

## Riflessioni sulle interazioni a lungo raggio

Jacques Villain

CEA, Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée, Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité, 38054 Grenoble Cedex 9, France  
jvillain@infonie.fr

Diverse leggi della termodinamica classica non mantengono la loro validità in presenza di interazioni a lungo raggio. Ad esempio l'energia non è più proporzionale al numero delle particelle, a densità costante. Inoltre, alcuni stati del sistema che sono instabili in una situazione di tipo canonico, all'equilibrio con un termostato diventano stabili per un sistema isolato (situazione microcanonica). In condizione di equilibrio microcanonico il calore specifico può assumere valori negativi. Nel lavoro che segue si esaminano, con una lineare trattazione, queste condizioni paradossali.

### 1 Estensività e non-estensività

Nel testo di meccanica statistica di Landau-Lifshitz [1] si legge: "Energy and entropy are additive: this means that if the number  $N$  of particles varies, they are proportional to  $N$ ". Questa affermazione è valida per un sistema macroscopico con interazioni a corto raggio. Al contrario, se si hanno interazioni tra due corpi proporzionali all'inverso  $1/r$  della distanza (corrispondenti quindi ad interazioni di Coulomb o di Newton) allora l'energia a densità costante per  $N$  grande è

$$U \propto R^3 \int_a^R r^2 dr/r \approx R^5 \approx N^{5/3}.$$

vale a dire non è additiva (o "estensiva"). Questa espressione è una forma semplificata della formula di Bethe-Weizsäcker valida nei nuclei [2], dove è presente una interazione di Coulomb repulsiva a lungo raggio (proporzionale a  $1/r$ ). Per definizione, dirò che una interazione è a lungo raggio se decresce con la distanza  $r$  meno rapidamente di un'esponenziale  $\exp(-kr)$ , eventualmente moltiplicata per un fattore oscillante o dipendente dall'angolo. Con questa definizione, una interazione a lungo raggio può essere compatibile con l'estensività se la decrescita è sufficientemente rapida. Un esempio, come vedremo, è l'interazione di Van der Waals proporzionale a  $r^{-6}$ . Sulla terra, la materia condensata può essere considerata estensiva in buona approssimazione: da una parte, l'interazione newtoniana fra particelle è trascurabile. D'altra parte, l'interazione di Coulomb non è trascurabile, ma le cariche positive e negative sono in numero uguale e le interazioni si cancellano sulla lunga distanza. Nelle stelle, l'interazione newtoniana ha effetti spettacolari che dipendono dalla massa e dall'energia. Nei testi classici di termodinamica, si tratta generalmente di fisica sulla terra e perciò l'attenzione è generalmente ristretta ad interazioni a corto raggio. Un'eccezione notevole è rappresentata dal libro di Thirring [3]. L'interesse per le interazioni a lungo raggio non è però una novità: i buchi neri furono previsti dall'inglese Michell e da Laplace nel settecento. Nel ventesimo secolo, la scoperta della relatività generale costituì ovviamente un progresso decisivo, ma in questa nota, soprattutto dedicata alla meccanica statistica, conviene piuttosto ricordare alcune opere di grande interesse di Lebowitz e Lieb [4], Thirring [5] and Lieb and Thirring [6]. All'inizio del ventunesimo secolo la meccanica statistica è diventata un argomento molto popolare come si può dedurre dalla bibliografia. Questo interesse è dovuto particolarmente alla scoperta di proprietà sorprendenti come il calore specifico che risulta essere, in certi casi, negativo. Un calore specifico negativo? Abbiamo imparato che il calore specifico è sempre positivo.

## 2 Distribuzione canonica e distribuzione microcanonica

Il calore specifico

$$C = dU/dT \quad (1)$$

è in effetti positivo se l'energia interna

$$U = \sum p_n E_n \quad (2)$$

è definita usando la distribuzione canonica

$$p_n = (1/Z) \exp(-\beta E_n) \quad (3)$$

dove  $Z = \sum \exp(-\beta E_n)$  e  $\beta = 1/(k_B T)$  sono le sommatorie sugli stati  $n$  del sistema  $S$  considerato, la cui energia è  $E_n$  e la cui probabilità è  $p_n$ . La distribuzione canonica è valida per un sistema in equilibrio con un termostato che perturba infinitamente poco il sistema  $S$ . Questa situazione è molto conveniente per un campione in un laboratorio. Non per una stella! Per un oggetto astronomico, dove le interazioni gravitazionali sono essenziali, può risultare più adeguata la distribuzione microcanonica che descrive un sistema di energia  $E$  fissata. La distribuzione microcanonica è definita dalla formula  $p_n = 1/g(E)$  se  $E_n = E$  e  $p_n = 0$ , dove  $g(E)$  è il numero degli stati di energia  $E$ .

Per un sistema estensivo macroscopico le due distribuzioni sono essenzialmente equivalenti. Per dimostrarlo, possiamo scrivere il valore medio canonico di qualsiasi quantità  $X$

$$\langle X \rangle_c = \frac{\sum_n X_n \exp(-\beta E_n)}{\sum_n \exp(-\beta E_n)}$$

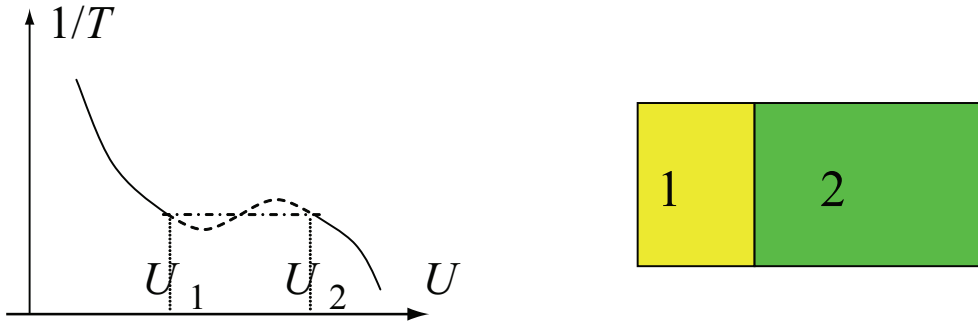
come un integrale sull'energia  $E$  dove compare il valore medio microcanonico  $\langle X \rangle_{mc}(E)$ :

$$\langle X \rangle_c = \frac{\int \langle X \rangle_{mc} e^{S(E) - \beta E} dE}{\int e^{S(E) - \beta E} dE}$$

dove  $e^{S(E)}$  è la densità degli stati, ciò che definisce l'entropia  $S(E)$ . Generalmente l'esponenziale ha un massimo aguzzo per un valore unico  $U_1$ , e  $\langle X \rangle_c$  è uguale a  $\langle X \rangle_{mc}(U_1)$ . Le distribuzioni canonica e microcanonica sono quindi equivalenti. Vi è una eccezione, se ha luogo una transizione di fase con discontinuità dell'energia da un valore  $U_1$  ad un valore  $U_2$  per una certa temperatura. Nel caso canonico, i valori dell'energia fra  $U_1$  e  $U_2$  sono esclusi, impossibili. Nel caso microcanonico, sono invece possibili, tramite la separazione del campione in due domini separati da una parete. Al variare della posizione della parete, l'energia varia da  $U_1$  ad  $U_2$  a temperatura costante. Nella Fig. 1 compare un segmento di retta nel caso microcanonico, mentre nel caso canonico vi è una discontinuità. Ciascuno dei domini è in uno stato che potrebbe essere ottenuto anche all'equilibrio con un termostato, cioè nel caso canonico. Perciò possiamo dire che le due distribuzioni (canonica e microcanonica) sono essenzialmente equivalenti. È vero localmente, non globalmente, perché la discontinuità è sostituita da un segmento di retta. Il calore specifico canonico è positivo, come si dimostra nei testi classici... Il calore specifico microcanonico è uguale al calore specifico canonico (quindi positivo) tranne alla transizione, dove comunque il calore specifico non è definito. Ma ricordiamo che abbiamo supposto che le interazioni siano a corto raggio. Questo è essenziale. Se le interazioni fossero a lungo raggio, una parete del dominio potrebbe perturbare l'intero campione e il segmento di retta non sarebbe un segmento di retta.

## 3 Un modello semplice con interazioni a lungo raggio

Nel caso di interazioni a lungo raggio, ci aspettiamo che le difficoltà siano anche legate alle transizioni di fase. Cerchiamo un esempio semplice, per cominciare. Potremmo pensare a un fluido (che dovrebbe essere



**Fig. 1:** A sinistra: transizione di fase in un sistema macroscopico quando le 2 fasi hanno energie differenti  $U_1$  e  $U_2$ . Per un sistema in equilibrio con un termostato (caso canonico) l'intervallo  $[U_1, U_2]$  è escluso e la temperatura  $T(U)$  non esiste in questo intervallo. Nel caso microcanonico,  $T(U)$  esiste nell'intervallo  $[U_1, U_2]$ . Per interazioni a corto raggio, la curva è un segmento di retta, mentre nel caso non-estensivo si può ottenere la linea a tratti, con parti a pendenza negativa corrispondenti a un calore specifico microcanonico negativo, come discusso nella sezione 3. A destra, un campione con due domini negli stati 1 e 2.

a pressione costante). Ma con interazioni a lungo raggio il fluido diventerà un sistema complesso difficile, magari un buco nero o una stella di neutroni. Lasciamo l'analisi di questi casi agli esperti e consideriamo un sistema con particelle immobili. Un possibile candidato è il modello di Ising. L'hamiltoniana è

$$H = -(1/2) \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (4)$$

dove gli "spin" sono localizzati negli  $N$  punti  $R_i$  di un reticolo, ad esempio cubico. Prendiamo interazioni ferromagnetiche proporzionali alla potenza  $-\alpha$  della distanza:

$$J_{ij} = 1/r_{ij}^\alpha, \quad r_{ij} = |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|. \quad (5)$$

Lo stato fondamentale è  $S_i = 1$  e l'energia è

$$U = -Nu_0 - Nu_1 \int_a^L \frac{r^2 dr}{r^\alpha} = -Nu'_0 - Nu'_1 L^{3-\alpha} \quad (6)$$

dove  $u_0, u_1, u'_0, u'_1$ , sono costanti,  $L$  è la dimensione lineare del campione,  $a$  la distanza fra spin. Questo calcolo dimostra che l'energia per spin è indipendente dalla dimensione  $L$  del campione se  $\alpha > 3$ . Questa è la condizione dell'estensività del modello. Vediamo che l'interazione di Coulomb o di Newton ( $\alpha = 1$ ) non è estensiva, ma l'interazione di Van der Waals ( $\alpha = 6$ ) è estensiva. Per investigare le conseguenze di una transizione di fase, consideriamo il caso artificiale, ma semplice, di interazioni indipendenti dalla distanza, cioè  $\alpha = 0$ . L'hamiltoniana del modello di Ising diventa, aggiungendo un campo magnetico  $NJh$ ,

$$H = -(J/2) \sum_{ij} S_i S_j - NJh \sum_i S_i \quad (7)$$

e si confonde con l'energia  $U$ . La Eq. 6 può scriversi come una funzione

$$U(m) = -(JN^2/2)(m - Nh)^2 + (Nh)^2 J/2 \quad (8)$$

della magnetizzazione media  $m$  per spin

$$m = \sum S_i / N.$$

L'entropia è  $S(m) = -k_B \ln g \ln g$ , dove  $K_B$  è la costante di Boltzmann e  $g$  è il numero degli stati che hanno la magnetizzazione  $Nm$ . L'analisi combinatoria e la formula di Stirling forniscono il risultato ben noto

$$S(m)/k_B = N \ln 2 - (N/2)[(1-m) \ln(1-m) + (1+m) \ln(1+m)] \quad (9)$$

Nell'approccio canonico, il valore di  $m$  all'equilibrio è ottenuto tramite la minimizzazione dell'energia libera  $F(m) = U(m) - TS(m)$ . La soluzione è ben nota: è essenzialmente quella del modello di Ising nell'approssimazione del campo medio, che nel caso dell'hamiltoniana non è più un'approssimazione. Al variare di  $T$  con  $h$  fisso, c'è una transizione soltanto per  $h = 0$ , ma continua ("di secondo ordine"). Al variare di  $h$  con  $T$  fisso, c'è una transizione di primo ordine a  $h = 0$ , con una discontinuità di  $m$  ...ma  $U(m)$  è continua secondo la (8). L'argomento della sezione 2 dimostra l'equivalenza delle distribuzioni canonica e microcanonica. Il calore specifico è quindi positivo secondo le formule (1) e (2). Osserviamo che, per mantenere  $m$  fisso al variare di  $N$ , la temperatura  $T$  deve essere proporzionale a  $N$ ; o più generalmente a  $N^{1-\alpha/3}$ , secondo la (6). Per trovare un caso di non-equivalenza del caso canonico e del caso microcanonico, e forse un calore specifico microcanonico negativo, occorre una discontinuità dell'energia e quindi un modello meno simmetrico del modello di Ising. Una possibilità è di introdurre interazioni a tre spin, ancora indipendenti dalla distanza. L'energia  $U$  è adesso una funzione di terzo grado della magnetizzazione  $m$ ,

$$U(m) = -KN^3m^3 - hN^3Jm \quad (10)$$

mentre l'entropia è ancora data dalla (9). Il campo  $h$  deve essere debole ma positivo. Adesso (Fig. 2)  $U$  è una funzione decrescente di  $m$ , e se c'è una discontinuità di  $m$  a campo costante, c'è una discontinuità dell'energia da un certo valore  $U_1$  ad un valore  $U_2$  per una certa temperatura  $T_c$ . Vogliamo dimostrare che il calore specifico microcanonico  $C$  può essere negativo. Nel caso canonico, l'intervallo di energia fra  $U_1$  e  $U_2$  è vietato. Al di fuori di questo intervallo il caso canonico e il caso microcanonico sono equivalenti per un sistema a molte componenti, secondo l'argomento generale. L'intervallo da  $U_1$  a  $U_2$  è anche un intervallo di magnetizzazione da un certo valore  $m_1$  a un certo valore  $m_2$ . In questo intervallo possiamo definire (Fig. 3) l'energia  $U$ , l'entropia  $S$ , le derivate  $U' = dU/dt$  e  $S' = dS/dm$  e quindi una temperatura  $T = dU/dS = U'/S'$  e un calore specifico  $C = dU/dm$ . Sappiamo che le temperature corrispondenti a  $U_1$  e  $U_2$  sono uguali. Le funzioni  $U(m)$ ,  $S(m)$ ,  $U'(m)$ ,  $S'(m)$  sono continue. Pertanto ci sono certamente valori di  $U$  per i quali  $dT/dU < 0$ , quindi  $C < 0$ .

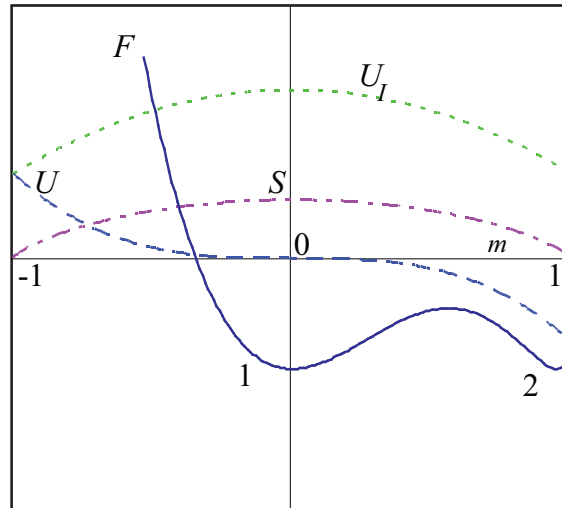
Abbiamo prospettato un modello artificiale il cui unico interesse è di far capire come un calore specifico possa essere negativo e, più generalmente, come un sistema microcanonico possa avere stati vietati nel caso canonico. Un po' meno accademico sarebbe il modello di Ising con interazioni non-estensive dipendenti dalla distanza: per esempio interazioni a due corpi proporzionali a  $r^{-\alpha}$  con  $0 < \alpha < 3$ . Probabilmente c'è ancora una zona di energia ( $U_1 < U < U_2$ ) vietata nel caso canonico. Nel caso microcanonico una congettura plausibile è che per  $U_1 < U < U_2$  abbiamo (come nel caso estensivo della sezione 2) due domini separati da una parete. Lontano dalla parete, la perturbazione della magnetizzazione va a zero, ma lentamente, cosicché la perturbazione dell'energia totale non è trascurabile per un campione infinito. La parete ha quindi uno spessore infinito. Ci aspettiamo un calore specifico negativo per certi valori dell'energia.

#### 4 Interazioni a lungo raggio realistiche

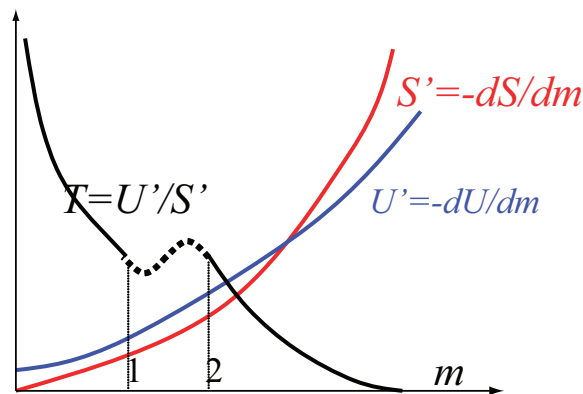
Proporrò soltanto alcuni esempi stimolanti e una bibliografia.

**Esempio 1. elettroni e nuclei con una interazione di Coulomb:** Il calore specifico è positivo (Lebowitz e Lieb 1969 [4]).

**Esempio 2. interazione newtoniana (stelle e galassie):** Un articolo di rassegna didattica è quello di Balian-Blazot [7].



**Fig. 2:** L'energia (Eq. 10)  $U$  in blu e l'entropia (Eq. 9)  $S$  in rosa. L'energia libera  $F = U - TS$  in nero ha due minimi uguali alla temperatura di transizione  $T_c$ . L'energia  $U_I$  del modello di Ising è evidenziata in verde.



**Fig. 3:** Le curve  $U' = dU/dm$  e  $S' = dS/dm$  in funzione di  $m$ , ottenute dalle (Eq. 10) e (Eq. 9). La linea nera rappresenta la temperatura  $T$ : la parte continua è comune ai formalismi canonico e microcanonico, mentre la parte punteggiata è valida soltanto nel formalismo microcanonico; nella parte dove la pendenza è negativa, il calore specifico microcanonico è negativo.

**Buco nero secondo Laplace:** La velocità di fuga  $v$  da una stella di massa  $M$  e di raggio  $R$  soddisfa  $mv^2/2 > GMm/R$ , dove  $G$  è la costante di Newton. Pertanto la luce, che ha la velocità  $c$  non può fuggire se  $R < 2GM/c^2$ . Abbiamo un buco nero. Ovviamente la teoria corretta deve usare la relatività generale, che da però un risultato simile! Il valore  $2GM/c^2$  si chiama raggio di Schwarzschild. Altri esperti dei buchi neri sono Chandrasekhar, R. Penrose, S. Hawking...

**Calore specifico negativo:** Una stella può perdere energia e, allo stesso tempo, riscaldarsi. Secondo Chavanis [8]: "If radiation energy is extracted from a star whose nuclear fuel is exhausted, the star will contract and heat up. ...Black holes display the same phenomenon. Thus, ...astronomical systems have negative specific heat". Il sistema che esibisce questo calore specifico negativo non è

però all'equilibrio. Il calore specifico del quale parliamo non è canonico (ovviamente) ma non è neanche microcanonico. Ma una argomentazione più complessa (Balian and Blaizot 1999 [7], Chavanis 2006 [8]) conferma la negatività del calore specifico microcanonico.

**Limite di bassa densità:** c'è un limite di volume infinito con  $V^{1/3}T/N$  fisso [9]. Per esempio si possono fissare la densità  $N/V$  allora la temperatura è proporzionale a  $N^{1/3} = N^{1-\alpha/3}$  come alla sezione 3.

**Esempio 3. Giove:** Questo pianeta è fluido, e irradia più energia di quanta non ne riceva dal sole. C'è quindi una sorgente interna di energia, probabilmente la contrazione gravitazionale. Giove è un pianeta, non è una stella perché la sua massa, (benché sia la maggiore fra i pianeti nel sistema solare) è ancora troppo piccola, ma Giove ha qualche proprietà di stella. Gli appassionati di fisica non estensiva (Robert and Sommerie, 1992 [10]) trovano su Giove vortici che, come tutti i vortici, hanno un'interazione a lungo raggio. Ma perché andare su Giove per trovare vortici che esistono anche sulla terra? I vortici di Giove hanno una turbolenza bidimensionale, che è molto differente dalla turbolenza usuale: la dissipazione di energia è debole! I vortici di Giove sono molto stabili. La macchia rossa (un vortice gigante) scoperta nel 1665, è oggi ancora presente.

## 5 Controversie.

Ci siamo chiesti se sono in errore i testi classici. Ovviamente l'affermazione di Landau e Lifshitz, citata all'inizio di questa nota, non è valida se si prendono in considerazione determinate interazioni, per esempio quelle gravitazionali. Ovviamente, il calore specifico cui ci si riferisce nei testi scolastici è il calore specifico canonico (sempre positivo). Quando si scrive un libro, si deve qualche volta scegliere una certa riduzione di rigore perché la trattazione non risulti pesante. Alcuni autori fanno una critica quasi provocatoria dei testi classici. Così Combes e Robert (2006) [11] scrissero: "The Gibbs canonical formalism has a priori no theoretical justification...". Gli stessi autori [12] commentarono un po' più tardi: "For [non-extensive] systems,...the canonical formalism of Gibbs is no longer justified. The canonical distribution, which describes correctly any extensive system in equilibrium with a thermostat ... cannot be used here any more".

Françoise Combes è un'ammirabile astrofisico e la sua competenza in cosmologia è altissima. Raoul Robert è un dei migliori esperti della turbolenza bidimensionale.... Ma la dimostrazione della Eq. 3 è generale per ogni sistema finito, sia estensivo, sia non estensivo, in equilibrio con un termostato. Questo equilibrio può essere impossibile da ottenere in pratica, ma questo è un'altra storia. L'intenzione dei suddetti autori è probabilmente di accennare che certe approssimazioni usuali per interazioni a corto raggio possono essere pericolose con interazioni a lungo raggio. Per esempio il formalismo canonico non descrive le fluttuazioni di un piccolo sottosistema (Bouchet and Barré, 2005 [13]). Citerò altre affermazioni che secondo me sono eccessive. Per esempio Gross (2006) [14]: "...a phase transition of first order ... is only treated correctly by microcanonical Boltzmann-Planck statistics...Conventional canonical statistics is insufficient to handle the original goal of Thermodynamics, phase separations...".

Per chiudere questo capitolo sulle controversie contemporanee legate alla meccanica statistica non estensiva, conviene parlare dell'entropia di Tsallis. Si tratta della formula seguente proposta da Tsallis (1988) [15]:

$$S_q = K_B \frac{1 - \sum_i p_i^q}{q - 1} \quad (11)$$

come generalizzazione dell'entropia di Boltzmann  $S_1 = k_B \sum p_i \ln p_i$ , che corrisponde a  $q = 1$ . Questa formula ha avuto un grande successo. Tsallis fu invitato nel 2005 a scrivere l'introduzione del numero speciale di Europhysics News sulla meccanica statistica non lineare (Sébenne, 2005 [16]). D'altra parte, l'entropia di Tsallis ha avversari convinti, per esempio Balian e Nauenberg (2006) [17]. Non sono chiare

le condizioni di applicabilità della formula di Tsallis. Forse la spiegazione più chiara è quella di Chavanis (2006 [18]): “In general, [the Tsallis entropy and its generalizations] reflect the existence of ‘hidden constraints’... If the system does not ‘mix well’ there is no universal form of entropy to account for non-ergodicity. In many cases, the resemblance with a “generalized thermodynamical formalism” is essentially effective or formal. In some cases, there is no relation with thermodynamics at all.”.

## 6 Conclusioni

Le interazioni a lungo raggio hanno particolarità notevoli. Se il decadimento dell’interazione con la distanza è sufficientemente lento, l’energia non è proporzionale a  $N$ . In un tale sistema non estensivo, il calore specifico microcanonico può essere negativo, e più generalmente la meccanica statistica microcanonica può avere proprietà molto differenti della meccanica statistica canonica, valida all’equilibrio con un termostato. Quando  $N$  va all’infinito, catastrofi come buchi neri possono aver luogo, ma un limite termodinamico è anche possibile con una temperatura che va all’infinito con  $N$ . Ovviamente l’equilibrio con un termostato non esiste per i sistemi astronomici che sono il laboratorio ideale per le interazioni gravitazionali, e la distribuzione microcanonica può essere più adeguata della distribuzione canonica.

## References

- [1] L. Landau, E. Lifshitz, *Statistical Physics* (1967).
- [2] K. F. von Weizsäcker, *Zeitschrift für Physik* **96**, 431 (1935).
- [3] W. Thirring, *A course in mathematical physics* (Springer, Heidelberg, 1991).
- [4] J. L. Lebowitz, E. H. Lieb, *Physical Review Letters* **22**, 631 (1969).
- [5] W. Thirring, *Zeitschrift für Physik* **235**, 339 (1970).
- [6] E. H. Lieb, W. E. Thirring, *Annals of Physics* **155**, 494 (1984).
- [7] R. Balian, J. P. Blaizot, *American Journal of Physics* **67**, 1189 (1999).
- [8] P. H. Chavanis *International Journal of Modern Physics B* **20**, 3113 (2006).
- [9] H. J. de Vega, N. G. Sanchez, *Comptes rendus. Physique*, **7** 391 (2006).
- [10] R. Robert, J. Sommeria, *Physical Review Letters* **69**, 2776 (1992).
- [11] F. Combes, R. Robert, *Comptes Rendus. Physique* **7**, 307 (2006).
- [12] F. Combes, R. Robert, *Comptes Rendus. Physique* **8**, 85 (2007).
- [13] F. Bouchet, J. Barré, *Journal of Statistical Physics* **118**, 1073 (2005).
- [14] D. H. E. Gross, *Comptes Rendus. Physique* **7**, 311 (2006).
- [15] C. Tsallis, *Journal of Statistical Physics* **52**, 479 (1988).
- [16] C. Sébenne (Editor). *Nonextensive statistical mechanics: new trends, new perspectives*, *Europhysics News* **36** (2005)(special issue).
- [17] R. Balian, M. Nauenberg, *Europhysics News* **37**, 9 (2006).
- [18] P. H. Chavanis, *Comptes Rendus. Physique* **7**, 318 (2006).