

# Approfondimenti Lezione 3

Mara Bruzzi

## APPROFONDIMENTO 1 : I BOSONI

Particelle come le  $\alpha$ , i fotoni, i mesoni hanno invece funzioni d'onda simmetriche  $\psi_S$ . Esse non obbediscono al principio di esclusione di Pauli. Tali particelle sono dette **BOSONI**.

**La presenza di un bosone in un particolare stato quantistico aumenta la probabilità che altri bosoni identici vengano trovati in tale stato** ( i laser sono un esempio di questo fenomeno ).

## Probabilità di trovare due particelle nello stesso stato: $n = m$

Particelle distinguibili (caso classico):

$$\varphi_B = \varphi_{nn}(2,1) = \varphi_{nn}(1,2) = \varphi_n(1)\varphi_n(2) = \varphi_n(2)\varphi_n(1)$$



$$\frac{dP_B}{dV} = \varphi^*_{*B} \varphi_B = \varphi_n(1)\varphi_n(2)\varphi_n^*(1)\varphi_n^*(2)$$

Particelle indistinguibili (Bosoni):

$$\varphi_{BE} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(1)\varphi_n(2) + \varphi_n(2)\varphi_n(1)] = \frac{2}{\sqrt{2}} \varphi_n(1)\varphi_n(2)$$



$$\frac{dP_{BE}}{dV} = \varphi^*_{*BE} \varphi_{BE} = \left(\frac{2}{\sqrt{2}}\right)^2 \varphi_n(1)\varphi_n(2)\varphi_n^*(1)\varphi_n^*(2) = 2 \frac{dP_B}{dV}$$

Perciò la probabilità di trovare due bosoni nello stesso stato in un esperimento è DUE VOLTE la probabilità di trovare nello stesso stato due particelle classiche.

## APPROFONDIMENTO

### Determinazione della distribuzione più probabile all'equilibrio per i bosoni.

Come per le statistiche precedenti assumiamo che all'equilibrio le particelle siano disposte nella configurazione di probabilità massima ed imponiamo:

$$d(\ln P) = 0.$$

$$\ln(P_{BE}) = \sum_i [(n_i + g_i - 1) \ln(n_i + g_i - 1) - n_i \ln n_i - (g_i - 1) \ln(g_i - 1)]$$
$$-d(\ln(P_{BE})) = \sum_i [-\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i] dn_i = 0$$

Poiché il sistema è chiuso ed isolato:  $\sum dn_i = dN = 0$   $dU = \sum dn_i \varepsilon_i = 0$

Usando i moltiplicatori di Lagrange:  $\ln n_i - \ln(n_i + g_i - 1) + \alpha + \beta \varepsilon_i = 0$

→  $\frac{n_i}{n_i + g_i} = e^{-\alpha - \beta \varepsilon_i}$

Che diviene:

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1}$$

## Approfondimento 2: Il metodo dei moltiplicatori di Lagrange

E' un metodo che si utilizza nel caso si vogliono calcolare il massimo/minimo di funzioni di più variabili  $F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$  quando le variabili non sono tra loro indipendenti, ma correlate da relazioni note. Supponiamo ad esempio che tali relazioni siano esprimibili mediante la condizione  $\phi_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$  (1) e  $\phi_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$  (2). Avremo quindi soltanto  $n-2$  variabili indipendenti. Cerchiamo i valori  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  per cui  $dF = 0$  per piccoli cambiamenti nelle variabili.

Osservo che:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial F}{\partial x_3} dx_3 + \dots + \frac{\partial F}{\partial x_n} dx_n = 0 \quad (3)$$

Non implica che:  $\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0$ , perché le variazioni  $dx_i$  non sono indipendenti. Esse sono correlate mediante le relazioni:

$$d\phi_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial \phi_1}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial \phi_1}{\partial x_3} dx_3 + \dots + \frac{\partial \phi_1}{\partial x_n} dx_n = 0, \quad (4) \quad d\phi_2 = \frac{\partial \phi_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial \phi_2}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial \phi_2}{\partial x_3} dx_3 + \dots + \frac{\partial \phi_2}{\partial x_n} dx_n = 0. \quad (5)$$

Moltiplichiamo ora le equazioni (4,5) per due quantità arbitrarie  $\alpha$  e  $\beta$  e aggiungiamole alla (3). Otteniamo:

$$\sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial \phi_1}{\partial x_i} + \beta \frac{\partial \phi_2}{\partial x_i} \right) dx_i = 0 \quad \text{Dato che abbiamo ora } n+2 \text{ variabili, con } \alpha \text{ e } \beta \text{ arbitrari, questo}$$

implica che:  $\left( \frac{\partial F}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial \phi_1}{\partial x_i} + \beta \frac{\partial \phi_2}{\partial x_i} \right) = 0$   $i = 1, 2, 3, \dots, n$ . Questo set di  $n$  equazioni ci permette di ottenere  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  in funzione di  $\alpha$  e  $\beta$ . La sostituzione in (1) e (2) ci permette quindi di determinare  $a$  e  $b$  e quindi di calcolare  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ .

## APPROFONDIMENTO: Molteplicità della distribuzione

Considero il livello  $\varepsilon_i$  come una scatola con  $g_i + n_i - 1$  palline colorate.  $g_i - 1$  palline nere dividono la scatola in  $g_i$  spazi in cui possono essere inserite le palline bianche. I  $g_i$  spazi sono i livelli degeneri, le  $n_i$  palline bianche sono le particelle.



**Esempio:  $n_i = 16$  palline bianche contenute in  $g_i = 9$  livelli degeneri ottenuti inserendo  $g_i - 1 = 8$  palline nere.**

Il numero di possibili permutazioni di  $n_i + g_i - 1$  oggetti distinguibili è  $(n_i + g_i - 1)!$   
Per particelle indistinguibili devo dividere tale valore per  $n_i!$  e  $(g_i - 1)!$

## APPROFONDIMENTO

Per il livello 1: 
$$W_1 = \frac{(g_1 + n_1 - 1)!}{n_1!(g_1 - 1)!}$$

Nel totale:

$$W_{BE} = \prod_{i=1}^s \frac{(g_i + n_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}$$

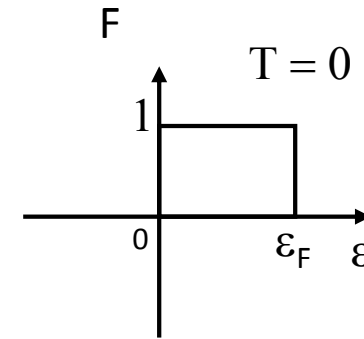
**Distribuzione di Bose Einstein**

### APPROFONDIMENTO 3: Energia di Fermi $\varepsilon_F$ , potenziale chimico $\mu$ e potenziale elettrochimico $\mu_e$

L'energia di Fermi  $\varepsilon_F$  è l'energia per la quale, alla temperatura dello zero assoluto ( $T = 0$ ) si ha il gradino della distribuzione, è il valore di separazione tra gli stati occupati e gli stati liberi.

$$F = 1 \quad \varepsilon < \varepsilon_F$$

$$F = 0 \quad \varepsilon > \varepsilon_F$$



Per temperature non nulle, si utilizza il concetto di potenziale chimico  $\mu$ , energia alla quale la probabilità di occupazione dello stato è pari a  $\frac{1}{2}$ :

$$F(\mu) = \frac{1}{2}$$

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1}$$

Per  $T = 0$  coincide con il livello di Fermi.

Per  $T \neq 0$  il potenziale chimico è funzione della temperatura:

$$\mu(T) = \varepsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]$$

In generale, in prima approssimazione si può trascurare la differenza tra  $\varepsilon_F$  e  $\mu$ .



## - Sistemi aperti

Nel caso di **sistema aperto** la relazione termodinamica :  $TdS = dU + pdV$

si estende alla:  $TdS = dU + pdV - \gamma dN$  dove  $-\gamma dN$  rappresenta il lavoro chimico compiuto per variare il numero di particelle del sistema di  $dN$ ,  $\gamma =$  potenziale chimico.

I materiali solidi all'equilibrio termico sono caratterizzati da  $T$  e  $V$  costanti. In tal caso è utile considerare la funzione di stato Helmholtz:  $F = U - TS$ . Infatti per  $T$  e  $V$  costanti la variazione infinitesima  $dF$  è direttamente proporzionale a  $dN$ :

$$dF = dU - dTS - TdS = -SdT - pdV + \mu dN = \mu dN.$$

### **esempio: materiali diversi\* a contatto tra loro all'equilibrio termico**

Il sistema è chiuso ed è composto da due sottosistemi aperti che si scambiano particelle ( per esempio che fluiscono da l'uno all'altro  $dN_2 = -dN_1$  ):

$$dF = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 = (\mu_1 - \mu_2) dN$$

All'equilibrio:  $\frac{dF}{dN} = 0 \rightarrow \mu_1 = \mu_2$  **perciò i due materiali a contatto hanno stesso potenziale chimico.**

## Il potenziale elettrochimico

Consideriamo un sistema chiuso composto da piu' materiali a contatto che tra loro scambiano particelle ( e.g. elettroni di conduzione) in presenza di un **gradiente di potenziale elettrico** ( e.g. il potenziale di built-in nella giunzione pn ). La relazione che esprime primo e secondo principio della termodinamica:  $TdS = dU + pdV$  per i sistemi chiusi per uno dei materiali a contatto:  $TdS = dU + pdV - \mu dN - \phi dq$  con:

$\mu$  = potenziale chimico;

$\mu dN$  = lavoro compiuto per variare di  $dN$  il numero di particelle del sistema;

$\phi$  = potenziale elettrostatico;  $dq$  = variazione infinitesima di carica elettrica, (e.g. per conduzione di elettroni  $dq = -e dN$ );

$\phi dq$  = lavoro compiuto per variare di  $dq$  la carica del sistema;

I materiali solidi all'equilibrio termico sono caratterizzati da  $T$  e  $V$  costanti. Come abbiamo visto è utile considerare la funzione di stato Helmholtz:  $F = U - TS$ . Infatti per  $T$  e  $V$  costanti la variazione infinitesima  **$dF$  è direttamente proporzionale a  $dN$** :

$$dF = dU - dTS - TdS = - SdT - pdV + (\mu - e\phi) dN = \mu_e dN. \quad \mu_e = \text{potenziale elettrochimico.}$$

**APPROFONDIMENTO:**

Consideriamo per esempio una giunzione pn. Il sistema dei due semiconduttori diversamente drogati si può vedere come composto da due sottosistemi che si

scambiano particelle in modo che esse fluiscano da l'uno all'altro:  $dN_2 = - dN_1$ . All'equilibrio è presente un potenziale elettrostatico di built-in  $\phi$  che varia lungo  $x$ . Poiché :

$$dF = \mu_{e1}dN_1 + \mu_{e2}dN_2 = (\mu_{e1} - \mu_{e2})dN$$

In condizioni di equilibrio:  $\frac{dF}{dN} = 0 \rightarrow \mu_{e1} = \mu_{e2}$  e quindi i due materiali a contatti all'equilibrio **hanno lo stesso potenziale chimico  $\mu_e$**

