Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti, I. Giardina e M. Grilli
Compito del 11.11.2021

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

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

con

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

dove $p = |\boldsymbol{p}|$, $q = |\boldsymbol{q}|$ la distanza dall'origine del potenziale centrale e 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'entropia $S(T, V, N)$ del sistema.
   - 1.b) Determinare la temperatura T^* tale che la probabilità che particelle abbiano energia di singola particella ϵ positiva sia 4 volte la probabilità che la abbiano negativa.
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) Determinare l'energia media per particella nel limite di alta temperatura $T \gg 1$. Utilizzare l'espressione trovata per determinare l'andamento della capacità termica a volume costante C_V nel limite $T \gg 1$.
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 ϵ_F.
   - 3.b) Determinare l'energia del sistema a temperatura nulla per $\epsilon_\mathrm{F} = -V_0/2$.

- 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'entropia $S(T,V,N)$ del sistema si può ottenere dalla relazione $S = \beta(E - F)$, dove $E = -(\partial/\partial\beta)_{V,N} \ln Z$ e $F = -T \ln Z$. Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z(T,V,N) = Z_1(T,V)^N/N!$, dove $Z_1(T,V)$

$$Z_1 = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} = \frac{2\pi^2 m a^2}{h^2 V_0^2 \beta^3}\Big[(3\beta^2 V_0^2 + 2\beta V_0 - 2)e^{\beta V_0} + 2\Big].$$

Ne segue che:

$$E/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big|_{V,N} \ln\frac{Z_1 e}{N} = 3\beta^{-1} - V_0\, e^{\beta V_0} \frac{3\beta^2 V_0^2 + 8\beta V_0}{(3\beta^2 V_0^2 + 2\beta V_0 - 2)e^{\beta V_0} + 2},$$

per cui:

$$\boxed{S/N = \ln\left[\frac{2\pi^2 m a^2 e^4}{h^2 V_0^2 \beta^3}\Big[(3\beta^2 V_0^2 + 2\beta V_0 - 2)e^{\beta V_0} + 2\Big]\right] - \beta V_0\, e^{\beta V_0} \frac{3\beta^2 V_0^2 + 8\beta V_0}{(3\beta^2 V_0^2 + 2\beta V_0 - 2)e^{\beta V_0} + 2}.}$$

1.b) Indicando con $\mathcal{P}_+$ e $\mathcal{P}_-$ la probabilità che l'energia di singola particella sia rispettivamente positiva o negativa si ha $\mathcal{P}_+ = 4\mathcal{P}_-$ che con $\mathcal{P}_+ + \mathcal{P}_- = 1$ fornisce $\mathcal{P}_+ = 4/5$. Per particelle classiche indipendenti

$$\mathcal{P}_+ = \frac{1}{Z_1}\int_0^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon},$$

dove

$$G(\epsilon) = \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\big) = \frac{2\pi^2 m a^2}{h^2 V_0^2}\, \big[\big(4V_0^2 - \epsilon^2\big)\, \theta\big(\epsilon + V_0\big) + \epsilon^2\, \theta(\epsilon)\big)\big]\,.$$

ovvero

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi^2 m a^2}{h^2 V_0^2}\, \big[\big(4V_0^2 - \epsilon^2\big)\, \theta\big(\epsilon + V_0\big) + \epsilon^2\, \theta(\epsilon)\big)\big]\,.$$

Di conseguenza

$$\mathcal{P}_+ = \frac{4\beta^2 V_0^2}{(3\beta^2 V_0^2 + 2\beta V_0 - 2)e^{\beta V_0} + 2}.$$

Siccome

$$\lim_{\beta\to 0} \mathcal{P}_+ = 1, \qquad \lim_{\beta\to+\infty} \mathcal{P}_+ = 0,$$

esite la una temperatura T^* tale che $\mathcal{P}_+ = 4/5$. Ponendo $x = \beta V_0$ si ha

$$\boxed{T^* = V_0/x^*.}$$

dove x è soluzione dell'equazione:

$$5x^2 - 2 - e^x(3x^3 + 2x - 2) = 0.$$

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

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

il numero di particelle nello stato non-condensato. La condizione per l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein è:

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

Nel problema in questione $\epsilon_{\min} = -V_0$ e $G(\epsilon)$ è data al punto 1.b). Sostituendo si ha

$$\tilde{N}(T,V,-V_0) = \frac{2\pi^2 ma^2}{h^2 V_0^2}\left[\int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \frac{4V_0^2-\epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} + \int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1}\right].$$

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

$$\frac{4V_0^2-\epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon+V_0)}-1} \sim \frac{3V_0^2}{\beta(\epsilon+V_0)} \qquad \epsilon \to -V_0^+,$$

ne concludiamo

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

2.b) In assenza di condensazione di BE l'energia del sistema è data da

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

Nel limite $T \gg 1$ la fugacità z si annulla, per cui

$$E(T,z) \sim z \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, \epsilon \, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} + O(z^2), \qquad T \gg 1,\ z \ll 1.$$

Sostituendo l'espressione di $G(\epsilon)$ otteniamo

$$\begin{aligned} E(T,z) &\sim \frac{2\pi^2 ma^2 z}{h^2 V_0^2}\left[4V_0^2 \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \, \epsilon \, e^{-\beta\epsilon} - \int_{-V_0}^{0} d\epsilon \, \epsilon^3 \, e^{-\beta\epsilon}\right] + O(z^2) \\ &= \frac{8\pi^2 ma^2 z}{h^2}\left[T^2 + O(T)\right] + O(z^2) \qquad T \gg 1,\ z \ll 1. \end{aligned}$$

Dalla relazione

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

otteniamo

$$\begin{aligned} N(T,z) &\sim z \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, G(\epsilon)\, e^{-\beta\epsilon} + O(z^2) \\ &= \frac{2\pi^2 ma^2 z}{h^2 V_0^2}\left[4V_0^2 \int_{-V_0}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-\beta\epsilon} - \int_{-V_0}^{0} d\epsilon \, \epsilon^2 \, e^{-\beta\epsilon}\right] + O(z^2) \\ &= \frac{8\pi^2 ma^2 z}{h^2}\left[T + O(1)\right] + O(z^2) \qquad T \gg 1,\ z \ll 1. \end{aligned}$$

Sostituendo nell'espressione di $E(T,z)$ otteniamo

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

e

$$\boxed{C_V = \left.\frac{\partial}{\partial T}\right|_V E(T,V,N) \sim N + O(T^{-1}), \qquad T \gg 1.}$$

in accordo con il teorema di equipartizione.

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

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

dove, usando i risultati del punto 1.b),

$$G(\epsilon) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \frac{d^2p\, d^2q}{h^2}\, \delta\big(\epsilon - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})\big) = \frac{4\pi^2 m a^2}{h^2 V_0^2} \left[\big(4V_0^2 - \epsilon^2\big)\, \theta\big(\epsilon + V_0\big) + \epsilon^2\, \theta(\epsilon) \big) \right].$$

Di conseguenza

$$\boxed{N = \begin{cases} \dfrac{4\pi^2 m a^2}{3h^2 V_0^2} \Big[11V_0^3 + 12V_0^2 \epsilon_F - \epsilon_F^3 \Big], & -V_0 \leq \epsilon_F \leq 0; \\[2ex] \dfrac{4\pi^2 m a^2}{3h^2} \Big[11V_0 + 12\epsilon_F \Big] & \epsilon_F \geq 0. \end{cases}}$$

3.b) L'energia del sistema a temperatura nulla ed $\epsilon_F = -V_0/2$ è data da

$$E = \int_{-\infty}^{-V_0/2} d\epsilon\, \epsilon\, G(\epsilon) = \frac{4\pi^2 m a^2}{h^2 V_0^2} \int_{-V_0}^{-V_0/2} d\epsilon\, \epsilon\, (4V_0^2 - \epsilon^2)$$

che fornisce:

$$\boxed{E = -\frac{81\pi^2 m a^2 V_0^2}{16h^2}}$$

Dai risultati del punto 3.a) per $\epsilon_F = -V_0/2$

$$N = \frac{41\pi^2 m a^2 V_0}{6h^2}$$

di conseguenza

$$\boxed{E/N = -\frac{243}{328} N V_0.}$$