Corso di Meccanica Statistica
Proff. A. Crisanti e A. Vulpiani
Compito del 10.05.2016

Si consideri un sistema costituito da N particelle identiche non interagenti contenute in un volume tridimensionale V con Hamiltoniana di singola particella

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma) = a\, p^3 + b\, \sigma, \qquad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3,\ \mathbf{q} \in V,$$

dove $p = |\mathbf{p}|$, σ è una variabile che può assumere valori discreti e a e b sono costanti positive.

Si chiede:

1. Assumendo che il sistema, in equilibrio a temperatura T, sia composto da particella classiche e $\sigma = -1, +1$:
   (a) L'energia media per particella $U(T)/N$;
   (b) Il valore p^* per cui la densità di probabilità $P(p)$ del modulo dell'impulso $\mathbf{p}$ assume il valore massimo;
   (c) il valore medio $\langle\sigma\rangle$.
2. Assumendo che il sistema sia composto da Bosoni e $\sigma = -1, 0, +1$:
   (a) Discutere l'esistenza o meno della condensazione di Bose-Einstein.
3. Assumendo che il sistema sia composto da Fermioni e $\sigma = -1, +1$:
   (a) Il valor medio $\langle\sigma\rangle$ a $T = 0$ in funzione dei parametri del sistema;
   (b) L'energia $U(T = 0)$ in funzione dei parametri del sistema.

- **Risposte**

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

1.a L'energia media può essere calcolata dalla funzione di partizione canonica Z_N come $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$. 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:

$$\begin{aligned} Z_1 = \sum_\sigma \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3} e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)} &= \frac{V}{h^3} \sum_\sigma e^{-\beta b\sigma} \int d^3p\, e^{-\beta a p^3} \\ &= \frac{4\pi V}{h^3} \sum_\sigma e^{-\beta b\sigma} \int_0^{+\infty} dp\, p^2 e^{-\beta a p^3}. \end{aligned} \tag{1}$$

Nel caso specifico $\sigma = -1, +1$:

$$\sum_\sigma e^{-\beta b\sigma} = e^{\beta b} + e^{-\beta b} = 2\cosh \beta b.$$

Inoltre

$$\int_0^{+\infty} dp\, p^2 e^{-\beta a p^3} = \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} dp^3\, e^{-\beta a p^3} = \frac{1}{3\beta a} \int_0^{+\infty} dy\, e^{-y} = \frac{1}{3\beta a}.$$

Otteniamo così:

$$Z_1 = \frac{8\pi V}{3h^3 \beta a} \cosh \beta b.$$

Sostituendo:

$$\boxed{U(T)/N = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_1 = T - b \tanh \beta b.}$$

In alternativa si può utilizzare la relazione

$$U(T)/N = \langle H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma) \rangle = a\langle p^3 \rangle + b\langle \sigma \rangle.$$

Notando che la distribuzione di probabilità di una qualsiasi grandezza $\mathcal{A}(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)$ è:

$$P(A) = \frac{1}{Z_1} \sum_\sigma \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3} e^{-\beta H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)}\, \delta(A - \mathcal{A}(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)),$$

dalla (1) segue facilmente che:

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta b\sigma}}{\sum_\sigma e^{-\beta b\sigma}} = \frac{e^{-\beta b\sigma}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}}, \tag{2}$$

$$P(p) = \frac{p^2 e^{-\beta a p^3}}{\int_0^{+\infty} dp\, p^2 e^{-\beta a p^3}} = 3\beta a p^2 e^{-\beta a p^3}, \tag{3}$$

dove $p = |\mathbf{p}|$ è il modulo dell'impulso. Di conseguenza

$$\langle \sigma \rangle = \sum_\sigma \sigma\, P(\sigma) = \frac{-e^{\beta b} + e^{-\beta b}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}} = -\tanh \beta b,$$

$$\langle p^3 \rangle = \int_0^{+\infty} dp\, p^3 P(p) = 3\beta a \int_0^{+\infty} dp\, p^5 e^{-\beta a p^3} = \beta a \int_0^{+\infty} dp^3\, p^3 e^{-\beta a p^3} = \frac{1}{\beta a} \int_0^{+\infty} dy\, y\, e^{-y} = \frac{1}{\beta a},$$

da cui

$$\boxed{U(T)/N = \langle H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma) \rangle = a\langle p^3 \rangle + b\langle \sigma \rangle = T - b \tanh \beta b.}$$

1.b Dalla (3), vedi punto precedente, segue che

$$\frac{d}{dp}\ln P(p) = \frac{1}{P(p)}\left(\frac{2}{p} - 3\beta a p^2\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad 2 - 3\beta a p^3 = 0,$$

da cui

$$\boxed{p^* = \left[\frac{2}{3\beta a}\right]^{1/3}.}$$

Notiamo che $(p^*)^3 = \frac{2}{3}\langle p^3\rangle$.

1.c Dalla (2), vedi punto precedente, segue che

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = \sum_\sigma \sigma\, P(\sigma) = \frac{\sum_{\sigma=\pm1}\sigma\, e^{-\beta b\sigma}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}} = \frac{-e^{\beta b} + e^{-\beta b}}{e^{\beta b} + e^{-\beta b}} = -\tanh\beta b.}$$

2.a Se il sistema è composto da Bosoni il numero di particelle a temperature T è pari a $N = N_0 + \tilde{N}$; dove N_0 è il numero di particelle nello stato condensato ($\epsilon = \epsilon_{\min}$) ed $\tilde{N}$ il numero di particelle nello stato non-condensato ($\epsilon > \epsilon_{\min}$) dato da,

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

con $G(\epsilon;\sigma)$ densità degli stati di singola particella con σ fissato:

$$G(\epsilon;\sigma) = \int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}\,\delta\big(\epsilon - H(\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma)\big) = \frac{V}{h^3}\int d^3p\,\delta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big), \qquad p = |\mathbf{p}|.$$

Usando l'identità

$$\delta\big(f(p)\big) = \sum_k \frac{1}{|f'(p_k)|}\,\delta(p - p_k), \qquad \text{con } p_k : \; f(p_k) = 0,$$

otteniamo

$$\delta\big(\tilde{\epsilon} - ap^3\big) = \frac{1}{3ap_0^2}\,\delta(p - p_0), \qquad \text{con } p_0 = \big(\tilde{\epsilon}/a\big)^{1/3}.$$

Ne segue

$$G(\epsilon;\sigma) = \frac{4\pi V}{h^3}\int_0^{+\infty} dp\, p^2\,\delta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big) = \frac{4\pi V}{h^3}\, p_0^2\, \frac{1}{3ap_0^2}\,\theta(p_0)$$

ovvero

$$G(\epsilon;\sigma) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\,\theta(\epsilon - b\sigma). \tag{4}$$

Alternativamente utilizzando l'identità $\delta(x) = (d/dx)\theta(x)$ si ha:

$$\begin{aligned} G(\epsilon;\sigma) &= \frac{4\pi V}{h^3}\frac{d}{d\epsilon}\int_0^{+\infty} dp\, p^2\,\theta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big) = \frac{4\pi V}{3h^3}\frac{d}{d\epsilon}\int_0^{+\infty} dp^3\,\theta\big(\epsilon - ap^3 - b\sigma\big) \\ &= \frac{4\pi V}{3h^3}\frac{d}{d\epsilon}\int_0^{(\epsilon-b\sigma)/a} dy\,\theta\big(\epsilon - b\sigma\big) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\frac{d}{d\epsilon}\Big[(\epsilon - b\sigma)\,\theta\big(\epsilon - b\sigma\big)\Big], \end{aligned}$$

da cui segue facilmente la (4).

Sostituendo, ed osservando che $\epsilon_{\rm min} = -b$, otteniamo

$$\begin{aligned}\tilde{N} &= \frac{4\pi V}{3h^3 a} \sum_{\sigma=-1,0,+1} \int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{\theta\big(\epsilon - b\sigma\big)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \\ &= \frac{4\pi V}{3h^3 a\beta} \sum_{\sigma=-1,0,+1} \ln\Big[1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\Big]\Big|_{b\sigma}^{+\infty} = -\frac{4\pi V}{3h^3 a\beta} \sum_{\sigma=-1,0,+1} \ln\Big[1 - e^{-\beta(b\sigma-\mu)}\Big].\end{aligned}$$

Per $\sigma = -1$ si ha

$$\boxed{\lim_{\mu\to -b^-} \ln\big[1 - e^{-\beta(-b-\mu)}\big] = -\infty \quad \Rightarrow \quad \text{Non esiste condensazione Bose-Einstein.}}$$

I termini con $\sigma = 0$ e $\sigma = 1$ rimangono finiti per $\mu \to -b^-$.
Alla stessa conclusione si può giungere osservando che per $\mu = -b$ il termine con $\sigma = -1$

$$\int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{\theta\big(\epsilon + b\big)}{e^{\beta(\epsilon+b)} - 1} = \int_{0}^{+\infty} d\epsilon\, \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}$$

diverge logartimicamente all'estremo inferiore, $e^{\beta\epsilon} - 1 \sim \beta\epsilon$ per $\epsilon \ll 1$.

3.a Per definizione

$$\langle\sigma\rangle = \sum_{\sigma} P(\sigma)\,\sigma,$$

dove $P(\sigma)$ è la probabilità di osservare il valore σ:

$$P(\sigma) = \frac{N(\sigma)}{N} = \frac{1}{N}\int_{\epsilon_{\rm min}}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon), \qquad n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1},$$

dove $N(\sigma)$ è il numero di particelle con σ fissato e $G(\epsilon;\sigma)$ la densità degli stati di singola particella con σ fissato calcolata al punto precedente.
Osservando che $N = \sum_\sigma N(\sigma)$ ed $\epsilon_{\rm min} = -b$, si ha:

$$P(\sigma) = \frac{\int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon)}{\sum_\sigma \int_{-b}^{+\infty} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\, n(\epsilon)} \quad \xrightarrow[T=0]{} \quad P(\sigma) = \frac{\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)}{\sum_\sigma \int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)}.$$

Usando la $G(\epsilon;\sigma)$ calcolata al punto precedente si ottiene,

$$\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma) = \frac{4\pi V}{3h^3 a} \int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \theta(\epsilon - b\sigma).$$

Il valore di questo integrale dipende dalla condizione $\epsilon_{\rm F} > b$ o $\epsilon_{\rm F} < b$.
• Caso $\epsilon_{\rm F} > b$
In questo caso si ha $[\sigma = \pm 1]$:

$$\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;-1) = \frac{4\pi V}{3h^3 a} \int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \theta(\epsilon + b) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}(\epsilon_{\rm F} + b),$$

$$\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;+1) = \frac{4\pi V}{3h^3 a} \int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \theta(\epsilon - b) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}(\epsilon_{\rm F} - b),$$

da cui

$$N = \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma) = \frac{8\pi V}{3h^3 a}\epsilon_{\rm F} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\rm F} = \frac{3h^3 a}{8\pi}\frac{N}{V}.$$

$$P(\sigma) = \frac{\epsilon_{\rm F} - b\sigma}{2\epsilon_{\rm F}} = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{b}{\epsilon_{\rm F}}\sigma\right].$$

Sostituendo ed osservando che $\sigma^2 = 1$:

$$\langle\sigma\rangle = \sum_{\sigma=\pm1} \sigma P(\sigma) = \frac{1}{2}\sum_{\sigma=\pm1}\left[\sigma - \frac{b}{\epsilon_{\rm F}}\right] = -\frac{b}{\epsilon_{\rm F}} = -\frac{8\pi b}{3h^3 a}\frac{V}{N}.$$

• Caso $\epsilon_{\rm F} < b$
In questo caso si ha $[\sigma = \pm 1]$:

$$\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;-1) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \theta(\epsilon + b) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}(\epsilon_{\rm F} + b),$$

$$\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;+1) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \theta(\epsilon - b) = 0,$$

da cui

$$N = \sum_{\sigma=\pm1}\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}(\epsilon_{\rm F} + b) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\rm F} = \frac{3h^3 a}{4\pi}\frac{N}{V} - b.$$

$$P(\sigma) = \delta^{\rm Kr}_{\sigma,-1},$$

dove $\delta^{\rm Kr}_{a,b}$ è la delta di Kronecker. Di conseguenza

$$\langle\sigma\rangle = \sum_{\sigma=\pm1}\sigma P(\sigma) = -1.$$

Definendo $b_0 = \frac{3h^3 a}{8\pi}\frac{N}{V}$, cosicchè $\frac{8\pi V}{3h^3 a} = N/b_0$, si ha

$$\boxed{\langle\sigma\rangle = \begin{cases} -\dfrac{b}{b_0}, & b_0 > b \quad [\epsilon_{\rm F} = b_0 > b], \\ -1, & b_0 < b \quad [\epsilon_{\rm F} = 2b_0 - b < b]. \end{cases}}$$

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

$$U(T=0) = \sum_{\sigma=\pm1}\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, G(\epsilon;\sigma)\,\epsilon = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\sum_{\sigma=\pm1}\int_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\, \epsilon\, \theta(\epsilon - b\sigma).$$

Di nuovo bisogna distinguere i casi $\epsilon_{\rm F} > b$ e $\epsilon_{\rm F} < b$. Nel primo caso si ha

$$U(T=0) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\left[\frac{\epsilon^2}{2}\bigg|_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} + \frac{\epsilon^2}{2}\bigg|_{b}^{\epsilon_{\rm F}}\right] = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\big(\epsilon_{\rm F}^2 - b^2\big),$$

mentre nel secondo caso il termine $\sigma = 1$ non contribuisce e si ha

$$U(T=0) = \frac{4\pi V}{3h^3 a}\,\frac{\epsilon^2}{2}\bigg|_{-b}^{\epsilon_{\rm F}} = \frac{2\pi V}{3h^3 a}\big(\epsilon_{\rm F}^2 - b^2\big).$$

Ponendo come prima $b_0 = \frac{3h^3 a}{8\pi}\frac{N}{V}$, cosicchè $\frac{8\pi V}{3h^3 a} = N/b_0$, si ha

$$\boxed{U(T=0) = \begin{cases} \dfrac{N}{2b_0}\big(b_0^2 - b^2\big), & b_0 > b \quad [\epsilon_{\rm F} = b_0 > b], \\ N\big(b_0 - b\big), & b_0 < b \quad [\epsilon_{\rm F} = 2b_0 - b < b]. \end{cases}}$$