2.4 Dall'insieme configurazionale ed esteso all'insieme microcanonico (Kiessling)

Nell'ultimo capitolo abbiamo studiato:

$$S_U^-(\Lambda,n,E) = \log \Omega_U(\Lambda,n,E), \quad \Omega_U(\Lambda,n,E) = \frac{1}{n!}\int_{\Lambda^n} dq\, \chi(U(q) < E).$$

Adesso vogliamo arrivare al limite termodinamico di

$$S_H(\Lambda,n,E) = \log \Omega'(\Lambda,n,E), \quad \Omega'_H(\Lambda,n,E) = \frac{1}{n!}\int_{\mathbb{R}^{3n}\times\Lambda^n} dp\, dq\, \delta(E - H(p,q))$$

con $H(p,q) = K(p) + U(q) = \sum_{i=1}^{n} |p_i|^2 + \sum_{1\le i<j\le N} \Phi(q_i - q_j)$.

U stabile e temperato.

(1) Da $H = K + U$ a solo U, ma con l'insieme esteso.

$$\chi(H(p,q) < \mathcal{E}) = \int_0^\infty \chi(U(q) < \mathcal{E} - E)\, \delta(E - K(p))\, dE.$$

Integrando rispetto p e q:

$$\begin{aligned}
\Omega_H(\Lambda,n,\mathcal{E}) &= \int_{\mathbb{R}^{3n}\times\Lambda^n} \frac{1}{n!}\, dp\, dq\, \chi(H(p,q) < \mathcal{E}) \\
&= \frac{1}{n!}\int dp\, dq \int_0^\infty \chi(U(q) < \mathcal{E} - E)\, \delta(E - K(p))\, dE \\
&= \int_0^\infty dE \left(\frac{1}{n!}\int_{\Lambda^n} dq\, \chi(U(q) < \mathcal{E} - E)\right)\left(\int_{\mathbb{R}^{3n}} dp\, \delta(E - K(p))\right) \\
&= \int_0^\infty dE\, \underbrace{\Omega_U(\Lambda,n,\mathcal{E} - E)}_{\text{l'insieme config. ed esteso del capitolo 2.2+2.3}}\, \frac{n!}{|\Lambda|^n} \underbrace{\Omega'_K(\Lambda,n,E)}_{\text{come per il gas ideale}}
\end{aligned}$$

Per il gas ideale: $\frac{n!}{|\Lambda|^n}\Omega'_K(\Lambda,n,E) = \int_{\mathbb{R}^{3n}} dp\, \delta(E - K(p))$

$$= \int dp\, \delta(E - |p|^2) = \int_0^\infty dp\, 3N\, p^{3N-1} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}\, \delta(p^2 - E)$$

$$= \int_0^\infty \frac{de}{2\sqrt{e}}\, 3N\, e^{\frac{3N-1}{2}} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}\, \delta(e-E) = E^{\frac{3N}{2}-1} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}.$$

$p = \sqrt{e}$

$dp = \frac{de}{2\sqrt{e}}$

Per ottenere il limite termodinamico:

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log\left(\frac{n!}{|\Lambda|^n}\, \Omega'_K(\Lambda,n,E)\right) = \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log\left(E^{\frac{3N}{2}-1} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}\right)$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|}\left(\frac{3N}{2}\log(E\pi) - \log(E) - \log\left(\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)\right)\right)$$

Stirling

$$= \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|}\left(\frac{3N}{2}\log(E\pi) - \log(E) - \frac{3N}{2}\log\left(\frac{3N}{2}\right) + \frac{3N}{2} + O(\log N)\right)$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{3N}{2|\Lambda|} \log\left(\frac{E\pi}{|\Lambda|} \cdot \frac{2|\Lambda|}{3N}\right) - \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|}\log(E)$$

$$+ \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{3N}{2|\Lambda|} + \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|} O(\log N)$$

$$O(\log N) = O\left(\log\left(\underbrace{\frac{N}{|\Lambda|}}_{\to\rho}\right) + \log(|\Lambda|)\right)$$

$$= \frac{3}{2}\rho \log\left(e\pi\, \frac{2}{3}\, \frac{1}{\rho}\right) + \frac{3}{2}\rho$$

dove $\frac{E}{|\Lambda|} \to e$, $\frac{N}{|\Lambda|} \to \rho$.

$$\Rightarrow\ s_K(\rho, e) = \frac{3}{2}\rho\left(\log\left(e\pi\frac{2}{3}\rho^{-1}\right) + 1\right)$$

s piccolo $\left(\frac{\text{entropia}}{\text{volume}}\right)$

In particolare il limite esiste.

Per dimostrare che esiste non solo il limite $s_K(\rho,e)$ e il limite $s_{\bar{u}}(\rho,e) = \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log \Omega_U(\Lambda,n,E)$, ma esiste anche il limite della convoluzione Ω_H usiamo il metodo di Laplace.

Metodo di Laplace (idea generale)

Come calcolare $\int_a^b e^{Mf(x)}\,dx$ per $M\to\infty$?

Laplace: approssimare col valore nel massimo globale di f.

Lemma: [metodo di Laplace]

Sia $f \in C^2([a,b])$ con un unico punto di massimo globale $\in (a,b)$ $\left(f(x_0) = \max_{x\in[a,b]} f(x)\right)$

con $f''(x_0) < 0$. Allora

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\int_a^b e^{nf(x)}\,dx}{e^{nf(x_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{-nf''(x_0)}}} = 1.$$

Motivazione: Usando Taylor: $f(x) \approx f(x_0) - \frac{1}{2}|f''(x_0)|(x-x_0)^2$.

Così otteniamo una funzione gaussiana:

$$\int_a^b e^{Mf(x)}\,dx \approx \int_a^b e^{Mf(x_0)}\, e^{-\frac{M}{2}|f''(x_0)|(x-x_0)^2}\,dx$$

$$\approx e^{Mf(x_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{M}{2}|f''(x_0)|(x-x_0)^2}\,dx$$

$$= e^{Mf(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{M|f''(x_0)|}}.$$

Dimostrazione completa su Wikipedia.

Commento: Usando il metodo di Laplace su Γ otteniamo Stirling:

$$N! = \Gamma(N+1) = \int_0^\infty e^{-x} x^N\,dx \qquad x = Nz,\ dx = N\,dz$$

$$= N^{N+1}\int_0^\infty e^{N(\log z - z)}\,dz.$$

Applicazione per l'entropia (solo idea):

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log \Omega_H(\Lambda,n,E) = \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\int_0^\infty \Omega_U(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_K'(\Lambda,n,E)\,dE\right)$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\int_0^\infty e^{|\Lambda|(S_u^-(\rho,\varepsilon-e)+S_k(\rho,e))}\,dE\right)$$

costante?

$$= \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\exp\left(|\Lambda|\sup_e\left(S_u^-(\rho,\varepsilon-e)+S_k(\rho,e)\right)\right)\right)$$

$$= \sup_e\left(S_u^-(\rho,\varepsilon-e)+S_u(\rho,e)\right) =: S_{totale}(\rho,\varepsilon).$$

Dimostrazione: Avendo i limiti per S_u e S_u^- (dal teorema 2.3.2 (a)) troviamo che esiste un intervallo $(t_1,t_2)\neq\emptyset$ tale che, per $\delta>0$, per Λ suff. grande, e per ogni $t\in(t_1,t_2)$:

$$\frac{n!}{|\Lambda|^n}\Omega'_k(n,t)\,\Omega_U(\Lambda,n,E-t)$$
$$\geq \exp\left(|\Lambda|\left(S_{totale}(\rho,\varepsilon)-\delta\right)\right),$$

$$S_{totale}(\rho,\varepsilon) := \sup_{\varepsilon'\in(0,\varepsilon-\varepsilon_0(\rho))}\left(S_k(\rho,\varepsilon')+S_u^-(\rho,\varepsilon-\varepsilon')\right).$$

Questo inserito nell'integrale:

$$\liminf_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\Omega_H(\Lambda,n,E)\geq S_{totale}(\rho,\varepsilon).$$

Per una stima superiore, con $\delta>0$, Λ grande e ogni t:

$$\frac{n!}{|\Lambda|^n}\Omega'_k(n,t)\,\Omega_U(\Lambda,n,E-t)$$
$$\leq \exp\left(|\Lambda|\left(S_{totale}(\rho,\varepsilon)+\delta\right)\right).$$

(Se non fosse soddisfatta, si potrebbe trovare una successione (Λ_i,n_i,E_i) che non soddisfa il limite termodinamico).

$$\limsup_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\Omega_H(\Lambda,n,E)\leq S_{totale}(\rho,\varepsilon).$$ ∎

Raccogliendo tutto questo:

<u>Teorema 2.4.1:</u> [limite termodinamico per H, insieme esteso]

Se $\Lambda\to\infty$ (Fisher), $\frac{n}{|\Lambda|}\to\rho$, $\frac{E}{|\Lambda|}\to e$, dove $0\leq\rho\leq\rho_{cp}$, $\varepsilon>\varepsilon_0(\rho)$, allora esiste il limite termodinamico dell'entropia di H per l'insieme esteso:

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\frac{1}{n!}\int_{\mathbb{R}^{3n}\times\Lambda^n}dp\,dq\;\chi\left(H(p,q)\leq E\right)\right)=S_{totale}(\rho,\varepsilon)$$
$$=\sup_{\varepsilon'\in(0,\varepsilon-\varepsilon_0(\rho))}\left(S_u^-(\rho,\varepsilon-\varepsilon')+S_k(\rho,\varepsilon')\right).$$

(2) <u>Dall'insieme esteso per H all'insieme microcanonico per H (ragionamento formale)</u>

$$\Omega_H(\Lambda,n,\mathcal{E}) = \int_0^\infty \Omega_u(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k'(\Lambda,n,E)\,dE$$

$$\Omega_H(\Lambda,n,\mathcal{E}) = \frac{1}{n!}\int dp\,dq\,\chi(H(p,q)<E)$$

$$\Omega_H'(\Lambda,n,\mathcal{E}) = \frac{d}{d\mathcal{E}}\int_0^\infty \Omega_u(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k'(\Lambda,n,E)\,dE$$

$$= \int_0^\infty \frac{d}{d\mathcal{E}}\,\Omega_u(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k'(\Lambda,n,E)\,dE$$

$$= -\int_0^\infty \frac{d}{dE}\,\Omega_u(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k'(\Lambda,n,E)\,dE$$

integrazione per parti:

$$= \int_0^\infty \Omega_u(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\,\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k''(\Lambda,n,E)\,dE.$$

<u>Esiste il limite termodinamico per Ω_k'' ?</u>

$$\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k''(\Lambda,n,E) = \frac{\partial}{\partial E}\left(E^{\frac{3N}{2}-1}\,\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}\right)$$

$$= \left(\frac{3N}{2}-1\right)E^{\frac{3N}{2}-2}\,\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}.$$

$$\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k''(\Lambda,n,E)\right)$$

$$= \left.\frac{1}{|\Lambda|}\log\left(\frac{3N}{2}-1\right) - \frac{1}{|\Lambda|}\log E \;\right\}\to 0$$

$$\left.+\log\left(\frac{n!}{|\Lambda|^n}\,\Omega_k'(\Lambda,n,E)\right)\;\right\}\to s_k$$

<u>Niente cambia!</u> In particolare il limite esiste ancora.

In particolare anche l'entropia è la stessa.

(3) Dall'insieme esteso di H all'insieme microcanonico di H (ragionamento rigoroso)

$$\Omega'_H(\Lambda,n,\mathcal{E}) = \frac{1}{n!}\int dp\,dq\ \delta(\mathcal{E}-H(p,q))$$

$$= \frac{1}{n!}\int_{\Lambda^n} dq \int_{\mathbb{R}^{3n}} dp\ \delta(\mathcal{E}-|p|^2-U(q))$$

(come 13 aprile)

$$= \frac{1}{n!}\int dq \int_0^\infty dp\ 3N\, p^{3N-1}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}\,\delta(p^2-(\mathcal{E}-U(q)))$$

$$= \frac{1}{n!}\int dq \int_0^\infty \frac{de}{2e^{1/2}}\ 3N\, e^{\frac{3N-1}{2}}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}\,\delta(e-(\mathcal{E}-U(q)))$$

$$= \frac{1}{n!}\int dq\ \frac{3N}{2}\left(\mathcal{E}-U(q)\right)^{\frac{3N}{2}-1}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}.$$

Cerchiamo una formula di convoluzione con Ω_U:

$$\left.\begin{aligned} &P\int_0^{\mathcal{E}} E^{P-1}\int \chi(U(q)<\mathcal{E}-E)\,dq\,dE \\ &= \int(\mathcal{E}-U(q))^P\chi(U(q)<\mathcal{E})\,dq \end{aligned}\right\}\ \text{Controllate!}$$

per ogni $P>0$. Così otteniamo:

$$\Omega'_H(\Lambda,n,\mathcal{E}) = \frac{1}{n!}\int dq\ \left(\mathcal{E}-U(q)\right)^{\frac{3N}{2}-1}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

$$= \frac{1}{n!}\left(\frac{3N}{2}-1\right)\int_0^{\mathcal{E}} E^{\frac{3N}{2}-2}\underbrace{\int\chi(U(q)<\mathcal{E}-E)\,dq}_{=\Omega_U(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)}\,dE \times\frac{3N}{2}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

$$= \int_0^{\mathcal{E}} dE\ \Omega_U(\Lambda,n,\mathcal{E}-E)\ \underbrace{\frac{3N}{2}\left(\frac{3N}{2}-1\right)E^{\frac{3N}{2}-2}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}}_{}$$

come prima: limite esiste, $\longrightarrow S_K$.

Teorema 2.4.2: Teorema 2.4.1 vale anche per l'insieme microcanonico:

$$\lim_{\Lambda \to \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log\left(\frac{1}{n!}\int_{\mathbb{R}^{3n}\times\Lambda^n} dp\, dq\ \delta(H(p,q) - E)\right) = S_{totale}(\rho, \varepsilon).$$

- fine del capitolo 2 -