

Primo appello - prima sessione
(tempo 3 ore)

Si risolvano i due esercizi che seguono. **NOTA BENE:**

- Si diano tutti i passaggi necessari a capire in dettaglio il procedimento di soluzione. Risposte con il solo risultato o dettagli insufficienti non saranno considerate;
- se richieste, si diano le valutazioni (numeriche) con 3 cifre significative, né più né meno.

Esercizio 1 *Molecole biatomiche non interagenti*

Si consideri un sistema classico di N molecole biatomiche non interagenti all'interno di una scatola cubica di volume V e a temperatura T . L'hamiltoniana di una singola molecola è presa come

$$H(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) + \frac{K}{2}|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2,$$

ove $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ sono i momenti e le posizioni dei due atomi nella molecola. Evidentemente, essendo le molecole non interagenti la separabilità implica che se $Q_2(V, T)$ è la funzione di partizione canonica della singola molecola, allora la funzione di partizione canonica totale $Q_N(V, T)$ è proporzionale a $Q_2(V, T)^N$.

1. Si calcoli la funzione di partizione della singola Molecola.
2. Si calcoli la funzione di partizione totale e da questa l'energia libera.
3. Si calcoli il calore specifico.
4. Si calcoli il diametro quadratico medio $\langle |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 \rangle$.

Suggerimento

Per il calcolo della $Q_2(V, T)$ (problema a 2 corpi), conviene passare alle variabili distanza relativa \mathbf{r} e posizione del centro di massa \mathbf{R} . L'integrale su \mathbf{r} può essere esteso a tutto lo spazio per $K > 0$ e V grandi. L'integrale su \mathbf{R} va esteso alla scatola.

Esercizio 2 *Particelle classiche in campo esterno nell'Ensemble canonico in 2 dimensioni, con masse anisotrope*

Si considerino N particelle identiche non interagenti in regime classico in un potenziale armonico. L'hamiltoniana evidentemente è

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_{x_i}^2}{2m_x} + \frac{p_{y_i}^2}{2m_y} + \frac{K}{2}(x_i^2 + y_i^2) \right].$$

1. Si calcoli la funzione di partizione $Q_N(T, \omega)$, ove $\omega^2 = K/m^*$, e $m^* = \sqrt{m_x m_y}$; da questa si ottenga l'energia libera $A(N, T, \omega)$.
2. Si dica se l'espressione per $A(N, T, \omega)$ trovata al punto precedente fornisca una quantità estensiva oppure no e perché.
3. Si calcoli la densità ad un corpo

$$\rho(\mathbf{r}) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\rangle = N \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \rangle,$$

ove $\langle \dots \rangle$ indica la media canonica, come funzione di N , T , ω and r . A questo punto e solo a questo punto si consideri $\omega = \omega_0/\sqrt{N}$ e si riscriva $\rho(r)$ in termini di $l_0 = \sqrt{2\pi K_B T / (m^* \omega_0^2)}$, N e r e si faccia un disegno qualitativo di $\tilde{\rho}(r) = l_0^2 \rho(r)$ come funzione di $r/(l_0 \sqrt{N})$. Come dipende da N la larghezza a mezza altezza di $\tilde{\rho}(r)$?

4. Con la scelta $\omega = \omega_0/\sqrt{N}$ l'entropia è estensiva o no e perché ?