Elementi di Meccanica Statistica
I esonero A.A. 2009-2010
16 aprile 2010

Si consideri un gas perfetto di N particelle di massa m contenute in un parallelepipedo rettangolo di altezza h e lati di base l_x ed l_y. L'hamiltoniana del gas è

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \alpha z_i \right] ,$$

con $\alpha > 0$ ed avendo scelto un sistema di assi cartesiani con l'asse z parallelo allo spigolo di lunghezza h e il piano $z = 0$ coincidente con il piano individuato dalla base del parallelepipedo. Si chiede di:

1. calcolare l'espressione dell'energia libera del gas nell'ensemble canonico;
2. dimostrare che il rapporto tra la pressione esercitata dal gas sulla faccia superiore del parallelepipedo e quella esercitata sulle facce laterali è

   $$\frac{P_{sup}}{P_{lat}} = \frac{x}{e^x - 1}$$

   dove $x = \beta\alpha h$;
3. calcolare l'espressione dell'energia interna del gas;
4. dimostrare che il calore specifico è

   $$c_V = N k_B \left(\frac{5}{2} - \frac{1}{4} \frac{x^2}{\sinh^2(x/2)} \right) ;$$

5. discutere il valore dell'energia interna nel limite $h \to \infty$ alla luce del teorema di equipartizione.

Soluzione

Le particelle sono indipendenti, quindi possiamo calcolare gli integrali sugli impulsi e sulle coordinate per ciascuna particella separatamente. L'integrale sugli impulsi produce il risultato standard

$$(2\pi m/\beta)^{3/2}.$$

L'integrale sulle coordinate invece è

$$l_x l_y \int_0^h \mathrm{d}z e^{-\beta\alpha z} = l_x l_y \frac{1-e^{-\beta\alpha h}}{\beta\alpha}.$$

In definitiva, l'energia libera è

$$F = -k_B T \ln\left[\frac{1}{N!}\left((2\pi m k_B T)^{3/2} l_x l_y (1-e^{-\beta\alpha h})(\beta\alpha)^{-1}\right)^N\right].$$

La pressione esercitata sulla faccia superiore è

$$P_{sup} = -\frac{1}{l_x l_y}\frac{\partial}{\partial h}F,$$

mentre quella esercitata su una delle facce laterali è

$$P_{sup} = -\frac{1}{h l_y}\frac{\partial}{\partial l_x}F.$$

Si ottiene allora

$$P_{lat} = N\frac{k_B T}{h l_x l_y}$$

che corrisponde alla pressione di un gas perfetto in assenza di potenziale, mentre

$$P_{sup} = N\frac{\alpha}{l_x l_y}\frac{1}{e^{\beta\alpha h}-1}.$$

Notiamo che, nel limite $\alpha \to 0$, P_{sup} diventa uguale a P_{lat}, come ci si aspetta. Facendo il rapporto tra le due pressioni trovate, si ottiene l'espressione richiesta nel testo. Per calcolare l'energia interna usiamo la formula

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z.$$

Otteniamo

$$U = N\left(\frac{5}{2}k_B T - \frac{\alpha h}{e^{\beta\alpha h}-1}\right).$$

Notiamo che, nel limite $\alpha \to 0$, si ottiene l'energia standard del gas perfetto, in quanto il secondo termine in parentesi tende al valore $k_B T$. Derivando rispetto alla temperatura si ottiene l'espressione del calore specifico richiesta nel testo.

Nel limite $h \to \infty$, l'energia interna diventa $(5/2)Nk_B T$. In base al teorema di equipartizione, ogni coordinata o impulso canonico q contribuisce all'energia con

$$\langle q \frac{\partial H}{\partial q} \rangle = k_B T.$$

Dunque per gli impulsi si ha il risultato standard, mentre si ha $K_B T$ per la dipendenza lineare da z. Notiamo che il risultato del teorema di equipartizione si ottiene considerando nulli termini di superficie provenienti da un'integrazione per parti. Tali termini di superficie, nel caso presente, sono diversi da zero quando h non è infinito.