Derivazione variazionale delle statistiche di Fermi e Bose

L. P.

6 Novembre 2006

1 Statistica di Fermi

Supponiamo di avere un sistema di N fermioni, ognuno dei quali può trovarsi in uno stato di singola particella i cui è associata l'energia ϵ_i. Vogliamo valutare il valor medio n_i del numero d'occupazione dello stato i. Sebbene questo problema possa essere più facilmente risolto nell'*ensemble* gran canonico, è istruttivo ottenerlo sfruttando il principio variazionale degli ensemble generalizzati. In questo caso, lo stato del sistema è univocamente definito dall'insieme $\{i_1, \ldots, i_N\}$ degli stati occupati. Poiché la probabilità d'occupazione dipende alla fine solo dall'energia ϵ_i dello stato, raggruppiamo gli stati di singola particella in gruppi tali che il numero di stati G_j che si trovano nello stesso gruppo j sia grande, il numero di particelle N_j che si trovano nel gruppo j sia parimenti grande, ma che l'energia di tutti gli stati che appartengono al gruppo j sia praticamente uguale. Quindi l'ensemble è ben definito quando siano noti, per ciascun gruppo j, il numero di stati G_j, l'energia corrispondente ϵ_j, e il numero medio d'occupazione $n_j = N_j/G_j$. Fissato N_j, il numero di modi in cui possiamo distribuire le particelle all'interno del gruppo j è chiaramente dato da $G_j!/N_j!(G_j - N_j)!$, che corrisponde al numero di modi in cui è possibile scegliere gli N_j stati occupati fra i G_j possibili. Il logaritmo di questa quantità è dato da

$$s_j = -G_j \left[\ln n_j + \ln(1 - n_j)\right], \tag{1}$$

come si ottiene applicando la formula di Stirling. L'entropia di Shannon associata alla distribuzione $\{n_j\}$ è data da

$$\mathcal{S} = \sum_j s_j = -k_{\mathrm{B}} \sum_j G_j \left[\ln n_j + \ln(1 - n_j)\right]. \tag{2}$$

Vogliamo cercare il massimo di questa espressione rispetto a n_j, con le condizioni

$$\sum_j N_j = \sum_j G_j n_j = N; \qquad \sum_j G_j \epsilon_j n_j = E. \tag{3}$$

Introducendo i moltiplicatori di Lagrange α e β otteniamo l'equazione

$$\ln \frac{n_j}{1 - n_j} = \alpha - \beta \epsilon_j,$$

che ammette come soluzione

$$n_j = \frac{1}{e^{-\alpha+\beta\epsilon_j} + 1}. \tag{4}$$

Questa è la distribuzione di Fermi, espressa in funzione dei parametri $\alpha = \mu/k_{\mathrm{B}}T$ e $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$.

2 Statistica di Bose

Consideriamo adesso un sistema di N bosoni, e procediamo di nuovo al raggruppamento degli stati di singola particella. In questo caso il numero di modi in cui è possibile disporre le N_j particelle nei G_j stati è dato dal numero di modi in cui gli N_j stati possono essere scelti *con ripetizione*. Questo numero può essere valutato considerando che esso è uguale al numero di modi di ripartire N_j biglie identiche in G_j scatole. Indichiamo una disposizione di questo tipo nel modo seguente:

$$|\bullet\;\bullet|\bullet||\bullet\;\bullet\;\bullet| \quad \text{etc.},$$

dove le barre verticali delimitano successivamente la prima, la seconda, ..., la n-esima scatola e i puntini rappresentano le biglie. Abbiamo in totale N_j palline e $G_j + 1$ barre, ma la posizione della prima e dell'ultima barra sono fissate rispettivamente all'inizio e alla fine della sequenza. Quindi il numero di disposizioni è pari al numero di modi in cui possiamo porre le N_j palline fra N_j+G_j-1 posizioni possibili. Questo numero è pari a $(N_j+G_j-1)!/N_j!(G_j-1)!$ e il suo logaritmo è dato da

$$s_j = -G_j\left[(1+n_j)\ln(1+n_j) - n_j\ln n_j\right], \tag{5}$$

dove $n_j = N_j/G_j$ è il numero d'occupazione medio. L'entropia di Shannon associata a questa distribuzione è quindi

$$\mathcal{S} = \sum_j s_j = -k_{\mathrm{B}}\sum_j G_j\left[(1+n_j)\ln(1+n_j) - n_j\ln n_j\right]. \tag{6}$$

Ottimizzando questa espressione con i soliti vincoli otteniamo

$$n_j = \frac{1}{e^{-\alpha+\beta\epsilon_j} - 1}. \tag{7}$$

Interpretando α e β come sopra otteniamo la distribuzione di Bose

$$n_j = \frac{1}{e^{(\epsilon_j-\mu)/k_{\mathrm{B}}T} - 1}, \tag{8}$$

dove si è supposto che

$$\mu \le \min_j \epsilon_j, \tag{9}$$

perché le n_j non siano negative.