1 Esercizio del 8/11/2019 - Prima parte

1.1 Testo esercizio

Si consideri un gas perfetto costituito da N particelle identiche di massa m, non interagenti, vincolate a muoversi su un piano e con Hamiltoniana di singola particella:

$$H_1(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

dove $p = |\vec{p}|$, $q = |\vec{q}|$, soggette al potenziale centrale

$$V(q) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq q < R \\ 0 & R \leq q < 2R \\ \infty & q > 2R \end{cases}$$

con V_0 costante e positiva. Il sistema è a contatto con un bagno termico a temperatura T.

Assumendo che sia applicabile la statistica classica e che il sistema sia in equilibrio alla temperatura T:

- 1.a) Calcolare l' entropia $S(T)$ in funzione della temperatura T. Discutere l' andamento di $S(T)$ nei limiti $T \ll 1$ e $T \gg 1$.
- 1.b) Determinare la pressione $P(R)$ alla distanza $q = R$ dall' origine.
- 1.c) Determinare la probabilità $P(n;N)$ che $n < N$ particelle abbiano energia $\epsilon \leqslant 0$. Determinare il valore medio $< n >$ e la varianza σ_n^2 del numero di particelle con energia $\epsilon \leqslant 0$.

- 1.a) Iniziamo con una discussione qualitativa dell' andamento di $S(T)$ a bassa ed alta T. A bassa T il sistema popolera' lo stato di minima energia e quindi la particella stara', come coordinate spaziali, tra 0 e R. Quindi la parte configurazionale dell' entropia sara' (per particella)

$$S^{conf}_{T\to 0} = k_B \ln \pi \frac{R^2}{\lambda^2}$$

In modo analogo, ad alta T, visto che la differenza V_0 e' irrilevante, la particella campionera' l' intera superficie disponibile per cui

$$S^{conf}_{T\to\infty} = k_B \ln \pi \frac{(2R)^2}{\lambda^2}$$

Dal punto di vista cinetico invece avremo una entropia che si comporta come

$$S(T)^{cinetico} \sim \ln T$$

e che quindi diverge positivamente per $T \to \infty$ e negativamente per $T \to 0$. I contributi cinetici sono dunque dominanti rispetto a quelli configurazionali.

Per fare il calcolo esatto, dobbiamo calcolare la funzione di partizione e poi, da $A(N,V,T)$ ricavare S.

La funzione di partizione della singola particella e'

$$Q_1 = \frac{1}{h^2}\int dp^2 dq^2 e^{-\beta[\frac{p^2}{2m}+V(q)]}$$

Da qui, separando i momenti e le coordiante

$$Q_1 = \frac{1}{h^2}(\sqrt{2\pi m/\beta})^2 \int dq_x dq_y e^{-\beta V(q)}$$

Calcoliamo ora

$$\int dq_x dq_y e^{-\beta V(q)} = \int 2\pi q dq e^{-\beta V(q)} = \int_0^R 2\pi q dq e^{\beta V_0} + \int_R^{2R} 2\pi q dq = e^{\beta V_0}\pi R^2 + (\pi(2R)^2 - \pi(R)^2)$$

$$= (e^{\beta V_0}-1)\pi R^2 + 4\pi R^2$$

Da cui

$$Q_1 = \frac{2\pi m k_B T}{h^2}\left[(e^{\beta V_0}-1)\pi R^2 + 4\pi R^2\right] = \left[(e^{\beta V_0}-1)\pi(\frac{R}{\lambda})^2 + 4\pi(\frac{R}{\lambda})^2\right] = \pi(\frac{R}{\lambda})^2\left[(e^{\beta V_0}+3)\right]$$

Da qui calcoliamo A e S (del sistema) come

$$A = -k_B T \ln\frac{Q_1 e}{N}$$

e

$$< E > = -N\frac{\partial \ln Q_1}{\partial \beta} =$$

sommando la derivata del β che viene dalla parte cinetica (in λ) e la parte configurazionale

$$< E > = N\frac{\partial \ln \beta}{\partial \beta} - NV_0\frac{\pi(\frac{R}{\lambda})^2 e^{\beta V_0}}{\left[(e^{\beta V_0}-1)\pi(\frac{R}{\lambda})^2 + 4\pi(\frac{R}{\lambda})^2\right]}$$

$$= Nk_B T - NV_0\frac{\pi e^{\beta V_0}}{[\pi e^{\beta V_0}+3\pi]}$$

che dí corretti limiti a temperature basse e alte ($-NV_0$ e $-NV_0/4$) ed

$$TS = (< E > -A) = Nk_BT - NV_0\frac{\pi e^{\beta V_0}}{[\pi e^{\beta V_0} + 3\pi]} + k_BTN \ln \pi (\frac{R}{\lambda})^2 \left[(e^{\beta V_0} + 3)\right] \frac{e}{N}$$

da cui

$$\frac{S}{k_BN} = 1 - V_0\beta\frac{\pi e^{\beta V_0}}{[\pi e^{\beta V_0} + 3\pi]} + \ln \pi (\frac{R}{\lambda})^2 \left[(e^{\beta V_0} + 3)\right] \frac{e}{N}$$

Il limite per $\beta \to \infty$ da (ricordandosi che λ contiene β)

$$\frac{S}{k_BN} \sim -V_0\beta + \beta V_0 - 2\ln\lambda$$

che diverge come $\ln T$. Per $\beta \to 0$ e' facile vedere che anche li il termine dominante e'

$$\frac{S}{k_BN} = -\ln\lambda^2 \sim -\ln\frac{1}{T} \sim \ln T$$

- 1.c

  Guardiamo adesso la probabilita' $P(\epsilon < 0)$ che una particella abbia energia totale negativa, cioé distanza dall'origine minore di R ed energia cinetica minore di V_0.

$$P(\epsilon < 0) = \frac{1}{Q}\frac{1}{h^2}\int_0^R 2\pi q dq e^{-\beta V(q)} \int_0^{V_0} 2m\pi \frac{dp^2}{2m} e^{-\beta p^2/2m} = \frac{1}{Q}\frac{1}{h^2} 2m\pi k_BT\pi R^2 e^{\beta V_0} \int_0^{\beta V_0} dy e^{-y} =$$

$$= \frac{1}{Q}\frac{1}{h^2} 2m\pi k_BT\pi R^2 e^{\beta V_0}(1 - e^{-\beta V_0}) = \frac{e^{\beta V_0} - 1}{e^{\beta V_0} + 3}$$

  Per un sistema di N particelle indipendenti, mi aspetto che la probabilitá di osservarne n particelle con energia potenziale negativa sia una binomiale con $p = P(\epsilon < 0)$ e dunque

$$P(n, N) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}$$

  la cui media e' Np e la cui varianza e' $Np(1-p)$.

- Densita' degli stati

  Se volessimo calcolare la densitá degli stati $G(\epsilon)$, definita come

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2}\int 2\pi p dp 2\pi q dq \delta(H_1 - \epsilon) = \frac{1}{h^2}\int 2\pi p dp 2\pi q dq \delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - V(q)\right)$$

Effettuo un cambio di variabile

$$z = \frac{p^2}{2m} \quad dz = \frac{2pdp}{2m}$$

per cui

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2} \int 2\pi m dz 2\pi q dq \delta\left(\epsilon - z - V(q)\right)$$

poiche' l' integrale su z va da 0 a ∞, l' integrale e' zero o uno in base a se $\epsilon - V(q) > 0$ o no. Dunque

$$G(\epsilon) = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \int q dq \Theta(\epsilon - V(q)) = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \left[\int_0^R q dq \Theta(\epsilon + V_0) + \int_R^{2R} q dq \Theta(\epsilon) \right] =$$

$$= \frac{4\pi^2 m}{h^2} \left[\Theta(\epsilon + V_0) \int_0^R q dq + \Theta(\epsilon) \int_R^{2R} q dq \right] = \frac{4\pi^2 m}{h^2} \frac{R^2}{2} \left[\Theta(\epsilon + V_0) + 3\Theta(\epsilon)\right]$$

Se ora calcoliamo $P(\epsilon)$ possiamo scrivere

$$P(\epsilon) = \frac{G(\epsilon) e^{-\beta\epsilon}}{Q_1} = \frac{1}{Q_1} \frac{4\pi^2 m}{h^2} \frac{R^2}{2} \left[\Theta(\epsilon + V_0) + 3\Theta(\epsilon)\right] e^{-\beta\epsilon}$$

e scrivere la probabilitá che ϵ sia negativa integrando

$$P(\epsilon < 0) = \int_{-\infty}^{0} P(\epsilon) d\epsilon = \int_{-V_0}^{0} P(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{Q_1} \frac{4\pi^2 m}{h^2} \frac{R^2}{2} e^{-\beta\epsilon} = \frac{h^2}{2\pi m k_B T} \frac{1}{\pi R^2 \left[(e^{\beta V_0} + 3)\right]} \frac{4\pi^2 m}{h^2} \frac{R^2}{2} e^{-\beta\epsilon}$$

$$= \int_{-V_0}^{0} d\epsilon \frac{\beta e^{-\beta\epsilon}}{(e^{\beta V_0} + 3)} = \frac{e^{\beta V_0} - 1}{(e^{\beta V_0} + 3)}$$

che coincide con la espressione precedentemente trovata.

- 1.b

  Essendo un gas ideale in presenza di un potenziale esterno la pressione in R^- e' scrivibile come

  $$P(R) = \rho(R) k_B T$$

  Per stimare $\rho(R)$ usiamo i risultati del caso 1.c,

  $$\rho(R) = \frac{N_R}{\pi R^2} = \frac{N}{\pi R^2} \frac{e^{\beta V_0}}{e^{\beta V_0} + 3}$$

  da cui

  $$P(R) = \frac{N k_B T}{\pi R^2} \frac{e^{\beta V_0}}{e^{\beta V_0} + 3}$$

  Si puó anche considerare il sistema con $q < R$ come un sottosistema che ha lo stesso potenziale chimico

2 Esercizio 31/12/2018 — Prima parte

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti di massa m contenute in un disco di raggio R con centro in un sistema di riferimento (x, y), e sia l'Hamiltoniana di singola particella:

$$H_1(p, q) = \frac{p^2}{2m} - Aq^2$$

con A costante positiva.

Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia descrivibile dalla statistica classica di Boltzmann:

- 1.a) Calcolare l' energia media $E(T)$ in funzione della temperatura T.
- 1.b) Indicata con $P(r)$ la pressione a distanza r dal centro del disco, calcolare $P(R)$ e $P(0)$.
- 1.c) Calcolare la densità di probabilità $P(\epsilon)$ dell' energia ϵ di singola particella.
- 1.d) Calcolare la temperatura T^* alla quale la probabilità di trovare una particella con energia negativa è il doppio di quella di trovarla con energia positiva.

- Iniziamo con il calcolare la funzione di partizione di singola particella

  $$Q_1 = \frac{1}{h^2}\int dp_x dp_y \int dq_x dq_y e^{-\beta\frac{p^2}{2m}} e^{\beta A q^2} = \frac{1}{h^2}(\sqrt{2\pi m/\beta})^2 \int_0^R 2\pi q dq e^{\beta A q^2} = \frac{1}{h^2}(\sqrt{2\pi m/\beta})^2 \frac{\pi}{\beta A}\int_0^R \beta Ad$$

  $$= \frac{1}{h^2}\frac{2\pi m}{\beta}\frac{\pi}{\beta A}[e^{\beta A R^2} - 1]$$

- 1a

  L' energia media e'

  $$< E >= -N\frac{\partial \ln Q_1}{\partial \beta} = -N\frac{\partial}{\partial \beta}(-\ln \beta^2 + \ln[e^{\beta A R^2} - 1]) = 2k_B T - \frac{AR^2 e^{\beta A R^2}}{[e^{\beta A R^2} - 1]}$$

- 1b

  La probabilita' che la particella sia in r e'

  $$P(r) = \frac{\frac{1}{h^2}\frac{2\pi m}{\beta}\frac{\pi}{\beta A}\int_0^R \beta A dq^2 e^{\beta A q^2}\delta(q - r)}{\frac{1}{h^2}\frac{2\pi m}{\beta}\frac{\pi}{\beta A}[e^{\beta A R^2} - 1]}$$

$$= \frac{\int_0^R 2\beta Aqdqe^{\beta Aq^2}\delta(q-r)}{[e^{\beta AR^2}-1]} = \frac{2\beta Are^{\beta Ar^2}}{[e^{\beta AR^2}-1]}$$

Quindi la densita' in r sara'

$$\rho(r)2\pi r = NP(r) \quad \rightarrow \quad \rho(r) = \frac{NP(r)}{2\pi r}$$

e di conseguenza

$$P(r) = \rho(r)k_BT = Nk_BT\frac{\beta Ae^{\beta Ar^2}}{[e^{\beta AR^2}-1]\pi} = \frac{N}{\pi}\frac{Ae^{\beta Ar^2}}{[e^{\beta AR^2}-1]}$$

che in zero ad in R danno rispettivamente

$$P(0) = \frac{N}{\pi}\frac{A}{[e^{\beta AR^2}-1]} \qquad P(R) = \frac{N}{\pi}\frac{Ae^{\beta AR^2}}{[e^{\beta AR^2}-1]}$$

- 1c $G(\epsilon)$

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2}\int dp_xdp_ydq_xdq_y\delta(H(p,q)-\epsilon)$$

Come prima, sostituiamo H_1 con $\frac{p^2}{2m} - Aq^2$ e la variabile p con la variabile $z = p^2/2m$

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2}\int_0^R 2\pi qdq\int_0^\infty 2\pi mdz\delta\left(\epsilon - z + Aq^2\right)$$

L' integrazione su z genera una $\Theta(\epsilon + Aq^2)$

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2}\int_0^R 2\pi qdq2\pi m\Theta(\epsilon + Aq^2)$$

Cambiando variabile $t = Aq^2$, $dt = 2qAdq$,

$$= \frac{1}{h^2}2\pi^2\frac{m}{A}\int_0^{AR^2} dt\Theta(\epsilon + t)$$

Per risolvere l' integrale, consideriamo che la Θ da contributi solo quando $\epsilon + t > 0$, quindi quando $t > -\epsilon$.

Allora, visto che integriamo t da 0 a AR^2, possono sussistere 3 casi:

$$-\epsilon < 0 \tag{1}$$
$$0 < -\epsilon < AR^2 \tag{2}$$
$$-\epsilon > AR^2 \tag{3}$$

che si possono anche scrivere come

$$\epsilon > 0 \tag{4}$$
$$-AR^2 < \epsilon < 0 \tag{5}$$
$$\epsilon < -AR^2 \tag{6}$$

Per ciascuno di questi casi

$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} \int_0^{AR^2} dt = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} AR^2 \tag{7}$$
$$G(\epsilon) = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} \int_{-\epsilon}^{AR^2} dt = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} (AR^2 + \epsilon) \tag{8}$$
$$G(\epsilon) = 0 \tag{9}$$

Ora possiamo calcolare la densità di probabilità $P(\epsilon)$ dell' energia ϵ di singola particella come

$$P(\epsilon) = G(\epsilon) \frac{e^{-\beta\epsilon}}{Q_1}$$

- 1d

  Per rispondere alla 1d occorre notare che $P(\epsilon < 0) + P(\epsilon > 0) = 1$. Quindi la condizione per T^* e' equivalente ad avere

$$P(\epsilon > 0) = \frac{1}{3}$$

$$P(\epsilon > 0) = \int_0^\infty G(\epsilon) \frac{e^{-\beta\epsilon}}{Q_1} d\epsilon$$

Nella regione $\epsilon > 0$ $G(\epsilon) = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} AR^2$ per cui

$$P(\epsilon > 0) = \int_0^\infty \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} AR^2 \frac{e^{-\beta\epsilon}}{Q_1} d\epsilon = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} \frac{1}{\beta} \frac{1}{Q_1} AR^2 \int d\beta\epsilon e^{-\beta\epsilon} = \frac{1}{h^2} 2\pi^2 \frac{m}{A} AR^2 \frac{1}{\beta} \frac{1}{Q_1}$$

con

$$Q_1 = \frac{1}{h^2} \frac{2\pi m}{\beta} \frac{\pi}{\beta A} [e^{\beta AR^2} - 1]$$

per cui

$$P(\epsilon > 0) = \frac{\beta AR^2}{[e^{\beta AR^2} - 1]}$$