

Consideriamo un gas ideale classico di N particelle non interagenti in due dimensioni, ciascuna di massa m , confinate sul piano Oxy da un potenziale esterno radiale

$$V(r) = \begin{cases} V_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^a, & r < r_0, \\ \infty, & r \geq r_0, \end{cases}$$

dove $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ è la distanza dall'origine, e $V_0 > 0$, $a > 0$ e $r_0 > 0$ sono parametri dimensionali. La Hamiltoniana del sistema è

$$H_N = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(r_i) \right]$$

e il sistema è a contatto con un termostato a temperatura T .

Si assuma che le particelle siano descritte dalla fisica classica:

1. [3 punti] Calcolare la funzione di partizione del sistema (per $a > 0$ generico).
2. [4 punti] Determinare, quando $a = 2$, l'andamento asintotico dell'entropia del sistema $S(T)$ nei limiti $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$. Commentare i risultati trovati.
3. [3 punti] Determinare la densità radiale (per $a > 0$ generico).

Si assuma ora che le particelle siano bosoni con spin $s = 1$:

4. [3 punti] Calcolare la densità degli stati di singola particella (per $a > 0$ generico).
5. [4 punti] Determinare per quali valori di a è presente la condensazione di Bose-Einstein.

Si assuma ora che le particelle siano fermioni con spin $s = \frac{1}{2}$:

6. [4 punti] Determinare l'energia di Fermi ϵ_F , quando $\epsilon_F < V_0$ (per $a > 0$ generico).
7. [3 punti] Calcolare il massimo della posizione lungo x quando $\epsilon_F = V_0$ (per $a > 0$ generico).

Ora qualche domanda di sistemi correlati:

8. [2 punti] Se un sistema di 4 spin di Ising è descritto dalla Hamiltoniana $-J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4)$, con $S_i = \pm 1$, quanto vale $\langle S_1 S_4 \rangle$ a $T = 0$ e $T = \infty$?
9. [2 punti] Se un sistema di 4 spin di Ising è descritto dalla Hamiltoniana $-J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4)$, con $S_i = \pm 1$, quanto vale $\langle S_2 \rangle$ in funzione di T ?
10. [2 punti] Se un sistema di 4 spin di Ising è descritto dalla Hamiltoniana $-H(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)$, con $S_i = \pm 1$ e $H > 0$, quanto vale $\langle S_1 S_4 \rangle$ a $T = 0$ e $T = \infty$?

La funzione gamma incompleta è definita come $\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt$. Nota che $\gamma(a, \infty) = \Gamma(a)$ e che per z piccolo $\gamma(a, z) \approx \frac{z^a}{a}$. Nota anche che $\gamma(1, z) = 1 - e^{-z}$, $\gamma(2, z) = 1 - (z+1)e^{-z}$ e $\gamma(3, z) = 2 - (z^2 + 2z + 2)e^{-z}$.

Esercizio 1

La funzione di partizione di singola particella è

$$Z_1 = \frac{1}{h^2} \int d^2p \exp\left(-\beta \frac{p^2}{2m}\right) \int d^2r \exp[-\beta V(r)].$$

La parte impulsiva vale

$$\int d^2p \exp\left(-\beta \frac{p^2}{2m}\right) = \frac{2\pi m}{\beta},$$

Usando coordinate polari,

$$d^2r = r dr d\theta,$$

si ottiene

$$\int d^2r e^{-\beta V(r)} = 2\pi \int_0^{r_0} r dr \exp\left[-\beta V_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^a\right].$$

Introducendo la variabile

$$x = \left(\frac{r}{r_0}\right)^a,$$

si ha

$$r dr = \frac{r_0^2}{a} x^{\frac{2}{a}-1} dx,$$

e quindi

$$\int d^2r e^{-\beta V(r)} = \frac{2\pi r_0^2}{a} \int_0^1 x^{\frac{2}{a}-1} e^{-\beta V_0 x} dx.$$

Pertanto,

$$\int_0^1 x^{\frac{2}{a}-1} e^{-\beta V_0 x} dx = (\beta V_0)^{-\frac{2}{a}} \gamma\left(\frac{2}{a}, \beta V_0\right).$$

e

$$Z_1 = \frac{4\pi^2 m r_0^2}{a \beta h^2} (\beta V_0)^{-\frac{2}{a}} \gamma\left(\frac{2}{a}, \beta V_0\right)$$

e infine la funzione di partizione del gas di N particelle è

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left[\frac{4\pi^2 m r_0^2}{a \beta h^2} (\beta V_0)^{-\frac{2}{a}} \gamma\left(\frac{2}{a}, \beta V_0\right) \right]^N.$$

Esercizio 2 -Calcolo dell'entropia per $a = 2$

Se $a = 2$, l'integrale configurazionale si riduce a:

$$2\pi \int_0^{r_0} e^{-\beta V_0 \frac{r^2}{r_0^2}} r dr \quad (1)$$

Sostituendo $u = \beta V_0 \frac{r^2}{r_0^2}$, si ha $du = \frac{2\beta V_0}{r_0^2} r dr$, da cui:

$$\pi \frac{r_0^2}{\beta V_0} \int_0^{\beta V_0} e^{-u} du = \pi r_0^2 \frac{k_B T}{V_0} \left(1 - e^{-\frac{V_0}{k_B T}}\right) \quad (2)$$

La funzione di partizione di singola particella per $a = 2$ diventa:

$$Z_1 = \frac{2\pi^2 m r_0^2 (k_B T)^2}{h^2 V_0} \left(1 - e^{-\frac{V_0}{k_B T}}\right) \quad (3)$$

Utilizzando l'approssimazione di Stirling ($\ln N! \approx N \ln N - N$), l'energia libera di Helmholtz $F = -k_B T \ln Z_N$ si scrive come:

$$F = -N k_B T \left[\ln \left(\frac{Z_1}{N} \right) + 1 \right] \quad (4)$$

L'entropia si ricava tramite la relazione termodinamica $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$.

0.1 Limite per $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$)

Quando $T \rightarrow 0$, il termine esponenziale $e^{-\frac{V_0}{k_B T}} \rightarrow 0$. Di conseguenza:

$$Z_1 \approx C T^2 \quad \text{con} \quad C = \frac{2\pi^2 m r_0^2 k_B^2}{h^2 V_0} \quad (5)$$

L'energia libera diventa:

$$F \approx -N k_B T \ln T^2 - N k_B T \left[\ln \left(\frac{C}{N} \right) + 1 \right] \quad (6)$$

Derivando rispetto a T , otteniamo l'entropia nel limite di bassa temperatura:

$$S(T \rightarrow 0) \approx N k_B \left[\ln \left(\frac{2\pi^2 m r_0^2 (k_B T)^2}{N h^2 V_0} \right) + 3 \right] \quad (7)$$

0.2 Limite per $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$)

Quando $T \rightarrow \infty$, espandiamo l'esponenziale al primo ordine: $1 - e^{-\frac{V_0}{k_B T}} \approx \frac{V_0}{k_B T}$. In questo limite:

$$Z_1 \approx \frac{2\pi^2 m r_0^2 (k_B T)^2}{h^2 V_0} \cdot \frac{V_0}{k_B T} = \frac{2\pi m}{h^2} (\pi r_0^2) k_B T \quad (8)$$

Il sistema si comporta come un gas ideale in una scatola 2D di area $A = \pi r_0^2$. Definendo $C' = \frac{2\pi^2 m r_0^2 k_B}{h^2}$, l'energia libera assume la forma:

$$F \approx -N k_B T \left[\ln \left(\frac{C' T}{N} \right) + 1 \right] \quad (9)$$

Derivando rispetto a T , si ottiene l'entropia ad alte temperature:

$$S(T \rightarrow \infty) \approx N k_B \left[\ln \left(\frac{2\pi^2 m r_0^2 k_B T}{N h^2} \right) + 2 \right] \quad (10)$$

Esercizio 3 - Calcolo della densità radiale

La densità di probabilità spaziale per una singola particella è proporzionale al fattore di Boltzmann configurazionale:

$$P(\mathbf{r})d^2\mathbf{r} = \frac{e^{-\beta V(r)}}{\int e^{-\beta V(r)}d^2\mathbf{r}} r dr d\theta \quad (11)$$

La densità radiale $\rho_r(r)$, normalizzata al numero totale di particelle N , si ottiene integrando sulla coordinata angolare θ (che fornisce un fattore 2π) e moltiplicando per N :

$$\rho_r(r) = N \cdot \frac{2\pi r e^{-\beta V(r)}}{\int_0^{r_0} 2\pi r e^{-\beta V(r)} dr} \quad (12)$$

Sostituendo l'espressione del potenziale e il valore dell'integrale calcolato precedentemente, otteniamo la densità radiale finale:

$$\rho_r(r) = \begin{cases} \frac{Na(\beta V_0)^{2/a}}{r_0^2 \gamma\left(\frac{2}{a}, \beta V_0\right)} r e^{-\beta V_0\left(\frac{r}{r_0}\right)^a}, & r < r_0 \\ 0, & r \geq r_0 \end{cases} \quad (13)$$

Esercizio 4 - Densità degli stati di singola particella

La densità degli stati di singola particella è data da

$$g(E) = \frac{1}{h^2} \int d^2p d^2r \delta\left(E - \frac{p^2}{2m} - V(r)\right).$$

Utilizzando coordinate polari nello spazio degli impulsi si trova (con il solito cambio di coordinate

$$u = \frac{p^2}{2m},$$

$$g(E) = \frac{2\pi m}{h^2} \int d^2r \Theta(E - V(r)).$$

ovvero

$$g(E) = \frac{2\pi^2 m r_0^2}{h^2} \begin{cases} \left(\frac{E}{V_0}\right)^{2/a}, & E < V_0, \\ 1, & E \geq V_0. \end{cases}$$

La funzione di partizione può essere ricostruita dalla densità degli stati attraverso la trasformata di Laplace

$$Z_1(\beta) = \int_0^\infty g(E) e^{-\beta E} dE,$$

che restituisce il risultato ottenuto direttamente dall'integrale nello spazio delle fasi.

Esercizio 5 - Gas di bosoni spin-1: condensazione di Bose-Einstein

Consideriamo un gas ideale di bosoni in due dimensioni con spin $S = 1$. La degenerazione interna degli stati è

$$g_s = 2S + 1 = 3.$$

La densità degli stati totale include quindi il fattore di degenerazione:

$$\rho(E) = 3g(E),$$

dove

$$g(E) = \frac{2\pi^2 m r_0^2}{h^2} \begin{cases} \left(\frac{E}{V_0}\right)^{2/d}, & E < V_0, \\ 1, & E \geq V_0. \end{cases}$$

Il numero di particelle negli stati eccitati è

$$N_{\text{ex}} = \int_0^\infty dE \frac{\rho(E)}{\exp[\beta(E - \mu)] - 1}.$$

La condensazione di Bose-Einstein si verifica quando, nel limite

$$\mu \rightarrow E_0,$$

il numero massimo di particelle negli stati eccitati rimane finito. Ponendo l'energia del ground state uguale a zero,

$$E_0 = 0,$$

si ha

$$N_{\text{ex}}^{\text{max}} = \int_0^\infty dE \frac{\rho(E)}{e^{\beta E} - 1}.$$

Per basse energie,

$$e^{\beta E} - 1 \simeq \beta E,$$

e quindi

$$N_{\text{ex}}^{\text{max}} \sim \int_0^\infty dE \frac{\rho(E)}{E}.$$

Poiché per $E < V_0$

$$\rho(E) \sim E^{2/a},$$

si ottiene

$$N_{\text{ex}}^{\text{max}} \sim \int_0^\infty dE E^{2/a-1}.$$

L'integrale converge se

$$\frac{2}{a} > 0,$$

cioè per

$$\boxed{a > 0}.$$

Pertanto un gas ideale di bosoni spin-1 in una trappola bidimensionale del tipo

$$V(r) = V_0(r/r_0)^a$$

presenta condensazione di Bose-Einstein a temperatura finita per ogni $a > 0$.

Esercizio 6 - Gas di fermioni spin-1/2: energia di Fermi

La degenerazione interna è

$$g_s = 2S + 1 = 2.$$

La densità degli stati totale è quindi

$$\rho(E) = 2g(E),$$

con

$$g(E) = \frac{2\pi^2 m r_0^2}{h^2} \begin{cases} \left(\frac{E}{V_0}\right)^{2/d}, & E < V_0, \\ 1, & E \geq V_0. \end{cases}$$

A temperatura zero gli stati sono riempiti fino all'energia di Fermi ϵ_F :

$$N = \int_0^{\epsilon_F} \rho(E) dE.$$

Consideriamo inizialmente il caso

$$\epsilon_F < V_0.$$

Allora

$$N = 2 \frac{2\pi^2 m r_0^2}{h^2} \int_0^{\epsilon_F} \left(\frac{E}{V_0}\right)^{2/a} dE.$$

Quindi

$$N = \frac{4\pi^2 m r_0^2}{h^2} V_0^{-2/a} \int_0^{\epsilon_F} E^{2/a} dE.$$

Poiché

$$\int_0^{\epsilon_F} E^{2/a} dE = \frac{\epsilon_F^{1+2/a}}{1+2/a},$$

si ottiene

$$N = \frac{4\pi^2 m r_0^2}{h^2} \frac{V_0^{-2/a}}{1+2/a} \epsilon_F^{1+2/a}.$$

Invertendo la relazione:

$$\epsilon_F^{1+2/d} = N \frac{h^2}{4\pi^2 m r_0^2} \left(1 + \frac{2}{a}\right) V_0^{2/a}.$$

Pertanto l'energia di Fermi è

$$\epsilon_F = \left[\frac{N h^2}{4\pi^2 m r_0^2} \left(1 + \frac{2}{a} \right) V_0^{2/a} \right]^{\frac{a}{a+2}}$$

Esercizio 7

Quando $\epsilon_F = V_0$ $r_{max} = r_0$ e anche $x_{max} = r_0$.

Esercizio 8

Il sistema descritto è una catena lineare aperta ferromagnetica ($J > 0$).

Limite per $T = 0$ (Bassa temperatura)

A temperatura zero, il sistema decade rigorosamente nei suoi stati fondamentali di minima energia. Per rendere minima l'energia totale, ogni coppia di spin adiacenti deve massimizzare il legame, ovvero $S_i S_{i+1} = 1$. Esistono due configurazioni fondamentali degeneri dovute alla simmetria globale del sistema:

1. Tutti gli spin verso l'alto: $(+1, +1, +1, +1)$
2. Tutti gli spin verso il basso: $(-1, -1, -1, -1)$

In entrambi i casi, lo spin S_1 e lo spin S_4 possiedono sempre lo stesso segno concordante. Di conseguenza, il loro prodotto assume sempre il valore di $+1$:

$$\langle S_1 S_4 \rangle_{T=0} = 1 \quad (14)$$

Limite per $T = \infty$ (Alta temperatura)

A temperatura infinita ($\beta = \frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$), il termine di energia cinetica e disordine termico domina completamente sull'interazione di accoppiamento. Tutti i $2^4 = 16$ microstati del sistema diventano equiprobabili e gli spin risultano statisticamente indipendenti. La media del prodotto si fattorizza nel prodotto delle singole medie:

$$\langle S_1 S_4 \rangle_{T=\infty} = \langle S_1 \rangle \langle S_4 \rangle \quad (15)$$

Poiché ciascuno spin ha probabilità identica $p = 1/2$ di essere $+1$ o -1 , si ottiene $\langle S_1 \rangle = \langle S_4 \rangle = 0$. Pertanto:

$$\langle S_1 S_4 \rangle_{T=\infty} = 0 \quad (16)$$

Esercizio 9

L'Hamiltoniana dell'esercizio presenta una simmetria esatta per inversione di segno simultanea di tutti gli spin ($\mathbb{Z}_2$). Sotto la trasformazione $S_i \rightarrow -S_i$ per ogni i , l'espressione energetica si conserva in quanto formata solo da prodotti di coppie:

$$\mathcal{H}(-S_1, -S_2, -S_3, -S_4) = -J[(-S_1)(-S_2) + \dots] = \mathcal{H}(S_1, S_2, S_3, S_4) \quad (17)$$

Ciò garantisce che nello spazio delle configurazioni, a ogni stato con un determinato valore di S_2 corrisponda un rispettivo stato speculare di uguale energia ma valore di S_2 opposto. Nella sommatoria per il calcolo della media statistica nel collettivo canonico, questi termini si elidono reciprocamente a due a due per ogni valore finito di β :

$$\langle S_2 \rangle(T) = \frac{\sum_{\{S\}} S_2 e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\})}}{\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\})}} = 0 \quad (18)$$

Quindi, per qualsiasi temperatura $T > 0$ in un sistema finito, la magnetizzazione spontanea è strettamente nulla:

$$\langle S_2 \rangle(T) = 0 \quad (19)$$

Esercizio 10

In questa configurazione, non vi è alcuna interazione di accoppiamento reciproco tra gli spin. Essi rispondono unicamente al campo magnetico esterno H (che supponiamo positivo, $H > 0$). Essendo variabili indipendenti, la media termica del prodotto si fattorizza a qualunque temperatura:

$$\langle S_1 S_4 \rangle = \langle S_1 \rangle \langle S_4 \rangle \quad (20)$$

La magnetizzazione media di un singolo spin isolato immerso in un campo magnetico è data dalla relazione standard: $\langle S_i \rangle = \tanh(\beta H)$.

Limite per $T = 0$

Per $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), l'energia termica è nulla e il campo magnetico esterno forza e allinea stabilmente tutti gli spin nella sua stessa direzione:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \tanh(\beta H) = 1 \implies \langle S_1 \rangle = 1, \quad \langle S_4 \rangle = 1 \quad (21)$$

Sostituendo nella fattorizzazione si ottiene:

$$\langle S_1 S_4 \rangle_{T=0} = 1 \cdot 1 = 1 \quad (22)$$

Limite per $T = \infty$

Per $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$), l'agitazione termica distrugge l'allineamento ordinato causato dal campo esterno:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \tanh(\beta H) = 0 \implies \langle S_1 \rangle = 0, \quad \langle S_4 \rangle = 0 \quad (23)$$

Di conseguenza:

$$\langle S_1 S_4 \rangle_{T=\infty} = 0 \cdot 0 = 0 \quad (24)$$