

Corso di Meccanica Statistica Compito del 6/9/2023

Proff. S. Caprara, I. Giardina e F. Sciortino

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle identiche di massa m , contenute nella regione piana bidimensionale $0 \leq x, y \leq L$ (x, y sono le coordinate cartesiane, con le dimensioni di una lunghezza), con Hamiltoniana di singola particella:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\gamma \sigma x}{L},$$

dove $\gamma > 0$ è un parametro dimensionale, $p^2 \equiv |\mathbf{p}|^2$, $\mathbf{q}$ è il vettore di componenti cartesiane x, y e σ è una variabile discreta adimensionale, corrispondente ad un grado di libertà interno delle particelle. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T .

1. Meccanica Statistica Classica

Assumendo che sia applicabile la statistica classica e che $\sigma = 0, \pm 1$:

- [3 punti] Calcolare l'energia interna per particella $u = U/N$ in funzione di T .
- [3 punti] Calcolare le probabilità P_0, P_{+1} e P_{-1} che σ assuma i valori indicati dal pedice, in funzione di T .
- [4 punti] Calcolare il valor medio di σ in funzione di T e determinare gli andamenti asintotici per $\gamma \ll \kappa_B T$ e $\gamma \gg \kappa_B T$.

2. Bosoni

Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni di spin $s = 1$ e che la variabile $\sigma = s_z = 0, \pm 1$ sia associata alla proiezione dello spin lungo l'asse z , in opportune unità di misura:

- [3 punti] Dimostrare l'esistenza della condensazione di Bose-Einstein.
- [4 punti] Calcolare il valore approssimato della temperatura di condensazione T_0 nel caso limite $\gamma \gg \kappa_B T_0$, a meno di termini esponenzialmente piccoli $\sim e^{-\gamma/\kappa_B T_0}$.
- [3 punti] Determinare il valor medio di σ e di x a $T = 0$.

3. Fermioni

Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin $s = 1/2$, si trovi a $T = 0$, e che la variabile $\sigma = 2s_z = \pm 1$ sia associata alla proiezione dello spin lungo l'asse z , in opportune unità di misura:

- [4 punti] Determinare il numero di particelle N_{+1} e N_{-1} con valore di σ indicato dal pedice, in funzione dell'energia di Fermi ε_F .
- [3 punti] Determinare il valore medio di σ , in funzione di ε_F .
- [3 punti] Calcolare il valore massimo della coordinata x di una particella con $\sigma = +1$, $x_{\max;+1}$, in funzione di ε_F .

Si ricordano le definizioni: $\Gamma(z) = \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t}$; $\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt \frac{t^{z-1}}{e^t - 1}$.

Risposte

1.a) Per un sistema di N particelle classiche non interagenti la funzione di partizione canonica è $Z_N = Z_1^N/N! \approx (Z_1 e/N)^N$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella. L'energia interna per particella assume dunque l'espressione $u = U/N = -\partial(\ln Z_1)/\partial\beta$, con $\beta \equiv (\kappa_B T)^{-1}$. Abbiamo

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{1}{h^2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{q} e^{-\beta H(\mathbf{p}, \mathbf{q})} = \frac{2\pi L}{h^2} \sum_{\sigma=0, \pm 1} \int_0^{\infty} dp p e^{-\beta p^2/2m} \int_0^L dx e^{-\beta \gamma \sigma x/L} \\ &= \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta^2} \sum_{\sigma=0, \pm 1} \int_0^{\beta \gamma} d\xi e^{-\sigma \xi} = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta^2} [\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)]. \end{aligned}$$

dove, nell'ultimo integrale, si è introdotta la variabile adimensionale $\xi = \beta \gamma x/L$. Quindi,

$$u = -\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \beta} = 2k_B T - \frac{1 + 2 \cosh(\beta \gamma)}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)} \gamma.$$

1.b) Abbiamo

$$P_{\sigma} = \frac{\int_0^{\beta \gamma} d\xi e^{-\sigma \xi}}{\sum_{\sigma=0, \pm 1} \int_0^{\beta \gamma} d\xi e^{-\sigma \xi}} = \frac{\int_0^{\beta \gamma} d\xi e^{-\sigma \xi}}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)}.$$

Quindi

$$P_0 = \frac{\beta \gamma}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)}, \quad P_{+1} = \frac{1 - e^{-\beta \gamma}}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)}, \quad P_{-1} = \frac{e^{\beta \gamma} - 1}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)}.$$

1.c) Il valor medio cercato è

$$\langle \sigma \rangle = \sum_{\sigma=0, \pm 1} \sigma P_{\sigma} = \frac{2 - 2 \cosh(\beta \gamma)}{\beta \gamma + 2 \sinh(\beta \gamma)}.$$

Per $\gamma \ll \kappa_B T$ abbiamo

$$\langle \sigma \rangle \approx -\frac{1}{3} \beta \gamma + O(\beta^3 \gamma^3).$$

Per $\gamma \gg \kappa_B T$ abbiamo

$$\langle \sigma \rangle \approx -1 + O(\beta \gamma e^{-\beta \gamma}).$$

2.a) Calcoliamo innanzitutto la densità degli stati

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{2\pi L}{h^2} \sum_{\sigma=0, \pm 1} \int_0^{\infty} dp p \int_0^L dx \delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - \frac{\gamma \sigma x}{L}\right) = \frac{2\pi m L}{h^2} \sum_{\sigma=0, \pm 1} \int_0^L dx \theta\left(\epsilon - \frac{\gamma \sigma x}{L}\right) \\ &= \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\theta(\epsilon) + \frac{\epsilon}{\gamma} \theta(\epsilon) \theta(\gamma - \epsilon) + \theta(\epsilon - \gamma) + \left(1 + \frac{\epsilon}{\gamma}\right) \theta(-\epsilon) \theta(\epsilon + \gamma) + \theta(\epsilon) \right], \end{aligned}$$

dove il primo termine tra parentesi quadra è il contributo per $\sigma = 0$, il secondo e il terzo termine danno il contributo per $\sigma = +1$, il quarto e il quinto termine sono il contributo per $\sigma = -1$. È evidente che l'energia minima di una particella è $\epsilon_{\min} = -\gamma$.

Se il sistema è composto da N Bosoni, posto $\beta_0 \equiv (\kappa_B T_0)^{-1}$, la condizione di condensazione è

$$N = \int_{-\gamma}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} d\epsilon$$

Le cinque θ (e prodotti di θ) in $g(\epsilon)$ determinano 5 diversi limiti di integrazione. Nell'ordine, $0 < \epsilon < \infty$, $\gamma < \epsilon < \infty$, $0 < \epsilon < \gamma$, $-\gamma < \epsilon < 0$, $0 < \epsilon < \infty$. Spezzando $0 < \epsilon < \infty$ come somma degli intervalli $0 < \epsilon < \gamma$ e $\gamma < \epsilon < \infty$ troviamo

$$N = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \left[\int_{-\gamma}^0 d\epsilon \frac{\epsilon + \gamma}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} + \int_0^{\gamma} d\epsilon \frac{\epsilon + 2\gamma}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} + \int_{\gamma}^{\infty} d\epsilon \frac{3}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} \right]$$

La convergenza del primo integrale (l'unico per il quale può porsi il problema) dimostra che la condensazione di Bose-Einstein esiste.

2.b) Nel caso in cui $\gamma \gg \kappa_B T_0$, mentre il primo integrale ha dei contributi (per $\epsilon \approx -\gamma$) finiti, gli altri due integrali hanno limiti di integrazione tali che il secondo e il terzo integrale nell'espressione di N sono sempre esponenzialmente piccoli (rispettivamente, come $e^{-\beta_0 \gamma}$ e come $e^{-2\beta_0 \gamma}$) per cui

$$N \approx \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \int_{-\gamma}^0 d\epsilon \frac{\epsilon + \gamma}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} \approx \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma} \int_{-\gamma}^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon + \gamma}{e^{\beta_0(\epsilon+\gamma)} - 1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta_0^2} \int_0^{\infty} dz \frac{z}{e^z - 1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2 \gamma \beta_0^2} \zeta(2) \Gamma(2),$$

dove la seconda uguaglianza è approssimata a meno di termini esponenzialmente piccoli (come $e^{-\beta_0 \gamma}$). Poiché $\Gamma(2) = 1$, si ha

$$\kappa_B T_0 \approx \left(\frac{h^2 \gamma N}{2\pi m L^2 \zeta(2)} \right)^{1/2}.$$

2.c) Per $T = 0$, tutte le particelle sono nel condensato, che è lo stato di minima energia, per il quale $p = 0$, $x = L$ e $\sigma = -1$, quindi $\langle x \rangle = L$ e $\langle \sigma \rangle = -1$.

3.a) Nel caso dei Fermioni, alla densità degli stati calcolata nel caso dei Bosoni, contribuiscono solo gli ultimi quattro termini (contributi per $\sigma = \pm 1$, lo stato $\sigma = 0$ non esiste), cioè

$$G(\epsilon) = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{\epsilon}{\gamma} \theta(\epsilon) \theta(\gamma - \epsilon) + \theta(\epsilon - \gamma) + \left(1 + \frac{\epsilon}{\gamma} \right) \theta(-\epsilon) \theta(\epsilon + \gamma) + \theta(\epsilon) \right] \equiv G_{+1}(\epsilon) + G_{-1}(\epsilon).$$

I primi due termini sono il contributo per $\sigma = +1$ e gli ultimi due sono il contributo per $\sigma = -1$. Quindi, a $T = 0$, $N_{\sigma} = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} G_{\sigma}(\epsilon) d\epsilon$. Abbiamo

$$N_{+1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{\epsilon_F^2}{2\gamma} \theta(\epsilon_F) \theta(\gamma - \epsilon_F) + \left(\epsilon_F - \frac{\gamma}{2} \right) \theta(\epsilon_F - \gamma) \right]$$

e

$$N_{-1} = \frac{2\pi m L^2}{h^2} \left[\frac{(\epsilon_F + \gamma)^2}{2\gamma} \theta(-\epsilon_F) \theta(\epsilon_F + \gamma) + \left(\epsilon_F + \frac{\gamma}{2} \right) \theta(\epsilon_F) \right].$$

3.b) Si ha

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sum_{\sigma=\pm 1} \sigma N_{\sigma}}{\sum_{\sigma=\pm 1} N_{\sigma}} = \frac{\frac{\epsilon_F^2}{2\gamma} \theta(\epsilon_F) \theta(\gamma - \epsilon_F) + (2\gamma \epsilon_F - \gamma^2) \theta(\epsilon_F - \gamma) - (\epsilon_F + \gamma)^2 \theta(-\epsilon_F) \theta(\epsilon_F + \gamma) + (2\gamma \epsilon_F + \gamma^2) \theta(\epsilon_F)}{\frac{\epsilon_F^2}{2\gamma} \theta(\epsilon_F) \theta(\gamma - \epsilon_F) + (2\gamma \epsilon_F - \gamma^2) \theta(\epsilon_F - \gamma) + (\epsilon_F + \gamma)^2 \theta(-\epsilon_F) \theta(\epsilon_F + \gamma) + (2\gamma \epsilon_F + \gamma^2) \theta(\epsilon_F)}.$$

3.c)

- Per $\epsilon_F < 0$ non ci sono particelle con $\sigma = +1$;
- Per $0 \leq \epsilon_F \leq \gamma$ gli stati con massima x sono quelli in cui l' energia cinetica e' nulla. Per cui si ha $\epsilon_F = \gamma x_{\max;+1}/L$ e $x_{\max;+1} = L\epsilon_F/\gamma$;
- Per $\epsilon_F > \gamma$ la particella ha $x_{\max;+1} = L$.