#### Università degli Studi di Trento – Dipartimento di Fisica

# Corso di Fisica Computazionale

Esercitazione del 03 Marzo 2016

# Integrali e zeri di funzioni

#### Indice

1	Metodo Babilonese per la radice quadrata	1
2	Temperatura di Boyle	1
3	Quantizzazione di Bohr–Sommerfeld	1
4	Gas ideale di Fermi	2

### 1 Metodo Babilonese per la radice quadrata

Implementare il metodo Babilonese per il calcolo della radice quadrata, testandolo su alcuni numeri tra  $1 e 10^9$ .

#### 2 Temperatura di Boyle

Considerando un gas di particelle la cui interazione è descritta dal potenziale di Lennard-Jones, calcolare la temperatura di Boyle  $T_{\rm B}^*$ , definita da

$$B(T_{\rm B}^*) = 0,$$

dove  $T^* = k_{\rm B}T/\varepsilon$  indica la temperatura ridotta del sistema.

### 3 Quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

Le energie  $E_n$  degli stati stazionari di una particella che che si muove in un potenziale unidimensionale V(x) sono date, in prima approssimazione, dall'espressione

$$h\left(n+\frac{1}{2}\right) = 2\int_{a}^{b} \sqrt{2m\left(E_{n}-V(x)\right)} dx,$$

dove h è la costante di Planck,  $n = 0, 1, 2, \dots$  ed a e b sono i punti di inversione classici del moto di una particella con energia  $E_n$ . Utilizzare questa formula per:

- calcolare le energie dei primi 5 stati di un oscillatore armonico, confrontando il risultato ottenuto col valore noto dalla risoluzione esatta del problema,
- calcolare le energie dei primi 3 stati legati di un dimero di Neon in onda s, assumendo che i due atomi interagiscano secondo un potenziale di Lennard-Jones con  $\varepsilon/k_{\rm B}=35.7~{\rm K}$  e  $\sigma=2.79~{\rm Å}$ , e riportando il risultato in J/ $k_{\rm B}$ , dove  $k_{\rm B}$  è la constante di Boltzmann,
- stabilire sotto quali condizioni un sistema di due particelle interagenti secondo il potenziale Lennard-Jones non presenta alcuno stato legato in questa approssimazione.

#### 4 Gas ideale di Fermi

Calcolare il potenziale chimico  $\mu$  di un gas di Fermi ideale per particelle di massa m a spin  $\sigma = \frac{1}{2}$  in funzione della temperatura T e della densità numerica  $\varrho = N/V$ , risolvendo l'equazione

$$\varrho = \frac{(2\sigma + 1)}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty dE \, \frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_{\rm B}T}\right) + 1}$$

in un opportuno sistema di unità ridotte e confrontando i risultati ottenuti con l'espansione al secondo ordine per basse temperature

$$\frac{\mu(T,\varrho)}{E_{\rm F}} = 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_{\rm B}T}{E_{\rm F}}\right)^2 - \frac{\pi^4}{80} \left(\frac{k_{\rm B}T}{E_{\rm F}}\right)^4 + \dots$$

dove

$$E_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2 \varrho}{2\sigma + 1} \right)^{2/3}.$$

Stabilire per quale valore della temperatura T il potenziale chimico  $\mu$  si discosta dal suo valore approssimato per più del 5% nel caso di un sistema di atomi di <sup>3</sup>He ad un densità  $\rho = 0.059 \text{ g cm}^{-3}$ , supponendo che si possa trattare l'Elio-3 come un fluido fermionico ideale.

Ripetere lo stesso calcolo per un gas di elettroni (nell'approssimazione in cui questi siano non-interagenti) corrispondenti alla densità media presente in un blocco di Ferro ( $\rho_{\text{Fe}} = 7.874 \text{ g cm}^{-3}$ ).

Discutere il limite di alta temperatura della funzione  $\mu(T, \varrho)$ , derivandone un'espressione analitica. Stabilire il valore minimo di T (in opportune unità ridotte) oltre il quale il limite di alta temperatura si discosta dal valore numerico per meno del 5%.