12/12

Recap: Pot. di Landau: $\begin{cases} \Omega = -k_BT \log Z_{GC} \\ \Omega = -pV \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{pV}{k_BT} = \log Z_{GC}(\mu,V,T) \\ N = -\dfrac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial \mu}\log Z_{GC}(\mu,V,T) \end{cases}$

specifico gli stati: elimino la degenerazione di scambio $g(N,E)$!

consente di ricavare e scrivere $\mu=\mu(T,V,N)$

$$\boxed{Z_{GC}} = \sum_{N,E} g(E,N)\, e^{-\beta(E-\mu N)} = \sum_{n_1,n_2,\dots,n_k} e^{-\beta(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2 + \dots - \mu(n_1+n_2+\dots))}$$

$$= \sum_{n_1} e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)n_1} \times \sum_{n_2} e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)n_2} \times \dots \times \sum_{n_j} e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j} \times \dots$$

=
- BOSONI $\quad n_j \in \mathbb{N}: \quad \boxed{\prod_i \dfrac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}}}$
- FERMIONI $\quad n_j = \{0,1\}: \quad \boxed{\prod_i \left[1+e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right]}$

> Z_{GC} è una produttoria di serie

<u><n> dello stato k-esimo</u>

$$\langle n_k \rangle = \sum_{N,E} n_k P(E,N) = \prod_{i\neq k} \boxed{\sum_{\{n\}}} n_k \frac{e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}\, e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)n_i}}{\boxed{Z_{GC}}}$$

$$\boxed{Z_{GC}} = \left(\prod_j \sum_{n_j} e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}\right)$$

$$\boxed{\sum_{\{n\}}} = \sum_{n_1} \dots \sum_{n_j} \dots$$

$$= \sum_{n_k} n_k\, e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k} \cdot \frac{1}{\sum_k e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}}$$

$$= -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k} \frac{1}{\sum_k e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}}$$

$$= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \log \boxed{Z^k_{GC}} \longrightarrow Z_{GC} \text{ del singolo stato quantistico di energia } \varepsilon_k$$

EQUAZIONE DI STATO

Riepiloghiamo:

$$\frac{pV}{k_BT} = \log Z_{GC} \begin{cases} \sum_i \log\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right) & \text{FERMIONI} \\ -\sum_i \log\left[1-e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right] & \text{BOSONI} \end{cases}$$

$$\left(i = k = \frac{2\pi}{L}(n_x,n_y,n_z)\right)$$

Gas debolmente degenere

Poniamoci nel caso $n < n_Q$ ma non $n \ll n_Q$

gas classico: $\mu = k_B T \log \frac{n}{n_Q}$, da cui $e^{\beta\mu} = \frac{n}{n_Q} \ll 1$ perché $\frac{n}{n_Q} \ll 1$

gas debolmente degenere: $e^{\beta\mu} \ll 1$

$\log(1+x) \simeq x + x^2$ ' espansione e si

$$\begin{cases} N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \log Z_{GC} \\ \frac{pV}{k_B T} = \dots \end{cases}$$

e ottengo $\mu = \mu(T, V, N)$ che porge l'eq. di stato:

$$\boxed{\frac{pV}{k_B T} = N\left(1 \boxed{\pm \frac{n}{n_Q}\frac{1}{2^{5/2}}}\right)}$$

correzione per gas debolmente degenere

$$\boxed{\begin{array}{l} +: \text{fermioni} \\ -: \text{bosoni} \end{array}}$$

$$\boxed{\frac{p}{k_B T} = n\left(1 \pm \frac{n}{n_Q}\frac{1}{2^{5/2}}\right)}:$$

fissati densità n e temperatura T, i fermioni hanno pressione maggiore dei bosoni. Manifestazione delle FORZE DI SCAMBIO: l'antisimmetria della funzione d'onda porta i fermioni a stare più lontani

Spiegazione intuitiva: caso di 2 particelle che occupano due stati u_A, u_B

distinguibili: $\psi_D(x_1, x_2) = u_A(x_1)\, u_B(x_2)$

fermioni: $\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_A(x_1)\, u_B(x_2) - u_A(x_2)\, u_B(x_1)\right]$

bosoni: $\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_A(x_1)\, u_B(x_2) + u_A(x_2)\, u_B(x_1)\right]$

Calcoliamo la distanza media $\langle |x_1 - x_2|^2 \rangle$ nei tre casi. Scopriremo che essa è maggiore per fermioni e minore per bosoni:

(1) $$\int d^3x_1\, d^3x_2\, (x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 x_2)\, |u_A(x_1)|^2 |u_B(x_2)|^2$$

$$= \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x_A \rangle \langle x_B \rangle \equiv \Delta_D$$

(2) $$\int d^3\vec{x}_1\, d^3\vec{x}_2\, (\vec{x}_1^2 + \vec{x}_2^2 - 2\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_2)\, |\psi_\pm(x_1, x_2)|^2$$

$$= \dots = \Delta_D \mp 2\, |\langle a|\vec{x}|b\rangle|^2$$

$-$ bosoni

$+$ fermioni

indistinguibilità, probabilità che due particelle siano nello stesso posto:

$$P(x_1=x,\ x_2=x) = \begin{cases} 0 & \text{fermioni} \\ >0 & \text{bosoni} \end{cases}$$

$\boxed{\text{ESERCIZIO}}$

Ricavare l'eq. di stato del gas perfetto $pV = N k_B T$ nell'ensemble gran canonico.

$$\frac{pV}{k_B T} = \log Z_{GC}, \qquad N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu}\log Z_{GC}, \qquad Z_{GC} = \sum_{E,N} g(E,N)\, e^{-\beta(E-\mu N)}$$

$$= \sum_N \boxed{\sum_E g(E,N)\, e^{-\beta E}}\, e^{\beta\mu N}$$

$Z_C(N)$ a N fissato

canonica

serie generatrice $= \sum_N Z_C(N)\, e^{\beta\mu N}$

approssimazione di gas classico:

$$Z_{GC} = \sum_N \frac{Z_1^N}{N!} e^{\beta\mu N} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(Z_1 e^{\beta\mu})^N}{N!} = \exp[Z_1 e^{\beta\mu}]$$

$$\Rightarrow \frac{pV}{k_B T} = Z_1 e^{\beta\mu}, \qquad N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}(Z_1 e^{\beta\mu}) = \frac{1}{\cancel{\beta}} Z_1 \cancel{\beta} e^{\beta\mu} \Rightarrow \boxed{e^{\beta\mu} = \frac{N}{Z_1}}$$

$$\Rightarrow \frac{pV}{k_B T} = \cancel{Z_1}\frac{N}{\cancel{Z_1}} \quad \text{OK}$$

gas classico: $\mu = \frac{1}{\beta}\log\frac{n}{n_a}$

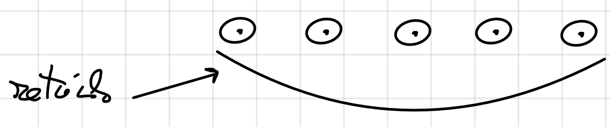
$$\Rightarrow e^{\beta\mu} = \frac{n}{n_a} \approx \frac{V}{V} = \frac{N}{Z_1}$$

Gas degenere

Fermioni

MODELLO: particelle non interagenti in una scatola, e.g.

elettroni in un metallo. In realtà gli elettroni interagiscono. Giustifichiamo l'approssimazione di particelle libere.



FONDO

Assumiamo che le cariche (e^- di valenza, nuclei ionizzati) formino una distribuzione continua, come una sorta di gelatina (JELLIUM)

L'hamiltoniana classica è

termini di interazione

$$H = \sum_i \frac{\bar{p}_i^2}{2m_e} + \sum_j \frac{P_j^2}{2M_N} + \boxed{U_{ee} + U_{ef} + U_{ff}}$$

fondo - fondo

elettrone-elettrone   elettroni - fondo

$$U_{ee} = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3x' \frac{n(x)\, n(x')}{4\pi\varepsilon_0 |x-x'|} \quad : \text{repulsiva}$$

$$U_{ef} = \int d^3x\, d^3x' \frac{n(x)\, n_+(x')}{4\pi\varepsilon_0 |x-x'|} \quad : \text{attrattiva}$$

$$U_{ff} = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3x' \frac{n_+(x)\, n_+(x')}{4\pi\varepsilon_0 |x-x'|} \quad : \text{repulsiva}$$

$\Rightarrow U_{ee} + U_{ef} + U_{ff} = 0$ se $n_f = n_e$

> Ciò giustifica la modellizzazione di elettroni in un metallo mediante un gas di elettroni liberi

E.g. $n_{Na} \sim 10^{22}/cm^3$, $n_{Q_{Na}} \sim (m k_B T)^{3/2} \sim 10^{19}/cm^3$ a T ambiente

---

Temperatura nulla (T=0)

stati: $u_{\bar{k}}(\bar{x}) = \dfrac{e^{i\bar{k}\cdot\bar{x}}}{\sqrt{V}}$, energia $\varepsilon(\bar{k}) = \dfrac{\hbar^2}{2m}\bar{k}^2$, $\bar{k} = \dfrac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$

ε_F: energia di Fermi

V fissato, studio $\varepsilon_F = \varepsilon_F(n)$

$n = \dfrac{N}{V}$ → numero di particelle

↳ scala spaziatura h

Densità di stati nel limite termodinamico $(N,V)\to\infty$

$h \to 0$.

> $D(\varepsilon)\, d\varepsilon$ = # stati/unità di volume con energia compresa tra ε e $\varepsilon + d\varepsilon$

$$N = V\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon) \Rightarrow \boxed{n = \frac{N}{V} = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\, d\varepsilon}$$

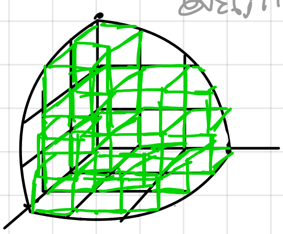
. Per trovare $D(\varepsilon)$ consideriamo il limite termodinamico $L \to \infty$

Ignota notazione: livello energetico arbitrario

$$\int_0^{\tilde{\varepsilon}} d\varepsilon\, D(\varepsilon) = \frac{1}{V}\left(\#\text{ vettori t.c. } \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} < \tilde{\varepsilon}\right) \simeq \frac{1}{V}\boxed{\frac{4\pi\tilde{k}^3}{3}}\ \boxed{\frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}}$$

volume all'interno sfera di raggio $\tilde{k}$

volume singolo cubo



da cui $\displaystyle\int_0^{\tilde{\varepsilon}} d\varepsilon\, D(\varepsilon) = \frac{1}{V}\frac{4\pi}{3}\boxed{\tilde{k}}^3 \cdot \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \cdot 2$

$\tilde{k} = \left(\dfrac{2m\tilde{\varepsilon}}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$

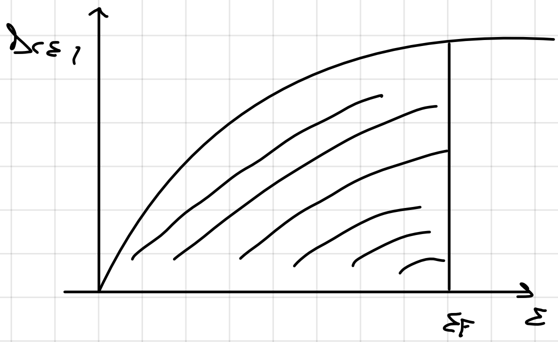
2: spin

si ottiene $\int_0^{\tilde{\varepsilon}} D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m\tilde{\varepsilon}}{\hbar^2}\right)^{3/2}$ densità di stati

$$\Rightarrow D(\varepsilon) = \frac{d}{d\tilde{\varepsilon}}\left[\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m\tilde{\varepsilon}}{\hbar^2}\right)^{3/2}\right]_{\tilde{\varepsilon}=\varepsilon} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2} \Rightarrow \boxed{D(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}}$$

a $T=0$, $n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\,\sqrt{\varepsilon}$

$$= \frac{2}{3}\,\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon_F^{3/2}$$



$$\Rightarrow \boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}}$$

energia di Fermi

Introducendo il vettore d'onda di Fermi $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, scriviamo $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2$ e concludiamo che k_F è il momento di una particella libera di energia ε_F

Es: calcolare $D[\varepsilon_F(n)]$

$$\boxed{D(\varepsilon_F)} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon_F^{1/2} = \boxed{\frac{3n}{2\varepsilon_F}}$$

Es: energia media per particella $\langle\varepsilon\rangle$

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{V}{N}\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\;\varepsilon\, D(\varepsilon) = \frac{1}{n}\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\,\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{3/2} = \frac{1}{n}\,\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{2}{5}\,\varepsilon_F^{5/2}$$

energia totale

Si ricordi $\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\varepsilon_F}{(3\pi^2 n)^{2/3}}$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\varepsilon\rangle = \frac{3}{5}\,\varepsilon_F}$$

energia media per particella ε_S