問題 2　統計力学: BEC

2-1

自由粒子のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z) \tag{2-1.1}$$

である。これの解は

$$\begin{aligned}(k_x,k_y,k_z) &= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}(E_x,E_y,E_z)\\ E &= E_x+E_y+E_z\end{aligned} \tag{2-1.2}$$

を用いて

$$\Psi(x,y,z) \propto \exp(i(k_x x+k_y y+k_z z)) \tag{2-1.3}$$

と表せる。周期境界条件より、

$$\begin{aligned}\Psi(x+L,y,z) = \Psi(x,y+L,z) = \Psi(x,y,z+L) = \Psi(x,y,z)\\ \exp(ik_x x)\Psi(x,y,z) = \exp(ik_y y)\Psi(x,y,z) = \exp(ik_z z)\Psi(x,y,z) = \Psi(x,y,z)\end{aligned} \tag{2-1.4}$$

となるので、波数とエネルギーは量子化され、

$$\begin{aligned}k_xL = 2\pi n_x, k_yL = 2\pi n_y, k_zL = 2\pi n_z\\ E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)\end{aligned} \tag{2-1.5}$$

となる。波動関数は

$$\Psi(x,y,z) \propto \exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_x x+n_y y+n_z z)\right) \tag{2-1.6}$$

2-2

分配関数の和は

$$\Xi_i = \sum_{n_i=0}^{\infty}\exp\left(-\frac{(E_i-\mu)n_i}{k_BT}\right) = \frac{1}{1-\exp\left(-\frac{(E_i-\mu)}{k_BT}\right)} \tag{2-2.1}$$

のようにまとめれる。

ボーズ分布関数は

$$\begin{aligned}f(E_i,\mu) &= \frac{1}{\Xi_i}\sum_{n_i=0}^{\infty}n_i\exp\left(-\frac{(E_i-\mu)n_i}{k_BT}\right) = \frac{k_BT}{\Xi_i}\frac{\partial}{\partial\mu}\sum_{n_i=0}^{\infty}\exp\left(-\frac{(E_i-\mu)n_i}{k_BT}\right)\\ &= \frac{k_BT}{\Xi_i}\frac{\partial\Xi_i}{\partial\mu} = k_BT\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\Xi_i = -k_BT\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\left(1-\exp\left(-\frac{E_i-\mu}{k_BT}\right)\right)\\ &= \frac{\exp\left(-\frac{E_i-\mu}{k_BT}\right)}{1-\exp\left(-\frac{E_i-\mu}{k_BT}\right)} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i-\mu}{k_BT}\right)-1}\end{aligned} \tag{2-2.2}$$

2-3

1 粒子固有状態の数は次のような積分で求められる。

$$\Omega(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int_{0\le E_{\boldsymbol{k}}\le E}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k} = \frac{V}{8\pi^3}\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2} = \frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{2-3.1}$$

なので、状態密度は

$$D(E) = \frac{\mathrm{d}\Omega(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E} \tag{2-3.2}$$

2-4

$$N = \int_0^\infty \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) - 1} \times \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}\,\mathrm{d}E = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x$$
$$= \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2}\right)^{3/2} \times \frac{\sqrt{\pi}}{2}\zeta(3/2) = \zeta(3/2)V\left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{2-4.1}$$

2-5

T_c では $N_0 = 0, \mu = 0$ と考えられるので、前問の結果が使えて

$$N = \zeta(3/2)V\left(\frac{mk_B T_c}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$
$$T_c = \left(\frac{N}{\zeta(3/2)V}\right)^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \tag{2-5.1}$$

2-6

$$N_0 = N - \int_0^\infty f(E, \mu = 0)D(E)\,\mathrm{d}E = N - \zeta(3/2)V\left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = N - N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{2-6.1}$$

2-7

$$E = N_0 E_g + \int_0^\infty E f(E, \mu = 0)D(E)\,\mathrm{d}E$$
$$C \propto \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}\int_0^\infty \frac{E^{3/2}}{\exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) - 1}\,\mathrm{d}E = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}(k_B T)^{5/2}\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x \propto T^{3/2} \tag{2-7.1}$$

より、$\gamma = 3/2$

2-8

スピン縮重度は $2S + 1$ より、(1) 式は

$$N = (2S + 1)\int_0^\infty f(E, \mu)D(E)\,\mathrm{d}E \tag{2-8.1}$$

のようになる。なので設問 5 での式を読み替えることで転移温度は

$$N = \zeta(3/2)(2S + 1)V\left(\frac{mk_B T_c'}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$
$$T_c' = \left(\frac{N}{\zeta(3/2)(2S + 1)V}\right)^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \tag{2-8.2}$$

のように書ける。

2-9

ゼーマン分裂したときの状態密度は

$$D(E) = \sum_{m_z = -S}^{S} \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E + cm_z B} \tag{2-9.1}$$

となる。T_c' において基底状態のエネルギーと化学ポテンシャルは等しくて $\mu = -cSB$ となるので、T_c' を決める方程式は

$$
\begin{aligned}
N &= \sum_{m_z=-S}^{S} \int_{-cm_zB}^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{E+cSB}{k_BT_c'}\right)-1} \times \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E+cm_zB}\,\mathrm{d}E \\
&= \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT_c'}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{m_z=-S}^{S} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x e^{\frac{c(S-m_z)B}{k_BT_c'}}-1}\,\mathrm{d}x
\end{aligned}
\tag{2-9.2}
$$

となる。

2-10

$m_z = S$ のときは

$$
\int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x-1}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\zeta(3/2) \tag{2-10.1}
$$

$m_z < S$ のときの和について、

$$
\begin{aligned}
\sum_{m_z=-S}^{S-1} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x e^{\frac{c(S-m_z)B}{k_BT_c'}}-1}\,\mathrm{d}x &= \sum_{m_z=-S}^{S-1} \exp\left(-\frac{c(S-m_z)B}{k_BT_c'}\right) \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x - e^{-\frac{c(S-m_z)B}{k_BT_c'}}}\,\mathrm{d}x \\
&\simeq \sum_{m_z=-S}^{S-1} \exp\left(\frac{c(S-m_z)B}{k_BT_c'}\right) \int_0^{\infty} \sqrt{x}e^{-x}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{2cSB}{k_BT_c'}\right) \frac{1-\exp\left(-\frac{2cSB}{k_BT_c'}\right)}{1-\exp\left(-\frac{cB}{k_BT_c'}\right)} \to 0
\end{aligned}
\tag{2-10.2}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
N &= \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT_c'}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{m_z=-S}^{S} \int_{-\frac{cm_zB}{k_BT}}^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^x e^{\frac{cm_zB}{k_BT_c'}}-1}\,\mathrm{d}x \\
&\simeq V\zeta(3/2)\left(\frac{mk_BT_c'}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \\
T_c' &= \left(\frac{N}{\zeta(3/2)V}\right)^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}
\end{aligned}
\tag{2-10.3}
$$

となる。

感想

H25 年度にもあった BEC に磁場を加えたときの話。以前は断熱消磁してみたときの系の温度の話だったが、ここでは転移温度の話になってる。

直感的には温度が高いと温度ゆらぎがゼーマン分裂幅以上になるため、これらの準位の区別がつかないので磁場がないときと同じ結果になる。磁場を加えると、基底状態は $m_z = S$ の状態になるので、磁気量子数による縮絨度がないので $2S+1$ の分がなくなる。本番ではこっちの定性的なことを記述して $B - T_c'$ グラフを作るのが安牌か。