Condensazione di Bose-Einstein

Guido Cioni

6 gennaio 2011

Introduzione

In questo breve articolo l'autore si propone di analizzare il fenomeno della condensazione di Bose-Einstein , teorizzata nel 1924 dal fisico indiano *Satyendra Nat Bose* e dal noto fisico *Albert Einstein*. Il primo aveva inviato nel 1924 un articolo ad Einstein in cui , trattando i fotoni come particelle identiche, era riuscito a derivare la legge di Planck per la radiazione di corpo nero : fino ad allora il problema del corpo nero era stato affrontato invano in quanto la ricerca teorica aveva portato a delle formule valide sono in particolari regimi di frequenze (Legge di *Wien* e Legge di *Rayleigh-Jeans*) . Einstein teorizzó che ,in un gas formato da particelle indistinguibili , un abbassamento della temperatura porta all'occupazione , da parte degli atomi , di un solo livello energetico possibile , quello di energia nulla. Questo comportamento singolare ipotizza un nuovo stato di aggregazione della materia, detto BEC (Bose-Einstein Condensate) .

1 Statistica Quantistica in un Gas Ideale

Prima di affrontare il problema vero e proprio é necessario elencare i postulati e le principali proprietá delle statistiche quantistiche , soffermandoci sulla Statistica di Bose-Einstein. Le statistiche quantistiche, o pi generalmente la meccanica quantistica, vennero introdotte per sopperire ad alcuni problemi sostanziali che erano emersi negli anni durante lo studio dei comportamenti a livello subatomico in alcune particelle. Gli esperimenti[1] (che non verranno ivi discussi) misero in dubbio la vecchia fisica corpuscolare che considerava le particelle alla stregua di pura materia inerte : la meccanica quantistica ipotizzava che ad ogni particella fosse associata un'*onda di materia* identificata dall'impulso $\vec{p}$ associato a questa. Non si trattava di rivoluzionare l'intero impianto della fisica ma di estenderne la validitá anche a livello subatomico : come la Dinamica rappresentava il limite della Relativitá Generale , cosí la meccanica quantistica generalizzava la meccanica

[1] Si veda, ad esempio, l'esperimento di Davisson e Germer (1927) o quello ti Tonomura et.al. (Am.Journ.Phys. 57) (1989) .

classica in un particolare limite. La meccanica quantistica permetteva di spiegare molti comportamenti insoliti degli atomi che sembravano adattare una natura discreta , occupando solo certi livelli di energia (a differenza di quanto accadeva in meccanica classica dove una particella avrebbe potuto assumere qualsiasi valore di energia). Nel seguito ci interesserá analizzare gli aspetti fondamentali delle statistiche quantistiche che analizzano il comportamento di sistemi in cui , nonostante l'elevato numero di particelle , i comportamenti quantistici non possono essere trascurati. Queste statistiche si basano sui postulati seguenti :

Indistinguibilitá delle particelle Si abbandona l'idea di distinguibilitá delle particelle in un sistema complesso come un gas.

Occupazione della cella in un dominio La conoscenza sulla posizione delle particelle si limita alla determinazione dell'occupazione n_{ik} relativa ad una cella g_i nello spazio delle fasi μ[2].

In natura le particelle si possono raggruppare in due diversi gruppi , identificati da due diverse statistiche .

Statistica di Bose-Einstein Le celle n_{ik} possono essere riempite in qualsiasi modo. Le particelle descritte con questo tipo di statistica vengono dette bosoni ed hanno spin INTERO $(0, 1...)$.

Statistica di Fermi-Dirac Le celle n_{ik} possono essere o vuote o piene, ovvero $n_{ik} = 0, 1$: non esistono altri valori possibili. Le particelle che appartengono a questa categoria vengono dette fermioni ed hanno spin SEMIINTERO $(1/2, 3/2, ...)$.

In aggiunta a questi due modelli si puó considerare il *Sistema di Boltzmann* che non esiste in natura, ma un modello matematico che ad alte temperature descrive bene il comportamento termodinamico di entrambi i sistemi reali.

Abbiamo giá visto che ad ogni atomo corrisponde un pacchetto d'onde con dimensione spaziale dell'ordine della lunghezza d'onda termica di De Broglie

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \tag{1}$$

Quando la distanza media tra gli atomi diventa paragonabile con λ_{dB} , le funzioni d'onda di atomi adiacenti si sovrappongono ed essi perdono la loro identitá. A differenza dei fermioni, per i quali vale il principio di esclusione di Pauli, i bosoni tendono ad occupare insieme lo stesso stato quantico. Questo comportamento é alla base del fenomeno di condensazione che andremo a descrivere.

[2]Lo spazio delle fasi μ é costituito da tutte le possibili combinazioni $\{\vec{p}, \vec{q}\}$ per una singola particella.

2 Statistica di Bose per un gas ideale

La statistica di Bose ammette qualsiasi valore per il numero di occupazione delle celle g_i, ovvero $n_{ik} = 0, 1, 2, ...$ Dal punto di vista matematico si tratta quindi di ripartire N_i particelle in g_i celle distinguibili. Il numero di modi per realizzare lo stato macroscopico nei diversi domini é dato da

$$W = \prod_i W_i = \prod_i \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!} \tag{2}$$

Lo stato piú probabile si trova massimizzando W e dunque basta trovare i valori per cui $\mathrm{d}\ln W = 0$, dato che il logaritmo é una funzione monotona. Si tratta quindi di massimizzare la funzione W sui vincoli di conservazione dell'energia totale del numero di particelle.

$$\begin{cases} \mathrm{d}\ln W = 0 \\ \sum_i N_i = N \\ \sum_i u_i N_i = U \end{cases} \tag{3}$$

Il problema si risolve con i moltiplicatori di Lagrange : senza eseguire tutti i calcoli (basta utilizzare l'approssimazione di Sterling e utilizzare il moltiplicatori $\beta\mu$ e β) si riporta il risultato finale.

$$\bar{n}_i^0 = N_i^0/g_i = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(u_i-\mu)} - 1} \tag{4}$$

dove μ é i potenziale chimico e $\beta \equiv 1/kT$.

3 Analisi del fenomeno

Si utilizza quindi la (4) applicandola nel limite di forte occupazione ($\bar{n}_i^0 \gg 1$) in cui non vale l'approssimazione classica. Affinché $\bar{n}_i^0$ sia sempre positivo occorre che sia $\mathrm{e}^{u_i/kT}\,\mathrm{e}^{-\mu/kT} \geq 1$: applicando questa relazione allo stato di energia piú bassa con $u_0 = 0$ si ricava $\mathrm{e}^{-\mu/kT} \geq 1$, ovvero $\mu \leq 0$. Tale condizione rappresenta quindi un limite per il valore del potenziale chimico : per $\mu \to 0$ la popolazione dello stato di energia piú bassa diventa molto grande, mentre quella per gli stati di energia piú alti di quello fondamentale si riduce a

$$\bar{n}_i^0 = \frac{1}{\mathrm{e}^{u_i/kT} - 1} \tag{5}$$

Pertanto questa popolazione risulta indipendente dal numero totale di particelle presenti e dipende solo dalla temperatura del sistema.

Passiamo quindi a calcolare la popolazione totale per un valore generico di μ , il limite verrá fatto successivamente. Per un sistema di particelle libere con energia dei domini data dalla sola energia cinetica il numero di celle si puó calcolare considerando il volume di una calotta sferica nello spazio delle fasi, ovvero

$$g(p)\,\mathrm{d}p = \frac{4\pi V p^2\,\mathrm{d}p}{h^3} \tag{6}$$

Questa equazione non tiene conto peró della degenerazione dei domini per cui il valore $\vec{p} = 0$ é un valore permesso alle particelle. La relazione si corregge quindi aggiungendo una funzione $\delta(p)$ che tiene conto della nuova degenerazione.

$$g(p) = \frac{4\pi V p^2}{h^3} + \delta(p) \tag{7}$$

Il numero di particelle si ottiene quindi sostituendo la (7) nella seguente, che si ottiene estendendo al continuo la (4) .

$$N = \sum_i \bar{n}_i^0 g_i = \int \bar{n} g(p)\,\mathrm{d}p = \frac{4\pi V}{h^3}\int \frac{p^2}{\mathrm{e}^{p^2/2mkT}\,\mathrm{e}^{-\mu/kT} - 1}\,\mathrm{d}p + \frac{\mathrm{e}^{\mu/kT}}{1 - e^{\mu/kT}} \tag{8}$$

Definendo la fugacitá come $z \equiv \mathrm{e}^{mu/kT}$ si ottiene

$$N = N_0 + N_{ecc} = \frac{z}{1-z} + \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\int_0^\infty \frac{x^2}{\mathrm{e}^{x^2}/z - 1}\,\mathrm{d}x \tag{9}$$

avendo cambiato variabile con $x^2 \equiv p^2/2mkT$. Si procede quindi calcolando

$$\begin{aligned}
N_{ecc} &= \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\int_0^\infty \frac{x^2}{\mathrm{e}^{x^2}/z - 1}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\int_0^\infty x^2 z\,\mathrm{e}^{-x^2}\sum_{m=0}^{\infty} z^m\,\mathrm{e}^{-mx^2}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\int_0^\infty x^2\left(z\,\mathrm{e}^{-x^2} + z^2\,\mathrm{e}^{-2x^2} + \sum_{m>1}^{\infty} z^m\,\mathrm{e}^{-mx^2}\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\int_0^\infty x^2\sum_{m=1}^{\infty} z^m\,\mathrm{e}^{-mx^2}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{4\pi V}{h^3}(2mkT)^{3/2}\sum_{m=1}^{\infty} z^m\int_0^\infty x^2\,\mathrm{e}^{-mx^2}\,\mathrm{d}x
\end{aligned} \tag{10}$$

Sostituendo $mx^2 = y^2$ si perviene all'integrale

$$\int_0^{+\infty} y^2\,\mathrm{e}^{-y^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \tag{11}$$

grazie alle proprietá dell'integrale Gaussiano. Quindi la popolazione eccitata diviene

$$N_{ecc} = \frac{4\pi V}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{z^m}{m^{3/2}} \equiv \frac{4\pi V}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} g_{3/2}(z) \tag{12}$$

Poiché la fugacitá z é compresa tra 0 ed 1 , la funzione $g_{3/2}(z)$ é limitata , positiva e monotona crescente. Il valore massimo é assunto in $z = 1$: in questo punto la funzione vale $g_{3/2}(1) = \sum_1^\infty m^{-3/2} = 2,612$. Recuperando il numero totale di particelle si ottiene

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) + \frac{N_0}{V} \tag{13}$$

Pertanto, per una data densitá e temperatura , dall'equazione precedente si puó determinare implicitamente il potenziale chimico μ del gas in quanto $z = e^{\beta\mu}$. Fissata la densitá , al diminuire di T , la funzione $g_{3/2}(z)$ cresce : poiché la funzione é monotona si deve avere una crescita di z che implica una crescita di μ fino a quando non raggiunge il suo valore massimo annullandosi ($\mu \leq 0$) ottenendo , come visto prima , il valore di $2,612$. La temperatura T_C alla quale $z = 1$ (e quindi $\mu = 0$, condizione presentata all'inizio del capitolo) é detta temperatura critica :

$$T_C \equiv \left(\frac{N}{g_{3/2}(z)V}\right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi mk} \tag{14}$$

Dobbiamo quindi risolvere l'equazione (13) : per temperature molto basse, ovvero per $T < T_C$, μ é molto vicino allo zero , quindi possiamo assumere $z = 1$ e riscrivere la popolazione totale come

$$N = \frac{V}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} g_{3/2}(1) + N_0 = N\left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2} + N_0 \tag{15}$$

dalla quale si ricava

$$N_{ecc} = N\left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2} \; ; N_0 = N\left\{1 - N\left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}\right\} \tag{16}$$

In virtú della limitatezza della funzione $g_{3/2}(z)$, per dati valori di V, T , il numero totale di particelle negli stati eccitati é dato dalla (16) , dunque é limitato. Quindi se il numero di particelle N del sistema é maggiore di questo valore limite , é naturale che gli stati eccitati saranno occupati dal numero massimo di particelle che possono contenere, che si ha nel caso di uguaglianza nella seconda relazione della (16) , mentre le rimanenti si disporranno nello stato fondamentale , la cui capacitá é pressoché illimitata. La condizione per cui si verifichi il fenomeno é quindi data da

$$\lambda_{dB}^3 \geq \frac{V}{N} g_{3/2}(1) \tag{17}$$

4 Conclusioni

Possiamo pertanto concludere che c'é un numero macroscopico di particelle nello stato fondamentale con $\vec{p} = 0$: allo zero assoluto tutte le particelle sono nella cella dello spazio delle fasi con energia piú bassa , che possiede una degenerazione unitaria, per cui $W = 1$ e l'entropia vale $S = k \ln W = 0$, in accordo con il terzo principio della termodinamica .Questo fenomeno é detto condensazione di Bose-Einstein. A differenza della condensazione *fisica* , relativa al passaggio da vapore a liquido, la BEC é un fenomeno puramente quantistico che nasce dall'indistinguibilitá delle particelle bosoniche non interagenti. Dalla formula (17) si nota, esplicitando la forma di λ_{dB} , che gli effetti quantistici sono piú evidenti quando la temperatura é relativamente bassa e la densitá relativamente alta.