

付録 B 3次元調和ポテンシャル中の理想ボース気体の空間密度分布および運動量分布

B.1 半古典近似による理想ボース気体の空間密度分布

外部ポテンシャル $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ に閉じ込められた理想ボース気体の空間密度分布 $n(\mathbf{r})$ は、この系の一粒子固有状態（つまり一粒子シュレーディンガー方程式の解） $|\phi_\nu\rangle$ の位置空間波動関数 $\phi_\nu(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \phi_\nu \rangle$ を用いて

$$n(\mathbf{r}) = \sum_\nu f_\nu |\phi_\nu(\mathbf{r})|^2. \quad (\text{B.1})$$

と表される*. ここで、

$$f_\nu = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_\nu - \mu)] - 1} \quad (\text{B.2})$$

は、付録 A の式 (A.21) で導出したボース分布関数で、エネルギーが ε_ν の一粒子状態 $|\phi_\nu\rangle$ に存在する平均粒子数を表す。しかし、式 (B.1) は、すべての一粒子固有状態をシュレーディンガー方程式より解く必要があり、甚だ実用的ではない。そこで、系の固有状態にボース分布を適用するのではなく、一粒子の位相空間 $(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ 上の基本体積 h^3 あたり一つの状態が存在するとしてボース分布を適用する半古典近似を採用することにする[30].

位相空間上の点 (\mathbf{r}, \mathbf{p}) にある状態が持つエネルギー $\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ は、

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (\text{B.3})$$

であるから、この状態に存在する平均粒子数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ は、

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\exp[\beta(p^2/2m + V(\mathbf{r}) - \mu)] - 1} \quad (\text{B.4})$$

となる。位相空間上の体積 $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ に存在する状態の数 dW は

* 付録 C の式 (C.18) で示すように、これは場の演算子の積 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ の期待値である。

$$dW = \frac{1}{h^3} dx dy dx dp_x dp_y dp_z \quad (\text{B.5})$$

であるので、位相空間上の単位体積あたりに存在する粒子数 $n(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ は

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) dW}{dx dy dx dp_x dp_y dp_z} = \frac{h^{-3}}{\exp[\beta(p^2/2m + V(\mathbf{r}) - \mu)] - 1} \quad (\text{B.6})$$

と表せる。空間密度分布 $n(\mathbf{r})$ は、式 (B.6) を、全運動量空間にわたって積分することにより得られる：

$$n(\mathbf{r}) = \int n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty p^2 \{ \exp[\beta(p^2/2m + V(\mathbf{r}) - \mu)] - 1 \}^{-1} dp \quad (\text{B.7})$$

ここで、変数変換 $x = \beta p^2/2m$ を施すと、式 (B.7) は、

$$n(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} \int_0^\infty x^{1/2} \{ \exp[x + \beta(V(\mathbf{r}) - \mu)] - 1 \}^{-1} dx \quad (\text{B.8})$$

となる。ここで、 $\lambda_{\text{dB}} \equiv h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ は、付録 A の式 (A.36) で定義した熱的ド・ブロイ波長である。後の計算手法は、付録 A の式 (A.34) と同様であり、結果は

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\exp[-s\beta(V(\mathbf{r}) - \mu)]}{s^{3/2}} \\ &= \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} g_{3/2}(\exp[-\beta(V(\mathbf{r}) - \mu)]) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

となる。 $g_n(z) \equiv \sum_{s=1}^{\infty} z^s / s^n$ は、ボース関数と呼ばれている*。

B.2 半古典近似による理想ボース気体の運動量分布

*数学では多重対数関数 (polylogarithm function) と呼ばれる。Mathematica® のプログラムでは、PolyLog[n, z] と表す。

半古典近似による理想ボース粒子系の運動量分布は、式 (B.6) を、全位置空間にわたって積分することにより得られる：

$$n(\mathbf{p}) = \int n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} = \frac{1}{h^3} \int \left\{ \exp[\beta(p^2/2m + V(\mathbf{r}) - \mu)] - 1 \right\}^{-1} d\mathbf{r} \quad (\text{B.10})$$

ここで、ポテンシャルの形状として、3次元調和ポテンシャルを考える：

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) . \quad (\text{B.11})$$

変数変換 $X = \omega_x x$, $Y = \omega_y y$, $Z = \omega_z z$, $R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$ を施すと、式 (B.10) は

$$\begin{aligned} n(\mathbf{p}) &= \frac{1}{h^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \int \left\{ \exp[\beta(p^2/2m + m(X^2 + Y^2 + Z^2)/2 - \mu)] - 1 \right\}^{-1} dXdYdZ \\ &= \frac{4\pi}{h^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \int_0^\infty R^2 \left\{ \exp[\beta(p^2/2m + mR^2/2 - \mu)] - 1 \right\}^{-1} dR \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

となる。ここで、更に変数変換 $x = \beta m R^2 / 2$ を施すと、

$$n(\mathbf{p}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3 m^3 \bar{\omega}^3} \int_0^\infty x^{1/2} \left\{ \exp[x + \beta(p^2/2m - \mu)] - 1 \right\}^{-1} dx \quad (\text{B.13})$$

となる。ここで、 $\bar{\omega} \equiv (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ と定義した。後の計算手法は、式 (B.9) と同様であり、結果は

$$\begin{aligned} n(\mathbf{p}) &= \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3 m^3 \bar{\omega}^3} \sum_{s=1}^\infty \frac{\exp[-s\beta(p^2/2m - \mu)]}{s^{3/2}} \\ &= \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3 m^3 \bar{\omega}^3} g_{3/2}(\exp[-\beta(p^2/2m - \mu)]) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

となる。

B.3 転移温度以下での空間密度分布

系の温度 T が転移温度 T_C 以下になり、最低エネルギー状態の粒子数 N_0 がマクロな数になっている（ボース凝縮を起こしている）とき、フガシティー $\lambda \equiv \exp(\beta\mu)$ は 1 に極めて近い値をとる。このとき、式 (B.9) の空間密度分布は、

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} g_{3/2}(\exp[-\beta V(\mathbf{r})]) \quad (\text{B.15})$$

となる*。特にポテンシャルの極小点、つまり空間密度のピーク位置では、 $V(\mathbf{r}) = 0$ であるので**、

$$\begin{aligned} n_{\text{peak}} &= \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} g_{3/2}(1) = \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} \zeta(3/2) \\ &= \frac{2.612}{\lambda_{\text{dB}}^3} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

となる。このことから、ボース凝縮が起きる条件は、ポテンシャルの形状に依らず、空間密度のピーク位置での位相空間密度 $\rho_{\text{PS,peak}} \equiv n_{\text{peak}} \lambda_{\text{dB}}^3$ が 2.612 となる時、と言うことができる。この結論は、箱型ポテンシャルにおけるボース凝縮発生の条件（付録 A, 式 (A.38)) を確かに再現している。

B. 4 ボース・アインシュタイン分布とマックスウェル・ボルツマン分布との比較

3次元調和ポテンシャル中の N 粒子系が、マックスウェル・ボルツマン統計に従うとしたときの空間密度分布 $n_{\text{MB}}(\mathbf{r})$ は、

$$n_{\text{MB}}(\mathbf{r}) = N \omega_x \omega_y \omega_z \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{\beta}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \right] \quad (\text{B.17})$$

である。特に、温度が転移温度 $T_C = \frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B} \left(\frac{N}{1.202} \right)^{1/3}$ （付録 A, 式 (A.50)) のときのピーク

密度を求めてみると、

* この密度分布の式には、ボース凝縮体の密度分布は含まれていない。つまりノーマル成分の密度分布のみを表す。その理由は、付録 A, 式 (A.32) の脚注と同じである。

** 系がボース凝縮を起こしているとき、フガシティー $\lambda \equiv \exp(\beta\mu)$ が 1 に極めて近い値をとるという結論は、系の最低エネルギー状態のエネルギー、つまりポテンシャルの極小点のエネルギーをゼロとすることを前提にしている。

$$\begin{aligned}
 n_{\text{MB}}(0) &= N\omega_x\omega_y\omega_z \left(\frac{m}{2\pi k_B T_C} \right)^{3/2} = \frac{1}{\lambda_{\text{dB}}^3} \frac{N\omega_x\omega_y\omega_z m^3}{h^3} \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T_C} \right)^3 \\
 &= \frac{1.202}{\lambda_{\text{dB}}^3}.
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

これは、ボース・アインシュタイン統計を用いたときに得られるピーク密度の値 (B.16) の 46% である*。つまり、マクスウェル・ボルツマン分布は、ピーク密度を実際より小さく計算してしまう。逆に言えば、ボース・アインシュタイン統計は、粒子を最低エネルギー状態の周りに局在させようとする傾向がある。同じような傾向は、運動量分布にも表れる (詳しい議論は付録 F.4)。

* ツェータ関数の値の比 $\zeta(3)/\zeta(3/2) = 1.202/2.612 \cong 0.46$ 。

