

# Meccanica statistica

## 1) Introduzione

1.1) Cos'è la meccanica statistica?

1.2) la teoria microscopica

1.3) L'ipotesi ergodica

1.4) L'insieme microcanonico

1.5) Le quantità termodinamiche

1.6) Il gas ideale

1.7) La correzione di Gibbs:  $1/N!$

## 1.1 Cos'è la meccanica statistica?

Lo studio di sistemi con "molte" particelle.

L'idea fondamentale della MS:

trovare delle quantità osservabili che descrivono le proprietà macroscopiche del sistema (pressione, temperatura), e l'interazione del sistema con altri sistemi e con l'ambiente.

Esempi:

1) L'origine della MS: il contatto di un gas o di vapore in un motore a vapore.

descrizione  
microscopica:

$N = 10^{23}$  molecole  
di acqua, con  $10^{23}$   
posizioni in  $\mathbb{R}^3$  e  $10^{23}$   
momenti lineari in  $\mathbb{R}^3$ .

$$\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$$

descrizione  
macroscopica:

la termodinamica:  
relazioni tra pressione,  
temperatura, volume,  
transizioni di fase:  
acqua  $\leftrightarrow$  vapore.

## 2) I magneti:

### Descrizione microscopica:

$N = 10^{23}$  spin quantistici  
di elettroni sul reticolo  
di un cristallo: equazione  
di Schrödinger

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^2$$

### Descrizione macroscopica:

relazione tra temperatura,  
campo magnetico esterno,  
e la magnetizzazione  
(momento magnetico)  
del pezzo di ferro.

Esiste una temperatura  $T_c$  (ferro:  $770^\circ\text{C}$ )  
("c" = "critica") tale che la magnetizzazione  
è zero per  $T > T_c$  e spontaneamente diventa non-zero  
quando  $T < T_c$ . Come si spiega questa transizione  
di fase (la transizione ferromagnetica)?

## 3) I condensati di Bose-Einstein

(prima osservazione: 1995, premio Nobel 2001)

### Descrizione microscopica:

equazione di Schrödinger  
su  $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{10^5} \mathcal{H}_i^2$ ,  
$$i\hbar \partial_t \Psi = \left( \sum_{i=1}^N -\hbar^2 \Delta_i + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(x_i - x_j) \right) \Psi$$
  
$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \prod_{i=1}^N \varphi(x_i), \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

### Descrizione macroscopica:

La funzione d'onda  
del condensato  
 $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$   
equazione di Gross-  
Pitaevskii (non-lineare)  
$$i\hbar \partial_t \varphi = -\hbar^2 \Delta \varphi + g |\varphi|^2 \varphi$$

Transizione di fase alla temperatura

$$T_c = \left( \frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B}$$

$$\approx 6 \cdot 10^{-8} \text{ K}$$

per gli atomi di rubidio.

$n$ : densità del gas  
 $m$ : massa di una particella  
 $k_B$ : costante di Boltzmann  
 $\zeta$ : funzione  $\zeta$  di Riemann

## 1.2 La teoria microscopica

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle con  
momenti  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ ,  
posizioni  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ ,  
e le masse  $m_i > 0$ .

L'evoluzione temporale è definita dalle equazioni  
di Hamilton:

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}).$$

L'Hamiltoniana è l'energia totale del sistema,

tipicamente:  $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \underbrace{\sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(q_i - q_j)}_{\text{interazione tra le coppie}}$ .

(Spesso  $m_i = \frac{1}{2}$ .)

Per  $\Phi \in C_b^2$  abbiamo un flusso  $S_t$

sullo spazio di fase:  $S_t: \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$   
 $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \longmapsto (\mathbf{p}_t, \mathbf{q}_t)$ .

Un'osservabile è una funzione  $O: \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}$ ,  
per esempio l'energia cinetica:  $K(\mathbf{p}, \mathbf{q}) := \sum_{i=1}^N p_i^2$ .

La media temporale (per l'intervallo del tempo  $[0, T]$ )  
dell'osservabile  $O$  è:

$$\langle O \rangle_T := \frac{1}{T} \int_0^T dt O(S_t(\mathbf{p}, \mathbf{q})).$$

In generale  $\langle O \rangle_T$  dipende dai valori iniziali.

In realtà questa formula non è molto utile perché non possiamo calcolare  $S_t$  per  $N > 3$ .

La proposta della MS: un trucco per calcolare le relazioni  
tra osservabili  $O_1, O_2, O_3, \dots, O_5$  (un numero non dipende da  $N$ )  
usando solo  $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  senza calcolare il flusso  $S_t$ .

Le costanti del moto: Per sistemi di alta complessità,

normalmente esiste solo una costante del moto:

l'energia totale:  $E = H(p, q)$ .

In fatti:

$$\frac{d}{dt} H(S_t(p_0, q_0)) = \frac{d}{dt} H(p(t), q(t))$$

$$= \sum_{i=1}^N \dot{p}_i \frac{\partial}{\partial p_i} H(p, q) + \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} H(p, q)$$

usando le equazioni di Hamilton:

$$= \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\partial}{\partial q_i} H(p, q) \right) \frac{\partial}{\partial p_i} H(p, q) + \frac{\partial}{\partial p_i} H(p, q) \frac{\partial}{\partial q_i} H(p, q) = 0.$$

L'evoluzione muove sulla superficie

$$\mathcal{M}_{N,E} := \{ (p, q) \in \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N} : H(p, q) = E \}.$$

Se le particelle sono confinate a uno spazio fisso  $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ :

$$\mathcal{M}_{N,E,\Lambda} := \{ (p, q) \in \mathbb{R}^{3N} \times \Lambda^N : H(p, q) = E \}.$$

Come ci ciula questa cosa?

→ Youtube: "Thermalization of 200 rigid billiard balls",  
SPS La Guardia, 5/4/2020.

Ci sono un paio di collisioni, e poi il sistema diventa un gas.

Le configurazioni per esempio a  $t = 17s$  e la configurazione a  $t = 23s$  hanno la stessa probabilità.

Postulato (versione I): Tutte le configurazioni con l'energia  $H(p, q) = E$  hanno la stessa probabilità.

Se aspetto un tempo  $T_{relax}$  molto più lungo del "tempo tipico microscopico".

Nella simulazione:  $T_{relax} \approx 10 T_{microscopico}$ ,

dove  $T_{microscopico}$  = intervallo di tempo tra due collisioni.

### 1.3 L'ipotesi ergodica di Boltzmann:

Definiamo la misura di probabilità

$$\mu_{N,E,\Lambda}(dp dq) := \frac{1}{\mathcal{L}(N,E,\Lambda)} \delta(H(p,q) - E) \frac{dp dq}{N!}$$

e la normalizzazione  $\mathcal{L}(N,E,\Lambda) := \int_{\mathbb{R}^{2N} \times \Lambda^N} \delta(H(p,q) - E) \frac{dp dq}{N!}$ .

Postulato (versione II) / ipotesi ergodica:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt O(S_t(p_0, q_0)) = \int_{\mathbb{R}^{2N} \times \Lambda^N} \mu_{N,E,\Lambda}(dp, dq) O(p, q)$$

Vantaggi: 1) non dobbiamo calcolare il flusso

2) la configurazione iniziale non entra più.

Problemi: 1) dimostrarla è molto difficile.

↳ "10000 balls in a chaotic billiard

and a dash", Quattrone, 7/11/2017.