統計力学演習　第13回　Bose-Einstein凝縮　　2012年7月17日

問題1 [理想Bose気体のBose-Einstein凝縮]

一辺Lの立方体の箱（体積$V=L^3$）の箱に閉じ込められ、温度Tで熱平衡状態にあるBose気体を考える。気体原子は質量mの同種のBose粒子からなり、粒子数をNとする。粒子間に相互作用はないとする。

自由Bose粒子の一粒子状態は波数ベクトル$\vec{k}$でラベルされ、その一粒子エネルギーは$\epsilon_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$と表される。ここで、波数ベクトルの大きさを$k=|\vec{k}|=\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$と表した。

(1-1) 系に周期境界条件を課すと、波数ベクトルは$\vec{k}=\dfrac{2\pi}{L}\vec{n}$ $(n_x,n_y,n_z=0,\pm1,\pm2,\cdots)$と量子化される。このことを用いて、エネルギーが$\epsilon$と$\epsilon+\mathrm{d}\epsilon$の間にある状態数を$D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon$としたとき、

$$D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon = 2\pi V\left(\frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\epsilon}\ \mathrm{d}\epsilon \tag{1}$$

となることを示せ。

波数ベクトル$\vec{k}$を持つ粒子数の平均値$n_{\vec{k}}$は、Bose分布関数より、$n_{\vec{k}}=\dfrac{1}{e^{\beta(\epsilon_k-\mu)}-1}$となる。ここで、$\beta=1/(k_BT)$である。これを用いて全粒子数$N$は、$N=\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}$と表されるが、これを波数ベクトルがゼロの粒子数$N_0$とゼロでない粒子数$N'$に分ける：

$$\begin{aligned} &N = N_0 + N' \\ &N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu}-1}, \qquad N' = \sum_{\vec{k}\neq 0} n_{\vec{k}} \end{aligned} \tag{2}$$

通常はN_0は微視的な物理量なので、巨視的な物理量であるN'に比べて無視できるが、Bose-Einstein凝縮が起きると、N_0が巨視的な物理量になり、無視できなくなる。

(1-2) N'の定義式における波数ベクトルに関する和を、前に求めた状態密度を用いて積分に直すと、

$$N' = \int_0^\infty \frac{D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} \tag{3}$$

となる。積分を実行することにより、

$$N' = V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\zeta_\alpha(3/2) \tag{4}$$

を示せ。ここで、$\alpha=-\beta\mu$であり、

$$\zeta_\alpha(s) = \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^{x+\alpha}-1}\mathrm{d}x \tag{5}$$

である。$\Gamma(3/2)=\sqrt{\pi}/2$を用いてよい。

(1-3) 上の積分を級数展開することにより、

$$\zeta_\alpha(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\alpha}}{n^s} \tag{6}$$

を示せ。ただし、ガンマ関数の積分表示

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty y^{s-1} e^{-y} \mathrm{d}y \tag{7}$$

を用いてよい。

このことから、$\zeta_\alpha(s)$ は $s > 1, \alpha > 0$ で無限和が収束し、α の単調減少関数であって $\alpha = 0$ で最大値をとることがわかる。$\alpha = 0$ のとき、$\zeta_\alpha(s)$ は通常のリーマンのゼータ関数 $\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} 1/n^s$ となる。

以上のことから、N' には最大値 $N'_{\mathrm{MAX}} = V(mk_BT/2\pi\hbar^2)^{3/2}\zeta(3/2)$ が存在し、それ以上の値は取れないことがわかる。これは温度を下げていくと減少していき、転移温度 T_C 以下になると全粒子数 N より小さくなり、足りない分 $N - N'$ は基底状態の粒子数 N_0 が補うこととなる。

(1-4) 転移温度 T_C において、N' の最大値 N'_{MAX} は全粒子数 N に等しくなることから、

$$T_C = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N}{\zeta(3/2)V}\right)^{2/3} \tag{8}$$

を示せ。

(1-5) 凝縮した粒子数 N_0 は、温度の関数として

$$N_0 = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}\right] \tag{9}$$

と書けることを示し、横軸：温度 T、縦軸：凝縮した粒子数 N_0 のグラフの概形を描け。

(1-6) 液体ヘリウムの場合に、Bose-Einstein 凝縮の転移温度 T_C が数 K のオーダーになることを示せ。ただし、$m =$ を用いること。