

Transizioni di fase nell'insieme grancanonico: il modello ipercubico

Candidata: Giulia Cencetti (giuliacencetti@gmail.com)

Relatore: dott. Lapo Casetti (casetti@fi.infn.it)

In questo lavoro di tesi si tratta il fenomeno delle transizioni di fase di un sistema dal punto di vista della meccanica statistica d'equilibrio. Ci si concentra in particolare sull'applicazione della teoria a un modello molto semplice, il modello ipercubico, un sistema la cui hamiltoniana $H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \mathcal{V}(q)$ ha energia potenziale \mathcal{V} corrispondente alla generalizzazione in uno spazio delle configurazioni N -dimensionale di una buca di potenziale quadrata con una barriera finita al centro. Il modello ipercubico è già stato studiato negli insiemi statistici canonico e microcanonico. In questo lavoro si è perciò affrontato lo stesso problema nell'insieme grancanonico.

La tesi è organizzata nel modo seguente: dopo un breve richiamo alla teoria degli insiemi statistici di equilibrio, si discute la teoria delle transizioni di fase, che in meccanica statistica si traducono in comportamenti non analitici delle funzioni termodinamiche. Si espone anche la teoria di Lee e Yang, che, tramite lo studio degli zeri della funzione di granpartizione, permette di individuare i valori critici dei parametri di controllo (temperatura e potenziale chimico) a cui avviene una transizione. Nell'ultima parte si introduce il modello ipercubico. Si riportano per completezza i risultati trovati precedentemente per gli insiemi canonico e microcanonico, mentre si approfondisce in particolar modo l'insieme grancanonico. Per tale insieme si ricavano analiticamente alcune grandezze termodinamiche; si nota che per un numero finito N di gradi di libertà tutte le funzioni sono analitiche, come atteso dalla teoria, mentre per $N \rightarrow \infty$ (limite termodinamico) appaiono le singolarità cercate, corrispondenti a transizioni di fase. Si osserva come i grafici tracciati per N finito mostrino un evidente avvicinamento alla funzione ricavata nel limite termodinamico. Se ne deduce che nonostante le transizioni avvengano formalmente solo nel limite termodinamico, di fatto è sufficiente che N sia macroscopicamente grande per osservarle.

Dalle non analiticità si individuano i valori di temperatura e potenziale chimico per cui avvengono le transizioni di fase. Si ricava in tal modo un diagramma di fase che, nonostante l'estrema semplicità del modello, non risulta affatto banale. Si individuano infatti tre curve di coesistenza e un punto triplo.

I risultati ottenuti vengono ulteriormente confermati dalla teoria di Lee e Yang, in quanto i valori critici che si ricavano tramite quest'ultima corrispondono proprio a punti appartenenti alle curve di coesistenza del diagramma di fase ottenuto precedentemente, quindi a transizioni di fase.