Bose-Einstein 凝縮の厳密な導出

高岡佑

2012 年 10 月 4 日

1　はじめに

@田崎晴明：『統計力学 I,II』（培風館），以下 [1]，[2] と書く。

2　BEC の大まかな説明

・$x \geq 0$ のとき $e^x - 1 \geq x$ だから[*1]

3　積分近似の正当性

定理（積分近似の正当性）

$$\lim_{V\to\infty}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j) = \int_0^{\infty} d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu}(\epsilon). \tag{3.1}$$

ただし，$\mu(V)$ は有限体積系の化学ポテンシャルであり，μ はその $V \to \infty$ での極限である。また，

$$\nu(\epsilon) := \frac{1}{V}\frac{d}{d\epsilon}\frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^{3/2} = \frac{\pi}{4V(E_0)^{3/2}}\sqrt{\epsilon} = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3}\sqrt{\epsilon}, \tag{3.2}$$

$$f_{\beta,\mu}(\epsilon) := \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}.$$

この節の目標は，この定理を（$\mu(V)$ の V 依存性まで考慮しつつ）厳密に示すことにある。そのためには，以下に述べる 2 つの補題が必要である。

[*1] e^x を Talor 展開してみよ。

補題 1

m を**非正の定数**（化学ポテンシャルではない！）とするとき，

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty}f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j)=\int_0^{\infty}d\epsilon\ \nu(\epsilon)f_{\beta,m}(\epsilon). \tag{3.3}$$

ただし，$\tilde{\epsilon}_j := \epsilon_j - \epsilon_1$ とおいた[a]。（左辺の $f_{\beta,m}$ の引数に注意せよ）

[a] なぜこのような変数変換をするのか奇妙に思うかもしれないので，少し先の話をしよう。2.3 節で，$\tilde{\mu} := \mu - \epsilon_1$ とおいて，Bose 分布関数の中の $\epsilon - \mu$ を $\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}$ のように書き換える。こうしておくと，常に $\tilde{\mu} < 0$ が成り立つ（後述）ので便利なのだ。

補題 2

次の関数は，（他のパラメータを固定し，μ のみの関数と見るとき）$\mu \leq 0$ で連続[a]。

$$g(\mu) := \int_0^{\infty}d\epsilon\ \nu(\epsilon)f_{\beta,\mu}(\epsilon) \tag{3.4}$$

[a] 積分が収束することは，[2]p.398 で示されている。

以下，3.1 節〜3.2 節でこの 2 つの補題を証明し，3.3 節でそれらを用いて積分近似の正当性を示す。事実上，補題 1 が定理の核心であるから，紙面の多くはその証明のために割かれるであろう。

3.1　補題 1 の証明

この節の議論は，ほぼ [2]p.409（積分近似の正当性）の議論そのままである。ただし，補題 1 では和の中の ϵ_j が $\tilde{\epsilon}_j$ で置き換わっているので，その点で途中少しだけ面倒な処理が加わる。

補題 1（再掲）

m を**非正の定数**（化学ポテンシャルではない！）とするとき，

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty}f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j)=\int_0^{\infty}d\epsilon\ \nu(\epsilon)f_{\beta,m}(\epsilon).$$

ただし，$\tilde{\epsilon}_j:=\epsilon_j-\epsilon_1$ とおいた。（左辺の $f_{\beta,m}$ の引数に注意せよ）

証明の方針

少し長い証明になるので，「何をしているか」分かるように，先に大まかな方針だけ説明しておこう。

まず，状態数 $\Omega(\epsilon)$ に対する評価（通称「球で挟むやつ」。[1]p.68，またはこれの付録参照）より，

$$\frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}}-\sqrt{3}\right)^3\le\ \Omega(\epsilon)\ \le\frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^{3/2}. \tag{3.5}$$

我々の目的は (3.3) 左辺の和を状態密度の積分で近似することであるから，とにかくこれが必要である（状態密度は，(3.5) の右辺を ϵ で微分したものであることに注意しよう）。(3.5) の左辺を $\Omega_+(\epsilon)$，右辺を $\Omega_-(\epsilon)$ とおけば，

$$\Omega_+(\epsilon)\le\Omega(\epsilon)\le\Omega_-(\epsilon). \tag{3.6}$$

グラフにすると，図 3.1 のようになる。

$\Omega_\pm(\epsilon)$ は，$\Omega(\epsilon)$ を滑らかな関数で近似した「状態数っぽい何か」と解釈できる。そして，$\Omega_+(\epsilon)$ を ϵ で微分したものは我々の知っている状態密度そのものであり，従って $\Omega_-(\epsilon)$ を ϵ で微分したものも「状態密度っぽい何か」になるだろう。話のどこかで状態密度が出てこなければならないということは，どこかで $\Omega_\pm(\epsilon)$ を微分する場面に遭遇しなければならないということだ。

ここでおもむろに，図 3.1 のグラフの x 軸と ϵ 軸をひっくり返すと，図 3.2 のようになる。ただし，$\Omega_\pm(\epsilon)$ の逆関数を $\epsilon_\pm(x)$ とおいた[*2]。

ここで $f_{\beta,m}(\epsilon)$ が登場する（しつこいようだが，$m\le 0$ は**定数**）。具体的な表式を思い出せば分かるとおり，$f_{\beta,m}(\epsilon)$ は ϵ の単調減少関数である。従って，図 3.2 のグラフに登場する全ての関数（ϵ_j, $\epsilon_\pm(x)$）に $f_{\beta,m}$ を「かぶせる」と，全ての上下関係が逆転し図 3.3 のようになる。

我々の求める和，すなわち $\sum_{j=2}^{\infty}f_{\beta,m}(\epsilon_j)$ が図の中に現れたことに気づいただろうか[*3]。グラフの点線と，x 軸の間に挟まれた面積がちょうどそれである。そしてその和が，上下から積分

$$\int_a^{\infty}dx\ f_{\beta,m}(\epsilon_\pm(x)) \tag{3.7}$$

[*2] グラフからも元の表式からも分かるように，$\Omega_\pm(\epsilon)$ は連続かつ狭義の単調増加関数だから，逆関数が存在する。

[*3] ϵ_j と $\tilde{\epsilon}_j$ の違いはあるが，大筋に影響はない。

で押さえられる形になっているではないか！[*4]

さらに $\epsilon_\pm(x)$ が $\Omega_\pm(\epsilon)$ の逆関数だったことを思い出し，$x = \Omega_\pm(\epsilon)$ とおいて置換積分すると，(3.7) は

$$\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon \ \frac{d\Omega_\pm(\epsilon)}{d\epsilon} \ f_{\beta,m}(\epsilon) \tag{3.8}$$

となる。狙い通り，「状態密度（っぽい何か）」と $f_{\beta,m}(\epsilon)$ の積分に帰着した！　あとは $V \to \infty$ で，上下から挟んだこの 2 つの積分が同一の極限に収束することを示せばよいのだ。

証明

以上を踏まえて，初めから証明を組み立てよう。まず，状態数 $\Omega(\epsilon)$ に対する評価（「球で挟むやつ」）より，

$$\frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}} - \sqrt{3}\right)^3 \ \le \ \Omega(\epsilon) \ \le \ \frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^{3/2}. \tag{3.9}$$

とりあえずこの式に $\epsilon = \epsilon_j$ を代入したくなるが，$\Omega(\epsilon_j)$ がいつまでも式に入ってくると鬱陶しい。そこで，$\Omega(\epsilon_j)$ を j そのもので置き換えてしまうことを考える[*5]。

エネルギー準位を指定する番号 j は ϵ_j が小さい順に振られているから，$j \le \Omega(\epsilon_j)$ が成り立つ（図 3.4 参照)。

@図 3.4

これと (3.9)（で $\epsilon = \epsilon_j$ とおいた式）より，

$$j \le \frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon_j}{E_0}\right)^{3/2}. \tag{3.10}$$

求める不等式の片側が出てきた。

もう片方の側は，ちょっと小細工が必る。今，正の数 δ を任意にとると，$\Omega(\epsilon_j - \delta) \le j$（これも図 3.4 から分かる)。これと (3.9) から，

$$\frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_j - \delta}{E_0}} - \sqrt{3}\right)^3 \le j \tag{3.11}$$

を得る。$\delta > 0$ は任意だったから，（$\delta \to +0$ とすれば）

$$\frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_j}{E_0}} - \sqrt{3}\right)^3 \le j \tag{3.12}$$

が得られる[*6]。(3.10),(3.12) をまとめて，

$$\frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_j}{E_0}} - \sqrt{3}\right)^3 \ \le \ j \ \le \ \frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon_j}{E_0}\right)^{3/2} \tag{3.13}$$

（これが [2]p.409 の式 (10.4.30) である)。めでたく，$\Omega(\epsilon_j)$ が j で置き換えられた。

[*4] これだと $j = 1$ からでも積分近似が成立してしまい，BEC が起こらないのでは？　と思った人もいるだろう。しかし，積分範囲内で $f_{\beta,m}$ の引数が 0 になると ($m = 0$ のとき) 発散してしまうから，積分の下限 a は $\epsilon_\pm(a) > 0$ なるように十分大きく取らなければならない。この条件を真面目に考慮すると，$j = 1$ からの和に対してこのような評価は成立しないので，安心してよい。

[*5] この辺りの議論，[2]p.409 ではかなり説明が端折られていると感じたので，少し詳しく書いた。

[*6] 何だか騙された気になるような議論だが，図 3.1 を見ながら考えれば納得がいくだろう。

この不等式を $\tilde{\epsilon}_j$ について解く。すなわち (3.13) を再び (3.10) と (3.12) に分離させ（まとめた意味はあまりなかった），それぞれ ϵ_j について解いて再び「合体」させると，

$$E_0\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{2/3} \ \le\ \epsilon_j \ \le\ E_0\left(\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{1/3}+\sqrt{3}\right)^2 \tag{3.14}$$

を得る。

ここで，ϵ_j を $\tilde{\epsilon}_j$ に変換しよう[*7]。すなわち (3.14) の全ての辺から ϵ_1 を引き去り，$\tilde{\epsilon}_j := \epsilon_j - \epsilon_1$ を使って，

$$E_0\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{2/3} - \epsilon_1 \ \le\ \tilde{\epsilon}_j \ \le\ E_0\left(\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{1/3}+\sqrt{3}\right)^2 - \epsilon_1. \tag{3.15}$$

$\epsilon_1 > 0$ であるから，この右辺の ϵ_1 は取り除いてしまえる。そうなると，左辺の方も何とか綺麗な形に持っていきたくなる。

簡単のため，$(\frac{6j}{\pi})^{1/3} =: A$ とおく。$\epsilon_1 = 3E_0$ であるから，(3.15) 左辺は

$$E_0\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{2/3} - \epsilon_1 = E_0(A^2-3) = E_0(A+\sqrt{3})(A-\sqrt{3}). \tag{3.16}$$

ここで，j を十分大きく（具体的には 4 以上に）とれば，$A-\sqrt{3}>0$ にできる。然らば (3.16) 右辺で，$A+\sqrt{3}$ を $A-\sqrt{3}$ で置き換えれば

$$E_0\left(\frac{6j}{\pi}\right)^{2/3} - \epsilon_1 \ \ge\ E_0(A-\sqrt{3})^2 = E_0\left(\left(\frac{6x}{\pi}\right)^{1/3}-\sqrt{3}\right)^2 \qquad (j\ge 4) \tag{3.17}$$

のように下から押さえられる[*8]。結局，(3.15) は

$$\epsilon_-(j) \ \le\ \tilde{\epsilon}_j \ \le\ \epsilon_+(j) \qquad (j\ge 4) \tag{3.18}$$

に帰着したわけである。ただし，

$$\epsilon_\pm(x) := E_0\left(\left(\frac{6x}{\pi}\right)^{1/3} \pm \sqrt{3}\right)^2 \tag{3.19}$$

とした[*9]。

ここでようやく，$f_{\beta,m}(x)$ が登場する。$f_{\beta,m}(\epsilon)$ は ϵ の減少関数だから，(3.18) 全体に $f_{\beta,m}$ を「かぶせる」と不等号が逆転し，

$$f_{\beta,m}(\epsilon_+(j)) \ \le\ f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) \ \le\ f_{\beta,m}(\epsilon_-(j)) \qquad (j\ge 4) \tag{3.20}$$

となる。

ここで例の「上下から積分で押さえるやつ」をやる。まず区間 $[j, j+1]$ に注目すると，(3.20) 左側の不等式と，$f_{\beta,m}(\epsilon)$ が減少関数であることから，

$$\int_j^{j+1} dx\ f_{\beta,m}(\epsilon_+(x)) \ \le\ f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) \tag{3.21}$$

[*7] ここからが，「[田崎 $+\alpha$]」の部分。

[*8] 「最終的に示すべき式 (3.3) は j=2 からの和なのに，j の範囲はこれでいいのか？」と思うかもしれない。だが最終的に，和の最初の有限項は $V\to\infty$ で必ず 0 に収束する。よって $j\ge 4$ だろうが $j\ge 100$ だろうが，とにかく「ある n 以上」で成り立てば問題ないのだ。

[*9] ここからまた [2] と同じ。ただし，$\epsilon_-(x)$ の定義が（先ほどの「方針」とも）微妙に変わっている。

が言える。同様に，今度は区間 $[j-1,j]$ に注目すると，(3.20) 右側の不等式から，

$$f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) \ \leq \ \int_{j-1}^{j} dx\ f_{\beta,m}(\epsilon_-(x)) \qquad (j \geq 5). \tag{3.22}$$

脚注 4 @でも述べたとおり，積分区間内で $f_{\beta,m}$ の引数が 0 になるとまずく，そうならないためには $j \geq 5$ であればよい（少なくとも，$j=1$ でまずいことは明らかであろう）。

(3.21), (3.22) をまとめて，$j=5$ から和をとると，

$$\frac{1}{V}\int_5^\infty dx\ f_{\beta,m}(\epsilon_+(x)) \ \leq \ \frac{1}{V}\sum_{j=5}^{\infty} f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) \ \leq \ \frac{1}{V}\int_4^\infty dx\ f_{\beta,m}(\epsilon_-(x)) \tag{3.23}$$

を得る（V で割った）。さらに $\epsilon_\pm(x)$ の逆関数を $\Omega_\pm(\epsilon)$ と書き（先ほどの $\Omega_\pm(\epsilon)$ とは**微妙に違う！**）[*10]，$x = \Omega_\pm(\epsilon)$ とおいて置換積分すれば，

$$\frac{1}{V}\int_{\epsilon_+(5)}^\infty d\epsilon\ \frac{d\Omega_+(\epsilon)}{d\epsilon}\ f_{\beta,m}(\epsilon) \ \leq \ \frac{1}{V}\sum_{j=5}^{\infty} f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) \ \leq \ \frac{1}{V}\int_{\epsilon_-(4)}^\infty d\epsilon\ \frac{d\Omega_-(\epsilon)}{d\epsilon}\ f_{\beta,m}(\epsilon) \tag{3.24}$$

となる。

あとは，この右辺と左辺が $V\to\infty$ で (3.3) 右辺に収束することを示せばよいから，ここから

$$\frac{1}{V}\int_{\epsilon_\pm(a)}^\infty d\epsilon\ \frac{d\Omega_\pm(\epsilon)}{d\epsilon}\ f_{\beta,m}(\epsilon) \tag{3.25}$$

を一気に処理してしまおう（a は 4 か 5）。まず $\Omega_\pm(\epsilon)$ の導関数を計算すると，

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V}\ \frac{d\Omega_\pm(\epsilon)}{d\epsilon} &= \frac{1}{V}\ \frac{d}{d\epsilon}\ \frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}} \pm \sqrt{3}\right)^3 \\
&= \frac{1}{V}\frac{d}{d\epsilon}\ \frac{\pi}{6}\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^{3/2} + \frac{1}{V}\frac{d}{d\epsilon}\left((const.)\frac{\epsilon}{E_0} + (const.)\sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}} + (const.)\right) \\
&= \nu(\epsilon)\ +\ (const.)\ \frac{1}{VE_0}\ +\ (const.)\ \frac{1}{V\sqrt{\epsilon E_0}}.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

最後の行で，$\nu(\epsilon)$ の定義 (3.2) を使った。第 1 項以外は，0 に収束することさえ示せばよいので定数は気にしない（ただし，E_0 には V 依存性があるので注意）。

これを (3.25) に代入すれば，

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V}\int_{\epsilon_\pm(a)}^\infty d\epsilon\ \frac{d\Omega_\pm(\epsilon)}{d\epsilon}\ f_{\beta,m}(\epsilon) = \int_{\epsilon_\pm(a)}^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon)\ f_{\beta,m}(\epsilon)\ +\ \frac{(const.)}{VE_0}\int_{\epsilon_\pm(a)}^\infty d\epsilon\ f_{\beta,m}(\epsilon) \\
+\ \frac{(const.)}{V\sqrt{E_0}}\int_{\epsilon_\pm(a)}^\infty d\epsilon\ \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\ f_{\beta,m}(\epsilon)
\end{aligned} \tag{3.27}$$

となる。$\epsilon_\pm(a) \sim E_0 \sim L^{-2}$ だから，右辺第 1 項が $V\to\infty$ で (3.3) 右辺に収束することは明らかだろう[*11]。残りの項が 0 に収束することを示せば，全てが終わる。

[*10] 実際逆に解いてやると，

$$\Omega_\pm(\epsilon) = \frac{\pi}{6}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}} \mp \sqrt{3}\right)^3$$

を得る。

[*11] ここで m が定数だったことが利いてくる。もしこれが V 依存性を持っていたら，本当に収束するか怪しくなってしまう！

(3.27) 右辺第 2 項の評価

$f_{\beta,m}(\epsilon)$ の具体形を代入し，$E_0 \sim L^{-2}$ を用いれば，評価すべき式は

$$(\mathrm{I}) := \frac{1}{L}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon\ \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-m)}-1}$$

となる（定数は省略)。これは明らかに正なので*12，上から押さえて評価すればよい。$m \le 0$ だから，m は 0 で置き換えてしまう。さらに，後のために積分範囲を $[\epsilon_\pm(a), 1]$ と $[1, \infty)$ に分割し，

$$(\mathrm{I}) \ \le\ \frac{1}{L}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{1} d\epsilon\ \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1}\ +\ \frac{1}{L}\int_{1}^{\infty} d\epsilon\ \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1}$$

としておく。

この第 2 項の積分範囲では $\epsilon \ge 1$ だから，被積分関数に $\sqrt{\epsilon}$ を掛けても問題なかろう。また第 1 項では，$e^{\beta\epsilon}-1$ を $\beta\epsilon$ で置き換えれば上から押さえられ，

$$\begin{aligned}(\mathrm{I}) \ &\le\ \frac{1}{L}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{1} d\epsilon\ \frac{1}{\beta\epsilon}\ +\ \frac{1}{L}\int_{1}^{\infty} d\epsilon\ \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta\epsilon}-1} \\ &\le\ (const.)\ \frac{\ln\epsilon_\pm(a)}{L}\ +\ \frac{1}{L}\int_{0}^{\infty} d\epsilon\ \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta\epsilon}-1}\end{aligned} \tag{3.28}$$

となる。第 2 項の積分は，被積分関数が正であることを使って下限を 0 まで延長した。

(3.28) 第 1 項は，$\epsilon_\pm(a) \sim L^{-2}$ より $\ln L/L$ の形になるから，$V \to \infty$ で 0 に収束。また第 2 項の積分はおなじみで，$(1/L)\times$(有限確定) だから第 2 項もやはり 0 に収束する。

結局，$V \to \infty$ で (I)$\to 0$ が示された。

(3.27) 右辺第 3 項の評価

先ほど同様 $f_{\beta,m}(\epsilon)$ の具体形を代入し，$E_0 \sim L^{-2}$ を用いれば，評価すべき式は

$$(\mathrm{II}) := \frac{1}{L^2}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon\ \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-m)}-1}$$

となる（定数は省略)。これも明らかに正だから，上から押さえて評価する。先ほど同様，m は 0 で置き換えて，

$$(\mathrm{II}) \ \le\ \frac{1}{L^2}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon\ \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1}.$$

さらに先ほど同様，$e^{\beta\epsilon}-1$ を $\beta\epsilon$ で置き換えれば，

$$\begin{aligned}(\mathrm{II}) \ &\le\ \frac{1}{L^2}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon\ \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\frac{1}{\beta\epsilon} \\ &=\ \frac{(const.)}{L^2}\int_{\epsilon_\pm(a)}^{\infty} d\epsilon\ \epsilon^{-3/2} \\ &=\ \frac{(const.)}{L^2}\frac{1}{\sqrt{\epsilon_\pm(a)}} \\ &=\ \frac{(const.)}{L}\ \to\ 0 \quad (\text{for } V \to \infty).\end{aligned}$$

*12 省略した定数の符号は関係ない。

よって，$V \to \infty$ で (II)$\to 0$ が示された。

結局，(3.27) 右辺は $V \to \infty$ で

$$\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,m}(\epsilon)$$

に収束する。然らば (3.24) より，

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \sum_{j=5}^{\infty} f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) = \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,m}(\epsilon). \tag{3.29}$$

ところで，@のときと同様の議論により，$j \geq 2$ について $f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j)/V \to 0$ が示せる[*13]。よって (3.29) 左辺の和は $j = 2$ からとっても何ら問題なく，そうしたものがまさに (3.3) であるから，補題は示された。（証明終）

*13

$$\frac{1}{V} f_{\beta,m}(\tilde{\epsilon}_j) = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\epsilon}_j - m)} - 1} \leq \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \epsilon_1)} - 1} \leq \frac{1}{V} \frac{1}{\beta(\epsilon_j - \epsilon_1)} \sim \frac{1}{VE_0} \sim \frac{1}{L} \to 0.$$

3.2　補題 2 の証明

補題 2（再掲）

次の関数は,（他のパラメータを固定し，μ のみの関数と見るとき）$\mu \leq 0$ で連続。

$$g(\mu) := \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu}(\epsilon)$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu}(\epsilon) &= (const.)\int_0^\infty d\epsilon\ \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} \\ &= (const.)\int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-\beta\mu}-1}\end{aligned}$$

であるから，簡約のため

$$\eta(x) := \int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-x}-1}$$

が $x \leq 0$ で連続であることを示せば十分であろう*14。

証明

$x < 0,\ a \leq 0$ とするとき，$x \to a$ で $|\eta(x) - \eta(a)| \to 0$ を示す。

$$\begin{aligned}|\eta(x)-\eta(a)| \ &\leq \ \int_0^\infty du\ \ \left|\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-x}-1} - \frac{\sqrt{u}}{e^{u-a}-1}\ \right| \\ &= \int_0^\infty du\ \sqrt{u}\ \ \left|\ \frac{e^{u-a}-e^{u-x}}{(e^{u-x}-1)(e^{u-a}-1)}\ \right| \\ &= \int_0^\infty du\ \sqrt{u}\ e^u\ \frac{|\ e^{-a}-e^{-x}\ |}{(e^{u-x}-1)(e^{u-a}-1)} \\ &= |\ e^{-a}-e^{-x}\ | \int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-a}-1}\ \frac{1}{e^{-x}-e^{-u}}.\end{aligned} \tag{3.30}$$

最後の式をよく見ると，再び

$$\int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-a}-1}$$

という形の積分が出てきそうな状況であることに気づくだろう。今後，この積分が $a \leq 0$ で有限値に収束することをフルに活用して証明を進める。

(i)$a < 0$ の場合

$u \geq 0$ より $e^{-u} \leq 1$ であるから，(3.30) で e^{-u} を 1 で置き換えると上から押さえられ*15,

$$|\eta(x)-\eta(a)| \ \leq \ \frac{|\ e^{-a}-e^{-x}\ |}{e^{-x}-1}\int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^{u-a}-1} \tag{3.31}$$

*14 @この $\eta(x)$ は，[2]10-4 節（理想 Bose 気体）に出てくる $\eta(x)$（p.398）と同じものである。

*15 厳密に言うと，広義積分であるから $u > 0$ だが，極限（積分の下限 $\to 0$）をとると”$<$”が”$\leq$”に変わり，(3.31) を得る。

を得る。右辺の積分は x によらない有限値である。$x \to a$ とすれば，積分の前の分母は $e^{-a}-1\ (>0)$ に収束し，分子は 0 に収束するから，(3.31) 右辺全体は 0 に収束する。よって $|\eta(x)-\eta(a)| \to 0$ が示された。

(ii)$a=0$ の場合

(3.30) で $a=0$ とすると，

$$|\eta(x)-\eta(0)| \ \leq\ (e^{-x}-1)\int_0^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^u-1}\ \frac{1}{e^{-x}-e^{-u}}$$

となる。

これは一筋縄ではいかない。先ほどのように e^{-u} を 1 で置き換えると，今度は手前の $(e^{-x}-1)$ がキャンセルされてしまい，$x \to 0$ で 0 に収束してくれないからだ。

そこで，ちょっとした小細工が要る。まず $\delta > 0$ を任意にとり，積分範囲を $(0,\delta]$ と $[\delta,\infty)$ に分ける。

$$\begin{aligned}|\eta(x)-\eta(0)| \ \leq\ & (e^{-x}-1)\int_0^\delta du\ \frac{\sqrt{u}}{e^u-1}\ \frac{1}{e^{-x}-e^{-u}} \\ & +(e^{-x}-1)\int_\delta^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^u-1}\ \frac{1}{e^{-x}-e^{-u}}.\end{aligned}$$

右辺第 1 項は，先ほど同様 e^{-u} を 1 で置き換える。さらに第 2 項では，u を積分の下限 δ で置き換える。すると

$$|\eta(x)-\eta(0)| \ \leq\ \int_0^\delta du\ \frac{\sqrt{u}}{e^u-1} \ +\ \frac{e^{-x}-1}{e^{-x}-e^{-\delta}}\int_\delta^\infty du\ \frac{\sqrt{u}}{e^u-1} \tag{3.32}$$

となる。例によって，右辺の積分はどちらも有限確定である。

右辺第 1 項は $\delta \to 0$ で 0 に収束する[*16]から，$\delta > 0$ を十分小さくとりさえすれば任意に（例えば $\varepsilon/2$ より）小さくできる。そうして δ が決まった後で，x を十分 0 に近くとれば[*17]，第 2 項も任意に（例えば $\varepsilon/2$ より）小さくできる（何故なら，$x \to 0$ で第 2 項は 0 に収束)。

よって，x を十分 0 に近くとれば (3.32) 右辺全体を任意に（任意の $\varepsilon > 0$ より）小さくできるから，$x \to 0$ で右辺は 0 に収束。従って $|\eta(x)-\eta(0)|$ も 0 に収束する。

結局，任意の $x = a(\leq 0)$ で $\eta(x)$ は連続である。補題は示された。（証明終）

[*16] 広義積分であるから，

$$\lim_{\delta\to+0}\int_0^\delta = \lim_{\delta\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int_\varepsilon^\delta = \lim_{\delta\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\left(\int_\varepsilon^R - \int_\delta^R\right) = \int_0^R - \int_0^R = 0.$$

[*17] 正確に言うなら，$\varepsilon > 0$ に対応するある正数より $|x|$ が小さいようにとれば

3.3 定理の証明

補題を示すだけで随分とかかったが，ここまで来れば終わったも同然である。

定理（積分近似の正当性）（再掲）

$$\lim_{V\to\infty}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j) = \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu}(\epsilon).$$

ただし，$\mu(V)$ は有限体積系の化学ポテンシャルであり，μ はその $V\to\infty$ での極限である。

証明

まず,

$$\tilde{\mu}(V) := \mu(V) - \epsilon_1 \tag{3.33}$$

と定義する。このとき $\epsilon_j - \mu(V) = \tilde{\epsilon}_j - \tilde{\mu}(V)$ であるから,

$$f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j) = f_{\beta,\tilde{\mu}(V)}(\tilde{\epsilon}_j) \tag{3.34}$$

と書ける。特に $j=1$ の占有数

$$\frac{1}{e^{-\beta\tilde{\mu}(V)}-1}$$

が非負の有限値でなければならないという要請から,

$$\tilde{\mu}(V) < 0 \tag{3.35}$$

という条件を得る。また，$V\to\infty$ で $\epsilon_1 \to 0$ だから,

$$\tilde{\mu}(V) \to \mu \quad (\text{for } V\to\infty). \tag{3.36}$$

然らば (3.35) より,

$$\mu \le 0 \tag{3.37}$$

を得る。以下，この μ について場合分けをする。

<u>(i)$\mu < 0$ の場合</u>

$\tilde{\mu}(V) \to \mu < 0$ (for $V\to\infty$) である。極限の意味から，$0<\delta<-\mu$ なる任意の δ に対して V を十分大きくとれば,

$$\mu-\delta \ < \ \tilde{\mu}(V) \ < \ \mu+\delta \ < 0 \tag{3.38}$$

とできる。$f_{\beta,\mu}(\tilde{\epsilon}_j)$ は μ の増加関数だから，(3.38) にこれを「かぶせる」と,

$$\frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu-\delta}(\tilde{\epsilon}_j) \ \le \ \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\tilde{\mu}(V)}(\tilde{\epsilon}_j) \ \le \ \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu+\delta}(\tilde{\epsilon}_j) \tag{3.39}$$

となる。(3.34) より，真ん中の $\tilde{\epsilon}_j$，$\tilde{\mu}(V)$ は ϵ_j，$\mu(V)$ に置き換えられる。また左辺と右辺を見ると，$\mu \pm \delta$ は V によらない負の（(3.38) より）定数だから，補題 1 が使える！　早速 (3.39) で $V \to \infty$ とすれば，

$$\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu-\delta}(\epsilon)\ \le\ \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j)\ \le\ \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu+\delta}(\epsilon) \tag{3.40}$$

を得る。ところで δ は（$0 < \delta < -\mu$ なる範囲で）任意だったから，(3.40) 左辺と右辺は補題 2 より $\delta \to 0$ で

$$\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu}(\epsilon)$$

に収束する。然らば真ん中の辺もこれに等しくなければならず，主張が成り立つ*18。

(ii)$\mu = 0$ の場合

先ほど同様，$\delta > 0$ を任意にとれば，十分大きな V に対して

$$-\delta\ <\ \tilde{\mu}(V)\ < 0$$

が成り立つ（$\tilde{\mu}(V) < 0$ は (3.35) より）。あとはまた $f_{\beta,\mu}(\tilde{\epsilon}_j)$ を「かぶせ」て，

$$\frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,-\delta}(\tilde{\epsilon}_j)\ \le\ \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j)\ \le\ \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,0}(\tilde{\epsilon}_j)$$

を得る（ただし (3.34) を使った)。$\mu - \delta$ も 0 も非正の定数であるから，$V \to \infty$ とすれば補題 1 より，

$$\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,-\delta}(\epsilon)\ \le\ \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j)\ \le\ \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,0}(\epsilon). \tag{3.42}$$

$\delta > 0$ は任意だったから，先ほど同様 $\delta \to 0$ とすれば，補題 2 より左辺は右辺に収束する。然らば真ん中は右辺に等しいから，やはり主張が成り立つ。

結局，任意の $\mu \le 0$ で主張が成り立つ。定理は示された。（証明終）

*18 (3.40) では，簡単のため

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j) \tag{3.41}$$

という極限の存在を暗に仮定してしまったが，この仮定は必要ない。何故なら，(3.39) 左辺と右辺は収束するから (3.41) は上下に有界で，従って上極限・下極限（[3] 参照）が存在し，

$$\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu-\delta}(\epsilon)\ \le\ \varliminf_{V\to\infty} \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j)\ \le\ \varlimsup_{V\to\infty} \frac{1}{V}\sum_{j=2}^{\infty} f_{\beta,\mu(V)}(\epsilon_j)\ \le\ \int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon) f_{\beta,\mu+\delta}(\epsilon)$$

が言える。ここで $\delta \to 0$ とすれば，所望の結果を得る。また，このことは (3.42) についても同様である。

4　付録

4.1　自由粒子の Schrodinger 方程式の解と基本的な結果

4.2　状態数の評価（一般次元）

4.3　Bose-Einstein 関数

5　参考文献

[1] 田崎晴明：『統計力学 I』（培風館）[2] 田崎晴明：『統計力学 II』（培風館）[3] 高木貞治：『解析概論　改訂第三版（軽装版）』（岩波書店）