beta} \left[1 + \sqrt{\frac{\pi}{\alpha R^2 \beta}} + \frac{1}{\alpha R^2 \beta} \right]. \end{aligned}$$

Di conseguenza:

$$\boxed{E(T,V,N)/N = \frac{T + \frac{3}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha R^2}}\, T^{3/2} + \frac{2}{\alpha R^2} T^2}{1 + \sqrt{\frac{\pi T}{\alpha R^2}} + \frac{T}{\alpha R^2}} = T \frac{1 + \frac{3}{2}\sqrt{\dfrac{\pi T}{\alpha R^2}} + 2\dfrac{T}{\alpha R^2}}{1 + \sqrt{\frac{\pi T}{\alpha R^2}} + \frac{T}{\alpha R^2}}}.$$

Nel limite di alta temperatura si ha

$$\boxed{E(T,V,N)/N \sim 2T + O\big(T^{1/2}\big), \qquad T \gg 1,}$$

in accordo con il teorema di equipartizione.

1.b) Essendo le particelle indipendenti la probabilità $\mathcal{P}(p_x > 0, |\boldsymbol{q}| < R)$ è data da

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(p_x > 0, |\boldsymbol{q}| < R) &= \frac{1}{Z_1} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} \theta(p_x)\, \theta(R - q) \\ &= \frac{\pi^2 m R^2}{Z_1 h^2 \beta} = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + \sqrt{\dfrac{\pi T}{\alpha R^2}} + \dfrac{T}{\alpha R^2}}. \end{aligned}$$

Ponendo $t = \sqrt{T/\alpha R^2}$ la condizione $\mathcal{P}(p_x > 0, |\boldsymbol{q}| < R) = 1/4$ fornisce l'equazione

$t^2 + \sqrt{\pi}\, t - 1 = 0.$

Scartando la soluzione negativa, non fisica, otteniamo

$$\boxed{T^* = \frac{\alpha R^2}{4} \left[\sqrt{\pi + 4} - \sqrt{\pi} \right]^2 = \frac{\alpha R^2}{2} \left[\pi + 2 - \sqrt{\pi(\pi + 4)} \right]}$$

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 ($\epsilon = \epsilon_{\rm min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\rm min}$) dato da,

$$\tilde{N}(T,V,\mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}, \qquad \mu \le \epsilon_{\rm min} = 0.$$

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

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) \\ &= \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2} \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}} \right)^2 \theta(\epsilon). \end{aligned}$$

I bosoni hanno spin 0 per cui non vi è contributo dalle variabili di spin. Di conseguanza per $\mu = 0$ si ha

$$\tilde{N}(T,V,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon}-1} = \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2} \int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1} \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}}\right)^2 .$$

L'integrando presenta una singolarità non integrabile all'estremo inferiore,

$$\frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1} \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}}\right)^2 \sim \frac{1}{\beta\epsilon} \qquad \epsilon \to 0^+.$$

e l'integrale diverge e quindi

$$\boxed{\lim_{\mu\to 0^-} \tilde{N}(T,V,\mu) = \lim_{\mu\to 0^-} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, \frac{G(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} = \infty \quad \Rightarrow \text{ NON Esiste condensazione BE.}}$$

2.b) Il valore medio $\langle q \rangle$ è dato da

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

dove dal punto precedente

$$G(\epsilon,q) = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \, q \, \theta\big(\epsilon - V(q)\big),$$

è il numero di stati di singola particella con energia ϵ e modulo $|\boldsymbol{q}| = q$.
Nel limite di alta temperature si ha $z \ll 1$, di conseguenza al primo ordine in z si ha

$$\langle q \rangle \sim \frac{z}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-\beta\epsilon} \int_0^{+\infty} dq \, G(\epsilon,q) \, q, \qquad T \gg 1,$$

dove

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-\beta\epsilon} \int_0^{+\infty} dq \, G(\epsilon,q) \, q &= \frac{4\pi^2 m R^3}{3h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-\beta\epsilon} \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}}\right)^3 \theta(\epsilon) \\
&= \frac{4\pi^2 m R^3}{3h^2\beta} \left[1 + 3\left(\frac{1}{\alpha R^2 \beta}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} + 3\frac{1}{\alpha R^2\beta} + \left(\frac{1}{\alpha R^2\beta}\right)^{3/2} \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right] \\
&\sim \frac{\pi^2 m R^3 \sqrt{\pi}\, T}{h^2} \left(\frac{T}{\alpha R^2}\right)^{3/2}, \qquad T \gg 1.
\end{aligned}$$

In questo stesso limite si ha

$$\begin{aligned}
N = \tilde{N}(T,V,z) &\sim z \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-\beta\epsilon} \, G(\epsilon) \\
&= \frac{2\pi^2 m R^2}{h^2\beta} \left[1 + \left(\frac{\pi}{\alpha R^2\beta}\right)^{1/2} + \frac{1}{\alpha R^2\beta}\right], \\
&\sim \frac{2\pi^2 m R^2 T}{h^2} \, \frac{T}{\alpha R^2}, \qquad T \gg 1.
\end{aligned}$$

Sostituendo nell'espressione di $\langle q \rangle$ otteniamo,

$$\boxed{\langle q \rangle \sim \frac{R}{2} \sqrt{\frac{\pi T}{\alpha R^2}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi T}{\alpha}}, \qquad T \gg 1.}$$

3.a) Per un sistema composto di Fermioni di spin 1/2 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),

$$G(\epsilon) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2} \, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})\big)$$

$$\frac{4\pi^2 m R^2}{h^2} \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}}\right)^2 \theta(\epsilon).$$

Di conseguenza

$$\boxed{N = \frac{4\pi^2 m R^2}{h^2} \epsilon_{\mathrm{F}} \left[1 + \frac{4}{3}\sqrt{\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}} + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{2\alpha R^2}\right], \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} \geq 0.}$$

3.b) Il valore medio $\langle q \rangle$ in funzione dell'energia di Fermi è dato da

$$\langle q \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \int_{0}^{+\infty} dq \, G(\epsilon, q) \, q.$$

Utilizzando i risultati del punto 2.b), e ricordandosi del fattore 2 dovuto alla degenerazione dei spin, otteniamo

$$\begin{aligned}\langle q \rangle &= 2 \times \frac{4\pi^2 m R^3}{3h^2 N} \int_{-\infty}^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \left(1 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\alpha R^2}}\right)^3 \theta(\epsilon). \\ &= \frac{8\pi^2 m R^3}{3h^2 N} \epsilon_{\mathrm{F}} \left[1 + 2\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}\right)^{1/2} + \frac{3}{2}\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2} + \frac{2}{5}\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}\right)^{3/2}\right].\end{aligned}$$

Sostituendo ora l'espressione di N in funzione di ϵ_{F} travata al punto 3.a), otteniamo

$$\boxed{\langle q \rangle = \frac{2R}{3} \frac{1 + 2\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}\right)^{1/2} + \frac{3}{2}\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2} + \frac{2}{5}\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}\right)^{3/2}}{1 + \frac{4}{3}\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\alpha R^2}\right)^{1/2} + \frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{2\alpha R^2}}.}$$