Università degli Studi di Catania
Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di Laurea in Fisica
Corso Anuuale di Meccanica Statistica (prof. G. Giansiracusa)

LA CONDENSAZIONE DI BOSE - EINSTEIN IN UN UNIVERSO DI EINSTEIN

di Eloisa Bentivegna

Indice

I. Introduzione.....p. 1

II. Universo infinitamente esteso.....p. 2

A. Proprietà generali del gas di Bose ideale

B. Caratteristiche a bassa temperatura
i. Frazione condensata
ii. Calore specifico

III. Universo di Einstein.....p. 6

A. Proprietà generali del gas di Bose ideale in uno spazio con topologia S^3

B. Caratteristiche a bassa temperatura
i. Parametro termogeometrico
ii. Frazione condensata
iii. Calore specifico
iv. Aumento della temperatura critica

IV. Bibliografia.....p. 13

I. Introduzione

Uno tra i compiti di maggior interesse della Meccanica Statistica è senz'altro quello di fornire una fondazione teorica alle teorie fenomenologiche dei sistemi macroscopici. Tale connessione con il mondo microscopico dipende naturalmente dalla scelta del sistema di leggi che si assumono governare la dinamica molecolare: si parla così di Meccanica Statistica Classica o Meccanica Statistica Quantistica.

Com'è noto, nella trattazione di sistemi di più particelle identiche, la Meccanica Quantistica evidenzia come lo stato che descrive il sistema totale debba necessariamente godere di ben precise proprietà di simmetria (o antisimmetria). Indicato infatti con $<\alpha_i \alpha_j \alpha_k ...>$ lo stato in cui è presente una particella nello stato i, una nello stato j, e così via, è evidente che gli stati corrispondenti a sistemi fisici devono soddisfare la proprietà che

$$|u_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k ...}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{3,...})|^2 \equiv |\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{3,...} | \alpha_i \alpha_j \alpha_k ... \rangle|^2 = |\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{3,...} | \alpha_j \alpha_i \alpha_k ... \rangle|^2 \quad (1)$$

ovvero

$$<\alpha_i \alpha_j \alpha_k ...> = \pm <\alpha_j \alpha_i \alpha_k ...> \quad (2)$$

per ogni coppia ij .

Corrispondentemente, le particelle in natura possono essere divise in due categorie: i *bosoni*, per cui vale il segno positivo, e i *fermioni*, per cui vale quello negativo. In particolare, è evidente che lo stato di un sistema di fermioni in cui due o più particelle hanno gli stessi numeri quantici, gode della proprietà che

$$<\alpha_i \alpha_i \alpha_k ...> = - <\alpha_i \alpha_i \alpha_k ...> \quad (3)$$

ovvero è nullo. Ciò implica che, nella notazione dei numeri di occupazione, gli stati consentiti ad un sistema di fermioni sono tali che $n_i = 0$ oppure $n_i = 1$, $\forall i$. Tale restrizione non vige invece per i sistemi di bosoni.

Le proprietà degli stati sotto lo scambio di particelle identiche si riflettono in modo marcato sul comportamento dei sistemi a molti corpi, che esibiscono caratteristiche che differiscono a seconda del tipo di statistica, e che spesso non hanno un analogo classico.

II. Universo infinitamente esteso

A. GAS DI BOSE IDEALE

La funzione di partizione grancanonica per un sistema di particelle identiche non interagenti è

$$Z(z,V,T)=\sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N(V,T)=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\substack{[n_p]\\ \sum n_p=N}}\prod_{p}\left(z\,e^{-\beta\epsilon_p}\right)^{n_p}=\prod_{p}\left[\sum_{n}\left(z\,e^{-\beta\epsilon_p}\right)^{n}\right] \tag{4}$$

che, nel caso dei bosoni, può essere scritta come

$$Z(z,V,T)=\prod_{p}\frac{1}{1-ze^{-\beta\epsilon_p}} \tag{5}$$

E' noto da considerazioni classiche che dalla funzione di granpartizione è possibile ricavare alcune grandezze termodinamiche di rilievo per il sistema in esame, grazie alle formule:

$$\frac{PV}{kT}=\log Z(z,V,T) \tag{6.a}$$

$$N=z\frac{\partial}{\partial z}\log Z(z,V,T) \tag{6.b}$$

che in questo caso, passando al limite $V\to\infty$, assumono la forma

$$\frac{P}{kT}=-\frac{4\pi}{h^3}\int_0^{\infty} dp\,p^2\log\left(1-ze^{-\beta p^2/2m}\right)-\frac{1}{V}\log(1-z) \tag{7.a}$$

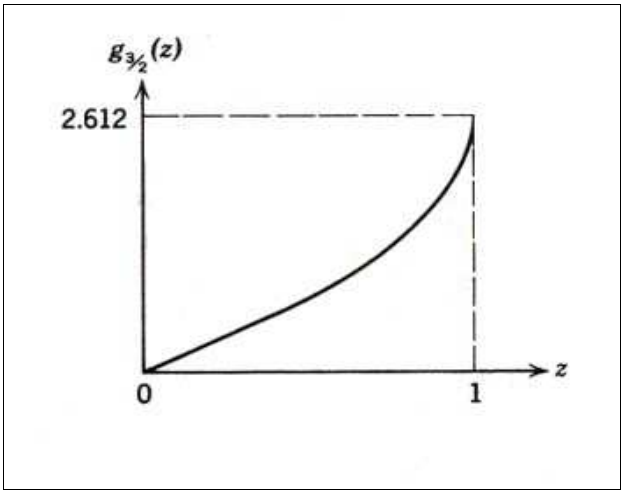
$$\frac{1}{v}=\frac{4\pi}{h^3}\int_0^{\infty} dp\,p^2\frac{1}{z^{-1}e^{\beta p^2/2m}-1}+\frac{1}{V}\frac{z}{1-z} \tag{7.b}$$

grazie al quale, eliminando z , si ottengono l'equazione di stato per un gas ideale e i numeri di occupazione medi dei vari livelli.

Si può procedere ricavando z dalla seconda equazione, e sostituendo poi nella prima. Per fare ciò è necessario prima esaminare la seguente funzione:

$$g_{3/2}(z)=\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty} dx\,x^2\frac{1}{z^{-1}e^{x^2}-1}=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{3/2}} \tag{8}$$

che ha il grafico mostrato in figura.



Si può quindi graficare la (7.b) in funzione di z , e da essa risolvere graficamente per z , ottenendo, nel limite $N \to \infty$:

$$z = \begin{cases} 1 & \dfrac{\lambda^3}{v} \geqslant g_{3/2}(1) \\ la\,radice\,di\; g_{3/2}(z) = \lambda^3 / v & \dfrac{\lambda^3}{v} \leqslant g_{3/2}(1) \end{cases} \tag{9}$$

dove

$$\lambda = \left[\frac{2\pi\hbar^2}{mkT} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{10}$$

è la lunghezza d'onda termica del gas e $v = \dfrac{V}{N}$ è il suo volume specifico.

Noto z , è inoltre possibile calcolare i numeri di occupazione medi dei vari livelli, per mezzo della relazione

$$\langle n_p \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\substack{\{n_p\} \\ \sum n_p = N}} n_p e^{-\beta \sum \epsilon_p n_p} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_p} \log Z = \frac{z e^{-\beta \epsilon_p}}{1 - z e^{-\beta \epsilon_p}} \tag{11}$$

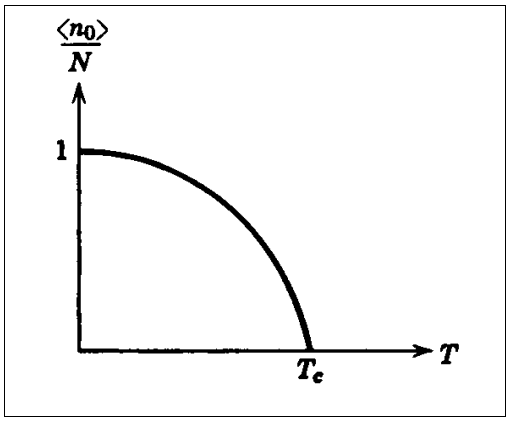
B. CARATTERISTICHE A BASSA TEMPERATURA

i. Frazione condensata

Il numero di occupazione dello stato con $\boldsymbol{p}=0$ è ad esempio:

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N}=\frac{1}{N}\frac{z}{1-z}=\begin{array}{ll} 0 & \frac{\lambda^3}{v}\leqslant g_{3/2}(1) \\ 1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & \frac{\lambda^3}{v}\geqslant g_{3/2}(1) \end{array} \tag{12}$$

E' questo il fenomeno della *condensazione di Bose - Einstein*: per $T<T_c$, la frazione di particelle che si trovano nello stato fondamentale diviene macroscopicamente rilevante. Per $T=0$ tutte le particelle si trovano nello stato fondamentale, mentre per $T>T_c$ la frazione (12) è, nel limite, praticamente nulla, così come le frazioni relative a tutti gli altri livelli.
Un grafico della (12) è mostrato in figura.



ii. Calore specifico

Com'é noto da considerazioni termodinamiche, il calore specifico a volume costante è definito come:

$$C_V=\left[\frac{\partial U}{\partial T}\right]_V \tag{13}$$

Occorre dunque determinare la dipendenza dell'energia interna U dalla temperatura.
Nel formalismo dell'ensemble grancanonico, l'energia interna è la media di ensemble dell'energia totale $E=\sum_p \epsilon_p n_p$, ovvero:

$$U(z,V,T)=\frac{1}{Z}\sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\substack{[n_p] \\ \sum n_p=N}} e^{-\beta\sum\epsilon_p n_p}\sum_p \epsilon_p n_p=-\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z(z,V,T) \tag{14}$$

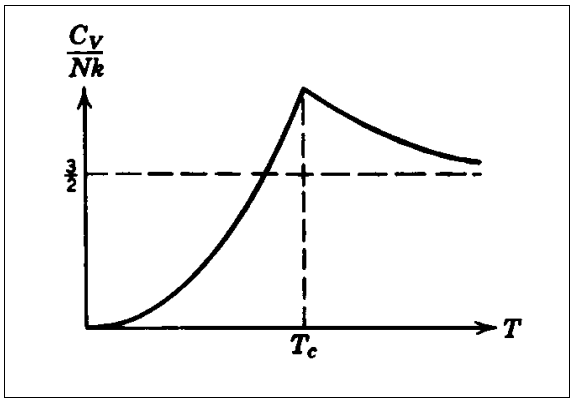
che, unita alla (6.a), dà:

$$\frac{U}{N}=\frac{3}{2}\frac{kTv}{\lambda^3}g_{5/2}(z) \tag{15}$$

E' possibile adesso calcolare esplicitamente il calore specifico:

$$\frac{C_V}{Nk}=\begin{array}{ll} \frac{15}{4}\frac{v}{\lambda^3}g_{5/2}(z)-\frac{9}{4}\frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} & \frac{\lambda^3}{v}\leqslant g_{3/2}(1) \\ \frac{15}{4}\frac{v}{\lambda^3}g_{5/2}(1) & \frac{\lambda^3}{v}\geqslant g_{3/2}(1) \end{array} \tag{16}$$

che ha l'andamento mostrato in figura.



III. Universo di Einstein

Se volessimo ora considerare delle particelle libere in un universo di Einstein, dovremmo sostituire nella funzione di partizione grancanonica (5) il corrispondente spettro energetico. Per far ciò, occorre prima esaminare il comportamento di una particella in tale spazio - tempo.

A. PROPRIETA' GENERALI DEL GAS DI BOSE IDEALE IN UNO SPAZIO CON TOPOLOGIA S^3

Si definisce universo di Einstein uno spazio con intervallo infinitesimo

$$ds^2 = -dt^2 + a^2\left[d\chi^2 + \sin^2\chi\left(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\,fi^2\right)\right] \qquad \begin{array}{c} t\in[-\infty,+\infty] \\ \chi\in[0,2\pi] \\ \theta\in[-\pi,+\pi] \\ \phi\in[0,2\pi] \end{array} \tag{17}$$

ovvero dotato del tensore metrico

$$g_{mi\nu} = \begin{matrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2\sin^2\chi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a^2\sin^2\chi\sin^2\theta \end{matrix} \tag{18}$$

e ha quindi la topologia di S^3 , la superficie sferica tridimensionale.
Si tratta pertanto di un universo chiuso, di volume V finito e pari a:

$$V = \int_{TUTTO\ LO\ SPAZIO} \left[det\ g\right]^{1/2} d^3\vec{x} \;=\; a^3 \int_0^{2\pi} \sin^2\chi\, d\chi \int_{-\pi}^{+\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \;=\; 2\pi a^3 \tag{19}$$

L'equazione del moto per un campo scalare massivo conformalmente invariante è

$$e\Phi + \frac{1}{6}R\Phi + m^2\Phi = 0 \tag{20}$$

con $R = \frac{6}{a^2}$ scalare di Riemann.
Lo spettro energetico risulta essere [3]

$$\epsilon_i = \frac{1}{a}\left[(i+1)^2 + m^2a^2\right]^{1/2} \approx \frac{(i+1)^2}{2ma^2} \qquad i = 0,1,2,... \tag{21}$$

dove l'ultimo passaggio è l'approssimazione nonrelativistica, in cui si trascura il contributo all'energia della massa a riposo.
Infine, ogni livello ha una degenerazione pari a:

$$d_i = (i+1)^2 \qquad i = 0,1,2,... \tag{22}$$

Inserendo questi risultati nella (5), si ottiene il seguente sistema, analogo al (6):

$$\begin{aligned} \frac{PV}{kT} &= \sum_{i=1}^{\infty} \log \frac{i^2}{1 - z e^{-\beta' i^2}} = \sum_{i=1}^{\infty} \log \frac{i^2}{1 - e^{-\beta' i^2 - \alpha}} \\ N &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 z^{-1} e^{-\beta' i^2}}{1 - z^{-1} e^{-\beta' i^2}} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 e^{-\beta' i^2 + \alpha}}{1 - e^{-\beta' i^2 + \alpha}} \end{aligned} \tag{23}$$

dove $\alpha = -\frac{\mu}{kT}$ e $\beta' = \frac{1}{2 m k T a^2}$. Inoltre

$$\langle n_i \rangle = \frac{e^{-\beta' (i+1)^2 + \alpha}}{1 - e^{-\beta' (i+1)^2 + \alpha}} \tag{24}$$

A differenza dello spazio ordinario ad estensione infinita, non è adesso possibile passare al limite $V \to \infty$ e sostituire le somme con integrali. Occorre dunque usare la *regola di somma di Poisson*:

$$\frac{1}{2} f(0) + \sum_{i=1}^{\infty} f(i) = \int_0^{\infty} f(t)\, dt + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\infty} f(t) \cos(2 m \pi t)\, dt \tag{25}$$

Il primo termine al secondo membro non è altro che ciò che si otterrebbe se si sostituisse semplicemente l'integrale alla sommatoria. Le correzioni dovute al volume finito ed alla curvatura sono pertanto contenute nel secondo termine. L'influenza sul condensato delle condizioni al contorno sarà messa in luce dal calcolo degli integrali nella (25), che è riportato in letteratura [2] e dà:

$$I_0 = \int_0^{\infty} \frac{t^2\, dt}{e^{\beta' t^2 + \alpha} - 1} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta'} \right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2} \right) F_{3/2}(\alpha) \tag{26.a}$$

$$I_m = -\frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\beta'} \right)^{3/2} \alpha^{1/2} \exp\left(-4 m \pi^{3/2} \alpha^{1/2} \left(\frac{a}{\lambda} \right) \right) \tag{26.b}$$

con

$$\lambda = \left[\frac{2 \pi \hbar^2}{mkT} \right]^{1/2} \tag{27}$$

B. CARATTERISTICHE A BASSA TEMPERATURA

i. Parametro termogeometrico

Definiamo il parametro termogeometrico y :

$$y = 2\pi^{3/2}\alpha^{1/2}\frac{a}{\lambda} \tag{28}$$

Un grafico di y in termini di quantità fisiche si può ottenere ragionando come segue: se si sostituisce nella (23) la regola di somma di Poisson con i relativi integrali (25), e si approssima, nel limite $\alpha \ll 1$, $F_{3/2}(\alpha) \approx \zeta\left(\frac{3}{2}\right) - 2\pi^{1/2}\alpha^{1/2}$, si ottiene:

$$N = \frac{2}{\pi^{1/2}}\frac{V}{\lambda^3}\left[\frac{1}{2}\pi^{1/2}\zeta\left(\frac{3}{2}\right) - \pi\,\alpha^{1/2}\left(1 + \frac{2}{e^{2y}-1}\right)\right] \tag{29}$$

ovvero

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3}\left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right) - 2\pi^{1/2}\alpha^{1/2}\coth y\right] \tag{30}$$

Prendiamo ora il limite termodinamico, ovvero:

$$N \to \infty$$

$$V \to \infty \,(a \to \infty)$$

$$\frac{N}{V} = cost$$

Poiché il primo membro della (28) resta costante nel limite $a \to \infty$, anche il secondo lo sarà. Possiamo quindi porlo uguale al suo valore in uno spazio infinito:

$$\frac{1}{\lambda^3}\left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right) - 2\pi^{1/2}\alpha^{1/2}\coth y\right] = \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\lambda_c^3(\infty)} \equiv \left(\frac{1}{\bar{l}^3}\right) \tag{31}$$

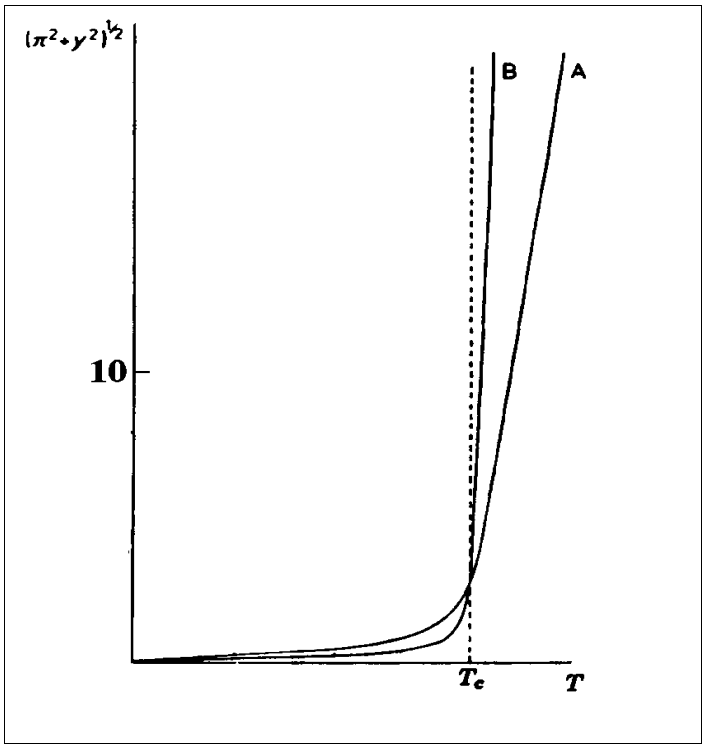
Ricordando la definizione di λ , si ha:

$$\left[\frac{T_c(\infty)}{T}\right]^{3/2} = 1 - \frac{y}{\pi\left(\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\right)^{2/3}}\left(\frac{T_c(\infty)}{T}\right)^{1/2}\left(\frac{\bar{l}}{a}\right)\coth y \tag{32}$$

ovvero, indicando con x il rapporto $\frac{T}{T_c(\infty)}$:

$$y\coth y=\pi\left(\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\right)^{2/3}\left(\frac{a}{\bar{l}}\right)x^{1/2}\left(1-x^{-3/2}\right) \tag{33}$$

che ci permette di graficare y in funzione di x, in corrispondenza di due diversi valori di $\frac{a}{\bar{l}}$.



ii. Frazione condensata

Dalla (24), con l'inserzione della (27), si ricava che:

$$\langle n_0\rangle=\left(e^{\beta'+\alpha}-1\right)^{-1}=\left(e^{\left(\frac{\pi^2}{y^2}+1\right)\alpha}-1\right)^{-1} \tag{34}$$

che, per $\alpha\ll 1$, si può approssimare con

$$\langle n_0\rangle=\left[\left(\frac{\pi^2}{y^2}+1\right)\alpha\right]^{-1} \tag{35}$$

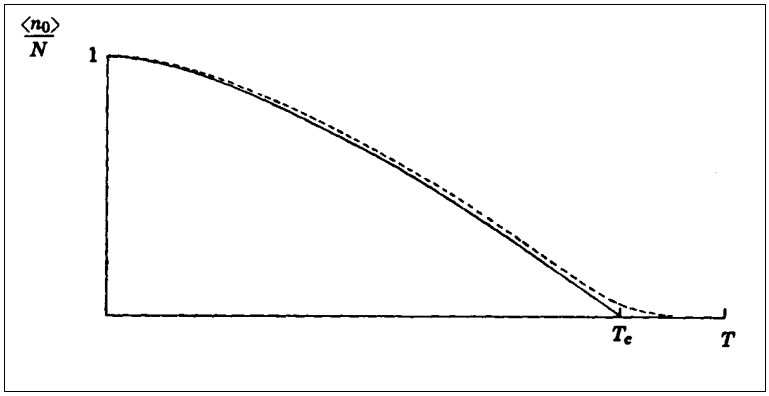
che, con l'aiuto della (30), diviene:

$$\langle n_0\rangle=N\left(1-x^{3/2}\right)+2\pi\left(\frac{a}{\bar{l}}\right)^2 y\coth y+\frac{4\pi^3}{\pi^2+y^2}\left(\frac{a}{\lambda}\right)^3 \tag{36}$$

Sostituendo quindi l'espressione (33) per il fattore termogeometrico, si ottiene

$$\langle n_0 \rangle = \frac{2\pi}{\left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\right]^{2/3}} \frac{x}{\pi^2 + y^2} \left(\frac{\bar{l}}{a}\right) \tag{37}$$

che è mostrato in figura.



E' evidente come l'effetto del volume finito (e, conseguentemente, delle condizioni al contorno periodiche) sia quello di aumentare la frazione di particelle nello stato condensato, rendendo tale quantità diversa da zero anche per temperature di poco maggiori di $T_c(\infty)$, la temperatura critica che si ottiene in uno spazio infinito.

iii. Calore specifico

Il calore specifico è ancora dato dalla formula generale (13), con:

$$U = \sum_i d_i \epsilon_i \langle n_i \rangle \tag{38}$$

in cui stavolta ϵ_i ed $\langle n_i \rangle$ sono quelli relativi all'universo di Einstein, dati rispettivamente dalle formule (21) e (24).
Se ora definiamo:

$$Z_s = \sum_i d_i \left(\frac{\epsilon_i}{kT}\right)^s \langle n_i \rangle \tag{39}$$

e

$$G_s = -\left(\frac{\partial Z_s}{\partial \alpha}\right)_{T,V} = \sum_i d_i \left(\frac{\epsilon_i}{kT}\right)^s \left[\langle n_i \rangle + \langle n_i \rangle^2\right] \tag{40}$$

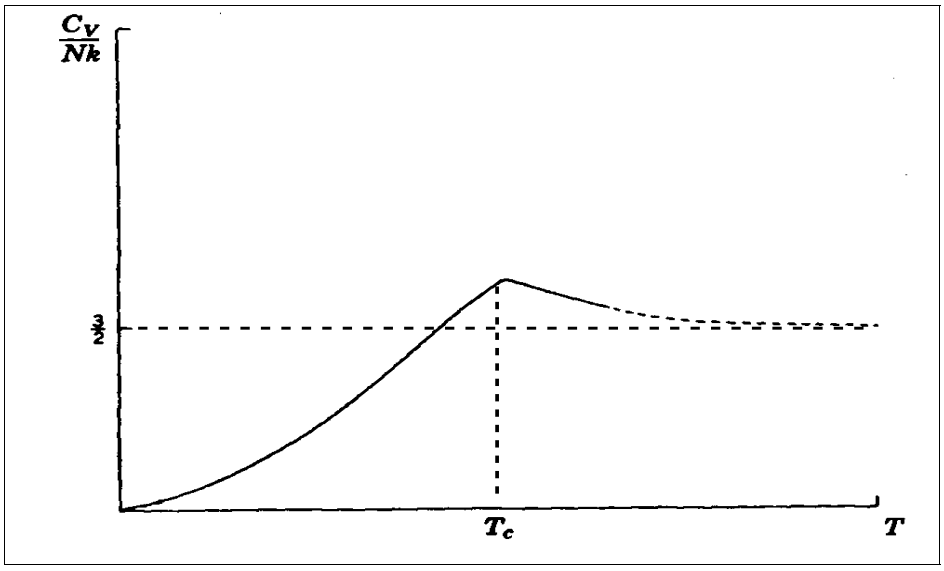
allora il calore specifico, ottenuto derivando la (38) e sostituendo le formule (39) e (40), assume la

forma:

$$C_V = k\left[G_2 - \left(\frac{G_1^2}{G_0}\right)\right] \tag{41}$$

Tale quantità può essere calcolata in modo analogo alla (29), usando la regola di somma di Poisson per trasformare le sommatorie nella (39) e (40) in integrali. Si ottiene così che

$$\frac{C_V}{Nk} = x^{3/2}\left[\frac{15}{4}\frac{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} - \frac{9}{8\pi^2}\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{4/3}}{x^{1/2}}\frac{y}{\coth y - cosech^2 y}\frac{\bar{l}}{a}\right] \tag{42}$$



La dipendenza del calore specifico da y mostra immediatamente il ruolo del parametro termogeometrico nella comparsa della cuspide in corrispondenza della temperatura critica: come mostrato sopra, per $a \to \infty$ la funzione $\left(\pi^2 + y^2\right)^{1/2}$ tende alla funzione gradino:

$$\left(\pi^2 + y^2\right)^{1/2} = \begin{matrix} 0 & x<1 \\ +\infty & x>1 \end{matrix} \tag{43}$$

Provocando una discontinuità nella derivata del termine $\dfrac{y}{\coth y - cosech^2 y}$ nella (42).

Per a finito, tuttavia, il parametro termogeometrico è una funzione continua con derivate continue; la corrispondente singolarità in C_V ne risulta pertanto arrotondata.

iv. Aumento della temperatura critica

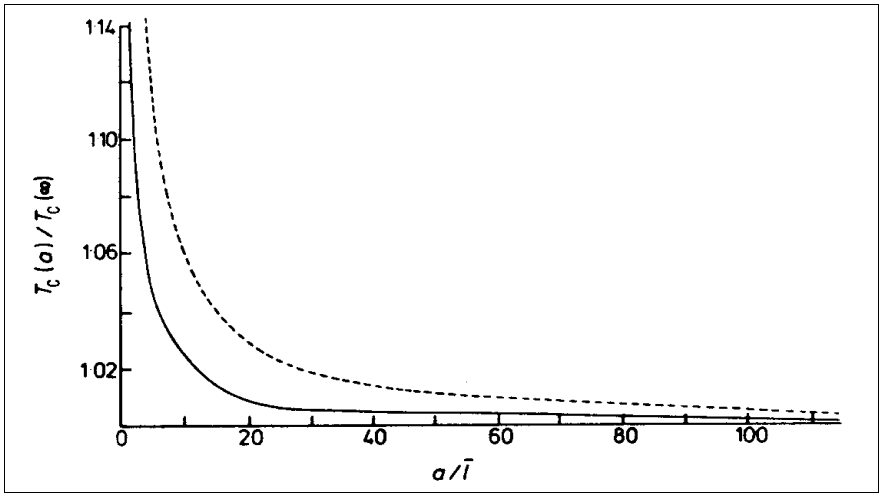
Dalla (31), nel limite $a \gg \lambda$, si ottiene

$$\frac{T_c(a)}{T_c(\infty)} \approx 1 + \frac{2}{3}\frac{y_0 \coth y_0}{\pi\left(\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\right)^{2/3}}\left(\frac{\bar{l}}{a}\right) = 1 + 0.221\left(\frac{\bar{l}}{a}\right) \tag{44}$$

dove y_0 è il valore del parametro termogeometrico in corrispondenza del quale la (42) ha un massimo, calcolato numericamente e pari a:

$$y_0 = 1.887 \tag{45}$$

E' possibile allora graficare l'andamento della temperatura critica in funzione del raggio dell'universo, ottenendo la seguente figura.



Si vede quindi che la variazione delle condizioni al contorno, modificando lo spettro energetico del sistema, ne modifica anche la temperatura critica, che risulta più alta nel volume finito. Ciò può essere spiegato esaminando lo spettro (20):

$$\epsilon_i = \frac{1}{a}\left[(i+1)^2 + m^2 a^2\right]^{1/2} \approx \frac{(i+1)^2}{2\mathrm{ma}^2} \qquad i = 0, 1, 2, \ldots \tag{21}$$

La diminuzione del raggio dell'universo provoca un generale innalzamento dei livelli energetici, e quindi una diminuzione dei numeri di occupazione $\langle n_i \rangle$, dati da:

$$\langle n_i \rangle = \frac{e^{-\beta'(i+1)^2 + \alpha}}{1 - e^{-\beta'(i+1)^2 + \alpha}} \tag{46}$$

Tale diminuzione è completamente governata dal fattore β' , in cui compare il prodotto $a^2 T$. Si vede quindi che, al diminuire di a^2 , la temperatura necessaria per ridurre l'occupazione dello stato fondamentale ad un valore macroscopicamente infinitesimo diviene sempre più alta. Si può quindi affermare che in un universo di Einstein il fenomeno della condensazione di Bose è favorito rispetto ad un universo infinito.

Bibliografia

[1] K. Huang, *Meccanica Statistica*, Zanichelli (1997)

[2] M. B. Al'taie, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **11**, 1603 (1978)

[3] E. Schroedinger, *Comm. Vat. Acad.*, **2**, 321 (1938)