Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 12.09.2016

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti confinate sul segmento $(0, ML)$, con M intero maggiore od uguale a 2. Sia:

$$H(p, q) = a|p| + V(q) \qquad p, q \in \mathbb{R},$$

con

$$V(q) = \begin{cases} (k-1)\, V_0, & (k-1)L < q \le kL,\ k = 1, 2, \ldots, M; \\ +\infty, & \text{altrimenti;} \end{cases}$$

con a e V_0 costanti positive, la Hamiltoniana di singola particella.

1. Assumendo che il sistema sia in equilibrio a temperatura T e che valga la statistica classica di Boltzmann, si calcoli in funzione della temperatura T:
   - 1.a) L'energia media per particella $E(T)/N$.
   - 1.b) Il numero medio di particelle $\langle n \rangle_{2L}$ contenute nell'intervallo $(0, 2L)$.
   - 1.c) Il valore minimo di $N^*(T)$ tale che, indicato con n il numero di particelle nell'intervallo $(0, 2L)$, si abbia $\mathcal{P}(|n - \langle n \rangle_{2L}| \le 10^{-5} \langle n \rangle_{2L}) \ge 0.955$.

2. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni di spin 1/2, si calcoli:
   - 2.a) Il numero massimo N^* tale che a $T = 0$ tutte le particelle si trovino nell'intervallo $(0, 2L)$.
   - 2.b) L'energia media $E(T = 0)$ per $\epsilon_{\mathrm{F}} = 2V_0$.

- Valutazione risposte:
  1.a: 5/30, 1.b: 6/30, 1.c: 7/30
  2.a: 7/30, 2.b: 5/30

Nota: Al punto 1.c) si ricordi il teorema del limite centrale ed il seguente risultato: $\int_{-2}^{2} dx\, e^{-x^2/2}/\sqrt{2\pi} \simeq 0.955$

- **Risposte**

Nota: La costante di Botzmann k_B è presa uguale a 1, di conseguenza $\beta^{-1} = T$.

1.a) L'energia media è data da $E(T) = -(\partial/\partial\beta)\ln Z_N$, dove Z_N è la funzione di partizione canonica del sistema. Per un sistema di N particelle classiche non interagenti $Z_N = Z_1^N/N!$ dove Z_1 è la funzione di partizione di singola particella:

$$
\begin{aligned}
Z_1 = \int \frac{dp\,dq}{h}\, e^{-\beta H(p,q)} &= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-\beta a|p|} \int_0^{ML} dq\, e^{-\beta V(q)} \\
&= \frac{2}{h\beta a}\sum_{k=1}^{M}\int_{(k-1)L}^{kL} dq\, e^{-\beta(k-1)V_0} \\
&= \frac{2L}{h\beta a}\sum_{k=0}^{M-1} e^{-\beta k V_0} = \frac{2L}{h\beta a}\frac{1-e^{-\beta M V_0}}{1-e^{-\beta V_0}}.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Ne segue che:

$$
E(T)/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 = T + \frac{V_0 e^{-\beta V_0}}{1-e^{-\beta V_0}} - \frac{M V_0 e^{-\beta M V_0}}{1-e^{-\beta M V_0}}
$$

ovvero:

$$
\boxed{E(T)/N = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 = T + V_0\left[\frac{1}{e^{\beta V_0}-1} - \frac{M}{e^{\beta M V_0}-1}\right].}
$$

1.b) La densità di probabilità canonica di singola particella è $\rho_1(p,q) = e^{-\beta H(p,q)}/Z_1$. Ne segue che la probabilità $\rho_1(q\in dL)\,dq$ che una particella si trovi nel segmento dL di lunghezza dq intorno al punto q è data da:

$$
\rho_1(q\in dL)\,dq = \frac{1}{Z_1}\int_{q\in dL}\frac{dp\,dq}{h}\, e^{-\beta H(p,q)} = \frac{e^{-\beta V(q)}}{\int_0^{ML} dq\, e^{-\beta V(q)}}\, dq = \frac{1-x_0}{1-x_0^M}\, e^{-\beta V(q)}\,\frac{dq}{L},
$$

dove $x_0 = e^{-\beta V_0}$.

Ne segue che la probabilità p_{2L} di trovare una particella nell'intervallo $(0, 2L)$ vale:

$$
\begin{aligned}
p_{2L} = \int_0^{2L} \rho_1(q\in dL)\,dq &= \frac{1-x_0}{1-x_0^M}\int_0^{2L} e^{-\beta V(q)}\,\frac{dq}{L} \\
&= \frac{1-x_0}{1-x_0^M}\sum_{k=1}^{2}\int_{(k-1)L}^{kL}\frac{dq}{L}\, e^{-\beta(k-1)V_0} \\
&= \frac{1-x_0}{1-x_0^M}\left(1+e^{-\beta V_0}\right) = \frac{1-x_0^2}{1-x_0^M}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

Di conseguenza:

$$
\boxed{\langle n\rangle_{2L} = N p_{2L} = N\frac{1-e^{-2\beta V_0}}{1-e^{-M\beta V_0}}.}
$$

Notiamo che se $M = 2$ allora $p_{2L} = 1$ e $\langle n\rangle_{2L} = N$ per ogni T, come deve essere.

1.c) La probabilità di trovare n particelle nell'intervallo $(0, 2L)$ è data dalla distribuzione binomiale

$$
\mathcal{P}(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!}\, p_{2L}^n \left(1-p_{2L}\right)^{N-n},
$$

dove p_{2L} è data dalla (2). Ne segue che la probabilità $\mathcal{P}(|n-\langle n\rangle_{2L}| \le \mathcal{K})$ che n differisca da $\langle n\rangle_{2L}$ meno di $\mathcal{K}$ è data da:

$$
\mathcal{P}(|n-\langle n\rangle_{2L}| \le \mathcal{K}) = \sum_{n:|n-\langle n\rangle_{2L}|\le\mathcal{K}} \mathcal{P}(n).
$$

Nel limite $N \gg 1$ la $\mathcal{P}(n)$ è piccata (esponenzialmente con N) intorno a $\langle n\rangle_{2L}$ e la somma è dominata dai valori di n prossimi a $\langle n\rangle_{2L}$. Intorno al massimo per $n = \langle n\rangle_{2L}$ la probabilità $\mathcal{P}(n)$ è ben approssimata da una Gaussiana (Teorema del Limite Centrale) con valor medio $\langle n\rangle_{2L} = Np_{2L}$ e varianza $\sigma_{2L}^2 = Np_{2L}(1-p_{2L})$.

Ne segue che

$$\mathcal{P}(|n-\langle n\rangle_{2L}| \le \mathcal{K}) \simeq \int_{|n-\langle n\rangle_{2L}|\le\mathcal{K}} \frac{dn}{\sqrt{2\pi\sigma_{2L}^2}}\, e^{-(n-\langle n\rangle_{2L})^2/2\sigma_{2L}^2},$$

che introducendo la variabile $x = (n-\langle n\rangle_{2L})/\sigma_{2L}$ porta a:

$$\mathcal{P}(|n-\langle n\rangle_{2L}| \le \mathcal{K}) \simeq \int_{-\mathcal{K}/\sigma_{2L}}^{+\mathcal{K}/\sigma_{2L}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-x^2/2}.$$

Dalla relazione $\int_{-2}^{2} dx\, e^{-x^2/2}/\sqrt{2\pi} \simeq 0.955$ segue che

$$\mathcal{P}(|n-\langle n\rangle_{2L}| \le \mathcal{K}) \ge 0.955 \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{K}/\sigma_{2L} \ge 2.$$

Dalle ipotesi del problema $\mathcal{K} = 10^{-5}\langle n\rangle_{2L}$, per cui

$$10^{-5}\langle n\rangle_{2L}/\sigma_{2L} \ge 2, \qquad \Rightarrow \qquad \langle n\rangle_{2L}/\sigma_{2L} = \sqrt{\frac{Np_{2L}}{1-p_{2L}}} \ge 2\times 10^5,$$

che usando la (2) fornisce

$$N^*(T) = 4\times 10^{10}\left(\frac{1-p_{2L}}{p_{2L}}\right) = 4\times 10^{10}\,\frac{x_0^2 - x_0^M}{1-x_0^2},$$

ovvero

$$\boxed{N^*(T) = 4\times 10^{10}\,\frac{e^{-2\beta V_0} - e^{-M\beta V_0}}{1-e^{-2\beta V_0}}.}$$

Notiamo che se $M=2$ allora la precedente formula fornisce $N^*(T) = 0$. Il risultato non è assurdo perchè se $M=2$ allora qualsiasi $N>0$ le particelle saranno sempre confinate nell'intervallo $(0,2L)$.

2.a Se il sistema è composto da Fermioni di spin 1/2 a $T=0$ si ha:

$$N = \int_{\epsilon_{\min}}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon),$$

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

$$G(\epsilon) = 2\int \frac{dp\,dq}{h}\,\delta\big(\epsilon - H(p,q)\big).$$

Il fattore 2 segue dal fatto che l'Hamiltoniana di singola particella non dipende dalle due possibili orientazioni dello spin della particella. Sostituendo l'espressione di $H(p,q)$ si ha:

$$\begin{aligned} G(\epsilon) &= \frac{2}{h}\int_0^{ML} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\delta\big(\epsilon - a|p| - V(q)\big) = \frac{4}{h}\int_0^{ML} dq\int_0^{+\infty} dp\,\delta\big(\epsilon - ap - V(q)\big) \\ &= \frac{4}{ha}\int_0^{ML} dq\,\theta\big(\epsilon - V(q)\big). \end{aligned} \tag{3}$$

Allo stesso risultato si arriva usando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\delta\big(\tilde\epsilon - a|p|\big) = \frac{d}{d\tilde\epsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\theta\big(\tilde\epsilon - a|p|\big) = \frac{d}{d\tilde\epsilon}\int_{-\tilde\epsilon/a}^{+\tilde\epsilon/a} dp\,\theta(\tilde\epsilon) = \frac{d}{d\tilde\epsilon}\frac{2\tilde\epsilon}{a}\theta(\tilde\epsilon) = \frac{2}{a}\,\theta(\tilde\epsilon),$$

da cui segue facilmente la (3).

Sostituendo l'espressione di $V(q)$ si ha

$$G(\epsilon) = \frac{4}{ha} \sum_{k=1}^{M} \int_{(k-1)L}^{kL} dq\, \theta(\epsilon - (k-1)V_0) = \frac{4L}{ha} \sum_{k=1}^{M} \theta(\epsilon - (k-1)V_0) = \frac{4L}{ha} \sum_{k=0}^{M-1} \theta(\epsilon - kV_0).$$

La richiesta che a $T = 0$ tutte le particelle si trovino nell'intervallo $(0, 2L)$ implica che $V_0 < \epsilon_F \leq 2V_0$, purchè sia $M > 2$. Quindi, essendo $\epsilon_{\min} = \min_q V(q) = 0$, si ha

$$N^* = \int_0^{2V_0} d\epsilon\, G(\epsilon) = \frac{4L}{ha} \sum_{k=0}^{M-1} \int_0^{2V_0} d\epsilon\, \theta(\epsilon - kV_0) = \frac{4L}{ha} \left[\int_0^{2V_0} d\epsilon + \int_{V_0}^{2V_0} d\epsilon \right] = \frac{4L}{ha} \left[2V_0 + V_0 \right],$$

ovvero

$$\boxed{N^* = \frac{12LV_0}{ha}, \qquad M > 2.}$$

Se $M = 2$ le particelle sono sempre confinate nell'intervallo $(0, 2L)$ per cui:

$\boxed{M = 2 \text{ non esiste valore massimo } N^*.}$

Tuttavia esiste un valore minimo $\tilde{N}$ tale che per $N \leq \tilde{N}$ le particelle a $T = 0$ sono confinate nell'intervallo $(0, L)$. Questo è dato da

$$\tilde{N} = \int_0^{V_0} d\epsilon\, G(\epsilon) = \frac{4L}{ha} \int_0^{V_0} d\epsilon \left[\theta(\epsilon) + \theta(\epsilon - V_0) \right] = \frac{4LV_0}{ha}.$$

Quindi per $M = 2$ le particelle a $T = 0$ si trovano in tutto l'intervallo $(0, 2L)$ se e solo se $N > \tilde{N}$.

2.b L'energia del sistema a temperatura $T = 0$ è data da

$$E(T = 0) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon\, G(\epsilon)\, \epsilon.$$

Per $\epsilon_F = 2V_0$ si ha:

$$E(T = 0) = \frac{4L}{ha} \sum_{k=0}^{M-1} \int_0^{2V_0} d\epsilon\, \epsilon\, \theta(\epsilon - kV_0) = \frac{4L}{ha} \left[\int_0^{2V_0} d\epsilon\, \epsilon + \int_{V_0}^{2V_0} d\epsilon\, \epsilon \right] = \frac{4L}{ha} \frac{1}{2} \left[4V_0^2 + 4V_0^2 - V_0^2 \right],$$

L'energia richieste è quindi

$$\boxed{E(T = 0) = \frac{14LV_0^2}{ha}}$$