2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第4回 解答例

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)

提出日; 6/12 13:00 (前半クラス), 6/5 13:00 (後半クラス)

I 理想量子気体

逆温度 β、化学ポテンシャル μ を持つ熱粒子浴と接触した量子系で、平衡状態において状態 i (この状態におけるエネルギー E_i、粒子数 N_i とする) が実現する確率 p_i は

$$p_i = \frac{1}{\Xi(\beta,\mu)} e^{-\beta(E_i-\mu N_i)}, \quad \Xi(\beta,\mu) = \sum_i e^{-\beta(E_i-\mu N_i)}$$

で与えられる。ここで p_i をグランドカノニカル分布、(β,μ) を大分配関数と呼ぶ。

(1) グランドカノニカル分布を用いて理想量子気体の分布関数を求めよう。この系の 1 粒子量子状態は $j=1,2,\ldots,\infty$ で指定され、それぞれのエネルギーは ε_j であるとする。このとき、理想量子気体の状態 i は、量子状態 j を占有する粒子数 n_j の組 $i=\{n_j\}_j$ で指定される ($N_i = \sum_j n_j$, $E_i = \sum_j n_j \varepsilon_j$)。ただし、$n_j$ の取り得る値は、Fermi-Dirac 統計に従う粒子 (fermion) については $\{0,1\}$、Bose-Einstein 統計に従う粒子 (boson) については $\{0,1,\ldots,\infty\}$ である。これを用いて、

$$\langle n_j \rangle = \begin{cases} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} & \text{Fermi-Dirac 統計に従うとき} \\ \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1} & \text{Bose-Einstein 統計に従うとき} \end{cases}$$

を導け。なお、これらの粒子数分布は、その量子状態のエネルギー期待値 ε のみに依存し、

$$f_F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}, \quad f_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$

はそれぞれ Fermi-Dirac 分布、Bose-Einstein 分布と呼ばれる。

解答.— まず、fermion の場合に関して

$$\begin{aligned} \langle n_j \rangle &= \sum_{\{n_j=0,1\}_j} n_j \cdot \frac{e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k}}{\Xi(\beta,\mu)} \\ &= \sum_{n_j=0,1} n_j \cdot \frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}}{\sum_{n_j=0,1} e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}} \qquad (n_j \text{ 以外の和は約分される}) \\ &= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}} \\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} \end{aligned}$$

を得る。

同じようにして boson の場合は

$$\begin{aligned}\langle n_j\rangle &= \sum_{\{n_j=0,1,2,\ldots\}_j} n_j\cdot\frac{e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k}}{\Xi(\beta,\mu)}\\ &= \sum_{n_j=0}^{\infty} n_j\cdot\frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}}{\sum_{n_j=0}^{\infty}e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}} \qquad (n_j\ \text{以外の和は約分される})\\ &= \sum_{n_j=0}^{\infty} n_j e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}(1-e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)})\end{aligned}$$

である。ここで、数列 $\{nr^n\}_n$ $(|r|<1)$ の無限級数の総和を考えると、

$$\begin{aligned}(1-r)\sum_{k=0}^{n}kr^k &= \sum_{k=0}^{n}kr^k-\sum_{k=1}^{n+1}(k-1)r^k\\ &= \frac{r(1-r^{n-1})}{1-r}-nr^{n+1}\\ &\to \frac{r}{1-r} \qquad (n\to\infty)\end{aligned}$$

である。$r=e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}$ として適用すると、

$$\begin{aligned}\langle n_j\rangle &= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{1-e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}}\\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1}\end{aligned}$$

を得る。

別解.— 粒子数期待値は

$$\begin{aligned}\langle n_j\rangle &= \sum_{\{n_j\}_j} n_j\cdot\frac{e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k}}{\Xi(\beta,\mu)}\\ &= -\frac{\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)}\Xi(\beta,\mu)}{\Xi(\beta,\mu)}\\ &= -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)}\ln\Xi(\beta,\mu)\end{aligned}$$

によって大分配関数から計算することができる。

まず、fermion 系の場合に大分配関数を計算すると、

$$\begin{aligned}\Xi(\beta,\mu) &= \sum_{\{n_j=0,1\}_j} e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k}\\ &= \prod_j\left(\sum_{n_j=0,1}e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}\right)\\ &= \prod_j\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}\right)\end{aligned}$$

である。従って、粒子数期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle n_j \rangle &= -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)} \ln\left(\prod_k \left(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right)\right) \\
&= -\sum_k \frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)} \ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right) \\
&= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}} \\
&= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1}
\end{aligned}
$$

となる。

次に、boson 系の場合には

$$
\begin{aligned}
\Xi(\beta,\mu) &= \sum_{\{n_j=0,1,2,\ldots\}_j} e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k} \\
&= \prod_j \left(\sum_{n_j=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j}\right) \\
&= \prod_j \left(1-e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

であるので、

$$
\begin{aligned}
\langle n_j \rangle &= -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)} \ln\left(\prod_k \left(1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right)\right)^{-1} \\
&= \sum_k \frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_j)} \ln\left(1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right) \\
&= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{1-e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}} \\
&= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1}
\end{aligned}
$$

を得る。

(2) ある物理量 A の期待値 $\langle A \rangle$ が $\langle A \rangle = \sum_j a(\varepsilon_j)$ [ただし、$a(\varepsilon)$ は ε について十分滑らかな関数] であると仮定する。このとき、状態数 $\Omega(\varepsilon) = \sum_{j;\varepsilon_j\le\varepsilon} 1$ の ε についての導関数 $D(\varepsilon) = \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\varepsilon}$ (状態密度) を用いて、

$$
\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) a(\varepsilon)
$$

と表せることを示せ。ただし、系の体積は十分大きく、1 粒子エネルギー固有値 ε_j の間隔は限りなく狭くなるものとする。

解答.— エネルギー ε の取りうる区間 $(-\infty,\infty)$ を微小幅 $\Delta\varepsilon$ で分割して $D_k = ((k-1)\Delta\varepsilon, k\Delta\varepsilon]$

とする。状態 j に関する和を、ε_j の属する区間 D_k ごとに分類すると

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_j a(\varepsilon_j)\\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{j;\varepsilon_j\in D_k} a(\varepsilon_j)\\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{j;\varepsilon_j\in D_k} a(k\Delta\varepsilon+(\varepsilon_j-k\Delta\varepsilon))\end{aligned}$$

を得る。ここで、$\varepsilon_j \in D_k = ((k-1)\Delta\varepsilon, k\Delta\varepsilon]$ の時、$|\varepsilon_j - k\Delta\varepsilon| \leq \Delta\varepsilon$ より、$\varepsilon_j - k\Delta\varepsilon$ を微小量と見なすと

$$a(k\Delta\varepsilon+(\varepsilon_j-k\Delta\varepsilon)) = a(k\Delta\varepsilon)+\mathcal{O}(\Delta\varepsilon)$$

と展開できる。$a(k\Delta\varepsilon)$ が j に依存しないことに注意すると

$$\begin{aligned}\sum_{j;\varepsilon_j\in D_k} a(k\Delta\varepsilon) &= a(k\Delta\varepsilon)\sum_{j;\varepsilon_j\in D_k} 1\\ &= a(k\Delta\varepsilon)\left(\sum_{j;\varepsilon_j\leq k\Delta\varepsilon} 1 - \sum_{j;\varepsilon_j\leq (k-1)\Delta\varepsilon} 1\right)\\ &= a(k\Delta\varepsilon)(\Omega(k\Delta\varepsilon)-\Omega((k-1)\Delta\varepsilon))\\ &= a(k\Delta\varepsilon)(D(k\Delta\varepsilon)\Delta\varepsilon+\mathcal{O}(\Delta\varepsilon^2))\end{aligned}$$

が得られるので、これを代入すると、

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{k=-\infty}^{\infty}\left(a(k\Delta\varepsilon)D(k\Delta\varepsilon)\Delta\varepsilon+\mathcal{O}(\Delta\varepsilon^2)\right)\\ &\to \int_{-\infty}^{\infty} a(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \qquad (\Delta\varepsilon\to 0)\end{aligned}$$

を得る。

(3) 一辺の長さ L で周期境界条件下の d 次元立方体中の自由粒子を考える。この粒子の固有状態は波数 $\boldsymbol{k}$ で指定される平面波状態 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ であり、整数 n_i を用いて $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, \ldots, n_d)$ となるものだけが許容される。この自由粒子が $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = A|\boldsymbol{k}|^r$ $(r > 0)$ の分散関係を持つとき、その状態密度 $D_{d,r}(\varepsilon)$ が、

$$D_{d,r}(\varepsilon) = g\frac{L^d}{(2\pi)^d}\frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}\frac{1}{A^{d/r}r}\varepsilon^{(d-r)/r}$$

で与えられることを示せ (ここで、g をスピンなどの内部自由度に起因する縮重度とした)。また、$r=2$ の場合における $D_{d,2}(\varepsilon)$ の概形を $d=1,2,3$ の場合に描け (これは、$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$ である非相対論的な自由粒子の状態密度を与える)。

解答.— まず、あるエネルギー ε に対して $\varepsilon(\boldsymbol{k}) \leq \varepsilon$ を満たす状態数 $\Omega_{d,r}(\varepsilon)$ (= それを満たす波数 $\boldsymbol{k}$ の個数 × 縮重度 g) を考えよう。$\varepsilon(\boldsymbol{k}) \leq \varepsilon$ で指定される領域の波数空間上の体積は、それが半径 $(\varepsilon/A)^{1/r}$ の d 次元球の内部を表すことを考えると、

$$\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2+1)}\left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{d/r}$$

である。平面波状態は、波数空間上の格子点 $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, \ldots, n_d)$ で特徴づけられ、波数空間上の体積 $(2\pi/L)^d$ ごとに対応する平面波状態が g 個存在する。故に $\varepsilon(\boldsymbol{k}) \leq \varepsilon$ の状態数は L が十分大きい時

$$\Omega_{d,r}(\varepsilon) = g \times \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2+1)} \left(\frac{\varepsilon}{A}\right)^{d/r} \Bigg/ \left(\frac{2\pi}{L}\right)^d$$

である。従って、状態密度は

$$\begin{aligned} D_{d,r}(\varepsilon) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\Omega_{d,r}(\varepsilon) \\ &= g\left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2+1)A^{d/r}} \frac{d}{r} \varepsilon^{d/r-1} \\ &= g\frac{L^d}{(2\pi)^d} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \frac{1}{A^{d/r}r} \varepsilon^{(d-r)/r} \end{aligned}$$

で与えられる。ただし、ガンマ関数の性質 $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ を用いた。

また、非相対論的な粒子 $(r=2)$ の場合において、

$$D_{d,r=2}(\varepsilon) \propto \begin{cases} \varepsilon^{-1/2} & (d=1) \\ \varepsilon^{0} & (d=2) \\ \varepsilon^{1/2} & (d=3) \end{cases}$$

となる。$D_{d,r=2}(\varepsilon)$ のグラフの概形は、それらの ε 依存性を図示すれば良い。

II　理想 Fermi 気体

体積 V の立方体の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想 Fermi 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、スピンは 1/2 であるとする。次の問いに答えよ。

(1) 絶対零度において Fermi 粒子に占められる準位のうちで最高のエネルギー準位を Fermi エネルギーという。この粒子系の Fermi エネルギー ε_F を求めよ。

解答.— 前設問 (3) の結果を用いると $(d=3,\ r=2,\ g=2,\ A=\hbar^2/2m)$、

$$D(\varepsilon) = D\varepsilon^{1/2}, \quad D = 2\frac{L^3}{8\pi^3}\frac{2\pi^{3/2}}{\pi^{1/2}/2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}L^3}{\pi^2\hbar^3}$$

で状態密度が与えられる。全粒子数に関して、前設問 (2) の結果を用いると

$$N = \sum_j \langle n(\varepsilon_j) \rangle = \int_0^\infty f_F(\varepsilon) D(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon$$

である。絶対零度 $\beta \to \infty$ では $f_F(\varepsilon) = \lim_{\beta\to\infty}(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1)^{-1} = \theta(\mu - \varepsilon)$ より

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\mu D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \\ &= \frac{2}{3}D\mu^{3/2} \end{aligned}$$

より、化学ポテンシャル μ が $\mu = (3N/2D)^{2/3}$ と決まる。また、この時分布 $f_F(\varepsilon) = \theta(\mu - \varepsilon)$ は、エネルギー μ 以下が全て占有されていることを意味することから、定義より Fermi エネルギー ε_F はこの時の化学ポテンシャル μ に一致する。従って、

$$\varepsilon_F = (3N/2D)^{2/3} = \frac{3^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2 N^{2/3}}{2mL^2}$$

である。

(2) 絶対零度におけるこの系の全エネルギーを ε_F を用いて表せ。また、これを用いて粒子系の圧力 P を求めよ。

解答.— 系の全エネルギー E は

$$\begin{aligned} E &= \sum_j \langle \varepsilon_j n(\varepsilon_j) \rangle \\ &= \int_0^\infty \varepsilon f_F(\varepsilon) D(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon \\ &= \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D \varepsilon^{1/2} \mathrm{d}\varepsilon \qquad (\text{絶対零度の時}) \\ &= \frac{2}{5} D \varepsilon_F^{5/2} \\ &= \frac{2}{5} \cdot \frac{3}{2} \left(\frac{2}{3} D \varepsilon_F^{3/2} \right) \varepsilon_F \\ &= \frac{3}{5} N \varepsilon_F \end{aligned}$$

である。

圧力 P に関して、全体積 $V = L^3$ とすると

$$\begin{aligned} P &= -\frac{\partial E}{\partial V} \\ &= -\frac{3}{5} N \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{3^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2 N^{2/3}}{2m} V^{-2/3} \right) \\ &= \frac{2}{5} \frac{N\varepsilon_F}{V} \end{aligned}$$

となる。

(3) $\varepsilon < 0$ で $h(\varepsilon) = 0$ であるような滑らかな関数 $h(\varepsilon)$ に対して、十分低温な範囲では以下の近似ができる。

$$\int_0^\infty h(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} h(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(h'(\varepsilon_F) - \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)} h(\varepsilon_F) \right) (k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big).$$

この式を用いて低温における系のエネルギー $E(T)$ および比熱 $C(T)$ を求めよ。また、余裕があれば上式の近似 (Sommerfeld 展開) を導出せよ。

解答.— $h(\varepsilon) = \varepsilon D(\varepsilon)$ $(\varepsilon \geq 0)$ を代入すると、

$$\begin{aligned} E &= \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon \\ &= \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(\varepsilon_F D'(\varepsilon_F) + D(\varepsilon_F) - \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)} \varepsilon_F D(\varepsilon_F) \right) (k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big) \\ &= \frac{3}{5} N \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{6} D(\varepsilon_F)(k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big) \end{aligned}$$

である。ここで、

$$D(\varepsilon_F) = D\varepsilon_F^{1/2} = \frac{3}{2}\left(\frac{2}{3}D\varepsilon_F^{3/2}\right)\varepsilon_F^{-1} = \frac{3N}{2\varepsilon_F}$$

を用いると、

$$E = \frac{3}{5}N\varepsilon_F + \frac{\pi^2 N}{4\varepsilon_F}(k_BT)^2 + \mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)$$

が得られる。

また、比熱 $C(T)$ は同じ低温極限で

$$\begin{aligned} C(T) &= \frac{\partial E}{\partial T} \\ &= \frac{\pi^2 N}{2\varepsilon_F}k_B^2 T \\ &\propto T \end{aligned}$$

で、温度 T に比例する。

Sommerfeld 展開の導出.— Sommerfeld 展開は、$k_BT \ll \varepsilon_F$ において微小量 k_BT/ε_F による展開であることに留意する。十分低温ということで Fermi 分布関数 $f_F(\varepsilon)$ を絶対零度の部分とそれ以外に分けて考える。すなわち、

$$f_F(\varepsilon) = f_F^{\beta=\infty}(\varepsilon) + g(\varepsilon - \mu) \tag{1}$$

とおく。$f_F^{\beta=\infty}(\varepsilon)$ は絶対零度の Fermi 分布関数で、$\varepsilon < 0$, $\mu < \varepsilon$ で 0, また $0 < \varepsilon < \mu$ で 1 となるステップ関数である。一方で、

$$g(\varepsilon) = f_F(\varepsilon+\mu) - f_F^{\beta=\infty}(\varepsilon+\mu) = \begin{cases} 0 & (\varepsilon < -\mu) \\ -\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon}+1} & (-\mu < \varepsilon < 0) \\ \frac{1}{e^{\beta\varepsilon}+1} & (\varepsilon > 0) \end{cases} \tag{2}$$

である。これを用いると Sommerfeld 展開における左辺は

$$\int_0^\infty h(\varepsilon)f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \int_0^\infty h(\varepsilon)(f_F^{\beta=\infty}(\varepsilon) + g(\varepsilon-\mu))\mathrm{d}\varepsilon \tag{3}$$

$$= \int_0^\mu h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon + \int_0^\infty h(\varepsilon)g(\varepsilon-\mu)\mathrm{d}\varepsilon \tag{4}$$

$$= \int_0^\mu h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon + \int_{-\infty}^\infty h(\varepsilon+\mu)g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \tag{5}$$

と計算される。ここで $h(\varepsilon)$ は $\varepsilon < 0$ で 0 なので、関数 $g(\varepsilon)$ を

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} -\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon}+1} & (\varepsilon < 0) \\ \frac{1}{e^{\beta\varepsilon}+1} & (\varepsilon > 0) \end{cases} \tag{6}$$

としても積分は同じ結果を与える。

(Step 1) 第 2 項

$$\int_{-\infty}^\infty h(\varepsilon+\mu)g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \tag{7}$$

の展開を行う。関数 $g(\varepsilon)$ は (2) 式より $\varepsilon = 0$ 近傍で指数的に減衰し、その寄与を与えるのは $|\varepsilon| \lesssim 1/\beta = k_BT$ の領域である。従って、十分低温の $k_BT \ll \varepsilon_F \ll \varepsilon_F \simeq \mu$ を考えるとき、ε の積分範囲

における ε は $|\varepsilon| \ll \mu$ と見做して良い (逆に、そうでない ε の範囲は $g(\varepsilon)$ の大きさが指数的に小さいため無視できる)。故に、$h(\varepsilon+\mu)$ を $\varepsilon=0$ 周りで Taylor 展開を行うことができて

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} h(\varepsilon+\mu)g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(h(\mu)+h'(\mu)\varepsilon+\frac{1}{2}h''(\mu)\varepsilon^2+\mathcal{O}\big(\varepsilon^3\big)\right)g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon &(8)\\ &= h'(\mu)\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\mathcal{O}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon^3 g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon\right) &(9)\end{aligned}$$

である。ここで $g(\varepsilon)$ は (6) 式で奇関数であることで奇数番目の積分が消えることを利用した。第 1 項に関しては

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon &= 2\int_0^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}+1} &(10)\\ &= 2\beta^{-2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\frac{x}{e^x+1} &(11)\\ &= \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 &(12)\end{aligned}$$

である。同じくして第 2 項は積分すると $\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)$ であることがわかるので、(7) 式は

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(\varepsilon+\mu)g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \frac{\pi^2}{6}h'(\mu)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \tag{13}$$

のようになる。

(Step 2) Step 1 の結果を利用すると、

$$\int_0^{\infty} h(\varepsilon)f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\mu} h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}h'(\mu)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \tag{14}$$

となるが、この式には化学ポテンシャル μ が未知数として残っている。従って、μ を Fermi エネルギー ε_F で表現する必要がある。導出された (14) 式に $h(\varepsilon)=D(\varepsilon)$ [状態密度] を代入すると

$$N = \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}D'(\mu)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \tag{15}$$

すなわち

$$\int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}D'(\mu)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \tag{16}$$

が得られる。ここで、化学ポテンシャルの温度依存性を顕に $\mu(k_BT)$ と書くと、$\mu(0)=\varepsilon_F$ で十分低温では $\mu \simeq \varepsilon_F$ である。よって

$$\begin{aligned}\int_0^{\mu} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon &= \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mu}\int_0^{\mu} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon\right)\bigg|_{\mu=\varepsilon_F}(\mu-\varepsilon_F)+\mathcal{O}\big((\mu-\varepsilon_F)^2\big) &(17)\\ &= \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+D(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F)+\mathcal{O}\big((\mu-\varepsilon_F)^2\big) &(18)\end{aligned}$$

であり、これを代入すれば

$$0 = D(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F)+\frac{\pi^2}{6}\big(D'(\varepsilon_F)+\mathcal{O}(\mu-\varepsilon_F)\big)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4,(\mu-\varepsilon_F)^2\big) \tag{19}$$

であり、μ について解けば

$$\mu = \varepsilon_F-\frac{\pi^2}{6}\cdot\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4,(\mu-\varepsilon_F)(k_BT)^2,(\mu-\varepsilon_F)^2\big) \tag{20}$$

が得られる。$\mu(k_BT=0)=\varepsilon_F$ より少なくとも $\mu-\varepsilon_F\in\mathcal{O}(k_BT)$ であるが、これを上式に代入すれば $\mathcal{O}(\cdot)$ の項は $\mathcal{O}\big((k_BT)^2\big)$ である。故に、(20) 式には $\mathcal{O}(k_BT)$ の項が現れず $\mu-\varepsilon_F\in\mathcal{O}\big((k_BT)^2\big)$ が言え、結果的に

$$\mu=\varepsilon_F-\frac{\pi^2}{6}\cdot\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \tag{21}$$

として化学ポテンシャルの温度依存性を得る。

(Step 3) 化学ポテンシャルの表式 (21) を Sommerfeld 展開の左辺の結果 (14) 式に代入する：

$$\begin{aligned}\int_0^\infty h(\varepsilon)f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon &= \int_0^\mu h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}h'(\mu)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \qquad (22)\\ &= \int_0^{\varepsilon_F} h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+h(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F)+\frac{\pi^2}{6}(h'(\varepsilon_F)+\mathcal{O}(\mu-\varepsilon_F))(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)\\ &= \int_0^{\varepsilon_F} h(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}\left(h'(\varepsilon_F)-\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}h(\varepsilon_F)\right)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big) \qquad (23)\end{aligned}$$

となり、Sommerfeld 展開の帰結を得る。 □

(4) 磁場 H 中に置かれた各電子のエネルギー準位は Zeeman 効果により $\varepsilon_\sigma(\boldsymbol{k})=\hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m-\sigma\mu_0H$ に分裂する (ただし、磁場の運動項への寄与は無視した)。ここで、$\sigma=+1$ (-1) は磁場に平行 (反平行) なスピン磁気モーメントを持つ電子を表す。この系の低磁場・低温極限における磁化率を求めよ。

解答.— $\varepsilon(\boldsymbol{k})=\hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$ の分散を持つとき、縮重度を含めない時の状態密度を

$$D_0(\varepsilon)=\frac{D}{2}\varepsilon^{1/2},\quad D=2\frac{L^3}{8\pi^3}\frac{2\pi^{3/2}}{\pi^{1/2}/2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{2}=\frac{\sqrt{2}m^{3/2}L^3}{\pi^2\hbar^3}$$

と書く ($D(\varepsilon)=2D_0(\varepsilon)$ で、$\varepsilon<0$ では $D_0=0$ とする)。

磁場 H を印加した時、エネルギー ε 以下のエネルギーを持つ状態は、運動項 $\hbar^2\boldsymbol{k}^/2m\le\varepsilon+\mu_0H$ を満たす $\sigma=+1$ の状態と、運動項 $\hbar^2\boldsymbol{k}^/2m\le\varepsilon-\mu_0H$ を満たす $\sigma=-1$ の状態で構成される。従って、磁化 $\mu_0\sigma$ の期待値は、

$$\begin{aligned}\langle\mu_0\sigma\rangle &= (+\mu_0)\int_0^\infty D_0(\varepsilon+\mu_0H)f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+(-\mu_0)\int_0^\infty D_0(\varepsilon-\mu_0H)f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon.\\ &= 2\mu_0^2H\int_0^\infty\frac{\partial D_0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\mathcal{O}\big((\mu_0H)^2\big)\end{aligned}$$

従って、磁化率の主要項は

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{\partial\langle\mu_0\sigma\rangle}{\partial H}\\ &\sim 2\mu_0\int_0^\infty\frac{\partial D_0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}f_F(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon\\ &= 2\mu_0^2\int_0^{\varepsilon_F}\frac{\partial D_0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2\mu_0^2}{3}\left(D_0''(\varepsilon_F)-\frac{(D_0'(\varepsilon_F))^2}{D_0(\varepsilon_F)}\right)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)\\ &= 2\mu_0^2D_0(\varepsilon_F)+\frac{\pi^2\mu_0^2}{3}\left(-\frac{1}{4}D_0(\varepsilon_F)\varepsilon_F^{-2}-\frac{1}{4}D_0(\varepsilon_F)\varepsilon_F^{-2}\right)(k_BT)^2+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)\\ &= \mu_0^2D(\varepsilon_F)\left(1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2\right)+\mathcal{O}\big((k_BT)^4\big)\end{aligned}$$

である。

(5) Na は常温・常圧で体心立法構造を取り、格子定数は $a = 4.225$ Å で与えられる。それぞれの Na 原子が 1 つの電子を供給するとしたとき、この系の電子密度 [1/m^3] および Fermi 温度 [K] ($T_F = \varepsilon_F/k_B$) を求めよ。ただし、Na 原子の作るポテンシャル, 電子間相互作用は無視して、Na 原子が供給する電子の集合が理想 Fermi 気体とみなせるとする。

解答.— 体心立法構造は、単位格子中に 2 個原子を含むので、電子密度

$$\rho = \frac{N}{V} = 2a^{-3} = 2.652 \times 10^{28}\,[1/\mathrm{m}^3]$$

である。その他の定数として、

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\,[\mathrm{J \cdot s}] \tag{24}$$

$$m = 9.109 \times 10^{-31}\,[\mathrm{kg}] \tag{25}$$

$$k_B = 1.381 \times 10^{-23}\,[\mathrm{J \cdot K^{-1}}] \tag{26}$$

を代入すると、 Fermi 温度 T_F は

$$T_F = \frac{3^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2\rho^{2/3}}{2mk_B} = 3.77 \times 10^4\,[\mathrm{K}]$$

である。

(注釈) フェルミ温度 T_F は、常温 T 10^2 [K] と比べると非常に大きい。この事実は、常温においては比熱・感受率など励起を関連した物理的性質はフェルミ面付近 ($\varepsilon_j \sim \varepsilon_f$) の電子のみしか作用しないことを意味する。

III　理想 Bose 気体

体積 V の立方体の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想 Bose 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、スピンは 0 であるとする。次の問いに答えよ。

(1) 粒子数密度 $\rho = \langle N\rangle/V$ を計算し、それを関数

$$F_{1/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}-1}$$

を用いて表せ。ただし、$\langle n_j\rangle/V$ が全ての j について ρ より十分小さい量であるとする。

解答.— 状態密度は、

$$D(\varepsilon) = D\varepsilon^{1/2}, \quad D = \frac{m^{3/2}V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}$$

で与えられる (スピン 0 より Fermion 系の場合と比べて係数 2 の違いがあることに注意)。粒子数密

度は

$$
\begin{aligned}
\rho &= \frac{\langle N\rangle}{V} \\
&= \frac{1}{V}\sum_j \langle n(\varepsilon_j)\rangle \\
&= \frac{1}{V}\int_0^\infty f_B(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \qquad (\langle n_j\rangle/V \text{ が全ての } j \text{ について } \rho \text{ より十分小さい}) \\
&= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \\
&= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\beta^{-3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}(\beta\varepsilon)\,\frac{(\beta\varepsilon)^{1/2}}{e^{\beta\varepsilon-\beta\mu}-1} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2} F_{1/2}(-\beta\mu)
\end{aligned}
$$

である。

(2) 上で求めた ρ を用いて、逆温度 β、密度 ρ および化学ポテンシャル μ の間に成り立つ関係式を導出せよ。また、これを μ について解いて μ を β,ρ の関数として表すとき、$\beta > \beta_c$ で解 μ が存在しなくなる。このような閾値 β_c を求めよ。

解答.— 成り立つ関係式は

$$F_{1/2}(-\beta\mu) = \left(\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}\right)^{3/2}\rho$$

である。

ここで、化学ポテンシャル μ は粒子数期待値

$$\langle n(\varepsilon(\boldsymbol{k}))\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\boldsymbol{k})-\mu)}-1}$$

が、全ての $\boldsymbol{k}$ に対して非負となるように $\mu < 0$ でないといけない。$F_{1/2}(-\beta\mu)$ は $\mu < 0$ において μ に関する単調増加関数であるので (さらに、$F_{1/2}(-\infty) = 0$)、

$$F_{1/2}(0) < \left(\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}\right)^{3/2}\rho$$

ならば、$\mu < 0$ に対応する解 μ が存在しない。従って、閾値 β_c を

$$\beta_c = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{F_{1/2}(0)}{\rho}\right)^{2/3}$$

で定めると、$\beta > \beta_c$ では解 μ が存在しない。

(3) $\beta > \beta_c$ の時、すなわち $T < T_c = 1/(k_B\beta_c)$ を満たす低温領域では、一粒子基底状態 $j = 1$ を巨視的な数の粒子が占有するような状態が実現している (Bose-Einstein 凝縮)。この状態において $j = 1$ の占有数密度 $\langle n_1\rangle/V$ を温度の関数として表し、その概形を図示せよ。

解答.— まず、boson 系で温度を下げることで何が起こっているのかを説明する。$T > T_c$ ($\beta < \beta_c$) の時、全ての粒子 (粒子数 N) が Bose-Einstein 分布に従い、

$$N = \int_0^\infty f_B(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \qquad (\text{粒子数保存})$$

を満たすように化学ポテンシャル μ が決まる (設問 (1), (2) と等価である)。そこから温度 T を下げていき T_c に近づけていくと $\mu < 0$ は徐々に大きくなっていき、最終的に $T = T_c$ $(\beta = \beta_c)$ で $\mu = 0$ となる。

転移温度からさらに温度を下げて $T < T_c$ $(\beta > \beta_c)$ とすると、基底状態 $j = 1$ の占有数が増大し、この状態に関しては和を積分に置換する公式 (設問 I-(2)) が使えなくなる。従って、

$$
\begin{aligned}
N &= \langle n_1 \rangle + \int_{\varepsilon_2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) && (27)\\
&= \frac{1}{e^{\beta(-\mu)} - 1} + V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(-\beta\mu) && (28)
\end{aligned}
$$

となる。ここで、$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2/2m$ で $\boldsymbol{k} = 2\pi(n_x, n_y, n_z)/L$ より $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \to 0$ $(L \to \infty)$ であることを用いた。化学ポテンシャル μ は上記の解として決定されるが、定性的には $T \to T_c+$ と近づけた時に $\mu = 0$ まで増大した所からさらに増大することはできずに $\mu = 0$ にとどまる (注釈)。故に、基底状態に対する占有数は

$$
\begin{aligned}
\frac{\langle n_1 \rangle}{V} &= \frac{1}{V} \left(N - V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(0) \right) \\
&= \rho - \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} F_{1/2}(0) \beta^{-3/2} \\
&= \rho \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right)
\end{aligned}
$$

となる。

注釈.— (5) 式を変形すると、

$$
\begin{aligned}
\langle n_1 \rangle^{-1} &= e^{-\beta\mu} - 1 && (29)\\
&= \left\{ N - V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(-\beta\mu) \right\}^{-1} && (30)\\
&= V^{-1} \left\{ \rho - \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(-\beta\mu) \right\}^{-1} && (31)
\end{aligned}
$$

である。ここで、この係数部分について

$$
\begin{aligned}
\rho - \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(-\beta\mu) &\geq \rho - \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} F_{1/2}(0) && (32)\\
&= \rho \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right) && (33)
\end{aligned}
$$

は $T < T_c$ の時、V に依存しない正の定数 $C > 0$ で下から抑えられる。以上より

$$
0 \leq e^{-\beta\mu} - 1 \leq (CV)^{-1} \to 0 \quad (V \to \infty) \qquad (34)
$$

であり、熱力学極限 $V \to \infty$ では化学ポテンシャルは $\mu \to 0$ となる。

注釈 2.— $\beta > \beta_c$ の時、$\langle n_j \rangle / V$ $(j \geq 2)$ が ρ に比べて十分小さく、この範囲の総和は積分に置換

できることを確かめる。化学ポテンシャル μ は $\mu \le \varepsilon_1 = 0$ であるので $j \ge 2$ では

$$\begin{aligned} \frac{\langle n_j \rangle}{V} &= \frac{1}{V} \cdot \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} - 1} & (35) \\ &\le \frac{1}{V} \cdot \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_2} - 1} \quad (\leftarrow \varepsilon_j \ge \varepsilon_2) & (36) \\ &\le \frac{1}{\beta V \varepsilon_2} & (37) \end{aligned}$$

である。ここで、ε_2 は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2/2m$ で 2 番目に小さいエネルギー固有値である。自由粒子 $\boldsymbol{k} = 2\pi(n_x, n_y n_z)/L$ では

$$\varepsilon_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} \tag{38}$$

となるので、

$$\frac{\langle n_j \rangle}{V} \le \frac{m}{2\pi^2\hbar^2\beta L} \to 0 \quad (L \to \infty) \tag{39}$$

である。従って、熱力学極限では $\langle n_j \rangle / V \ll \rho \ (j \ge 2)$ であり、基底状態以外の状態は $\beta > \beta_c$ でも

$$\sum_{j:\varepsilon_j \ge \varepsilon_2} (\cdot) \simeq \int_{\varepsilon_2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)(\cdot) \tag{40}$$

という置き換えが可能である。これを、Bose-Einstein 凝縮後の粒子数に対して用いると

$$N = \langle n(\varepsilon_1) \rangle + \int_{\varepsilon_2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle \tag{41}$$

という関係式が得られる。

(4) 温度 T におけるエネルギー期待値 $E(T)$ が転移温度 $T = T_c$ でも連続であることを示せ。

解答.—

$T > T_c$ の時、

$$\begin{aligned} E(T) &= \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \varepsilon f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) & (42) \\ &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} & (43) \\ &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \beta^{-5/2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}(\beta\varepsilon) \frac{(\beta\varepsilon)^{3/2}}{e^{\beta\varepsilon - \beta\mu} - 1} & (44) \\ &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \beta^{-5/2} F_{3/2}(-\beta\mu) & (45) \end{aligned}$$

である。

一方で、$T < T_c$ の時は

$$\begin{aligned} E(T) &= \varepsilon_1 \langle n_1 \rangle + \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \varepsilon f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) & (46) \\ &= \varepsilon_1 N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right) + \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \beta^{-5/2} F_{3/2}(-\beta\mu) & (47) \end{aligned}$$

であるが、$T \to T_c + 0, T \to T_c - 0$ のいずれにおいても $\mu \to 0$ で

$$E(T) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \beta^{-5/2} F_{3/2}(0) \tag{48}$$

であり連続である。

(5) 分散 $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ を持つ 2 次元の理想 Bose 気体は Bose-Einstein 凝縮を起こさないことを説明せよ。

解答.— Bose-Einstein 凝縮を起こさないということは、どのような β, μ に対しても

$$N > \int_0^\infty f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) \quad \mathrm{d}\varepsilon$$

となることはないということである。これには、$\mu \to -0$ で

$$\int_0^\infty f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) \quad \mathrm{d}\varepsilon \to \infty$$

となることを示せれば十分。

2 次元系では状態密度が ε に依存しないので $D(\varepsilon) = D$ とすると、Bose-Einstein 分布を占有する粒子数は $\mu < 0$ の時

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty f_B(\varepsilon) D \mathrm{d}\varepsilon &= D \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \\
&= D \beta^{-3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{1}{e^{x - \beta\mu} - 1} \\
&> D \beta^{-3/2} \int_0^{1/2} \mathrm{d}x \frac{1}{e^{x - \beta\mu} - 1}
\end{aligned}$$

である (適当にカットオフ 1/2 を入れたが何でも良い)。今、$\mu \to -0$ を考えているので $|\beta\mu| < 1/2$ を満たす十分小さな μ を考える。この時、$0 < x < 1/2$ において $0 < x - \beta\mu < 1$ であるので、その範囲内で

$$0 < e^{x - \beta\mu} - 1 = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k!} (x - \beta\mu)^k \leq \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k!} (x - \beta\mu) = (e - 1)(x - \beta\mu)$$

が成り立つ。故に、

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty f_B(\varepsilon) D \mathrm{d}\varepsilon &> (e-1)^{-1} D \beta^{-3/2} \int_0^{1/2} \mathrm{d}x \frac{1}{x - \beta\mu} \\
&= (e-1)^{-1} D \beta^{-3/2} \Big[\ln(x - \beta\mu) \Big]_{x=0}^{x=1/2} \\
&\to \infty \qquad (\mu \to -0)
\end{aligned}$$

を満たす。これにより、どれだけ温度を下げても、またどれだけ粒子数が多かったとしても

$$N = \int_0^\infty f_B(\varepsilon) D(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon$$

を満たす化学ポテンシャル $\mu < 0$ が存在する。すなわち、2 次元の場合において Bose-Einstein 凝縮は起きない。

注釈.— 3 次元以上では 低エネルギー領域 $\varepsilon \simeq 0$ で状態密度 $D(\varepsilon) \simeq 0$ となり占有可能な状態が少ないため、温度を冷やして Bose-Einstein 分布で低エネルギー状態を多く占有させようとしても途中で破綻してしまう。これが Bose-Einstein 凝縮の起源である。一方で 1, 2 次元系では、低エネルギー領域 $\varepsilon \simeq 0$ でも状態密度 $D(\varepsilon)$ が減衰せず ($\propto \varepsilon^0$)、 基底状態に集中することなく低エネルギー側にいくらでも粒子を占有させることが可能であるために Bose-Einstein 凝縮が起きない。我々の生きている世界が 3 次元で良かった！