§ 9.4　理想Bose気体: Bose凝縮

理想Bose気体: 粒子間の相互作用、粒子の大きさがない

$$e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (9.32)$$

エネルギーは各粒子の和 $E = \sum_k n_k e_k$ (9.31)

全粒子数 $N = \sum_k n_k = \sum_k f_k$ (9.33,34)

Bose統計 $f_k = \dfrac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} - 1}$ (9.35)

μは全粒子数 *N* の条件から決められる

μ: 化学ポテンシャル

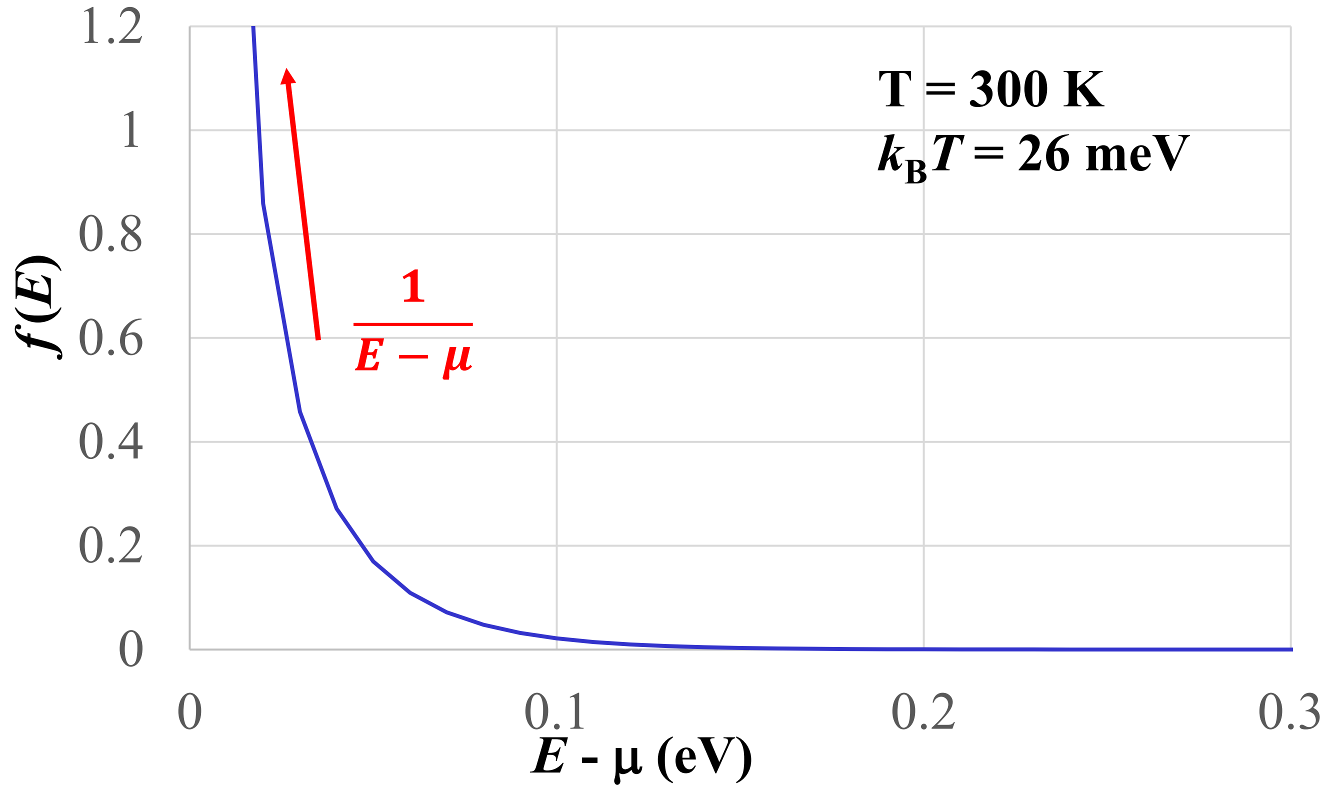
(電子の場合はフェルミエネルギー E_F)

Bose-Einstein分布の特徴

Bose-Einstein分布: $$f(E)=\frac{1}{\exp[(E-\mu)/k_BT]-1}$$

$(E - \mu) / k_BT >> 1$ の場合: Maxwell-Boltzmann近似に漸近 (古典領域)

- $E \to \mu$ で $(E-\mu)^{-1}$ に従って発散
- $f(E) \geq 0$ でなければいけないので、BE統計は、$E \geq \mu$ のみで意味がある
- E の最小値を 0 にとると、$\mu < 0$ のみ許される



§ 9.4 理想Bose気体: Bose-Einstein凝縮の概要

$N/V = \frac{1}{\lambda_T{}^3} F_{3/2}(\alpha) \leq \frac{1}{\lambda_T{}^3} F_{3/2}(0) = \frac{2.612}{\lambda_T{}^3}$　　　$\alpha = -\beta\mu,\ y = \beta e$

矛盾: Bose分布では入れる粒子数の上限はないのに、積分形にすると上限が現れる

原因: $f(e) = \frac{1}{\exp[\beta(e-\mu)]-1}$ **は** $e = \mu$ **で無限大に発散するので、** $\mu = 0$ **のときは、**

$N(e) \propto \sqrt{e}$ との積分が 0 にならずに基底状態の粒子数 n_0 が有限になる

そもそも: Bose粒子は一つの状態にいくつでも入れる

=> $T = 0$ では $n_0 = N,\ n_k = 0\ (k = 1, 2, \cdots)$

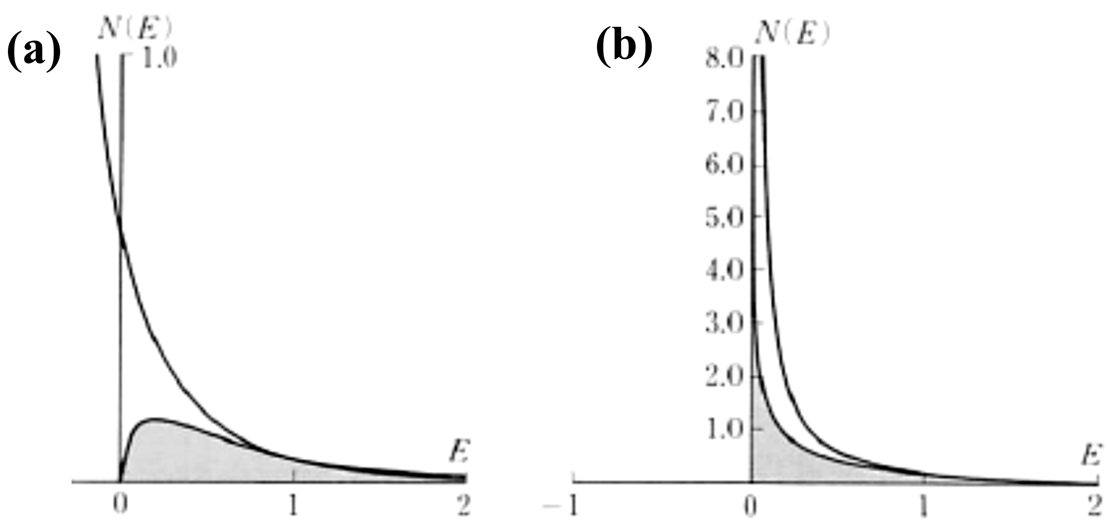
$T > 0$ では $k > 0$ の状態にも励起される。

温度が低くなると、励起準位だけでは全粒子を収容できなくなる

=> $\mu = 0$ となり、大部分の粒子は $k = 0$ (基底状態) にある: **Bose凝縮**

Bose凝縮: n_0 が全粒子数程度の大きな数になる

(a) $T > T_c$ と (b) $T < T_c$ の粒子数分布



宮下精二、熱・統計力学

Bose-Einstein分布の粒子数の積分形？

磯井恒丸、熱学・統計力学

状態密度 (2S+1 = 1) $N(e)/V = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3}\sqrt{e}$ (9.41)

Bose-Einstein分布では:

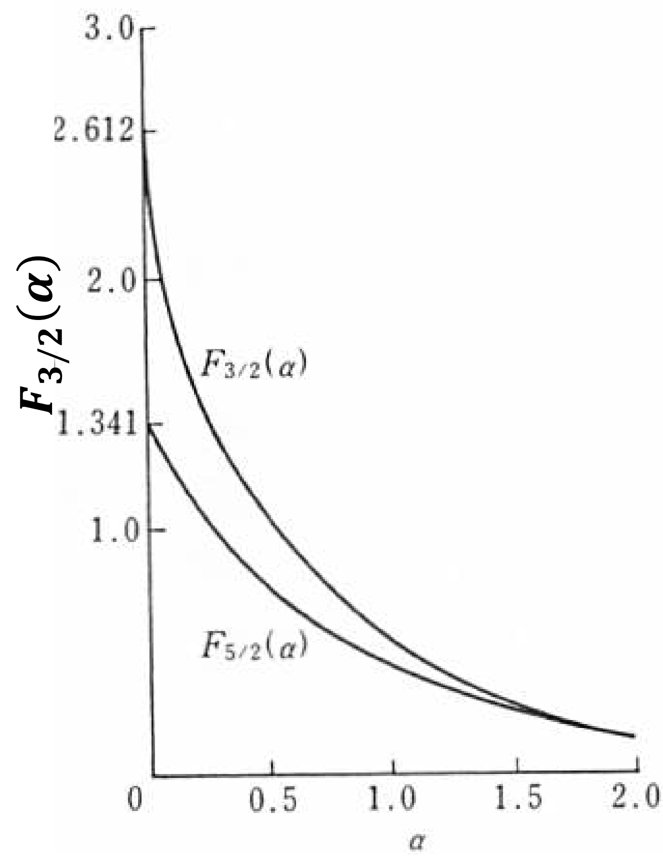
$$N/V = \int_0^\infty D(e)\frac{1}{\exp[\beta(e-\mu)]-1}de$$
$$= \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{e}}{\exp[\beta(e-\mu)]-1}de$$

$$N/V = \left[\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right]^{\frac{3}{2}} F_{3/2}(\alpha) = \frac{V}{{\lambda_T}^3}F_{3/2}(\alpha)$$

$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$:熱的ド・ブロイ波長

$\alpha = -\beta\mu$

$y = \beta e$



Bose-Einstein積分 $F_\sigma(\alpha)$

$$N/V=\left[\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right]^{3/2}F_{3/2}(\alpha)=\frac{1}{\lambda_T{}^3}F_{3/2}(\alpha)$$

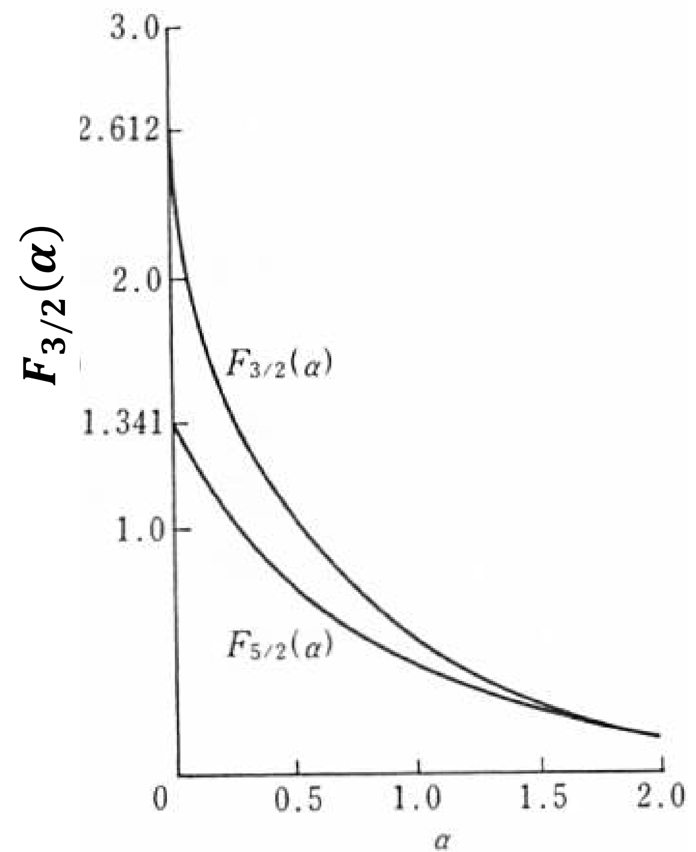
$\alpha=-\beta\mu, y=\beta e$

$$F_\sigma(\alpha)=\frac{1}{\Gamma(\sigma)}\int_0^\infty\frac{y^{\sigma-1}}{e^{y+\alpha}-1}dy$$

- $y\to 0$ で収束するためには $\alpha>0$ である必要
- $\alpha\to\infty$: $F_\sigma(\alpha)\propto e^{-\alpha}$ (9.48)
- $\alpha>0$: $F_\sigma(\alpha)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\alpha}}{n^\sigma}$ (9.49)
- $F_\sigma(\alpha)$ は$\alpha=0$ で最大値を取る
- $F_\sigma(0)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^\sigma}=\zeta(\sigma)$

Riemannのζ (ツェータ) 関数 (9.50)

$F_{3/2}(0)=2.612$



$\Gamma(\sigma)$: Γ関数、$\sigma!$を自然数に拡張

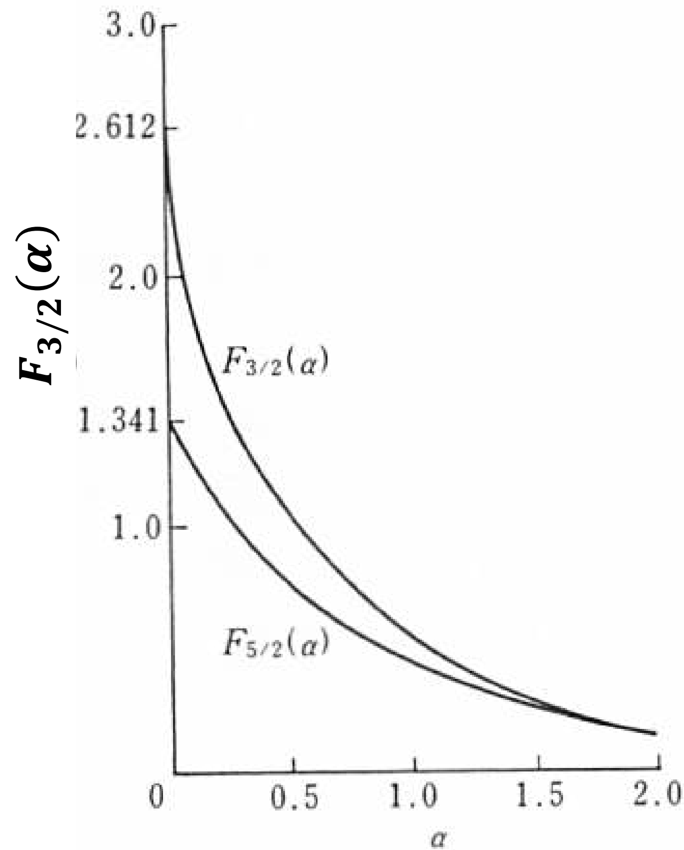
$\Gamma(z+1)=z\Gamma(z), \Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}, \Gamma(1)=1$

Bose-Einstein分布の粒子数の積分形の矛盾

磯井恒丸、熱学・統計力学

$$N/V = \left[\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right]^{\frac{3}{2}} F_{3/2}(\alpha) = \frac{1}{{\lambda_T}^3} F_{3/2}(\alpha) \quad (9.47)$$

$$F_\sigma(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{y^{\sigma-1}}{e^{y+\alpha}-1} dy$$



$F_\sigma(\alpha)$ は $\alpha = 0$ で最大値を取るので、

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{{\lambda_T}^3} F_{3/2}(\alpha) < \frac{1}{{\lambda_T}^3} F_{3/2}(0) = 2.612 \frac{1}{{\lambda_T}^3}$$

$$\frac{N}{V} < 2.612 \frac{1}{{\lambda_T}^3}$$

と、$N_{\max}/V = 2.612 \frac{1}{{\lambda_T}^3} = 2.612 \left[\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right]^{\frac{3}{2}}$ 以上の

粒子数密度 $\frac{N}{V}$ は存在しえない？？

別の表現: 粒子数密度 $\frac{N}{V}$ に対して

$$T_c(N) = \frac{h^3}{2\pi m k_B} \left[\frac{1}{F_{3/2}(0)} \frac{N}{V}\right]^{3/2} > T$$

では 全粒子を収容できなくなる？？

§ 9.4 理想Bose気体: Bose-Einstein凝縮

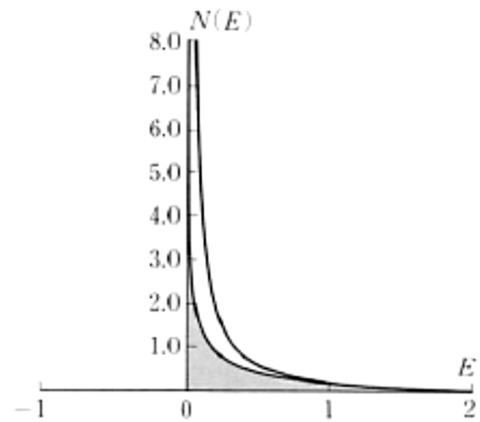
全粒子数 $N = n_0 + N'$ **(9.37,43)**

$\boldsymbol{N'/V = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} F_{3/2}(\alpha)}$ **(9.47)**

$\alpha = -\beta\mu, y = \beta e$ (9.37,42)

$F_\sigma(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{\exp(y+\alpha)-1} dy$ (9.45)

$\mu = 0$の粒子数分布



宮下精二、熱･統計力学

基底状態は $e = 0$なので、

$$n_0 = \frac{1}{\exp[-\beta\mu]-1}$$

$$-\beta\mu = \ln\left(1 + \frac{1}{n_0}\right) \sim \frac{1}{n_0}$$

Bose凝縮では n_0 が全粒子数程度の大きな数になる

=> **Bose凝縮が起こる条件: $\alpha = -\beta\mu \to 0$**

このとき、基底状態 $e = 0$ 近傍では $f(e) = \frac{1}{\exp(\beta e)-1} \sim \frac{k_B T}{e}$ と $N(e) \propto \sqrt{e}$ との積分が 0 にならず、n_0 個の粒子を基底状態に収容できるようになる。

§ 9.4 理想Bose気体: 転移温度

$$N'/V = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} F_{3/2}(\alpha) \qquad (9.47)$$

で T を一定として N' をプロットすると9－5図になる
最大値は $F_{3/2}(\alpha) = \zeta(3/2) = 2.612$ から

$$N'_{max}/V = 2.612\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (9.52)$$

$\alpha = -\beta\mu = 0$ のとき、

$$N = n_0 + N'_{max} \qquad (9.53)$$

$$\frac{N}{V} > \frac{N'_{max}}{V} = 2.612\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (9.54)$$

がBose凝縮の起こる条件となる。

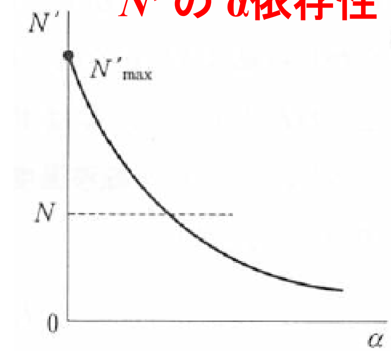
$$N/V = N'_{max}/V = 2.612\left(\frac{2\pi m k_B T_c}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (9.55)$$

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B}\left(\frac{N}{2.612V}\right)^{2/3} = \frac{0.5273h^2}{2\pi m k_B}\rho^{2/3} \qquad (9.56)$$

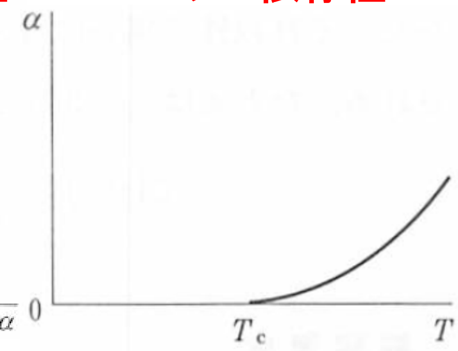
で T_c を定義すれば、(9.54)式より、
Bose凝縮の起こる条件は

$T < Tc$: 転移温度

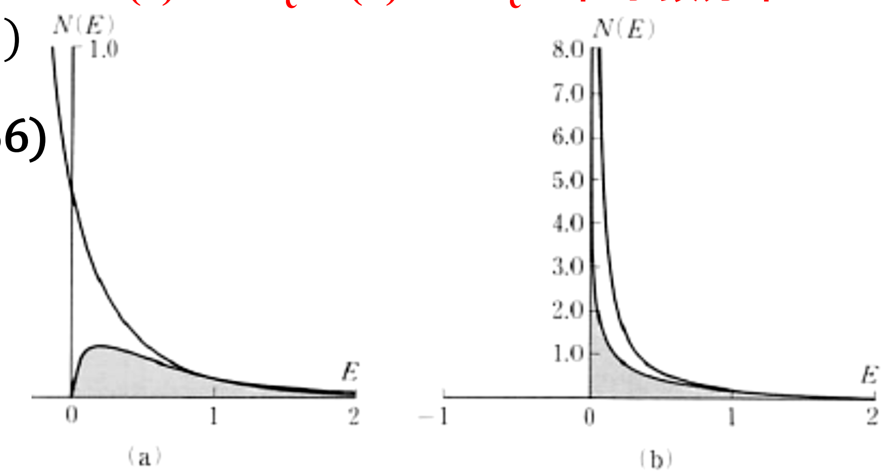
9－5図
N' の α依存性



9－6図
α の T 依存性



(a) $T > T_c$ と (b) $T < T_c$ の粒子数分布



宮下精二、熱・統計力学

Bose凝縮の化学ポテンシャル: プログラム

プログラム: bose_condensation.py

使用法: python bose_condensation.py [Fs|mu] Tmin Tmax Tstep alphamin alphamax

使用例1: python bose_condensation.py Fs 3 4.5 0.2 0 0.5 0.002

3.0~4.5 Kの範囲で0.2K毎に、$F_\sigma(\alpha)$ を $\alpha = 0 \sim 0.5$, 0.02ステップで計算して$N(T)$をプロット

使用例2: python bose_condensation.py mu 2.5 4.5 0.01

2.5~4.5 Kの範囲で0.01K毎に E_F, N', n_0 などを計算して $\alpha(T) = \mu(T) / k_B T$ をプロット

E_Fの計算は二分法、数値積分はintegrate.quad()を使っている