

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Augusto Righi”
Corso di Laurea in Fisica

L'equazione di Gross-Pitaevskii e la condensazione di Bose-Einstein

Relatore:
Prof. Pierbiagio Pieri

Presentata da:
Irene Lega

Anno Accademico 2024/2025

Sommario

In questo elaborato si analizza la condensazione di Bose-Einstein a partire dal caso ideale, descrivendo il comportamento statistico di un gas di bosoni non interagenti nel limite di basse temperature. Viene poi introdotto il formalismo della seconda quantizzazione, strumento necessario per descrivere sistemi a molti corpi indistinguibili, come i bosoni.

Si tratta la derivazione dell'equazione di Gross-Pitaevskii, con un approfondimento sulle approssimazioni volte alla sua comprensione, tra cui quella di campo medio, di gas debolmente interagenti e l'approssimazione di Bogoliubov.

Infine, si analizzano le soluzioni stazionarie dell'equazione di Gross-Pitaevskii, con particolare attenzione ai vortici quantizzati. Questi sono descritti come stati eccitati del condensato con momento angolare quantizzato, la cui struttura è studiata attraverso una risoluzione numerica dell'equazione.

Il lavoro conferma l'efficacia dell'equazione di Gross-Pitaevskii come strumento teorico per lo studio delle proprietà macroscopiche dei condensati di Bose-Einstein in presenza di interazioni repulsive.

Indice

1	Introduzione	2
2	Condensazione di Bose-Einstein	4
2.1	Gas di Bose ideale	5
3	Equazione Gross-Pitaevskii	12
3.1	Cenni di seconda quantizzazione	13
3.1.1	Operatori di campo bosonici	13
3.1.2	Campi	15
3.1.3	Matrice densità a un corpo	16
3.2	Approssimazioni e condizioni di applicabilità	18
3.2.1	L'approssimazione di Bogoliubov	20
3.3	Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo	23
3.3.1	Soluzioni stazionarie	26
3.4	Gross-Pitaevskii dipendente dal tempo	26
3.4.1	Condizione di irrotazionalità dei superfluidi	27
4	Vortici in un gas di Bose rarefatto	29
4.1	Risoluzione numerica per un vortice	31
5	Conclusioni	35

Capitolo 1

Introduzione

L'equazione di Gross-Pitaevskii (GPE) è un modello di equazione per la funzione d'onda a particella singola nello stato fondamentale in un condensato di Bose-Einstein. È un'equazione differenziale parziale non lineare che può risolvere, attraverso l'uso di approssimazioni adeguate, un problema a molti corpi nel formalismo della meccanica quantistica. La GPE, nonostante la sua relativa semplicità formale, può essere applicata per fornire informazioni su un grande numero di sistemi fisici come superfluidi, fenomeni luminosi o condensati di Bose-Einstein.

La GPE è stata indipendentemente e contemporaneamente derivata da Gross^[8] e da Pitaevskii^[11] nel 1961 e, ad oggi, è il principale strumento per la ricerca nell'ambito dei gas di Bose non uniformi e diluiti a basse temperature. Il condensato di Bose-Einstein (BEC) dimostra come la natura quantistica possa avere importanti conseguenze anche sulle proprietà macroscopiche della materia e renderla superconduttiva o superfluida. Con il BEC si è arrivati a capire più profondamente la coerenza quantistica tra le onde di materia, una delle più sorprendenti manifestazioni del principio di sovrapposizione.

Nel 1924 il fisico Satyendra Nath Bose, della Dacca University in India, scrisse un articolo sulla legge di distribuzione di Planck della radiazione del corpo nero per i fotoni, *Planck's Law and the Hypothesis of Light Quanta*^[4], in cui descriveva l'effetto fotoelettrico sulla base di argomentazioni statistiche. Sosteneva inizialmente che la distribuzione di Maxwell-Boltzmann poteva non essere vera per particelle microscopiche, dove le fluttuazioni dovute al principio di indeterminazione di Heisenberg diventavano significative. Calcolava così la probabilità di trovare le particelle nello spazio delle fasi tralasciando le posizioni distinte e il momento delle particelle. Rifiutato dalle riviste scientifiche, che considerarono le sue argomentazioni basate su un presunto errore di calcolo combinatorio in realtà chiave della sua scoperta rivoluzionaria, Bose mandò il suo articolo ad Albert Einstein. Egli, colpito dall'articolo, intuì che il metodo poteva essere applicato anche ai gas ideali di particelle massive. Questo permise ad Einstein di elaborare la teoria quantistica delle particelle bosoniche, particelle obbedienti alla statistica di Bose-Einstein^[6]. Einstein osservò che, ammettendo la conservazione del numero di particelle, anche un

sistema non interagente di particelle esibisce, a temperature sufficientemente basse, una transizione di fase, la condensazione di Bose-Einstein.

Il padre dei BEC è considerato Daniel Kleppner del MIT. Lui non riuscì mai a realizzarlo ma, nel 1995 nell'Università del Colorado, i suoi studenti Eric Cornell e Carl Wieman produssero il primo BEC di rubidio^[2], mediante tecniche di raffreddamento laser per formare un condensato di temperatura pari a circa $6 \times 10^{-8} K$. Il loro esperimento consisteva nel contenere le particelle in una trappola magnetica e raffreddarle attraverso prima il *laser cooling*, poi l'*evaporative cooling*. Sfortunatamente la forza repulsiva naturale tra gli atomi, che fa espandere la nuvola, la dissipò in meno di un secondo. Insieme a Wolfgang Ketterle, i due condivisero il Premio Nobel per la fisica nel 2001 e la loro tecnica fu utilizzata fino al 2018, quando la missione *Maius 1*^[13] portò alla produzione del primo BEC nello spazio, in orbita terrestre, di durata più lunga. Dal 2018 si stanno tentando esperimenti per proseguire lo studio del condensato di Bose-Einstein nello spazio.

Tra le applicazioni del BEC, Liang Liu, ricercatore dell'Accademia Cinese delle Scienze a Shanghai, ipotizza la possibilità di sviluppare un nuovo tipo di interferometro basato su questo fenomeno che utilizzi onde di materia al posto di onde luminose. Il condensato di Bose-Einstein, per le sue particolari caratteristiche, può essere descritto come un'unica onda di materia che può essere suddivisa in due diverse componenti, che possono poi essere ricombinate per generare figure d'interferenza molto sensibili alle perturbazioni esterne. Idealmente, questo fornirebbe il meccanismo fisico di base per realizzare sensori a onde di materia: gli interferometri quantistici, che permetteranno di effettuare la ricerca delle onde gravitazionali in intervalli di frequenze attualmente inaccessibili, svelando possibili violazioni sottilissime della teoria della relatività generale di Einstein.

Nel 2020, dopo i risultati sondati da *Maius 1*, il BEC è stato definito dalla comunità scientifica come stato della materia, dopo il solido, liquido e aeriforme e lo stato plasmatico. Per definire altre proprietà sullo stato e sulle proprietà quantistiche, la NASA ha programmato due missioni, la *Maius 2* e la *Maius 3*, il cui risultato potrà aprire la strada a molte applicazioni. Tra queste, gli interferometri quantistici per il rilevamento di onde gravitazionali e la misurazione precisa della gravità terrestre, per studiare la relazione con, ad esempio, i cambiamenti dei movimenti del magma nei vulcani, lo spostamento dei ghiacciai o le variazioni sottili del livello del mare.

Nel primo capitolo di questo elaborato, verranno discusse le caratteristiche principali del condensato di Bose-Einstein e la formulazione statistica gran canonica del caso del gas di Bose ideale, con la sua peculiare caratteristica ovvero la presenza di una transizione di fase in assenza di interazioni.

Nel secondo capitolo introdurremo gli strumenti per la comprensione, la formulazione e la derivazione della GPE, indipendente e dipendente dal tempo.

Nel terzo e ultimo capitolo ci concentreremo invece sulla soluzione della GPE corrispondente a un vortice.

Capitolo 2

Condensazione di Bose-Einstein

La condensazione di Bose-Einstein è uno stato particolare della materia che si ottiene a temperature estremamente basse. In condizioni di pressione di 1 atmosfera, se l'elio ^4He , sotto forma di gas, viene raffreddato fino a una temperatura di 4.2 K, è possibile osservare una transizione alla fase liquida. Se si scende sotto i 2.17 K, la fase liquida acquisisce proprietà particolari: diventa un superfluido. In questo capitolo tratteremo il caso di un BCE ideale, in cui questa transizione di fase è dovuta solo alla natura statistica del sistema, in quanto le particelle non sono interagenti.

Dalla termodinamica, sappiamo che le particelle di un gas possono occupare certi stati quantici, o stati energetici. Se queste particelle sono fermioni, il principio di esclusione di Pauli impone che due o più particelle non possano occupare lo stesso stato. Se invece si tratta di bosoni, come nel nostro caso, il principio di Pauli perde validità, e uno stato energetico può accogliere un qualsiasi numero di particelle. In particolare, raffreddati a una frazione di grado superiore allo zero assoluto, tutti i bosoni occuperanno lo stato di energia minore, lo stato fondamentale, ed avranno tra loro la stessa velocità. Così, l'insieme di bosoni si comporterà come un fluido macroscopico con nuove proprietà, il cui studio si limita all'analisi dello stato fondamentale del sistema.

Lo stato di una particella è descritto da una funzione normalizzata che è autovettore dell'Hamiltoniano associato al sistema fisico considerato. A tale autovettore corrisponde un autovalore che è l'energia di quello stato. Nel nostro caso dobbiamo quindi trovare l'autovettore corrispondente all'autovalore minimo dell'Hamiltoniano del gas di bosoni, quello, cioè, che descrive lo stato fondamentale del sistema.

La proprietà principale del condensato di Bose-Einstein sta nel fatto che le particelle che si trovano in tale stato esibiscono comportamenti quantistici apprezzabili su scala macroscopica. Per realizzare il BEC, di solito si confinano delle particelle in una trappola elettromagnetica e le si colpisce ripetutamente con raggi laser ultra-precisi, che ne rallentano i movimenti fino a fermarle quasi del tutto, portandole ad una temperatura vicina allo zero assoluto.

La stesura di questo capitolo è basata sul testo di L. M. Varela^[14].

2.1 Gas di Bose ideale

Il gas di Bose ideale fornisce l'esempio più elementare di realizzazione del condensato di Bose-Einstein ma, nonostante la sua semplicità, descrive correttamente importanti proprietà di sistemi concreti.

Nel contesto del gran canonico, la descrizione statistica del gas di Bose ideale avviene attraverso il calcolo della funzione di partizione

$$Z(T, V, \mu) = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k P_{N'}(E_k) = \sum_{N'=0}^{\infty} e^{\beta\mu N'} Q_{N'}(T, V, N) = \sum_k e^{\beta(\mu N_k - E_k)}, \quad (2.1)$$

dove

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2.2)$$

e

$$Q_{N'} = \sum_k e^{-\beta E_k} \quad (2.3)$$

è la funzione di partizione canonica per un sistema di N' particelle, la cui sommatoria include un set di autostati dell'hamiltoniano con energia E_k .

$$P_{N'}(E_k) = \frac{e^{\beta(\mu N' - E_k)}}{Z} \quad (2.4)$$

è invece la probabilità di realizzazione di una certa configurazione con N' particelle nello stato k , di energia E_k . Dalla funzione di partizione è possibile prevedere il comportamento termodinamico del sistema attraverso il potenziale gran canonico

$$\Omega = E - TS - \mu N = -k_B T \ln Z, \quad (2.5)$$

dove

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad (2.6)$$

è l'entropia del sistema,

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k N' P_{N'}(E_k) \quad (2.7)$$

è il numero totale di particelle e

$$E = \Omega - T \frac{\partial \Omega}{\partial T} - \mu \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k E_k P_{N'}(E_k) \quad (2.8)$$

è l'energia.

Se possiamo considerare le particelle indipendenti tra loro, l'hamiltoniano avrà una forma del tipo

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i^{(1)} \quad (2.9)$$

e la funzione di partizione gran canonica può essere esattamente risolta. Infatti,

$$N_k = \sum_i n_i \quad (2.10)$$

e

$$E_k = \sum_i \epsilon_i n_i, \quad (2.11)$$

in cui ϵ_i sono le energie di ogni particella determinate dalla risoluzione dell'equazione degli autovalori e autovettori, l'equazione di Schrödinger. La gran funzione di partizione si scrive allora

$$Z = \sum_{n_0} (e^{\beta(\mu-\epsilon_0)})^{n_0} \sum_{n_1} (e^{\beta(\mu-\epsilon_1)})^{n_1} \dots, \quad (2.12)$$

dove, nella statistica di Bose la sommatoria si estende ai valori di $n = 0, 1, 2, \dots$, mentre nel caso di Fermi è limitata ai valori $n = 0, 1$.

Possiamo allora calcolare il potenziale

$$\Omega = k_B T \sum_i \ln(1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}) \quad (2.13)$$

e il numero totale di particelle

$$N = \sum_i \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} = \sum_i \bar{n}_i, \quad (2.14)$$

in cui

$$\bar{n}_i = -\frac{\partial}{\partial \beta \epsilon_i} \ln Z = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} \quad (2.15)$$

sono i numeri di occupazione medi di ogni stato. Osservando il denominatore, risalta immediatamente un vincolo per il potenziale chimico del gas: $\mu < \epsilon_0$, in cui ϵ_0 è l'autovalore più piccolo, corrispondente all'energia minore del sistema. Quando $\mu \rightarrow \epsilon_0$, il numero di occupazione dello stato energetico più basso, lo stato fondamentale, aumenterà:

$$N_0 \equiv \bar{n}_0 = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_0 - \mu)] - 1}. \quad (2.16)$$

Questo è il meccanismo alla base del condensato di Bose-Einstein.

È utile mostrare il procedimento per scrivere il numero totale di particelle come somma

del numero di particelle nello stato fondamentale (stato di momento nullo, $\epsilon_0 = 0$), N_0 , e numero di particelle negli altri stati, $N_T(T, \mu) = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i(T, \mu)$:

$$N = N_0 + N_T. \quad (2.17)$$

A temperatura T costante, N_T è funzione di μ e raggiunge il valore massimo per $\mu = \epsilon_0$. N_0 , invece, è sempre di ordine 1 e diverge quando μ si approssima al valore di ϵ_0 . Dalla (2.7) possiamo vedere che

$$\begin{aligned} N &= \sum_k P_k N'_k = \sum_k N'_k \frac{e^{-\beta(E_k - \mu N'_k)}}{Z} = \\ &= \frac{1}{\beta Z} \sum_k \frac{\partial e^{-\beta(E_k - \mu N'_k)}}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \\ &= \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \right)_{T,V} = k_B T \left(\frac{\partial \ln Z_{BE}}{\partial \lambda} \right)_{\beta,V} \frac{\partial \lambda}{\partial \mu}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

che, con $\frac{\partial \lambda}{\partial \mu} = \beta \lambda$, diventa

$$N = \lambda \left(\frac{\partial \ln Z_{BE}}{\partial \lambda} \right)_{\beta,V}, \quad (2.19)$$

in cui abbiamo definito la fugacità $\lambda = e^{\mu\beta}$.

La funzione di partizione è spesso espressa in termini del logaritmo, forma ottenuta trattando la gran funzione di partizione canonica (2.1) come una serie geometrica convergente, nella condizione in cui $E_k - \mu > 0$. Dalla (2.12):

$$Z = \prod_k \sum_{N_k=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - E_k)N_k} = \prod_k \left(\frac{1}{e^{\beta(\mu - E_k)}} \right), \quad (2.20)$$

$$\ln Z = - \sum_k \ln[1 - e^{\beta(\mu - E_k)}]. \quad (2.21)$$

Passando ad un sistema macroscopico, in cui lo spettro di particelle può considerarsi continuo e la separazione tra livelli di energia tende a zero, sostituiamo le sommatorie con integrali

$$\ln Z = - \int_0^{\infty} dE g(E) \ln[1 - e^{\beta(\mu - E)}], \quad (2.22)$$

in cui $g(E)$ è la densità di stati del sistema, con la quale si costruisce il numero di stati in un intervallo di energia $[E, E + dE]^2$:

$$d\Gamma(E) = g(E)dE. \quad (2.23)$$

Per esempio, nel caso di un gas intrappolato in una scatola cubica di lato a ,

$$N(k) = \frac{4}{3}\pi k^3 / \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{V}{6\pi^2} k^3 = \frac{V}{6\pi^2 \hbar^3} (2mE)^{3/2} = \Gamma(E), \quad (2.24)$$

$$g(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} = g_s \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} E^{1/2}, \quad (2.25)$$

in cui abbiamo aggiunto la degenerazione dovuta ai possibili valori di spin $g_s = 2s + 1$.

Inserendo questo risultato nella gran funzione di partizione canonica, otteniamo

$$\ln Z = -\frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} g_s \int_0^\infty E^{1/2} \ln(1 - \lambda e^{-\beta E}) dE. \quad (2.26)$$

Per proseguire nel calcolo della funzione di partizione anteriore, bisogna sviluppare in serie di Taylor il logaritmo nell'integrando. Nel caso del gas di bosoni però, il contributo dello stato fondamentale di energia nulla potrebbe essere grande tanto quanto il resto della somma, quindi è utile, prima di proseguire, individuare un altro addendo:

$$\ln Z = -g_s \ln(1 - \lambda) - \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} g_s \int_0^\infty E^{1/2} \ln(1 - \lambda e^{-\beta E}) dE. \quad (2.27)$$

Allora, con $x = e^{-\beta E}$,

$$\ln Z = -g_s \ln(1 - \lambda) + \frac{4\pi V}{h^3} \frac{(2m^3)^{1/2}}{\beta^{3/2}} g_s \sum_{n=1}^\infty \frac{\lambda^n}{n} \int_0^\infty x^{1/2} e^{-nx} dx. \quad (2.28)$$

Con il cambio di variabile $p = x^{1/2}$,

$$\int_0^\infty x^{1/2} e^{-nx} dx = 2 \int_0^\infty p^2 e^{-np^2} dp = \frac{\sqrt{\pi}}{2n^{3/2}}, \quad (2.29)$$

e quindi

$$\ln Z = -g_s \ln(1 - \lambda) + V g_s \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{n=1}^\infty \frac{\lambda^n}{n^{5/2}}, \quad (2.30)$$

in cui definiamo le funzioni Zeta di Riemann

$$g_k(\lambda) = \sum_{n=1}^\infty \frac{\lambda^n}{n^k}, \quad (2.31)$$

$$g_k(1) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^k} \equiv \zeta(k),$$

che portano al risultato

$$\ln Z = -g_s \ln(1 - \lambda) + V g_s \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} g_{5/2}(\lambda) \quad (2.32)$$

per la gran funzione di partizione canonica logaritmica del gas di Bose.

Possiamo ora risolvere la (2.19) e ottenere

$$N = g_s \frac{\lambda}{1 - \lambda} + V g_s \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \lambda \frac{d g_{5/2}(\lambda)}{d\lambda}. \quad (2.33)$$

Derivando le Zeta di Riemann

$$\begin{aligned} \frac{d g_k}{d\lambda} &= \frac{d}{d\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n^k} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{n^{k-1}} = \\ &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n^{k-1}} = \frac{1}{\lambda} g_{k-1}(\lambda), \end{aligned} \quad (2.34)$$

arriviamo al risultato

$$N = g_s \frac{\lambda}{1 - \lambda} + V g_s \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(\lambda), \quad (2.35)$$

nel cui secondo membro sono evidenziati il numero medio di bosoni nello stato fondamentale (stato di momento nullo, $\epsilon_0 = 0$), addendo di sinistra, e il numero medio di bosoni negli altri stati, addendo di destra. Infatti, tenendo conto della degenerazione dovuta allo spin delle particelle g_s e del fatto che l'energia dello stato fondamentale è nulla,

$$\bar{n}_0 = g_s \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = \frac{g_s e^{\beta\mu}}{1 - e^{\beta\mu}} = \frac{g_s \lambda}{1 - \lambda}. \quad (2.36)$$

A temperature alte $\bar{n}_0 \rightarrow 0$ e l'occupazione dello stato fondamentale comincia quando il potenziale chimico del sistema tende all'energia dello stato fondamentale, $\mu \rightarrow 0$:

$$-\infty < \mu \leq 0 \iff 0 \leq \lambda \leq 1. \quad (2.37)$$

Il potenziale chimico si annulla ad una certa temperatura che prende il nome di temperatura di Bose:

$$\mu(T_B) = 0 \implies \lambda = 1 \implies \bar{n}_0(T_B) = 0. \quad (2.38)$$

A questa temperatura lo stato fondamentale inizia a riempirsi. Dalla (2.35) possiamo ottenere la temperatura di Bose nel caso di un gas intrappolato in una scatola cubica

con $\lambda = 1, \bar{n}_0 = 0$ e $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) = 2,616$:

$$\begin{aligned}\frac{N}{V} &= \frac{\bar{n}_0}{V} + g_s \left(\frac{mk_B T_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(\lambda) \\ \frac{N}{V} &= g_s \left(\frac{mk_B T_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(1) \\ \implies T_B &= \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{2,616g_s V} \right)^{2/3}.\end{aligned}\tag{2.39}$$

Raggiunto $\lambda_{max} = 1$, all'abbassare ulteriormente la temperatura, si prosegue con l'occupazione dello stato fondamentale che dà luogo alla condensazione di Bose-Einstein. In questo regime, in cui $T \leq T_B, \lambda = \lambda_{max} = 1$:

$$\frac{\bar{n}_0}{V} = \frac{N}{V} - g_s \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(1)\tag{2.40}$$

e, ricavando $g_{3/2}(1)$ dalla (2.39),

$$\begin{aligned}\frac{\bar{n}_0}{V} &= \frac{N}{V} - g_s \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \frac{1}{g_s \left(\frac{mk_B T_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}} = \\ &= \frac{N}{V} - \frac{N}{V} \left(\frac{T}{T_B} \right)^{3/2} = 1 - \left(\frac{T}{T_B} \right)^{3/2},\end{aligned}\tag{2.41}$$

risultato raffigurato in Figura 2.1.

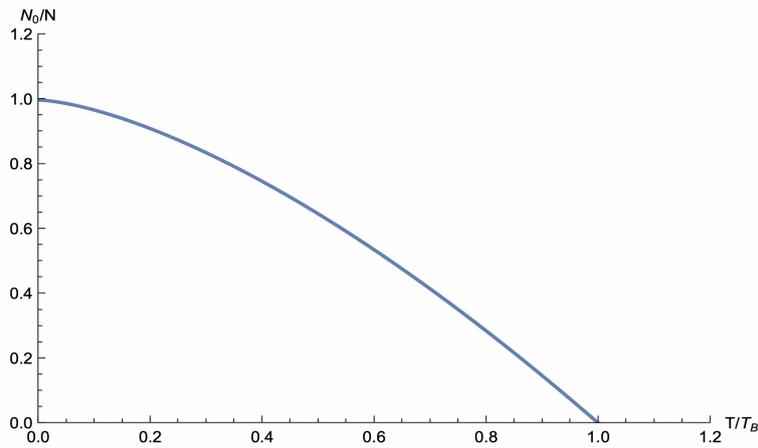


Figura 2.1: Relazione tra il numero di bosoni nello stato fondamentale N_0 e la temperatura T .

Mentre nella condensazione gas-liquido le particelle, a causa di forze di interazione tra le stesse, si raggruppano in regioni concrete dello spazio delle posizioni, nella condensazione di Bose-Einstein il raggruppamento prende luogo nello spazio dei momenti, in $p = 0$. È infatti un fenomeno dovuto ad una degenerazione, ovvero alla sovrapposizione delle funzioni d'onda delle particelle, che non potrebbe quindi avvenire in un gas ideale classico non degenerato.

Capitolo 3

Equazione Gross-Pitaevskii

Negli anni '50, Landau e Ginzburg^[7] proposero di modellare gli elettroni che danno origine alla superconduttività come un superfluido mediante un'equazione dalla forma semplificata

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 u + gu(|u|^2 - 1), \quad (3.1)$$

nel quadro di un modello a due fluidi, dove $|u|^2$ rappresenta la densità del superfluido che scorre senza attrito, mentre si suppone che il resto della materia sia in un normale stato fluido, e g è una costante di proporzionalità con le dimensioni dell'energia. Questa equazione fornisce previsioni soddisfacenti, ma il suo utilizzo è limitato dal fatto che le interazioni in un liquido come l'elio sono piuttosto forti. Tuttavia, il modello di Landau-Ginzburg è un caso particolare di un'equazione che emerge in modo naturale quando si studia il comportamento dei condensati di Bose-Einstein fino a un'approssimazione del primo ordine. Questa equazione è nota come equazione di Gross-Pitaevskii^{[8][11]}:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + g|\psi|^2 \right) \psi, \quad (3.2)$$

dove m è la massa degli atomi del condensato, $|\psi|^2$ è la densità atomica, V_{ext} rappresenta un potenziale esterno e g è un parametro che misura le interazioni atomiche. La GPE ha la stessa forma matematica dell'equazione di Schrödinger non lineare (NLSE), ed è sostanzialmente l'equazione di Schrödinger più un termine non lineare che in questo caso tiene conto dell'interazione tra le particelle. Nel caso dei condensati di Bose-Einstein, le interazioni sono così deboli che le previsioni fatte con questa equazione sono molto buone.

Questo capitolo è volto alla derivazione della GPE nei due casi dipendente e indipendente dal tempo, anticipata da un'introduzione sul formalismo della seconda quantizzazione e sulle condizioni e approssimazioni per il calcolo. I contenuti sono basati sull'articolo di F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari^[2] e sui testi di W. M. Alberico e A. Montanari^[1] e L. P. Pitaevskii e S. Stringari^[10].

3.1 Cenni di seconda quantizzazione

La seconda quantizzazione è il formalismo che si utilizza per descrivere sistemi quantistici a molti corpi.

La prima quantizzazione, il primo formalismo della meccanica quantistica, è basata sulla funzione d'onda come rappresentazione in coordinate spaziali del vettore di stato, in uno spazio di Hilbert dei possibili stati di una singola particella, in cui le osservabili sono considerate operatori lineari. Questo approccio risulta ridondante nel caso di un problema a molti corpi, in cui le particelle sono tra loro indistinguibili e un sistema di n particelle si descriverebbe attraverso il prodotto tensoriale di n spazi di Hilbert. Quando si ha a che fare con molte particelle, la domanda giusta da porsi non è più in che stato si trovi ogni particella, ma quante particelle si trovano in ciascuno stato. La seconda quantizzazione, infatti, ha un approccio fondato sui numeri di occupazione di ogni stato di particella singola. Questi, insieme, formano uno stato numero di occupazione, o stato di Fock,

$$|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle, \quad (3.3)$$

e tutti gli stati di Fock creano una base completa dello spazio astratto dei numeri di occupazione, o spazio di Fock, definito come la somma diretta del prodotto tensoriale di spazi di Hilbert di singola particella. Tali stati soddisfano inoltre le relazioni di ortogonalità e completezza

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_\infty | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle &= \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty}, \\ \sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle \langle n_1 n_2 \dots n_\infty| &= 1. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Uno stato a molti corpi può essere quindi descritto da una combinazione lineare di stati di Fock. In questo regime, le funzioni d'onda sono operatori, o operatori di campo.

3.1.1 Operatori di campo bosonici

Tra gli operatori di campo bosonici, introduciamo gli operatori di creazione e distruzione, \hat{a}_i^\dagger e \hat{a}_i , elementi chiave nello studio dei sistemi di bosoni. Operano nello spazio astratto dei numeri di occupazione rispettivamente aumentando o riducendo di uno il numero n di particelle di uno stato quantistico $|n\rangle$. L'operatore di distruzione (o di annichilazione) è l'operatore aggiunto dell'operatore di creazione. Possono essere entrambi definiti semplicemente sulla base della loro azione quando sono applicati su uno stato quantistico a particella singola ϕ_i . Nello spazio di Fock, sono definiti attraverso le relazioni

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1} |n_0, n_1, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_\alpha |n_0, n_1, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha} |n_0, n_1, \dots, n_\alpha - 1, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (3.5)$$

in cui gli n_α sono gli autovalori dell'operatore numero di particelle $\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$, che indica il numero di atomi nello stato α a una particella α . Soddisfano le relazioni di commutazione

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad (3.6)$$

e il valore atteso degli operatori $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i$ è

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle = \delta_{ij} n_i. \quad (3.7)$$

i e j indicano il numero quantico dello stato di singola particella a cui sono associati gli operatori.

L'operatore numero di particelle $\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$ gode delle seguenti proprietà:

- è hermitiano;
- $|n_1 \dots n_k \dots n_\infty\rangle$ sono i suoi autostati;
- n_k sono i suoi autovalori, che sono numeri reali, poiché \hat{n}_k è hermitiano, e positivi;
- due operatori \hat{n}_k e \hat{n}'_k commutano tra loro: $[\hat{n}_k, \hat{n}'_k] = 0$.

Una funzione d'onda dipendente dal tempo per un sistema di N bosoni identici, si può scrivere in prima quantizzazione nella forma:

$$\Psi(x_1 \dots x_N t) = \sum_{n_1 \dots n_\infty=0}^N f(n_1 \dots n_\infty, t) \phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N), \quad (3.8)$$

dove le $\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)$ sono autostati simmetrici dell'hamiltoniana di N bosoni identici non interagenti, moltiplicati per i coefficienti dello sviluppo $f(n_1 \dots n_\infty)$. Le variabili sono le coordinate.

Introducendo la base di stati di Fock e passando al formalismo della seconda quantizzazione, la (3.8) diventa

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \dots n_\infty=0}^N f(n_1 \dots n_\infty, t) |n_1 \dots n_\infty\rangle, \quad (3.9)$$

con $\sum_i n_i = N$ fissato. Notiamo che a primo membro non compaiono più le coordinate: ora le variabili sono i numeri di occupazione.

3.1.2 Campi

Gli operatori di creazione e distruzione, \hat{a}_i^\dagger e \hat{a}_i , si riferiscono ad una base specifica di autostati, i cui stati di particella singola sono caratterizzati da numeri quantici i . Possiamo allora passare dalla rappresentazione in termini di autostati a quella in coordinate spaziali, introducendo gli operatori di campo di creazione e distruzione, che creano o distruggono una particella in una determinata coordinata spaziale \mathbf{r} . Sono operatori nello spazio dei numeri di occupazione e sono definiti come combinazioni lineari di operatori di creazione o distruzione di particelle in uno stato definito, “pesati” dalla funzione d’onda di particella singola, stazionaria, relativa allo stato stesso:

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \hat{a}_{\mu}^\dagger, \quad \hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\mu}, \quad (3.10)$$

dove le sommatorie corrono su di un insieme completo di numeri quantici atti a caratterizzare lo stato di particella ψ_{μ} .

Rispettano le relazioni di commutazione:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (3.11)$$

L’azione di un operatore di campo consiste nel creare o distruggere una particella in un certo punto dello spazio \mathbf{r} , anziché in uno stato quantistico. In particolare, se consideriamo una funzione d’onda che descrive un sistema di N particelle, nella sua rappresentazione nel continuo

$$|\Psi_n\rangle = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) |\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\rangle, \quad (3.12)$$

possiamo applicare gli operatori di annichilazione e creazione:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) |\Psi_n\rangle &= \sqrt{N} \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) |\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\rangle, \\ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) |\Psi_n\rangle &= \sqrt{N+1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) |\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Inoltre, se l’operatore creazione viene applicato ad un *bra*,

$$\langle \Psi_N | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \left(\hat{\Psi}(\mathbf{r}) | \Psi_N \rangle \right)^\dagger, \quad (3.14)$$

il risultato sarà il duale dell’operatore annichilazione sul *ket*, e viceversa.

Risulterà utile la descrizione dell’hamiltoniano in termini di operatore di campo $\hat{\Psi}$:

$$, \quad (3.15)$$

in cui $V(\mathbf{r})$ è il potenziale a due corpi e in cui non abbiamo aggiunto campi esterni.

3.1.3 Matrice densità a un corpo

La matrice densità a un corpo $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ rappresenta una misura delle correlazioni spaziali tra le diverse densità di particelle in due punti del sistema. Descrive come le particelle sono distribuite e correlate nello spazio, cioè come la presenza di una particella in un punto \mathbf{r} influenza la presenza di un'altra particella in un punto \mathbf{r}' .

Nel contesto della teoria del condensato, la funzione d'onda $\Psi_0(\mathbf{r})$, che analizzeremo nel dettaglio nella sezione 3.2.1, è legata alle proprietà collettive del sistema e le correlazioni spaziali tra le particelle sono descritte dalla matrice densità. Vedremo che questi due elementi sono strettamente legati: la funzione d'onda deve essere autofunzione dell'operatore matrice densità.

La matrice densità è una rappresentazione dell'operatore densità in una certa base ortonormale, operatore utilizzato per descrivere gli stati fisici. Si può considerare l'analogo quantistico della distribuzione di probabilità nello spazio delle fasi in meccanica classica.

Definiamo la matrice densità a un corpo come

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3.16)$$

i cui elementi diagonali, che forniscono la densità del sistema, si definiscono ponendo $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \rangle = \rho(\mathbf{r}). \quad (3.17)$$

Questa è una definizione molto generale, applicabile a qualsiasi sistema, in equilibrio o fuori dall'equilibrio. La condizione di normalizzazione è data da $N = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})$, che definisce anche il numero totale di particelle. Dato che

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (\rho^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}))^*, \quad (3.18)$$

la matrice densità a un corpo è una matrice hermitiana.

Se il sistema occupa uno stato puro, descritto da una funzione d'onda a N corpi $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, allora la media (3.16) si trova seguendo le regole (3.13) e (3.14), e possiamo ricavare la matrice densità a un corpo per la variabile \mathbf{r}_1 , o matrice densità ridotta. Partendo dalla (3.16):

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle \Psi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) | \Psi_n \rangle = \\ &= N \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{r}'_2 \dots d\mathbf{r}'_N \Psi_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N) \Psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \langle \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N | \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \rangle, \end{aligned} \quad (3.19)$$

Utilizziamo ora l'ortogonalità della base di coordinate

$$\langle \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N | \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \rangle = \prod_{i=2}^N \delta(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}_i), \quad (3.20)$$

che semplifica l'integrale a:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (3.21)$$

con integrazione sulle $N-1$ variabili $\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$. Qui la funzione a più corpi $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ è normalizzata a 1. A questa definizione possono essere aggiunti gradi di libertà addizionali, come lo spin.

La matrice densità determina anche la distribuzione del momento:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{p}') \hat{\Psi}(\mathbf{p}) \rangle, \quad (3.22)$$

dove $\hat{\Psi}(\mathbf{p})$ è la rappresentazione dell'operatore di campo nello spazio dei momenti, cioè la trasformata di Fourier di $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$. Nel caso di un sistema di N particelle uniforme e isotropo, che occupa un volume V , in assenza di potenziali esterni, nel limite per $N, V \rightarrow \infty$, con densità $n = N/V$ fissa, la matrice densità a un corpo dipende solo dal modulo della variabile relativa $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, ovvero $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho^{(1)}(s)$. In questo caso, per $s \rightarrow \infty$, la distribuzione del momento per piccoli valori ha un comportamento lineare e la matrice densità diventa nulla. La cosa cambia in presenza di un BEC, in cui la distribuzione del momento contiene il termine aggiuntivo del condensato, ovvero delle particelle con $\mathbf{p} = 0$, che causa la convergenza della matrice densità a un corpo a grandi distanze:

$$\rho^{(1)}(s)_{s \rightarrow \infty} \rightarrow \rho_0, \quad (3.23)$$

con $\rho_0 = N_0/V$, densità dello stato fondamentale. Questo comportamento viene denominato ordine a lungo raggio non diagonale (ODLRO), siccome riguarda le componenti non diagonali della matrice densità a un corpo, ed è strettamente legato ai suoi autovalori.

L'ordine a lungo raggio espresso dalla matrice densità a un corpo è fortemente collegato al comportamento dei suoi autovalori ρ_i definiti dalla soluzione dell'equazione secolare

$$\int d\mathbf{r}' \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}') = \rho_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (3.24)$$

le cui soluzioni forniscono una base di funzioni d'onda a una particella ortonormali. Ecco la relazione tra la funzione d'onda del condensato e l'operatore matrice densità: l'autofunzione $\psi_0 = \Psi_0$ dell'operatore $\rho^{(1)}$ corrispondente all'autovalore più grande ρ_0 descrive la distribuzione spaziale delle particelle nel condensato, mentre la risoluzione dell'equazione (3.24) fornisce una descrizione completa del comportamento collettivo delle particelle nel sistema.

Possiamo allora scrivere la matrice densità nella sua forma diagonalizzata:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i \rho_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}'). \quad (3.25)$$

La diagonalizzazione, qui, significa trovare le funzioni d'onda del condensato che permettono di rappresentare l'operatore come una matrice diagonale e, nel contesto della seconda quantizzazione, gli autovalori ρ_i sono i numeri di occupazione degli stati a una particella ψ_i .

Dalla (3.25) è ancora più chiara la separazione in due termini nel caso della condensazione di Bose-Einstein, in cui $\rho_{i=0} = n_{i=0} \equiv N_0$ assume un valore dell'ordine del numero di particelle totali N , e possiamo scrivere

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N_0 \psi_0^*(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}') + \sum_{i \neq 0} \rho_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}'). \quad (3.26)$$

Nel limite termodinamico $N \rightarrow \infty$, la somma sugli $i \neq 0$ viene sostituita da un integrale che si annulla per grandi distanze $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, mentre il primo termine rimane finito.

3.2 Approssimazioni e condizioni di applicabilità

La GPE è un'approssimazione di campo medio per le interazioni tra particelle, cioè anziché studiare il contributo di ogni grado di libertà del sistema, si considera solo la loro media: gli effetti complessivi degli elementi del sistema su un elemento sono approssimati ad un singolo effetto medio. Questo riduce il problema a molti corpi ad un problema a un corpo. Questa approssimazione è applicabile se il gas è diluito,

$$|r| \ll d, \quad (3.27)$$

con r raggio delle forze interatomiche e $d = n^{-1/3}$ distanza media tra particelle, fissata dalla densità del gas $n = N/V$. In questo caso di gas rarefatto, che è quello ottenuto sperimentalmente, l'interazione simultanea tra tre o più particelle può essere trascurata. Ciò significa che, per una particella, tutte le altre hanno lo stesso stato, in quanto si trovano tutte nello stesso stato indipendente $|\psi\rangle$, e quindi possiamo abbandonare l'etichettatura delle funzioni d'onda. In questo modo dobbiamo minimizzare l'energia libera su uno spazio di funzioni del tipo

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi\rangle, \quad (3.28)$$

dove \otimes rappresenta il prodotto tensoriale e quindi $|\Psi\rangle$ è la funzione d'onda del prodotto tensoriale di N particelle; consideriamo la normalizzazione $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

Questa approssimazione è valida se il condensato non è molto denso, altrimenti le interazioni con le particelle più vicine sarebbero molto più forti di quelle con le particelle più distanti.

Il parametro adimensionale che controlla la validità dell'approssimazione del gas diluito, necessaria per la derivazione della GPE, è il numero di particelle in un "volume

di diffusione” $|a|^3$, con a lunghezza di scattering associata all’interazione tra particelle. Questo può essere scritto come $\bar{n}|a|^3$, dove \bar{n} è la densità media del gas. Quando $\bar{n}|a|^3 \ll 1$ il sistema è detto diluito o debolmente interagente. Tuttavia, si dovrebbe chiarire meglio il significato dei termini “debolmente interagente”, poiché la piccolezza del parametro $\bar{n}|a|^3$ non implica necessariamente che gli effetti di interazione siano piccoli. Questi, infatti, devono essere dell’ordine dell’energia cinetica degli atomi nella trappola. Una prima stima può essere ottenuta calcolando l’energia di interazione, E_{int} , sullo stato fondamentale dell’oscillatore armonico. Questa energia è data da $\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} N\bar{n}$, con N numero totale di particelle, dove la densità media è dell’ordine di N/a_{oscill}^3 , con a_{oscill} lunghezza di scattering dovuta al potenziale armonico, quindi $E_{int} \propto N^2|a|/a_{oscill}^3$. D’altra parte, l’energia cinetica è dell’ordine di $N\hbar\omega_{oscill}$ e quindi $E_{kin} \propto Na_{oscill}^{-2}$. Infine

$$\frac{E_{int}}{E_{kin}} \propto \frac{N|a|}{a_{oscill}}. \quad (3.29)$$

Questo è il parametro che esprime l’importanza dell’interazione atomo-atomo rispetto all’energia cinetica nel caso dell’oscillatore armonico. Può essere facilmente maggiore di 1 anche se $\bar{n}|a|^3 \ll 1$, per cui anche i gas molto diluiti possono presentare un comportamento non ideale significativo.

La condizione appena discussa, che richiede che il cosiddetto parametro del gas valga $\eta = \bar{n}|a|^3 \ll 1$, è tipicamente vera in condensati di sodio e rubidio in cui $\eta \approx 10^{-2}$ ed è equivalente a richiedere che il fenomeno investigato ricopra distanze molto maggiori della lunghezza di scattering, $|a| \ll d$, condizione in cui il gas è debolmente interagente. Da questo consegue che la distanza tra due particelle è sempre abbastanza grande da giustificare l’uso dell’espressione asintotica per la funzione d’onda del loro moto relativo, fissata dall’ampiezza di diffusione. Ciò significa che tutte le proprietà del sistema possono essere espresse in termini dell’ampiezza di diffusione e che i valori rilevanti dei momenti devono sempre soddisfare la disuguaglianza $pa/\hbar \ll 1$, ovvero la condizione di gas diluito in cui abbiamo sostituito $d = \lambda = \hbar/p$ per basse temperature, quando la quantità di moto p è molto piccola e λ diventa paragonabile alla distanza d tra le particelle. A tali momenti, l’ampiezza di scattering diventa indipendente dall’energia e dall’angolo di diffusione e può essere tranquillamente sostituita con il suo valore a bassa energia che, secondo la teoria standard dello scattering, è determinato dalla lunghezza di scattering a dell’onda s .

In conclusione, ci si aspetta che un singolo parametro, la lunghezza di scattering a delle onde s , caratterizzi tutti gli effetti dell’interazione sulle proprietà fisiche del gas.

Il sistema di N bosoni è descritto dall’hamiltoniano (3.15), in cui $V(\mathbf{r})$ è il potenziale interatomico. Nella realtà, questo potenziale contiene sempre un termine a corto raggio, il che rende difficile ottenere la soluzione dell’equazione di Schrödinger a livello microscopico. In particolare, la teoria delle perturbazioni non si può applicare allo scattering di particelle lente. Risulterebbe una cattiva approssimazione a brevi distanze, dell’ordine

del raggio delle forze interatomiche, dove il potenziale è forte e le correlazioni quantistiche sono importanti. D'altra parte, in virtù della discussione precedente sul criterio di diluizione di un gas, concludiamo che la forma effettiva del potenziale a due corpi non è importante per descrivere le proprietà macroscopiche del gas, a condizione che il potenziale fornisca il valore corretto della lunghezza di diffusione delle onde s . Questo è possibile perché in un gas diluito e freddo si può comunque ottenere un'espressione corretta per il termine di interazione osservando che, in questo caso, sono rilevanti solo le collisioni binarie a bassa energia: queste collisioni sono caratterizzate da un unico parametro, la lunghezza d'onda s , e sono indipendenti dai dettagli del potenziale a due corpi. È quindi conveniente sostituire il potenziale microscopico V con un potenziale efficace debole V_{eff} , al quale si può applicare con sicurezza la teoria delle perturbazioni. Il potenziale V_{eff} dovrebbe riprodurre le stesse proprietà di dispersione a bassa energia date dal potenziale iniziale V .

Un'altra importante approssimazione è quella di Bogoliubov, che tratteremo nel seguente paragrafo. Questa ipotesi, per essere valida, richiede che l'hamiltoniano in termini dell'operatore di campo $\hat{\Psi}$ abbia la forma (3.15), che la temperatura sia abbastanza bassa e che il numero di particelle condensate sia molto alto.

3.2.1 L'approssimazione di Bogoliubov

La teoria di Bogoliubov^[3] nasce per spiegare il comportamento superfluido dell'elio, ma avendo quest'ultimo forti interazioni, risulta adatta solo per BEC debolmente interagenti.

Le interazioni tra le particelle influenzano fortemente le proprietà del gas, anche per campioni molto diluiti. D'altra parte, il problema del gas di Bose quasi ideale non è banale, poiché l'energia dello stato fondamentale è nulla in assenza di interazioni e le tradizionali tecniche di perturbazione non possono essere applicate. Questo problema è stato risolto da Bogoliubov. La teoria di Bogoliubov si basa su una nuova tecnica di perturbazione e costituisce la base dei moderni approcci alla condensazione di Bose-Einstein nei gas diluiti. Partiamo dalla definizione (3.10) di operatore di campo di distruzione $\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}(\mathbf{r})\hat{a}_{\mu}$. È utile separare il termine condensato dalle altre componenti:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r})\hat{a}_0 + \sum_{i \neq 0} \psi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i \quad (3.30)$$

La condensazione di Bose-Einstein avviene quando il numero n_0 degli atomi di uno stato a una particella diventa molto grande: $n_0 \equiv N_0 \gg 1$, e il rapporto N_0/N rimane finito nel limite termodinamico $N \rightarrow \infty$. In questo limite, gli stati con N_0 e $N_0 \pm 1 \simeq N_0$ corrispondono alla stessa configurazione fisica. L'approssimazione di Bogoliubov consiste nell'ignorare la non commutatività degli operatori \hat{a}_0 e \hat{a}_0^\dagger , che è una buona approssimazione per descrivere il fenomeno macroscopico associato con la BEC, in cui nello stato

fondamentale $N_0 = \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle \gg 1$. Infatti, il commutatore tra i due operatori è 1, (3.6), mentre gli operatori stessi sono dell'ordine $\sqrt{N_0}$, (3.7): possiamo quindi sostituirli direttamente con $\sqrt{N_0}$. L'approssimazione di Bogoliubov implica anche che la componente microscopica $\psi_0 \hat{a}_0$ dell'operatore di campo viene trattata come un campo classico e prende il nome di parametro d'ordine, o funzione d'onda del condensato. Così, l'ansatz di Bogoliubov si scrive

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.31)$$

dove abbiamo definito $\Psi_0 = \sqrt{N_0}\psi_0$ e $\delta\hat{\Psi} = \sum_{i \neq 0} \psi_i \hat{a}_i$. Trattando l'operatore $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ come una piccola perturbazione, ovvero considerando i bosoni negli stati eccitati come fluttuazioni attorno al condensato dello stato fondamentale, Bogoliubov riuscì a sviluppare la teoria al primo ordine per le eccitazioni del gas di Bose interagente. Nel caso in cui la componente $\delta\hat{\Psi}$ sia trascurabile, come avviene nel caso del gas di Bose diluito a temperature molto basse, l'operatore di campo coincide con il campo classico Ψ_0 : tutto il sistema diventa classico e abbiamo l'analogo della transizione dall'elettrodinamica quantistica all'elettromagnetismo classico, quando il campo magnetico domina sulla descrizione microscopica perché un gran numero di fotoni si trova nello stesso stato quantico. In questo caso la non commutatività degli operatori di campo non è importante e si può descrivere il campo elettromagnetico utilizzando funzioni classiche. Nel caso della BEC, l'introduzione della funzione classica $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ è permessa dalla presenza di un gran numero di atomi in un unico stato. È una funzione complessa definita come valore di aspettazione dell'operatore di campo: $\Psi_0(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$. Il suo modulo fissa la densità del condensato attraverso $n_0(\mathbf{r}, t) = |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2$. La funzione Ψ_0 possiede anche una fase ben definita e, analogamente al caso dei gas uniformi, ciò corrisponde ad assumere il verificarsi di una rottura della simmetria di gauge globale nel sistema a molti corpi. Ψ_0 , inoltre, caratterizza il comportamento a lungo raggio non diagonale (3.23) della matrice densità a una particella $\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$, attraverso il suo ruolo nel comportamento asintotico conseguente dalla (3.31):

$$\lim_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \rightarrow \infty} \rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \Psi_0^*(\mathbf{r}', t) \Psi_0(\mathbf{r}, t). \quad (3.32)$$

Ma in un sistema di dimensioni finite, non si possono applicare i concetti di rottura della simmetria di gauge e di ordine a lungo raggio non diagonale, strumenti solitamente utilizzati nel contesto dei superfluidi. La funzione d'onda del condensato Ψ_0 ha comunque un significato chiaro: come introdotto nella sezione 3.1.3, può essere infatti determinata attraverso la diagonalizzazione della matrice densità a un corpo, $\int d\mathbf{r}' \rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}') = N_i \Psi_i(\mathbf{r})$. Una soluzione di questa equazione secolare è allora la funzione d'onda del condensato che corrisponde all'autofunzione, Ψ_0 , con l'autovalore più grande N_0 , ovvero il più grande tra i numeri di occupazione: il numero di particelle nel condensato. Nel contesto degli stati stazionari, in cui la dipendenza dal tempo è data da $e^{-iEt/\hbar}$,

possiamo ricavare la dipendenza dal tempo del parametro d'ordine:

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (3.33)$$

in cui μ è il potenziale chimico, grandezza chiave nella fisica del BEC, che governa quindi l'evoluzione temporale del parametro d'ordine. Diversamente da quanto accade nel caso del gas ideale, il potenziale chimico del gas interagente non è nullo, ma è dato da

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = gn, \quad (3.34)$$

ed è sempre positivo a temperatura uguale a zero.

Per sostituire l'operatore di campo con il campo classico dobbiamo assumere che sia soddisfatta la condizione delle interazioni deboli (3.15). Questo ci permette di ignorare sia lo svuotamento quantistico che quello termico del condensato e implica che il parametro d'ordine sia normalizzato al numero totale di atomi, $\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = N$, e che la densità del condensato coincida con la densità del gas, $n_0(\mathbf{r}) = |\Psi_0(\mathbf{r})|^2$.

La funzione d'approccio di Bogoliubov (3.31) per l'operatore di campo si può anche interpretare dicendo che il valore atteso $\langle \hat{\Psi} \rangle$ dell'operatore di campo è diverso da zero. La (3.31) è infatti una combinazione lineare di operatori di annichilazione e creazione, che forniscono le piccole deviazioni attorno al condensato. Sono queste che portano ad avere un valore atteso non nullo per l'operatore di campo e quindi un condensato che può essere descritto da un campo macroscopico e, in prima approssimazione, classico. In altre parole, l'operatore di campo è un operatore di annichilazione e creazione. Se un sistema è privo di eccitazioni, cioè tutte le particelle occupano lo stato fondamentale, allora l'operatore di campo agisce solo sullo stato fondamentale e non ha nessuna fluttuazione che possa portare a un valore medio diverso da zero. Se gli stati a destra e a sinistra dell'uguale avessero lo stesso numero di particelle, non sarebbe possibile avere un valore atteso non nullo, e quindi non sarebbe possibile descrivere il condensato. Da un punto di vista fisico, questa rottura di simmetria significa che il condensato si comporta come un serbatoio.

D'altra parte, visto che $N_0 \gg 1$, aggiungere una particella al condensato non cambia le proprietà fisiche del sistema. Questo è ciò che, dato il valore atteso non nullo dell'operatore di campo, ci permette poi di trascurare queste fluttuazioni e scrivere $\langle \hat{\Psi} \rangle = \Psi_0$, sapendo che gli stati a sinistra hanno una particella in meno rispetto a quelli a destra. Allo stesso modo, $\Psi_0^* = \langle \hat{\Psi}^\dagger \rangle$.

Tornando alla discussione sulla natura del potenziale di interazione, sarebbe sbagliato applicare l'approssimazione di Bogoliubov e sostituire $\hat{\Psi}$ con Ψ_0 per un potenziale realistico. La sostituzione è tuttavia accurata se si utilizza un potenziale efficace debole V_{eff} la cui perturbazione è piccola a tutte le distanze e in cui è applicabile la teoria delle perturbazioni.

3.3 Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo

Come discusso all'inizio del secondo capitolo, per ottenere informazioni sul sistema dobbiamo cercare l'energia dello stato fondamentale. L'hamiltoniano generico di un sistema di N particelle sotto l'azione di un potenziale esterno è

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (3.35)$$

dove il primo termine è l'energia cinetica della i -esima particella, il secondo è l'effetto del potenziale esterno e l'ultimo è l'interazione tra le N particelle. Minimizzando l'hamiltoniano, troviamo l'energia dello stato fondamentale del sistema.

È utile usare, per trovare l'equilibrio di un sistema, i potenziali termodinamici. In questo caso, possiamo minimizzare l'energia libera di Helmholtz a temperatura e volume costanti

$$F = E - \mu N, \quad (3.36)$$

con E energia e μ potenziale chimico. La formula dell'energia per un hamiltoniano H data una funzione d'onda ψ è

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.37)$$

In un sistema di N particelle, ad ognuna di esse viene associata una funzione d'onda, ma, come anticipato nel paragrafo precedente, possiamo utilizzare l'approssimazione di campo medio: le particelle si trovano tutte nello stesso stato indipendente $|\psi\rangle$, quindi possiamo liberarci degli indici che le differenziano tra loro. Dobbiamo allora minimizzare l'energia libera su uno spazio di funzioni che sono il prodotto tensoriale delle funzioni d'onda delle singole particelle,

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes \dots \otimes |\psi\rangle; \quad (3.38)$$

consideriamo anche la normalizzazione della funzione $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Questa approssimazione rimane valida nel limite del gas diluito.

Abbiamo quindi ridotto il problema alla minimizzazione di

$$F(\Psi) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \mu \langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle. \quad (3.39)$$

Questa, sarà svolta attraverso il metodo del calcolo delle variazioni, ovvero considereremo una piccola variazione nella funzione d'onda a singola particella $\psi(\mathbf{r})$ ma, invece di applicarla alle sue parti reale e immaginaria, prenderemo ψ e ψ^* come variabili indipendenti. Sostituendo nella (3.39) l'hamiltoniano introdotto sopra (3.35), studiamo ciascun termine.

Termine cinetico

Svolgendo il primo termine, ovvero il contributo cinetico, abbiamo

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \psi^*(\mathbf{r}_i) \nabla \psi(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i = \\
 &= N \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \\
 &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r},
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

in cui l'operatore momento è definito $\mathbf{p} = -i\hbar$ e dove abbiamo usato, nell'ultimo passaggio, la prima identità di Green^[9]

$$\oint_{\partial R} F(\nabla G \mathbf{n}) ds = \iint_R F \nabla^2 G dx dy + \iint_R (\nabla F \nabla G) dx dy \tag{3.41}$$

nella regione chiusa R del dominio, delimitata dal bordo ∂R . \mathbf{n} è il versore uscente normale all'elemento di superficie ds . Sostituendo F con $\psi^*(\mathbf{r})$ e G con $\psi(\mathbf{r})$, l'integrale di bordo si annulla e ritroviamo il risultato della (3.40).

Possiamo subito ottenere la derivata funzionale

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta \psi^*} \left(-N \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) &= \\
 = -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Termine di potenziale

Il termine di potenziale diventa

$$\langle \Psi | \sum_{i=1}^N V_{ext}(\mathbf{r}_i) | \Psi \rangle = N \int \psi^*(\mathbf{r}) V_{ext} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \tag{3.43}$$

la cui variazione è

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta \psi^*} \left(N \int \psi^*(\mathbf{r}) V_{ext} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) &= \\
 = N \int V_{ext}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Termine di interazione

Per il termine di interazione:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) | \Psi \rangle &= \\
= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_i \int \psi^*(\mathbf{r}_i) \psi^*(\mathbf{r}_j) V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \psi(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j &= \\
= \frac{N(N-1)}{2} \int d\mathbf{r} \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' &.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

La sua variazione è

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta \psi^*} \left(\frac{N(N-1)}{2} \int d\mathbf{r} \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) &= \\
= N(N-1) \int d\mathbf{r} \int \psi^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' &= \\
= N(N-1) \int \left(\int |\psi(\mathbf{r}')|^2 V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \right) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &.
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Termine di potenziale chimico

L'ultimo termine dell'energia libera diventa invece

$$\mu \langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle = \mu \sum_{i=1}^N \int \psi^*(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i = \mu N \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \tag{3.47}$$

la cui variazione è quindi

$$\frac{\delta \langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle}{\delta \psi^*} = N \int \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \tag{3.48}$$

Unificazione dei termini

Raccogliendo finalmente le variazioni di ciascun termine nella formula dell'energia libera F , si ha che:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F}{\delta \psi^*} = 0 = N \int \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + \right. \\
\left. + (N-1) \left(\int |\psi(\mathbf{r}')|^2 V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \right) \psi(\mathbf{r}) - \mu \psi(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Nel processo di minimizzazione, la variazione del potenziale deve essere uguale a zero, il che implica che il contenuto delle parentesi quadre deve essere nullo. Usiamo inoltre l'approssimazione per cui $N - 1 \simeq N$ e, secondo quanto detto nella sezione 3.2, un potenziale tale che $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, con g costante di accoppiamento dell'interazione, $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a$, in cui a è la lunghezza di scattering dell'onda s .

Allora

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + N\frac{4\pi\hbar^2}{m}a|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}), \quad (3.50)$$

che è l'equazione Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo, relativa allo stato stazionario del condensato. È un caso particolare della GPE dipendente dal tempo, discussa più avanti nella sezione 3.4, in cui la funzione d'onda è stazionaria e normalizzata a 1, $\psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|/\sqrt{N}$, e le sue soluzioni corrispondono a stati stazionari del gas. La lunghezza di scattering a misura l'intensità delle interazioni tra i bosoni: se $a < 0$ le interazioni sono attrattive, se $a > 0$ repulsive.

3.3.1 Soluzioni stazionarie

Le soluzioni dell'equazione di Gross-Pitaevskii, quando il potenziale esterno non dipende dal tempo, assumono una forma semplice e stazionaria. La soluzione e funzione d'onda del condensato si evolve nel tempo secondo la legge (3.33):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (3.51)$$

Tra le diverse soluzioni ammesse dall'equazione (3.50), quella con l'energia più bassa definisce il parametro d'ordine dello stato fondamentale e in generale risulta essere una funzione reale.

La GPE indipendente dal tempo ha la forma di un'equazione di Schrödinger non lineare, la cui non linearità deriva dal termine di campo medio, proporzionale alla densità delle particelle. In assenza di interazioni ($g = 0$), questa equazione si riduce alla consueta equazione di Schrödinger per l'hamiltoniana di singola particella $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r})$ e, per un trappola armonica, la soluzione allo stato fondamentale coincide, a parte un fattore di normalizzazione, con la funzione gaussiana $\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{N}\Psi_0(\mathbf{r})$.

Le soluzioni eccitate sono invece solitamente date da funzioni complesse di cui lo stato di vortice è l'esempio più famoso. Per un gas uniforme, in assenza di potenziale esterno, l'equazione (3.50) dà semplicemente $\mu = g|\Psi_0|^2 = gn$, in accordo con la (3.34).

3.4 Gross-Pitaevskii dipendente dal tempo

In questo capitolo studieremo cosa succede quando l'ambiente del condensato si evolve o quando la nube bosonica è instabile. Per farlo, dobbiamo stabilire un'equazione di campo medio che regoli l'evoluzione dei bosoni nel livello di energia minimo.

L'operatore di campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, nella rappresentazione di Heisenberg, soddisfa:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = \\ &= \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3.52)$$

ottenuta dall'hamiltoniano scritto in termini dell'operatore di campo $\hat{\Psi}$, (3.15), e dalle relazioni di commutazione dell'operatore, (3.11). Usando lo stesso potenziale debole della GPE indipendente dal tempo, V_{eff} , che ci permette di utilizzare l'approssimazione di Bogoliubov, e assumendo che $\psi(\mathbf{r}, t)$ varia lentamente su distanze dell'ordine del raggio della forza interatomica, possiamo sostituire $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ con $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e \mathbf{r}' con \mathbf{r} nell'argomento di Ψ per ottenere

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.53)$$

l'equazione Gross-Pitaevskii dipendente dal tempo, per il parametro d'ordine con $g = \int V_{eff}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. Esprimendo questo integrale in termini della lunghezza di scattering a dell'onda s , ritroviamo $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$, la costante di accoppiamento dell'interazione.

La validità della GPE dipendente dal tempo si estende non solo ai potenziali deboli, ma a tutte le forze in generale, con il giusto parametro di interazione. Questo rende la GPE lo strumento principale di investigazione per il gas di Bose diluito non uniforme a bassa temperatura.

Notiamo che la (3.53) non è un'equazione lineare: questo è dovuto all'interazione tra particelle, e segue direttamente dalla non linearità dell'equazione (3.52) per l'operatore di campo. Questo è ciò che permette di usare la GPE come punto di partenza per lo studio degli effetti di coerenza e interazione. Come anticipato nella sezione 3.2.1, la GPE è l'equivalente delle equazioni di Maxwell per la elettrodinamica classica ma, a differenza di queste, la (3.53) contiene esplicitamente la costante \hbar . Questo è dovuto alla differenza nella relazione tra energia ϵ , quindi frequenza $\omega = \epsilon/\hbar$, e momento p , quindi vettore d'onda $k = p/\hbar$, nel caso di fotoni e di atomi. Per i fotoni, $\epsilon = cp$ e la relazione di dispersione è $\omega = ck$, mentre per gli atomi $\epsilon = p^2/2m$ e $\omega = \hbar k^2/2m$, con la costante di Plank esplicita. Per gli atomi, quindi, i fenomeni di coerenza come l'interferenza dipendono da \hbar .

3.4.1 Condizione di irrotazionalità dei superfluidi

Per quanto riguarda i superfluidi dobbiamo prendere in considerazione la caratteristica importante dell'irrotazionalità.

Partendo dalla GPE dipendente dal tempo, possiamo moltiplicare i due membri per Ψ^*

e sottrarre il complesso coniugato dell'espressione risultante,

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla \left[\frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \right] = 0, \quad (3.54)$$

ottenendo così l'equazione di continuità

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (3.55)$$

in cui abbiamo usato la formula della densità del gas, che, come conseguenza della teoria di Bogoliubov, coincide con la densità del condensato:

$$\rho(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (3.56)$$

\mathbf{v} è la velocità del condensato:

$$\mathbf{v} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)}{\rho} = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta, \quad (3.57)$$

in cui θ è la fase del parametro d'ordine, data dalla (3.33):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}. \quad (3.58)$$

Dalla (3.57) vediamo che la velocità corrisponde al gradiente di una quantità scalare. Si deduce che il moto del condensato corrisponde a quello di un flusso e se la fase θ non è singolare, come invece avverrebbe al centro della linea di un vortice, possiamo verificare l'irrotazionalità del moto del condensato:

$$\text{rot } \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla \theta = 0, \quad (3.59)$$

caratteristica tipica dei superfluidi.

Nel caso di un condensato con fase θ non singolare, il BEC si comporta quindi come un fluido senza viscosità e con flusso irrotazionale.

Capitolo 4

Vortici in un gas di Bose rarefatto

Abbiamo detto che il BEC è un superfluido irrotazionale. Lungo l'asse z , però, la fase diventa singolare e la situazione cambia: qui, l'aspetto particolare del sistema è la creazione di vortici, che hanno però caratteristiche di quantizzazione che non si osservano nei vortici che si creano per esempio in acqua.

La particolarità dei vortici nel gas di Bose è data dall'esistenza di una regione dove la densità va a zero, che ha dimensioni dell'ordine di grandezza della lunghezza di healing del vortice. I vortici non sono generalmente configurazioni stabili, e corrispondono ad un minimo, locale o globale, del funzionale dell'energia solo in un sistema di riferimento in rotazione ad alta velocità angolare. Non possiamo quindi usare le equazioni descritte precedentemente, ma occorre includere in forma esplicita il termine di pressione quantistica. La trattazione di questo capitolo è basata sull'articolo di F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari^[5] e sul testo di L. Pitaevskii e S. Stringari^[10].

Nella rotazione di un fluido, il campo di velocità corrispondente ad una rotazione è dato dalla formula del corpo rigido

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \quad (4.1)$$

ed è caratterizzato da una vorticità diffusa

$$\text{rot } \mathbf{v} = 2\boldsymbol{\Omega} \neq 0. \quad (4.2)$$

Per quando riguarda i superfluidi, però, questo campo di velocità è in contraddizione con la condizione di irrotazionalità discussa nella sezione 3.4.1. Ci aspettiamo quindi che i superfluidi ruotino diversamente rispetto ai fluidi normali.

Consideriamo un gas confinato in un cilindro di raggio R e altezza L e cerchiamo una soluzione alla GPE che corrisponda ad una rotazione attorno all'asse del cilindro, ovvero una funzione d'onda che sia autostato del momento angolare con $l_z = s\hbar$, in modo tale che il momento angolare totale del vortice sia $L_z = Ns\hbar$. La soluzione sarà nella forma

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = e^{is\phi} |\Psi_0(r)|, \quad (4.3)$$

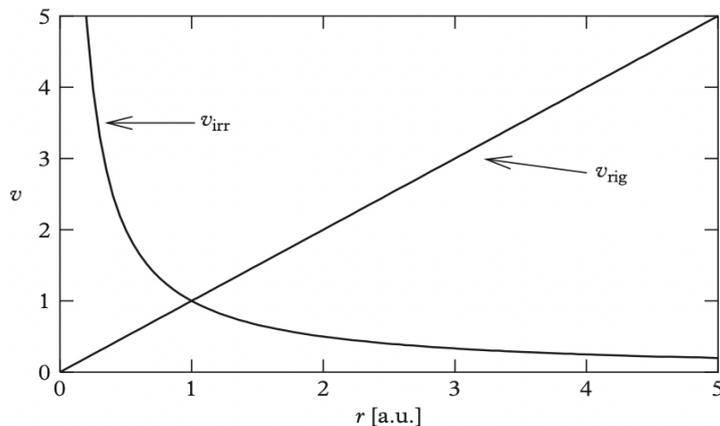


Figura 4.1: Campo di velocità tangenziale per flusso irrotazionale (v_{irr}) e rotazionale rigido (v_{rig}). Il campo di velocità irrotazionale diverge come $1/r$ quando $r \rightarrow 0$. r e v sono misurati in unità arbitrarie (a.u.). Figura riprodotta da [10].

in cui abbiamo introdotto le coordinate cilindriche r, ϕ , e z e $|\Psi_0| = \sqrt{n}$. s è un intero, per assicurare che la funzione d'onda sia univalente. Questa funzione d'onda, autostato del momento angolare, rappresenta un gas in rotazione attorno all'asse z con velocità tangenziale data dalla (3.57):

$$v_s = \frac{\hbar s}{m r}. \quad (4.4)$$

La differenza sostanziale tra questa velocità e quella del campo rotazionale del corpo rigido è la differenza nel comportamento come funzione di r : ora la velocità diminuisce con il raggio (Figura 4.1).

Abbiamo detto che il campo di velocità è irrotazionale ovunque tranne che nel caso di fase singolare. Però, la circuitazione della velocità lungo una curva chiusa attorno all'asse z non è nulla, ma quantizzata in unità di \hbar/m :

$$\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l} = 2\pi \frac{\hbar}{m}. \quad (4.5)$$

L'unico modo perché questo avvenga è che la vorticità del campo sia concentrata sull'asse z , ovvero che il rotore della velocità sia nullo ovunque tranne che su una linea, dove si comporta come una delta di Dirac.

Questo rotore avrà quindi la forma

$$\text{rot } \mathbf{v}_s = 2\pi s \frac{\hbar}{m} \delta^{(2)}(\mathbf{r}_\perp) \hat{\mathbf{z}}, \quad (4.6)$$

dove \mathbf{r}_\perp è un vettore di due dimensioni nel piano x, y , e $\hat{\mathbf{z}}$ è il vettore unitario nella direzione z .

Questi risultati mostrano quindi come la condizione di irrotazionalità sia soddisfatta in ogni punto tranne che nella linea del vortice e che la vorticità è una delta distribuita sull'asse z , regione in cui la densità del condensato è nulla.

4.1 Risoluzione numerica per un vortice

Come già anticipato, le soluzioni stazionarie dell'equazione di Gross-Pitaevskii sono caratterizzate da un parametro d'ordine che varia nel tempo attraverso una fase globale fissata dal potenziale chimico, (3.51), e l'equazione per il parametro d'ordine assume la forma (3.50). Riprendiamo la $\Psi_0(\mathbf{r})$, funzione d'onda del condensato relativa all'autovalore macroscopico N_0 , che gioca il ruolo di parametro d'ordine. È una quantità complessa che caratterizza la fase condensata e svanisce al di sopra della temperatura critica, e si può esprimere nella forma:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = |\Psi_0(\mathbf{r})|e^{is(\mathbf{r})}, \quad (4.7)$$

in cui $s(\mathbf{r})$ è la fase e svolge un ruolo importante nella caratterizzazione della coerenza e dei fenomeni superfluidi.

Sostituendo la soluzione (4.7) nella GPE indipendente dal tempo ricavata nella sezione 3.3,

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2 - \mu \right) \Psi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.8)$$

otteniamo l'equazione per $|\Psi_0|$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d|\Psi_0|}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 s^2}{2mr^2} |\Psi_0| + g|\Psi_0|^3 - \mu |\Psi_0| = 0. \quad (4.9)$$

Il valore a cui $|\Psi_0|$ deve tendere a grandi distanze dalla linea di vortice è il suo valore nel caso non perturbato, cioè \sqrt{n} , con n densità del condensato. Questo suggerisce l'introduzione di una funzione adimensionale

$$|\Psi_0| = \sqrt{n} f(\eta), \quad (4.10)$$

dove $\eta = r/\xi$ è una coordinata radiale e $\xi = \hbar/\sqrt{2mg\bar{n}}$ è la lunghezza di healing, con la condizione $f(\infty) = 1$. L'equazione diventa quindi

$$\frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df}{d\eta} \right) + \left(1 - \frac{s^2}{\eta^2} \right) f - f^3 = 0. \quad (4.11)$$

Per $\eta \rightarrow 0$ la soluzione fisica della (4.11) tende a zero come $f \sim \eta^{|s|}$, quindi la densità $n(r) = |\Psi_0(r)|^2$ tende a zero sull'asse del vortice. Dall'adimensionalità dell'equazione, si osserva che la regione del vortice vicina al suo asse, dove la densità è significativamente

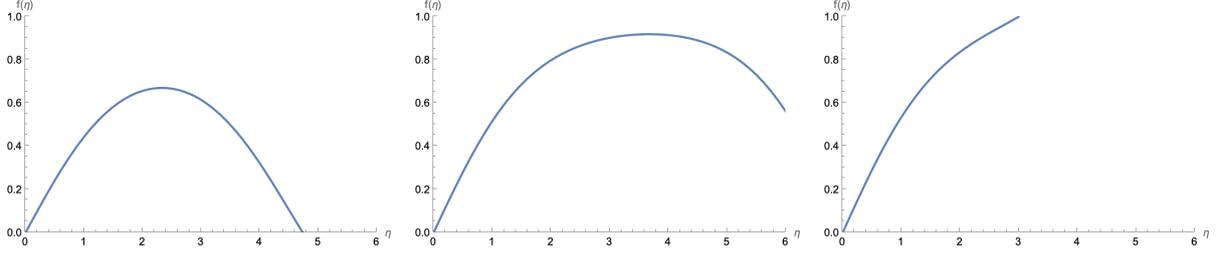


Figura 4.2: Esempi di soluzioni della GPE come funzione della coordinata radiale r/ξ per il caso $s = 1$, rispettivamente per i valori di A di 0.5, 0.58 e 0.6.

perturbata, è dell'ordine della lunghezza di healing ξ . Per semplificare la risoluzione analizzeremo prima il caso per $s = 1$ e successivamente per $s = 2$.

Per $s = 1$, sviluppiamo l'equazione (4.11):

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df}{d\eta} \right) + \left(1 - \frac{1}{\eta^2} \right) f - f^3 &= 0 \\
 \frac{1}{\eta} \left(\frac{d\eta}{d\eta} \left(\frac{df}{d\eta} \right) + \eta \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) + \left(1 - \frac{1}{\eta^2} \right) f - f^3 &= 0 \\
 \frac{1}{\eta} \frac{df}{d\eta} + \frac{d^2 f}{d\eta^2} + \left(1 - \frac{1}{\eta^2} \right) f - f^3 &= 0 \\
 \eta^2 f'' + \eta f' + (\eta^2 - 1) f - \eta^2 f^3 &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Visto il comportamento complesso della funzione differenziale nelle condizioni al contorno fornite dalla teoria, è possibile semplificare il calcolo della soluzione sfruttando il suo comportamento asintotico per $\eta \rightarrow 0$, che è

$$\begin{aligned}
 f(\eta) &= A\eta, \\
 f'(\eta) &= A,
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

con A coefficiente che rappresenta la pendenza del grafico di f vicino all'origine. Questa informazione permette l'utilizzo di un'ulteriore relazione tra f e η e una condizione sulla derivata di f nel limite $\eta \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned}
 f(0.01) &= 0.01A, \\
 f'(0.01) &= A.
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Nei grafici in Figura 4.2 mostriamo come al variare di A , varia la soluzione.

L'unico valore di A che fa sì che il grafico rispetti la condizione all'infinito, $f(\infty) = 1$, è $A = 0.58315$: otteniamo così il risultato riportato in Figura 4.3.

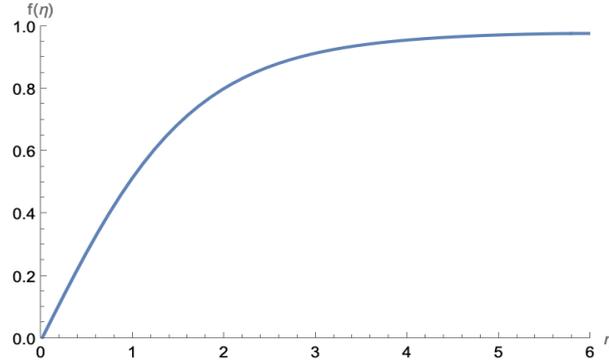


Figura 4.3: *Soluzione vorticale della GPE come funzione della coordinata radiale r/ξ per il caso $s = 1$.*

Nel caso per $s = 2$, riprendiamo la (4.11) e ripetiamo il procedimento:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df}{d\eta} \right) + \left(1 - \frac{4}{\eta^2} \right) f - f^3 &= 0 \\ \frac{1}{\eta} \frac{df}{d\eta} + \frac{d^2 f}{d\eta^2} + \left(1 - \frac{4}{\eta^2} \right) f - f^3 &= 0 \\ \eta^2 f'' + \eta f' + (\eta^2 - 4) f - \eta^2 f^3 &= 0. \end{aligned} \tag{4.15}$$

Il comportamento per η molto piccoli non è più lineare come nel caso precedente, ma, a causa del nuovo valore di s , sarà parabolico:

$$\begin{aligned} f(\eta) &= B\eta^2, \\ f'(\eta) &= 2B\eta. \end{aligned} \tag{4.16}$$

B , allora, è il coefficiente quadratico della parabola e ne determina la convessità: per $B > 0$ la concavità è rivolta verso l'alto, per $B < 0$ verso il basso, per $B = 0$ la parabola degenera in una retta (Figura 4.4).

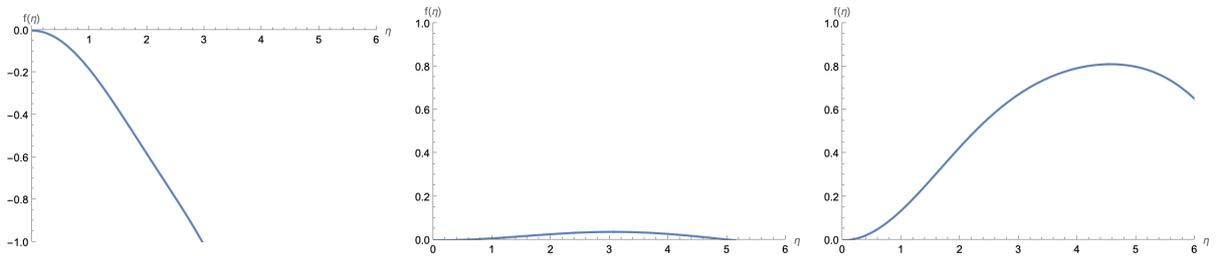


Figura 4.4: *Esempi di soluzioni della GPE come funzione della coordinata radiale r/ξ per il caso $s = 2$, rispettivamente per i valori di B di $-0.2, 0.01$ e 0.15 .*

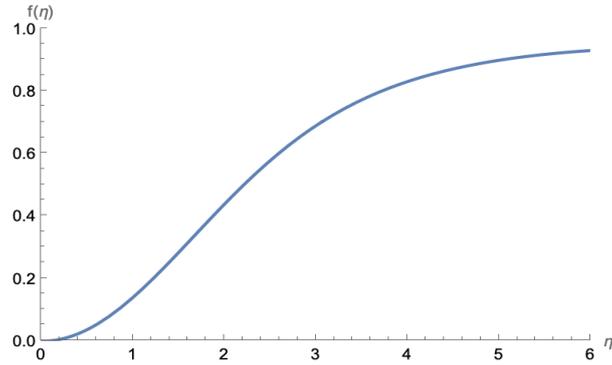


Figura 4.5: *Soluzione vorticale della GPE come funzione della coordinata radiale r/ξ per il caso $s = 2$.*

Utilizziamo le condizioni (4.16) per valori piccoli di η , $\eta = 0.01$:

$$\begin{aligned} f(0.01) &= 0.001^2 B, \\ f'(0.01) &= 0.02B, \end{aligned} \tag{4.17}$$

e, scegliendo $B = 0.1529$ che soddisfi la condizione all'infinito, otteniamo i risultati del grafico in Figura 4.5.

Capitolo 5

Conclusioni

Nel corso di questo elaborato è stato analizzato il fenomeno della condensazione di Bose-Einstein. Attraverso la descrizione del gas di Bose ideale, si è visto come, a partire dai principi statistici e quantistici, un sistema di bosoni a basse temperature sperimenti una transizione verso un comportamento macroscopico coerente. Questo fenomeno, che inizialmente poteva sembrare puramente teorico, ha trovato piena realizzazione sperimentale negli ultimi decenni, aprendo nuove frontiere nella fisica atomica, nella metrologia e nello studio dei sistemi quantistici macroscopici.

Attraverso il formalismo della seconda quantizzazione e l'introduzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii, è stato possibile passare dalla descrizione microscopica delle particelle a una descrizione efficace di campo medio, in grado di cogliere le caratteristiche essenziali del condensato in presenza di interazioni deboli. In particolare, con l'equazione di Gross-Pitaevskii è stato possibile ricavare l'evoluzione temporale del condensato e individuarne le configurazioni stazionarie.

Nel primo capitolo è stata descritta la condensazione in un gas di Bose ideale nel contesto del formalismo gran canonico. In tale scenario, in assenza di interazioni, la condensazione risulta da una transizione di fase puramente statistica, che si verifica quando il potenziale chimico tende al valore dell'energia dello stato fondamentale. È stata ricavata la temperatura critica a partire dalla densità degli stati in un sistema macroscopico e si è mostrato che, al di sotto di essa, una frazione macroscopica delle particelle occupa il livello fondamentale.

Nel secondo capitolo si è passati alla descrizione a molti corpi con l'introduzione della seconda quantizzazione. È stato costruito il formalismo degli operatori di campo bosonici ed è stata introdotta la matrice densità a un corpo, mostrando il suo ruolo nel descrivere le proprietà collettive del condensato e la sua relazione con la funzione d'onda del condensato.

Come introduzione al capitolo successivo, sono state affrontate le approssimazioni di campo medio e del potenziale efficace a corto raggio, fondamentali per la comprensione della derivazione dell'equazione di Gross-Pitaevskii. È stata inoltre discussa l'approssi-

mazione di Bogoliubov, che consente di trattare l'operatore di campo come un campo classico, riducendo il problema a una descrizione deterministica in termini della funzione d'onda del condensato.

Nel terzo capitolo è stata analizzata la GPE indipendente e dipendente dal tempo. Nel caso stazionario si è visto che la GPE ammette soluzioni reali associate allo stato fondamentale, ma anche soluzioni complesse che descrivono stati eccitati. Tra queste, sono state considerate in particolare le soluzioni a vortice, caratterizzate da una fase con dipendenza angolare e da una circuitazione quantizzata del campo di velocità.

Infine, è stata introdotta una risoluzione numerica dell'equazione di Gross-Pitaevskii per il caso di un singolo vortice, mostrando come la funzione d'onda, e quindi la densità, si annulli al centro del vortice e cresca radialmente.

L'equazione di Gross-Pitaevskii, pur essendo un'approssimazione di campo medio, si è dimostrata uno strumento efficace per descrivere molte delle proprietà osservabili nei BEC a basse temperature. La sua applicabilità si estende a configurazioni stazionarie, dinamiche e topologicamente non banali, purché siano soddisfatte le condizioni di diluizione e interazioni deboli. La possibilità di descrivere configurazioni vorticali all'interno dell'equazione di Gross-Pitaevskii ha portato allo sviluppo di modelli numerici capaci di simulare in modo accurato l'evoluzione e l'interazione tra vortici, anche in presenza di potenziali esterni complessi.

L'analisi sviluppata in questo elaborato evidenzia come, partendo da ipotesi di base relativamente semplici, sia possibile descrivere fenomeni collettivi quantistici su scala macroscopica. Studi futuri potranno estendere questo approccio a sistemi in rotazione, a geometrie più complesse, o all'inclusione di interazioni di lungo raggio e correlazioni più forti.

Bibliografia

- [1] W. M. Alberico, A. Montanari, *Teoria dei sistemi a molti corpi*, Università di Torino.
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, “Observation of Bose–Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor”, *Science*, vol. 269, no. 5221, 198–201 (1995).
- [3] N. N. Bogoliubov, ”On the theory of superfluidity”, *Journal of Physics (USSR)*, vol. 11, 23–32 (1947).
- [4] S. N. Bose, “Planck’s law and the hypothesis of light quanta”, *Z. Phys.* 26, 178–181 (1924).
- [5] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, “Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases”, *Reviews of Modern Physics*, arXiv:cond-mat/9806038 (1999).
- [6] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Erste Abhandlung”, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.*, 261–267 (1994).
A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung”, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.*, 3–14 (1995).
- [7] V. L. Ginzburg, L. D. Landau, “On the theory of superconductivity”, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 20, 1064 (1950).
- [8] E. P. Gross, “Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems”, *Il Nuovo Cimento*, 20, 454–477 (1961).
- [9] W. Kaplan, *Advanced calculus*, quinta edizione, Publishing House of Electronic Industry (1949).
- [10] L. Pitaevskii, S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*, Oxford Science Publications (2016).
- [11] L. P. Pitaevskii, “Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas”, *Soviet Physics JETP*, 13, 451–454 (1961).

- [12] J. Rogel-Salazar, *The Gross-Pitaevskii Equation and Bose-Einstein condensates*, University of Hertfordshire, arXiv:1301.2073 (2013).
- [13] T. van Zoest, N. Gaaloul, Y. Singh, H. Ahlers, W. Herr et al., “Bose–Einstein Condensation in Microgravity”, *Science*, vol. 328, no. 5985, pp. 1540–1543 (2010).
- [14] L. M. Varela, *Mecánica Estadística*, Universidade de Santiago de Compostela (2022).
- [15] Wikipedia, “Condensato di Bose-Einstein”.
Disponibile su: https://it.wikipedia.org/wiki/Condensato_di_Bose-Einstein.
Ultima consultazione il 7 aprile 2025.
- [16] Wikipedia, “Equazione di Gross-Pitaevskij”.
Disponibile su: https://it.wikipedia.org/wiki/Equazione_di_Gross-Pitaevskij.
Ultima consultazione l’8 aprile 2025.