Elementi di Meccanica Statistica
I esonero A.A. 2008-2009
12 dicembre 2008

Si consideri un gas perfetto di N particelle di massa m all'interno di una sfera di raggio R. Le particelle sono soggette ad un potenziale centrale dato da

$$V(r) = b\Theta\left[(r_2 - r)(r - r_1)\right],\ 0 < r_1 < r_2 < R,\ b \in \mathbb{R}$$

dove $\Theta(x)$ è la funzione a gradino che vale 1 per valori positivi dell'argomento e 0 per quelli negativi. La hamiltoniana di singola particella risulta quindi

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r).$$

Si chiede di determinare:

1. la funzione di partizione e l'energia libera nell'ensemble canonico;
2. la pressione esercitata dal gas sulla superficie della sfera discutendo in modo esplicito i limiti di alte e basse temperature e distinguendo i casi di valori positivi e negativi del parametro b;
3. l'energia interna del gas discutendo anche in questo caso i limiti di alte e basse temperature per valori positivi e negativi di b.

Soluzione

In coordinate sferiche la funzione di partizione di singola particella risulta

$$Z_1 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi mkT)^{3/2} 4\pi \int_0^R \mathrm{d}r\ r^2\ e^{-\beta V(r)}. \tag{1}$$

L'integrale su r risulta

$$\int_0^R \mathrm{d}r\ r^2\ e^{-\beta V(r)} = r_1^3 + e^{-\beta b}(r_2^3 - r_1^3) + R^3 - r_2^3. \tag{2}$$

La funzione di partizione del gas è quindi

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{(2\pi mkT)^{3N/2}}{N!} \left[\frac{4\pi}{3}\left(R^3 - (r_2^3 - r_1^3)(1 - e^{-\beta b})\right)\right]^N. \tag{3}$$

L'energia libera risulta allora

$$F = -NkT \ln\left[\left(\frac{(2\pi mkT)^{1/2}}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{4\pi e}{3N}\left(R^3 - (r_2^3 - r_1^3)(1 - e^{-\beta b})\right)\right]. \tag{4}$$

La pressione esercitata dal gas sulla superficie della sfera si può ottenere considerando la variazione di energia libera per una variazione di volume $\mathrm{d}V = 4\pi R^2 \mathrm{d}R$, cioè considerando la variazione dell'energia libera per una variazione del raggio. Si ha quindi

$$P = -\frac{1}{4\pi R^2}\frac{\partial F}{\partial R} \tag{5}$$

dove $-\partial F/\partial R$ rappresenta la forza radiale esercitata dal gas. Otteniamo quindi

$$P = \frac{NkT}{\frac{4\pi}{3}\left(R^3 - (r_2^3 - r_1^3)(1 - e^{-\beta b})\right)}. \tag{6}$$

Nel limite di alte temperature, $\beta \to 0$, per modo che il fattore $1 - e^{-\beta b}$ si annulla, la pressione diventa quella di un gas perfetto in una sfera

$$P = \frac{NkT}{\frac{4\pi}{3}R^3}. \tag{7}$$

Tale risultato non dipende dal segno di b. Nel limite di basse temperature, $\beta \to \infty$, dobbiamo distinguere i due casi corrispondenti a valori positivi e negativi di b. Per $b > 0$, si ha

$$P = \frac{NkT}{\frac{4\pi}{3}\left(R^3 - (r_2^3 - r_1^3)\right)}. \tag{8}$$

Eq.(8) corrisponde alla pressione di un gas perfetto in cui al volume della sfera si sia sottratto il volume della corona sferica racchiusa tra i raggi r_1 ed r_2. Ciò significa che la particelle non hanno sufficiente energia per superare la barriera di potenziale b. Per $b < 0$, si ha invece

$$P = \frac{NkT}{\frac{4\pi}{3}\left(r_2^3 - r_1^3\right)} e^{-\beta|b|}. \tag{9}$$

La pressione tende ad annullarsi esponenzialmente come risultato del fatto che le particelle sono intrappolate nella buca di potenziale corrispondente alla corona sferica racchiusa tra i raggi r_1 ed r_2.

Per il calcolo dell'energia interna usiamo la formula

$$U = F - T\frac{\partial F}{\partial T}. \tag{10}$$

Otteniamo agevolmente

$$U = \frac{3}{2}NkT + Nb\frac{(r_2^3 - r_1^3)e^{-\beta b}}{R^3 - (r_2^3 - r_1^3)(1 - e^{-\beta b})}. \tag{11}$$

Nel limite di alte temperature il segno di b è irrilevante e si ha

$$U = \frac{3}{2}NkT + Nb\frac{(r_2^3 - r_1^3)}{R^3} \tag{12}$$

che corrisponde ad un gas di N particelle libere di cui una frazione pari al rapporto tra il volume della corona sferica e quello della sfera ha energia potenziale Nb.

Nel limite di basse temperature, per $b > 0$, si ha

$$U = \frac{3}{2}NkT \tag{13}$$

che corrisponde al fatto che tutte le N particelle sono al di fuori della corona sferica. Nel caso $b < 0$, invece, si ha

$$U = \frac{3}{2}NkT - N|b| \tag{14}$$

che corrisponde al fatto che tutte le particelle sono intrappolate all'interno del guscio sferico.