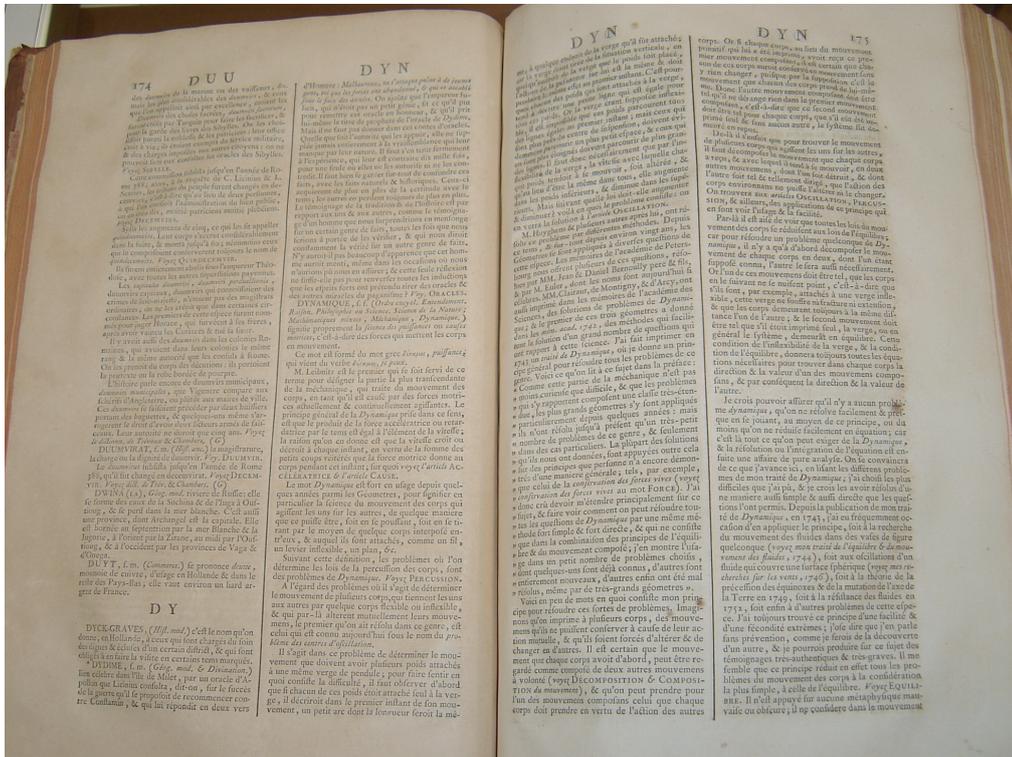


初級物理学要論

一力学・解析力学, 相対論, 古典電磁気学一 一量子力学, 熱・統計力学



「百科全書 (初版)」Dynamique (動力学) の頁 (高知大学附属図書館蔵)

高知大学理学部理学科物理科学

津江保彦*

*© Yasuhiko TSUE ホームページは, <http://www.cc.kochi-u.ac.jp/~tsue/>

はじめに

自然現象、自然法則[†]を理解するためには物理学、具体的には力学・解析力学、電磁気学・相対性理論、流体力学・連続体力学、量子力学・場の量子論、熱力学・統計力学などを学んでいく必要がある。本書は、変分原理から構成される初級の物理学に関して記したものである。従って、ここでは、力学・解析力学、電磁気学・相対性理論、量子力学、熱・統計力学の初歩を学ぶことが目的とされている。題材が絞られている理由としては、少数の原理—その一つとして最小作用の原理を採用する—からの首尾一貫した理論構成が目指されているためである。

実験事実としては、初めに“粒子と波の二重性”を採る。物質粒子には波動性が伴われることが、外村彰氏により実験事実として明確に提示されている。この事実から、理論的にはファインマンの経路積分を経由して、分子、原子、原子核の世界に導く量子力学が構成される。我々が目にする通常の世界像へ進むには、経路積分から得られる、作用が最小という条件、いわゆる最小作用の原理を認めることとすれば良い。最小作用の原理にガリレイの相対性原理を加えれば通常の非相対論的な力学が構成され(2章)、ガリレイの相対性原理の代わりにアインシュタインの相対性原理を課せば、特殊相対性理論の世界が構築される(13章)。ゲージ原理を加えれば電磁気現象が記述できる(13章)。さらに、一般相対性理論に辿り着くには一般座標変換に対する理論の不変性を課せば良い(14章)。このようにして得られた物理理論の正否は実験により検証される。また、理論に現れる物理定数、プランク定数： \hbar 、光速： c 、万有引力定数： G 、素電荷： e を決定するためにも実験が必要である。

ここでは物理学の理論的な側面に焦点を当てるので、実験的な事柄は対象外とするが、物理学は自然科学であるので、実験・観測は、あらためて言うまでもないことではあるがきわめて重要であることを付言しておこう。

第 I 部では、まず実験事実としての粒子と波動の二重性から、ファインマンの経路積分を導く。この形式により量子力学的な世界である極微の世界を記述できるが、我々の知っている通常の世界—古典力学的世界—を近似的に記述するため、この記述法から古典的世界のみ扱う方法を述べる。これをもとに、解析力学と呼ばれる体系を見ていこう。

第 II 部では、古典的世界の様相、(古典)力学により記述される物理現象を記述する。物体の速さが光速度に近づいた場合には相対性理論が必要となるので、併せて第 III 部で簡単に見ておく。

第 IV 部では電磁気学の初歩を見ておこう。

第 V 部では第 I 部で触れた量子力学を、シュレーディンガー形式で記述し、量子力学的世界を垣間見よう。

第 VI 部では、解析力学で述べられるリュービルの定理を基にして、簡単に熱・統計力学の初歩を見ておく。

第 VII 部では物理学によく現れるリー代数と、その応用例としてのクォーク模型を記述する。

[†]寺田寅彦は一貫して「方則」と記していたが、ここでは通常の表記に従おう。

目次

1 章	粒子と波の二重性	3
§1.1	二重スリットの実験	3
§1.2	波の伝播とファインマン (Feynman) の経路積分	4
§1.3	古典物理学における最小作用の原理	6
2 章	最小作用の原理	7
§2.1	最小作用の原理とオイラー・ラグランジュ方程式	7
§2.2	空間の一様性・等方性と慣性の法則	8
§2.3	質点系のラグランジアン構成	9
§§2.3.1	ガリレイの相対性原理	9
§§2.3.2	自由粒子のラグランジアン	9
§§2.3.3	相互作用する質点系とニュートン方程式	10
§§2.3.4	拘束系の扱い	11
§2.4	作用・反作用の法則	11
§2.5	長い註	12
§§2.5.1	運動の記述	12
§§2.5.2	単位系	14
3 章	対称性と保存則	15
§3.1	運動量	15
§3.2	角運動量	16
§3.3	エネルギー	17
§3.4	ネーターの定理	18
§§3.4.1	空間並進対称性と運動量保存則	19
§§3.4.2	空間回転対称性と角運動量保存則	20
§§3.4.3	時間並進対称性とエネルギー保存則	20
§3.5	力学的相似則	20
§§3.5.1	地表付近での落体運動	21
§§3.5.2	振り子の等時性	22
§§3.5.3	ケプラーの第3法則	22
§3.6	ビリアル定理	22
§§3.6.1	ビリアル定理	22
§§3.6.2	ビリアル定理の適用例	23
4 章	ハミルトン形式	25
§4.1	ハミルトン方程式	25
§4.2	ポアソン括弧とハミルトン方程式	26
§4.3	正準変換	27
§§4.3.1	正準変換の例	29
§4.4	保存量と対称性	32
§§4.4.1	運動量と並進	32
§§4.4.2	角運動量と回転	32

§ 4.5 関数としての作用	33
§§4.5.1 一般化座標微分と一般化運動量	33
§§4.5.2 時間微分とエネルギー	35
§§4.5.3 簡約化された作用	36
§ 4.6 ハミルトン・ヤコビ方程式	36
§§4.6.1 振動	37
§ 4.7 リュービルの定理	39
5 章 物質粒子の波動性—量子力学—	42
§ 5.1 アインシュタイン・ドブロイの関係	42
§ 5.2 シュレーディンガー方程式	43
§ 5.3 重ね合わせの原理	45
§ 5.4 波動関数の確率解釈	46
§§5.4.1 波動関数の確率解釈	46
§§5.4.2 物理量とエルミート演算子	47
§§5.4.3 物理量の期待値	48
§§5.4.4 確率の流れの密度と確率の保存	49
§ 5.5 古典力学との対応	50
§§5.5.1 エーレンフェスト (Ehrenfest) の定理	50
§§5.5.2 半古典近似	51
6 章 地上物体の運動	55
§ 6.1 質量のある物体間に働く力に関する観測事実	55
§§6.1.1 地上物体の運動の実験事実	55
§§6.1.2 惑星運行の観測事実と万有引力の法則	55
§§6.1.3 地表面付近の重力場	58
§ 6.2 地表面付近の運動	59
§§6.2.1 自由落下	59
§§6.2.2 単振り子	59
§§6.2.3 大気から速さ v に依存した抵抗を受けて自由落下する質点	60
7 章 中心力の問題—惑星運動の解析—	63
§ 7.1 角運動量保存則の役割	63
§ 7.2 中心力場のもとでの運動	64
§ 7.3 ケプラー問題	65
§ 7.4 逆 2 乗力問題再考	67
8 章 粒子の散乱	68
§ 8.1 2 体問題と換算質量	68
§ 8.2 散乱角	69
§ 8.3 散乱断面積	69
§ 8.4 ラザフォード散乱	71

9章 振動	73
§9.1 単振動	73
§9.2 減衰振動	74
§9.3 強制振動	75
§9.4 摩擦のあるときの強制振動	77
§9.5 パラメータ共鳴	78
§9.6 多自由度系での微小振動	80
§9.7 連続体の振動	82
10章 波動現象	85
§10.1 波動方程式	85
§10.2 振動数・波長	86
§10.3 音波	87
§10.4 弾性棒を伝わる波	88
§10.5 弦を伝わる波	89
11章 流体の運動方程式	90
§11.1 流体の運動方程式	90
§11.2 完全流体の場合	91
12章 剛体の回転	92
§12.1 回転の表現	92
§§12.1.1 回転の行列表示	92
§§12.1.2 リー群とリー代数	94
§§12.1.3 無限小回転と回転の生成子	98
§§12.1.4 回転の2価表現	99
§§12.1.5 オイラーの定理とオイラー角	102
§12.2 剛体の角速度・慣性テンソル・角運動量	104
§§12.2.1 剛体	104
§§12.2.2 角速度	104
§§12.2.3 剛体の角運動量と慣性モーメント	105
§§12.2.4 剛体のラグランジアン	108
§12.3 剛体回転の運動方程式	108
§§12.3.1 剛体回転の運動方程式	108
§§12.3.2 剛体回転の例:対称コマの自由回転	109
§§12.3.3 剛体の釣り合い	111
§12.4 オイラーの運動方程式	111
§12.5 剛体の運動の例	112
§§12.5.1 地球の自転	112
§§12.5.2 一様な重力場内での対称コマの運動	112
§§12.5.3 逆立ちコマ	116
§12.6 非慣性基準系における運動	118
§§12.6.1 非慣性系における運動方程式	118
§§12.6.2 コリオリ力の例	120

13章 特殊相対論と電磁気学	125
§13.1 アインシュタインの特殊相対性原理とローレンツ変換	125
§§13.1.1 光速度不変の原理と同時刻の相対性	125
§§13.1.2 ローレンツ変換	126
§§13.1.3 ローレンツ変換からの帰結	128
§13.2 相対論的力学	130
§§13.2.1 最小作用の原理	130
§§13.2.2 運動量・エネルギー	131
§§13.2.3 一般のローレンツ変換	131
§§13.2.4 ローレンツスカラー・ベクトル・テンソル	133
§§13.2.5 ローレンツ群	133
§§13.2.6 元形式でのエネルギー、運動量	136
§§13.2.7 粒子の崩壊・融合・衝突	137
§13.3 電磁場中の粒子の力学	139
§§13.3.1 電磁場との相互作用	139
§§13.3.2 元形式での運動方程式	141
§§13.3.3 ゲージ不変性	141
§§13.3.4 電磁場の方程式	142
14章 一般相対論と重力場の方程式	145
§14.1 等価原理	145
§14.2 時空の幾何学	145
§§14.2.1 計量テンソル	145
§§14.2.2 一般座標変換	147
§§14.2.3 共変微分	148
§§14.2.4 曲率	151
§14.3 重力場の下での自由粒子の運動	153
§§14.3.1 測地線	153
§§14.3.2 重力場中の非相対論的近似	154
§§14.3.3 重力場中での時間の遅れ	154
§14.4 重力場の方程式	155
§§14.4.1 数学的準備	155
§§14.4.2 重力場の方程式	156
§14.5 弱い重力場・強い重力場	159
§§14.5.1 ニュートンの万有引力の法則	159
§§14.5.2 シュバルツシルト解	161
§§14.5.3 重力場による時間の遅れ	163
15章 数学的準備—ベクトル解析の初歩—	167
§15.1 勾配・発散・回転	167
§§15.1.1 スカラー場の勾配	167
§§15.1.2 発散と回転	168
§15.2 ベクトル場の積分定理	169

§§15.2.1 ガウスの定理	169
§§15.2.2 ストークスの定理	170
16章 電磁気学の基本法則	172
§16.1 真空中のマクスウェル方程式	172
§§16.1.1 電荷に関するクーロンの法則	172
§§16.1.2 単磁化の非存在	173
§§16.1.3 マクスウェル・アンペールの法則	173
§§16.1.4 ファラデーの電磁誘導の法則	175
§§16.1.5 幾つかの注意	175
§16.2 物質中での Maxwell 方程式	177
§§16.2.1 誘電分極	177
§§16.2.2 磁化	178
17章 マクスウェル方程式からの帰結	180
§17.1 静電場	180
§§17.1.1 電位	180
§§17.1.2 導体	180
§§17.1.3 コンデンサ	182
§17.2 定常電流と磁場	184
§§17.2.1 オームの法則	184
§§17.2.2 ジュール熱	186
§§17.2.3 コイルが作る磁場	187
§§17.2.4 ビオ・サバルの法則	187
§17.3 電磁誘導	189
§§17.3.1 相互誘導・自己誘導	189
§§17.3.2 ソレノイドに蓄えられるエネルギー	189
§§17.3.3 LCR 回路	190
18章 電磁波	191
§18.1 電磁波	191
§18.2 電磁波の進行方向	192
§18.3 電磁場のエネルギー	193
19章 量子力学の基礎方程式と数学的定式化	197
20章 不確定性関係	201
§20.1 交換関係と同時固有状態	201
§20.2 不確定性関係	201
21章 量子的世界の特徴	203
§21.1 無限に深い井戸型引力ポテンシャル	203
§21.2 有限の深さの井戸型引力ポテンシャル	205
§21.3 ポテンシャル障壁の反射と透過	209
§21.4 調和振動子の量子論	211

§§21.4.1 級数を用いた解法	211
§§21.4.2 エルミート多項式	213
§§21.4.3 生成消滅演算子による記述	215
22章 角運動量	218
§22.1 保存量	218
§§22.1.1 保存量	218
§§22.1.2 運動量と空間並進	218
§§22.1.3 角運動量と空間回転	219
§22.2 角運動量	220
§§22.2.1 角運動量演算子	220
§§22.2.2 固有値と固有関数	222
§§22.2.3 ルジャンドル多項式とルジャンドル陪多項式	225
§22.3 角運動量代数とスピン	228
§§22.3.1 角運動量代数	228
§§22.3.2 パウリスピン	232
§22.4 角運動量の合成	234
§22.5 一様な外部磁場中の粒子の運動	236
23章 水素原子	238
§23.1 水素型原子の固有値と固有関数	238
§23.2 ラゲール陪多項式と水素原子の波動関数	242
24章 多粒子系の扱い	243
§24.1 粒子が区別できる場合	243
§24.2 同種粒子の扱い	244
25章 近似法	248
§25.1 変分法	248
§§25.1.1 変分法とヘリウム原子	248
§§25.1.2 変分法と分子軌道論	251
§25.2 WKB 近似	254
§§25.2.1 WKB 近似での波動関数	254
§§25.2.2 ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件	256
§§25.2.3 ポテンシャル透過の WKB 近似	258
§25.3 摂動論	261
§§25.3.1 時間に依存しない摂動－縮退が無い場合－	261
§§25.3.2 時間に依存しない摂動－縮退が有る場合－	263
§§25.3.3 時間に依存する摂動	268
26章 量子力学的散乱	271
§26.1 2 粒子散乱の一般論	271
§§26.1.1 重心運動の分離	271
§§26.1.2 散乱位相差	272

§§26.1.3	平面波の球面波展開	276
§§26.1.4	散乱振幅	277
§§26.1.5	散乱微分断面積	278
§§26.1.6	数学的補遺-ベッセル関数-	280
§26.2	遅い粒子の散乱-散乱長と有効距離-	284
§§26.2.1	散乱長	284
§§26.2.2	有効距離	285
§26.3	弱い摂動としての散乱	286
§§26.3.1	ボルン近似	286
§§26.3.2	ラザフォード散乱	288
27章	相対論的粒子の方程式	289
§27.1	相対論的粒子の方程式	289
§27.2	径路積分再考	292
§§27.2.1	時間発展演算子と径路積分	292
§§27.2.2	配位空間での径路積分	294
§§27.2.3	正準量子化	295
§27.3	最小作用の原理と相対論的粒子の運動方程式	296
§27.4	場の量子化	298
§§27.4.1	生成消滅演算子	299
§§27.4.2	スカラー場の量子化	301
28章	熱力学の三法則	305
§28.1	粒子の確率分布	305
§28.2	エントロピー増大の法則と平衡状態	308
§28.3	熱力学第1法則	309
29章	カノニカル分布	311
§29.1	カノニカル分布	311
§29.2	マクスウェル分布	311
§29.3	ボルツマン分布	312
30章	自由エネルギー	313
§30.1	エンタルピー	313
§30.2	ヘルムホルツの自由エネルギー	313
§30.3	ギブスの自由エネルギー	314
§30.4	熱力学的過程の進む方向	314
§30.5	粒子数が変化する場合	315
§30.6	分配関数と自由エネルギー	317
§§30.6.1	カノニカル分布	317
§§30.6.2	グランドカノニカル分布	317
§30.7	熱力学的諸量の関係	318
§§30.7.1	マクスウェルの関係式	318
§§30.7.2	熱容量	319

§§30.7.3 熱力学的不等式	320
§30.8 最大仕事とカルノーサイクル	321
31章 相転移	323
32章 理想気体	327
§32.1 理想気体の状態方程式	327
§32.2 理想気体の状態方程式の力学的把握と非理想気体の状態方程式	328
§32.3 非理想気体の状態方程式—Van der Waals 方程式—	330
33章 いくつかの応用	333
§33.1 ジュール・トムソン過程	333
§33.2 ジュールの実験	333
§33.3 混合によるエントロピーの増加	334
§33.4 理想常磁性体	335
§33.5 熱電子放出	336
§33.6 熱電離	337
34章 量子統計	338
§34.1 フェルミ分布関数	338
§34.2 ボーズ分布関数	338
§34.3 自由フェルミ気体、自由ボーズ気体	339
§34.4 縮退したフェルミ気体	340
§34.5 縮退したボーズ気体	341
35章 リー代数とクォーク	345
§35.1 root (ルート) と weight (ウェイト)	345
§35.2 いくつかの言葉の定義	347
§35.3 具体例: $su(3)$ の場合	348
§35.4 ヤング図	352
§35.5 動的対称性	354
§§35.5.1 水素原子—Runge-Lenz-Pauli ベクトル—	355
§§35.5.2 次元調和振動子	356
§35.6 クォークモデル	359
§§35.6.1 量子数の導入	359
§§35.6.2 ハドロンの分類	360
§§35.6.3 クォークモデル	363
§§35.6.4 フレーバー・スピン $su(6)$	365
§§35.6.5 カラー自由度	367
§§35.6.6 応用例	368
§35.7 ゲージ理論	371
§§35.7.1 $u(1)$ ゲージ理論—電磁場の場合—	371
§§35.7.2 非可換ゲージ理論— $su(N)$ ゲージ対称性を持つ場合—	373

第I部 量子論・解析力学

1章 粒子と波の二重性

§1.1 二重スリットの実験

粒子には波動性が伴う。我々の日常のスケールでは殆ど感知され得ないのであるが、極微の世界では、粒子に伴う波動性は顕著に現れる。大きさを持たない点粒子であると考えられている基本粒子の一種である電子を考えよう。電子を観測する際には、必ず粒子—1個、2個と自然数で数えられるもの—として認識される。しかしながら、粒子には波動性が伴うのである。

二重スリットによる実験を見てみよう。概念的に図1に示したように、狭いスリットを開け衝立に向かって電子を1個ずつ入射する。衝立に1重にしかスリットを開けていない場合には、期待されるようにスリットの正面に電子は沢山やってくる(図1-1)。中には逸れてくるものもある。一つだけならばどこにスリットを開けても結果は同じである(図1-2)。

スリットを二重にする。2本のスリットを開けておき、電子を1個ずつ入射する。電子はそれぞれのスリットの正面に沢山やってきて、二つのピーク(山)が見られることが期待される。しかし、自然はそうならない。2つのスリットを対称に作っておくと、電子は2つのスリットの中間に一番沢山やってくる。そこから外れると電子のやってきた個数は減ってきて、ある場所では一つも来ない。さらに中心から離れるとまた電子がやってくる場所があり、やって来ない場所が現れる(図1-3)。これは、波の干渉現象と同じである。電子を一つずつ二重スリットに入射していくと、波の干渉縞が現れる。A.Tonomura(外村彰)等の美しい実験により、粒子に波動性が伴うことは自然が採用した事実であることが示された(図2)。

粒子に伴う波を、数学的に $\psi(\mathbf{r}, t)$ と表すことにしよう。ここで、 \mathbf{r} は位置座標、 t は時刻である。1番目のスリットを通った電子に伴う波を $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 、2番目のスリットを通った電子に伴う波を $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ としよう。一般に波は重ね合わせることができる。これを重ね合わせの原理と呼ぶ。したがって、1と2の二つのスリットを開けた場合の電子に伴う波 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は、 $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)$ と表わされる。

電子は波のように伝播し、電子を観測した時のパターンが $\psi(\mathbf{r}, t)$ で現れるのであろうか。そうであれば、2つのスリットを開けた場合には、 $\psi_1 + \psi_2$ となり、電子を観測した2つのパターンを単純に足したものとなっ

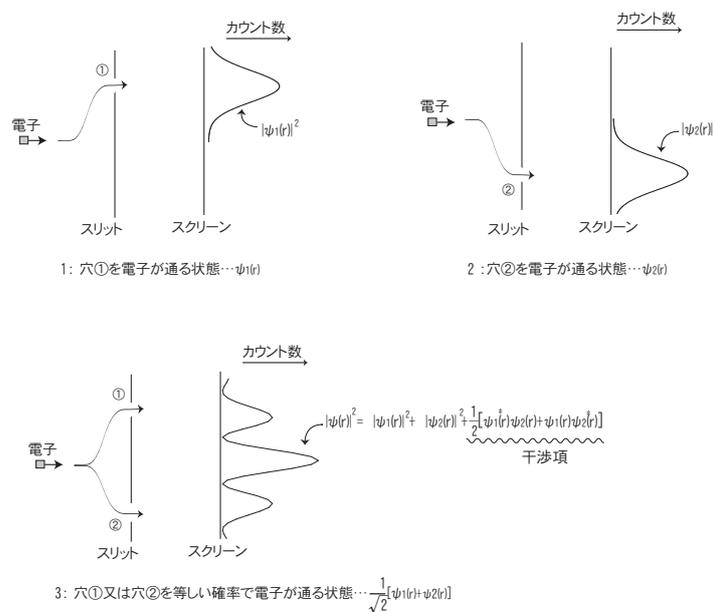


図 1:

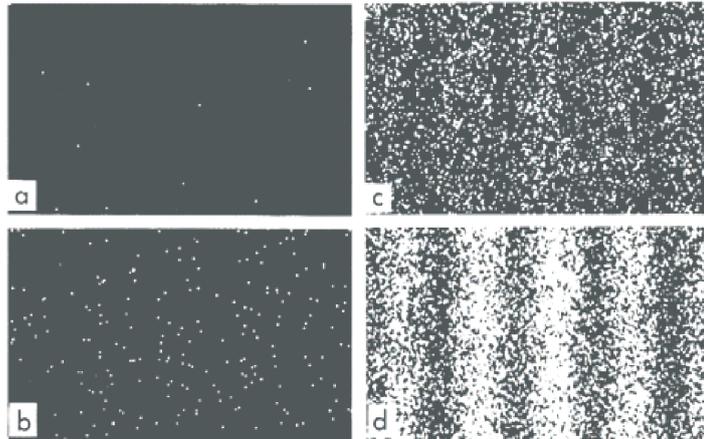


図 2: 2重スリットの実験。輝点は電子がスクリーンに到達した跡。(a)、(b)、(c)、(d)と時間が経過している。干渉縞がわかる。(A.Tonomura, et al., American Journals of Physics **57** (1989),117.)

てしまう。これは明らかにおかしい。そこで、電子を見出すパターンは、波動関数 ψ の絶対値の2乗、 $|\psi|^2$ と考える。関数 ψ が実数値関数とは限らないとして絶対値をとる。こうであれば、二重スリット実験では、電子を見出すパターンは $|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*$ となり、第3、4項が干渉パターンを与える。波動関数 ψ の絶対値の2乗が、粒子を時刻 t 、場所 \mathbf{r} で見出す確率密度と考えるのである。

§ 1.2 波の伝播とファインマン (Feynman) の径路積分

粒子には波動性が伴うことがわかった。今度は、この波がどのように伝播するかが、我々の知るべき次の問題となる。位置 \mathbf{r} での波は、過去に波面があったすべての場所 \mathbf{r}' から伝播された波によって生じる (図3)。これをホイヘンス (Huygens) の原理という。時刻 t にあった波 $\psi(\mathbf{r}', t)$ を素元波の種として、時刻 $t + dt$ に位置 \mathbf{r} で生じる波 $\psi(\mathbf{r}, t + dt)$ は、ホイヘンスの原理によれば

$$\psi(\mathbf{r}, t + dt) = \int d^3 \mathbf{r}' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt) \psi(\mathbf{r}', t) \quad (1.1)$$

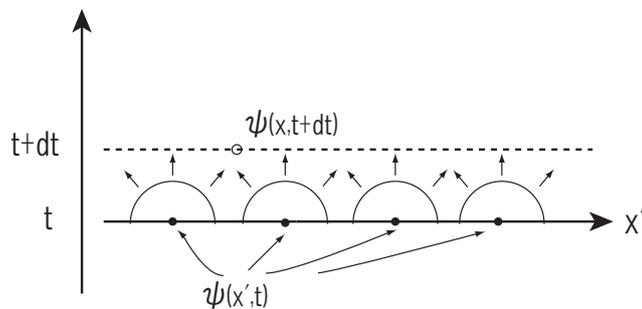


図 3:

と表わされる。ここで、 $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt)$ が、微少時間 dt の間の波の伝播を決定する。今、左辺の $\psi(\mathbf{r}, t + dt)$ も波動であるので、 $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt)$ も波動の形、しかも微少時間間隔なので平面波の形にとる。すなわち、

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt) = \mathcal{N} e^{iS(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt)/\hbar} \quad (1.2)$$

とおく。ここで、 \mathcal{N} はある規格化因子であり、後に決定しよう。 \hbar はある定数であり、 $S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt)$ は波の伝播を決定するある未知の関数である。時刻 t_0 から、有限の時間 T の後には、時間間隔 T を微小に分割し、 $dt = T/n$ として、伝播されていく波は (1.1) を繰り返し用いて

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t_0 + T) &= \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \cdots \int d^3\mathbf{r}_n K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; T/n) K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; T/n) \times \\ &\quad \cdots \times K(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n; T/n) \psi(\mathbf{r}_n, t_0) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \int d^3\mathbf{r}_i \mathcal{N} \cdot e^{iS(\mathbf{r}, \mathbf{r}_n; T)/\hbar} \psi(\mathbf{r}_n, t_0) \end{aligned} \quad (1.3)$$

と書ける。ただし、

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_n; T) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \{S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; T/n) + S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; T/n) + \cdots + S(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n; T/n)\} \quad (1.4)$$

と定義した。さらに、時間間隔 dt が微少であるときには、関数 $S(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; dt)$ は dt に線型であるとして

$$S(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; dt) \equiv L(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) dt \quad (1.5)$$

とおくと、先に定義した $S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_n; T)$ は積分の定義から

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_n; T) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \{L(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) + L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \cdots + L(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n)\} dt \\ &= \int_{t_0}^{t_0+T} L(\mathbf{r}(t)) dt \end{aligned} \quad (1.6)$$

と書ける。ただし、積分の上端と下端で、 $\mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_n$ 、 $\mathbf{r}(t_0 + T) = \mathbf{r}$ としている。

さて、我々は“粒子に伴う波動”のことを考察しているので、初めに“粒子”は位置 \mathbf{r}_0 に存在したとしよう。すなわち、時刻 t_0 で粒子は位置 \mathbf{r}_0 に確かに存在したとするのである。つまり、 $\mathbf{r}(t_0) (= \mathbf{r}_n) \equiv \mathbf{r}_0$ と固定する。このとき、(1.3) 式で、 \mathbf{r}_n 積分は行われず、

$$\psi(\mathbf{r}, t_0 + T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{n-1} \int d^3\mathbf{r}_i \mathcal{N} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0+T} L(\mathbf{r}(t)) dt\right) \psi(\mathbf{r}_0, t_0) \quad (1.7)$$

と書ける。

ここまでは、波の伝播や伝播を表す関数についての幾つかの物理的な洞察を用いてきたが、次に (1.7) に現われた積分について若干の考察を試みる。式 (1.7) の座標 \mathbf{r}_i に関する多重積分 $\prod_{i=1}^{n-1} \int d^3\mathbf{r}_i \mathcal{N}$ は、各時刻 $t = t_0 + (T/n) \times (n-i)$ という時間を固定して、その時刻での位置座標 $\mathbf{r}(t_0 + (T/n) \times (n-i)) \equiv \mathbf{r}_i$ について積分していく形になっている。同じ積分を時刻 $t = t_0$ での位置 $\mathbf{r}(t_0) \equiv \mathbf{r}_0$ と時刻 $t_0 + T$ での位置 $\mathbf{r}(t_0 + T) \equiv \mathbf{r}$ を固定して、“時間方向”に積分するように読み替えよう。すなわち、“あらゆる可能な粒子の取り得る径路 … 時間とともに辿る軌道 … についての積分”と捉えるのである。こうしても、積分範囲はすべて尽くされるであろう。こうして、規格化因子 \mathcal{N} まで含んだものとして、 $\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{n-1} \int d^3\mathbf{r}_i \mathcal{N} \rightarrow \int \mathcal{D}\mathbf{r}(t)$ と記し、“あらゆる径路 $\mathbf{r}(t)$ についての積分”と読み替えることにする (図 4)。こうして、(1.7) 式で表わされる“粒子に伴う波の伝播”は、粒子の取り得る径路 (軌道) $\mathbf{r}(t)$ についての積分として、

$$\psi(\mathbf{r}, t_0 + T) = \int \mathcal{D}\mathbf{r}(t) e^{iS(\mathbf{r}(t))/\hbar} \psi(\mathbf{r}_0, t_0) \quad (1.8)$$

$$S(\mathbf{r}(t)) \equiv \int_{t_0}^{t_0+T} L dt \quad (1.9)$$

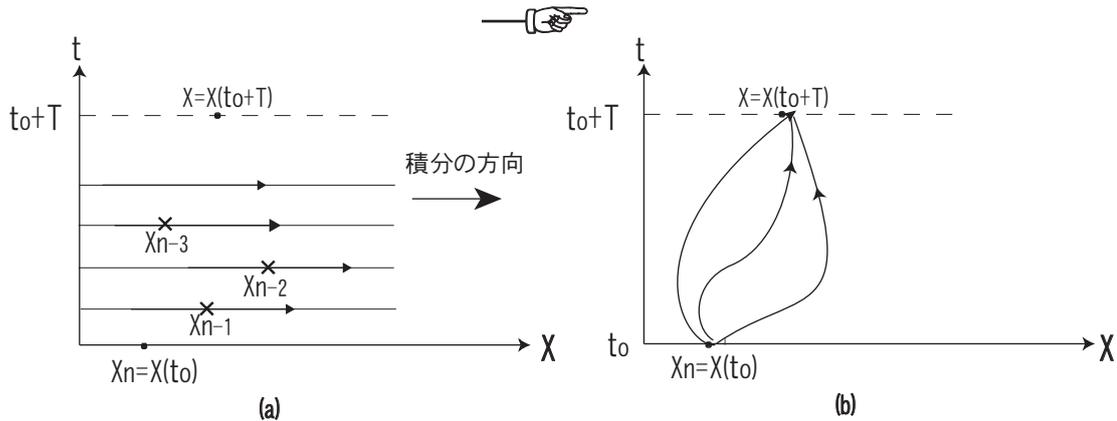


図 4:

となる。径路についてのこの積分は、ファインマン (Feynman) の径路積分と呼ばれる。

§ 1.3 古典物理学における最小作用の原理

前節では粒子に伴う波動の伝播を、粒子の取り得る軌道についての径路積分という形に定式化した。“粒子の取り得る軌道”と言及したが、粒子に伴う波を問題にする場合には積分の読み替えから、確かに“すべての軌道”についての積分が必要となる。しかしながら、粒子の波動性が顕著に現れてこない状況—古典物理学の世界と呼ばれる—では、あくまで、粒子の軌道はユニークに決まる。それを、古典軌道と呼ぼう。我々が通常目にする物体の運動である。

式 (1.8) に立ち戻ろう。時刻 t_0 に位置 \mathbf{r}_0 に存在した粒子は、時刻 $t_0 + T$ に位置 \mathbf{r} に居ることを表している。では、時間間隔 T のうちに \mathbf{r}_0 から \mathbf{r} まで、“古典粒子”は、とり得る可能な軌道のうち、どの軌道を辿って我々の目の前に立ち現れるのであろうか。

式 (1.8) では粒子の軌道 $\mathbf{r}(t)$ に関して、 $e^{iS(\mathbf{r}(t))/\hbar}$ という重みがかかって積分される形をとっている。一般には関数 $S(\mathbf{r}(t))$ は、粒子が $\mathbf{r}(t)$ と、時間とともに位置を変えて行くにつれ、値が変化するはずである。このとき、 $e^{iS(\mathbf{r}(t))/\hbar}$ は、その実部も虚部も、正負の値を取る三角関数としての振動関数であるので、粒子の位置座標の時間発展 $\mathbf{r}(t)$ とともに振動する。我々は、未知の定数 \hbar をあらかじめ理論に忍ばせておいた。この \hbar は実験で決めるべき物理定数であることを後に明らかにするが、実際には作用 (エネルギー×時間) の次元を持つ量であり、しかも我々のスケールからして極めて小さい値を取る。そこで、因子 $e^{iS(\mathbf{r}(t))/\hbar}$ は一般に激しく振動する。こうして、積分 $\int D\mathbf{r}(t) e^{iS(\mathbf{r}(t))/\hbar}$ は、殆どの“軌道” $\mathbf{r}(t)$ について、振動関数の積分として消えてしまう。唯一積分に寄与するのは、 S が最小になる軌道 $\mathbf{r}(t)$ のみである。関数 S を作用と呼ぶ。そこで、実現される古典軌道は、作用 S を最小とする軌道であり、これを、最小作用の原理として、基礎原理の一つに採用する。

2章 最小作用の原理

§2.1 最小作用の原理とオイラー・ラグランジュ方程式

我々が通常認識している物質粒子の古典軌道について、最小作用の原理から導出を行おう。前章で得られた知見を洗練しておこう。

ある物体の運動を記述するとき、その大きさを無視できる物体を質点と呼ぶことにする[†]。3次元空間に幾つかの質点が存在するとしよう。これを一つの系と呼ぶ。考えている系の質点の位置を決めるのに十分な任意の s 個の座標

$$q_1, q_2, \dots, q_s \quad (2.1)$$

のことを一般化座標と呼ぶ。また、一般化座標の時間導関数

$$\dot{q}_i \equiv \frac{dq_i}{dt}, \quad (i = 1, 2, \dots, s) \quad (2.2)$$

を、一般化速度と呼ぶ。

作用から L を定義した式 (1.5) では、 L はある時刻での粒子の位置 \mathbf{r}_i と、その dt 後の時刻での位置 $\mathbf{r}_{i+1} (= \mathbf{r}_j)$ の関数となっていた。そこで、 L は時刻 t での位置 $\mathbf{r}(t)$ と、速度 $\dot{\mathbf{r}}(t)$ の関数であるといえる。速度は、時刻 t と時刻 $t + dt$ での粒子の位置 $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_i$ と $\mathbf{r}(t + dt) = \mathbf{r}_{i+1}$ の差の関数であるからである[‡]。したがって、関数 L は一般化座標 $\{q_i\}$ と一般化速度 $\{\dot{q}_i\}$ の関数である。一般に、時間 t をあらわに含むことも許そう。関数 L をラグランジュ関数、または簡単にラグランジアン (**Lagrangian**) と呼ぶ。§1.3 で述べたように、系の古典的な軌道運動は、関数 S が最小値を取るような軌道 $q_i(t)$ として与えられる。最小作用の原理は以下のように纏められる：

最小作用の原理

時刻 $t = t_1$ 、 $t = t_2$ に、系の質点は位置座標 $q_i^{(1)}$ 、 $q_i^{(2)}$ ($i = 1, 2, \dots, s$) に居たとすると、これらの位置の間では、系は作用

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (2.3)$$

が最小の値 (実は極小) を取るように運動する。ここに、 $L(q, \dot{q}, t)$ をラグランジアンと呼ぶ。

次に、最小作用の原理に基づき、運動方程式を導出しよう。実際に実現する粒子の古典軌道を $q_i(t)$ とし、 $q_i(t)$ が満たすべき方程式を導く。最小作用の原理によれば、作用 S は軌道 $q_i(t)$ のとき極小値をとり、それ以外の軌道は積分 (1.8) に寄与しない。そこで、実際の古典軌道からずれた仮想的な軌道 $q_i(t) + \delta q_i(t)$ を考える。ただし、粒子は時刻 t_1 と t_2 では $q_i(t_1)$ 、 $q_i(t_2)$ に固定されており、したがって、 $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$ ととらねばならない。すなわち、始点と終点は固定したうえで、とり得る古典軌道を調べる。作用が極小であることから、軌道の変化分 $\delta q_i(t)$ のもとの、作用 S の第一変分は零である。すなわち、

$$\delta S \equiv \int_{t_1}^{t_2} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0$$

となる。 δq の1次までで

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt = 0$$

[†] 大きさのある物体から、大きさ零の極限を取った理想物体では無い。

[‡] $\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{T/n}$

となるが、第2項を時間について部分積分すると

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t=t_1}^{t=t_2} = 0$$

となる。ここで、 $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$ であったので、時間積分の境界項（上式中辺第2項）は消える。さらに、変分 $\delta q_i(t)$ は任意であるので、上式が成り立つためには、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (2.4)$$

が成り立たなければならない。これが、我々が求めたい古典軌道を与える粒子の運動方程式である。これをオイラー・ラグランジュ (Euler-Lagrange) 方程式と呼ぶ。

今後繰り返し言及される重要な註を与えておこう。ラグランジアンは一意的には決まらず、時間の完全導関数だけの不定性がある。すなわち、ラグランジアン L を

$$\bar{L}(q, \dot{q}, t) \equiv L(q, \dot{q}, t) + \frac{df(q, t)}{dt}$$

としても、新たな“ラグランジアン” \bar{L} から導出される運動方程式は同じである。ラグランジアン \bar{L} から得られる作用を \bar{S} とすると

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \int \bar{L} dt = \int L dt + \int \frac{df}{dt} dt \\ &= S + f(q^{(2)}, t_2) - f(q^{(1)}, t_1) \end{aligned}$$

となるが、第1変分をとると、 $\delta q^{(1)} = \delta q^{(2)} = 0$ (始点と終点は固定) であったので、

$$\delta \bar{S} = \delta S$$

が得られる[§]ことは容易に見て取れる。したがって、第1変分がゼロであることから得られる運動方程式は変わらないことがわかる。

§ 2.2 空間の一様性・等方性と慣性の法則

我々が認識している3次元空間には、特別な場所も方向もない。空間には特別な場所がなく、どこも一様であり、等方である。空間が一様かつ等方である座標系を慣性系と呼ぶ。ある慣性系に対して等速直線運動している別の座標系も慣性系である。

自由に運動している一つの質点を考えよう。空間の一様性から運動は特定の位置 \mathbf{r} に依存してはいけない。もしラグランジアンが \mathbf{r} に直接依存していれば、空間をずらして $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ とすれば、ラグランジアンが変わってしまい、運動が変化してしまう。このことは、運動はラグランジュ関数により決定されたので、ラグランジアンが座標 \mathbf{r} にあからさまに依存してはいけないことを意味する。したがって、ラグランジアンは速度 $\dot{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{v}$ の関数である。ところが、空間の等方性から、ラグランジアンはベクトルの向きに依存してはいけない。したがって、ラグランジアンは v^2 、すなわち速度の2乗の関数[¶]でなければならない。こうして、オイラー・ラグランジュの運動方程式 (2.4) は、 q_i を \mathbf{r} 、 $\dot{\mathbf{r}}$ を \mathbf{v} と書いて、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad \text{すなわち} \quad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \text{一定}$$

[§]境界で、 $\delta q^{(a)} = 0$ ($a = 1, 2$) であるので、 $\delta f(q^{(a)}) = \frac{\delta f(q^{(a)})}{\delta q^{(a)}} \delta q^{(a)} = 0$ から、境界での $f(q)$ の変分は0となる。

[¶]速度の大きさは、 $|\mathbf{v}| = \sqrt{v^2}$ のことであるから、速度の2乗の関数である。

となる。ラグランジアン L が v^2 の関数であるから、上式の第 2 式から、

$$\text{一定} = \frac{\partial L}{\partial v} = \frac{\partial L(v^2)}{\partial v^2} \cdot \frac{\partial v^2}{\partial v} = 2 \frac{\partial L}{\partial v^2} \cdot v$$

が得られるが、 $\partial L / \partial v^2$ もまた v^2 の関数となるので、結局、上の式から

$$v (= \dot{r}) = \text{一定}$$

が得られる。すなわち、慣性系では自由に運動する質点に関して、“ある時刻に静止していた ($v = 0$) 質点は静止を続け、一定の速度で運動していた質点はそのまま等速直線運動を続ける”ということの意味する。この事実を慣性の法則、またはニュートンの第 1 法則と言う。

§ 2.3 質点系のラグランジアン構成

§§2.3.1 ガリレイの相対性原理

空間が一様・等方となる座標系を慣性系と呼んだ。慣性系では慣性の法則が成り立ったが、慣性の法則の成り立つ慣性系は無数に存在する。ある慣性系に対して、等速直線運動する座標系もまた慣性系になる。時刻 $t = 0$ で 2 つの慣性系の原点は重なっていたとしよう。慣性系 K に対し、慣性系 K' は一定の速度 V で運動しているものとする。このとき、時刻 t で 2 つの慣性系を結ぶ変換は

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{V}t \quad (2.5)$$

となることを理解するのは容易であろう。ここでダッシュがついているのは K' 系での量である。両辺の時間微分をとると、2 つの慣性系での質点の速度の関係が得られる。

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{V} \quad (2.6)$$

慣性系は無数にあり、我々は特別な慣性系を持たない。そこで、すべての慣性系において力学法則は同一であることが期待される。これは、ガリレイの相対性原理と呼ばれる。式 (2.5) は、ガリレイ変換^{II}と呼ばれる。

§§2.3.2 自由粒子のラグランジアン

空間の一様性・等方性から、ラグランジアンは速度の 2 乗の関数であることがわかった。ここでは、ガリレイの相対性原理を用いて、自由粒子のラグランジアンを決定しよう。

ガリレイの相対性原理から、速度 V で互いに運動する 2 つの慣性系では力学法則は同一の形をとるはずである。すなわち、ラグランジアンから得られる運動方程式—オイラー・ラグランジュ方程式—は同一である。そのためには 2 つの慣性系でラグランジアンが全く同じである必要はない。§2.1 の終りに述べたように、両系のラグランジアンは、時間の完全微分だけは異なっても良い。ガリレイ変換から得られた (2.6) 式を用いると、ラグランジアンは質点の速度の 2 乗の関数であることから、

$$L(\mathbf{v}'^2) = L((\mathbf{v} - \mathbf{V})^2) = L(\mathbf{v}^2 - 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{V}^2)$$

となる。今、 V が小さいとしてみよう。このとき、テイラー展開により V の 2 次以上を無視する範囲で

$$L(\mathbf{v}'^2) \approx L(\mathbf{v}^2) - \frac{\partial L}{\partial v^2} 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}$$

^{II}ここでは 2 つの慣性系において、時間は同一 ($t' = t$) であることが陰に仮定されている。時間について吟味することにより、ガリレイ変換はローレンツ変換に、ガリレイの相対性原理はアインシュタインの (特殊) 相対性原理に読み替えられる。アインシュタインの相対性原理はより厳しく、“すべての慣性系において物理法則は同一である”ことを主張する。

となるが、両系のラグランジアンが時間の完全微分を除いて一致するには、右辺第2項の $\partial L/\partial \mathbf{v}^2 \cdot 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}$ が時間の完全微分であれば良い。速度 \mathbf{v} は $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ と時間の完全微分であり、両系間の速度 \mathbf{V} は時間に依存しないので、結局 $\partial L/\partial \mathbf{v}^2$ が時間に依存しなければ、

$$L(\mathbf{v}'^2) \approx L(\mathbf{v}^2) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}^2} 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{V} \right)$$

と書ける。すなわち、 $\partial L/\partial \mathbf{v}^2$ が時間に依存した速度 \mathbf{v} に依存しなければ成り立つ関係式である。これは、

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}^2} = \text{定数} \quad \text{すなわち} \quad L \propto \mathbf{v}^2 \quad (2.7)$$

ということの意味する。ここで、 \propto は“比例する”を意味する記号である。こうして、ラグランジアン L は、空間の一様性、等方性から質点の速度 \mathbf{v} の2乗の関数、さらにガリレイの相対性原理から、 \mathbf{v}^2 に比例しなければならないことがわかった。こうして、自由粒子のラグランジアンは、比例定数を $m/2$ と書くことにして、

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \quad (2.8)$$

と与えられることがわかった。

今までは、二つの慣性系間の相対速度 \mathbf{V} を小さいとして、 \mathbf{V} の1次までの近似で考察してきたが、(2.8)式で与えられるラグランジアンは、実際に有限の速度 \mathbf{V} のときにもガリレイの相対性原理を満たしていることが容易に確認できる。実際、

$$\begin{aligned} L(\mathbf{v}'^2) &= L((\mathbf{v} - \mathbf{V})^2) = \frac{1}{2} m (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - \left(m \mathbf{v} \cdot \mathbf{V} - \frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 \right) \\ &= L(\mathbf{v}^2) - \frac{d}{dt} \left(m \mathbf{r} \cdot \mathbf{V} - \frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 t \right) \end{aligned}$$

となり、両系のラグランジアンは確かに時間の完全微分しか異ならない。すなわち、両系で力学法則は同一である。

相互作用の無い多粒子系では、質点のラグランジアンを単純に加えておけば良い。運動方程式は各質点ごとに独立に得られるので、各粒子の物理量を添え字 a で区別すると、相互作用のない多粒子系のラグランジアンとして、

$$L = \sum_a \frac{1}{2} m_a \mathbf{v}_a^2 \quad (2.9)$$

が得られる。ここで、 m_a は a で区別される種類の質点の慣性質量**と呼ばれる。ラグランジアン¹の時間積分量である作用を最小にするのが我々が目にする古典運動であることから、慣性質量が負であってはならない。 m_a が負であれば、軌道 $\mathbf{v}_a(t)$ を幾らでも大きく無駄に運動させることで作用を幾らでも小さくでき、作用 S に極小値が与えられない。したがって、慣性質量は負の値を取り得ないことが結論される。

§§2.3.3 相互作用する質点系とニュートン方程式

前節では相互作用の無い自由粒子系のラグランジアンを構成した。粒子間に相互作用がある場合には、相互作用を特徴づける関数 V を加えることにより、ラグランジアンを構成する。 n 個の粒子間の相互作用は、各粒

**万有引力(重力)の強さを与える物質固有の量として、重力質量が存在する。重力質量と慣性質量は、電気力の強さを与える物質固有の量“電荷”と慣性質量が無関係に異なる物理量であるということと同じ意味で“無関係”であるのだが、実験によればすべての物質で、 10^{-13} のオーダーで、慣性質量と重力質量は同一の値を取る。そこで、本書では、必要な時以外には慣性質量と重力質量を区別せず、単に“質量”と記載する。慣性質量と重力質量があらゆる物質で常に等しいという事実を基礎原理とすると、一般相対性理論を構成することができる。12章を見よ。

子の位置の関数であるとして、ポテンシャル関数 $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ を導入する。相互作用は粒子の位置座標に依存した場のポテンシャル V により記述されると考えるのである。そこで、相互作用のある場合の質点系のラグランジアンは

$$L = \sum_{a=1}^n \frac{1}{2} m_a \mathbf{v}_a^2 - V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (2.10)$$

とする。運動方程式（オイラー・ラグランジュ方程式）(2.4) は、一般化座標 q_i を各質点のデカルト座標 $(\mathbf{r}_a)_k$ ($k = x, y, z$) と読み替えて、

$$m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = - \frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)}{\partial \mathbf{r}_a} \quad (2.11)$$

と得られる。ここで、場のポテンシャル関数の座標微分に負号をつけた量を \mathbf{F}_a と記すことにする。

$$\mathbf{F}_a \equiv - \frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)}{\partial \mathbf{r}_a} \quad (2.12)$$

この \mathbf{F}_a を、質点 a に働く力と呼ぶ。こうして、相互作用のある質点系では、質点 a に対する運動方程式 (2.11) は

$$m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = \mathbf{F}_a \quad (2.13)$$

と書ける。この運動方程式はニュートン方程式と呼ばれる。または、ニュートンの第2法則とも呼ばれる。

§2.3.4 拘束系の扱い

質点間の配列に制限があるとき、拘束条件が存在すると言う。例えば、3次元空間中に存在する N 個の質点の自由度は $3N$ であるが、この N 個の質点間の配列に l 個の制限

$$f_j(q_1, q_2, \dots, q_{3N}) = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, l)$$

があるとき、この拘束条件の存在は、一般に系の自由度を $3N$ から $3N - l$ に減らす^{††}。したがって、このような拘束条件が存在する場合には、自由度と同じ数の一般化座標を見つけ、系のラグランジアンをこれらの一般化座標と一般化速度であらわし、運動方程式を求める問題に帰着する。

§2.4 作用・反作用の法則

§2.3において、我々は相互作用のある質点系のラグランジアンを構成することに成功した。ここでは2質点系を考え、それぞれの質点を添え字1、2で区別する。ラグランジアン L は

$$L = \frac{1}{2} m_1 \mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \mathbf{v}_2^2 - V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

§2.2で述べた空間の一様性から、座標の原点を一様に \mathbf{a} だけずらしても物理法則は何も変わらないはずである。すなわち、

$$\mathbf{r}_i \longrightarrow \mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{a} \quad (i = 1, 2)$$

とする。このとき、一様並進のベクトル \mathbf{a} は時間に依存しないので、質点1、2の速度は変化せず、

$$\mathbf{v}'_i = \frac{d\mathbf{r}'_i}{dt} = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \frac{d\mathbf{a}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

^{††}以下では、このような拘束条件のみ考える。これをホロノミックな拘束条件と呼ぶ。

となる。したがって、ラグランジアンは

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}'_1{}^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}'_2{}^2 - V(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) \\ &= \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2^2 - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{a}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{a}) \end{aligned}$$

となる。空間の一様性から、座標原点を \mathbf{a} だけずらしても物理法則は変わらないはずなので、運動を決めるラグランジアンは変わってはいけない。すなわち、 $L' = L$ となるべきである。そのためには、ポテンシャル関数 V に制限が課せられる。すなわち、ポテンシャル関数 $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 に独立に依存する関数ではなく、差にのみ依存しなければならない。

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.14)$$

このときには、座標原点を \mathbf{a} だけずらしたときに

$$V(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = V(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) = V((\mathbf{r}_1 - \mathbf{a}) - (\mathbf{r}_2 - \mathbf{a})) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

となり、ラグランジアン自身が確かに $L' = L$ となる。すなわち、両系でラグランジアンにより記述される運動は同一となり、空間の一様性が保障される。

空間の一様性から得られたポテンシャル関数 V の性質 (2.14) から、2 質点間に働く力について重要な知見が得られる。質点 i に働く力はポテンシャル関数 V を座標 \mathbf{r}_i で微分した (2.12) で与えられる。したがって、質点 i に働く力 \mathbf{F}_i は、それぞれ

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_1} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_1} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \cdot \frac{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_1} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \\ \mathbf{F}_2 &= -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \cdot \frac{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_2} = +\frac{\partial V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \end{aligned}$$

と得られる。こうして

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2 \quad (2.15)$$

が結論される。すなわち、互いに力を及ぼす 2 質点がそれぞれ受ける力は、大きさが等しく向きが反対である。これを作用・反作用の法則、またはニュートンの第 3 法則と呼ぶ。

§ 2.5 長い註

§2.5.1 運動の記述

地上での物体には近似的に鉛直下向きに $F = mg$ という力 F が働く (§6.1.2 を見よ)。ここで、 m は物体の質量、 $g \approx 9.8\text{m/s}^2$ は^{##}重力加速度と呼ばれる。したがって、ポテンシャル関数 $V(x, y, z)$ として、

$$V(x, y, z) = mgz$$

と採ればよい。但し、鉛直上向きに z 軸をとった。実際、力 \mathbf{F} は

$$\begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial V}{\partial x} \\ -\frac{\partial V}{\partial y} \\ -\frac{\partial V}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -mg \end{pmatrix}$$

^{##}単位系については、§2.5.2 見よ。

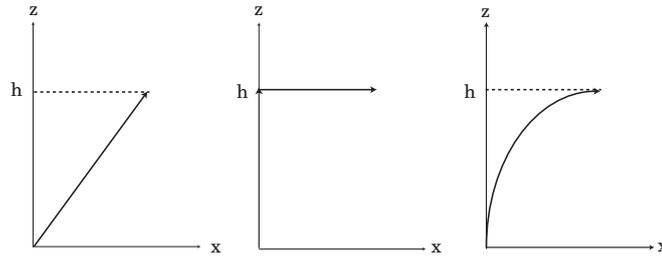


図 5:

であり、確かに鉛直下向きに大きさ mg の力を表す。

さて、質点が原点から斜め上に投げ出されたとしよう。質点が運動する平面を x - z 面とし、質点は x 軸、 z 軸双方とも正の方向に投げ出されたものとする。オイラー・ラグランジュ方程式、またはニュートン方程式は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = 0, \quad m \frac{d^2 y(t)}{dt^2} = 0, \quad m \frac{d^2 z(t)}{dt^2} = -mg$$

となり、これらを $x(t=0) = 0$ 、 $y(t=0) = 0$ 、 $z(t=0) = 0$ 、 $dx(t=0)/dt = v_x(t=0)$ 、 $dy(t=0)/dt = 0$ 、 $dz(t=0)/dt = v_z(t=0)$ という初期条件のもとで運動を解くと、一様重力場のもとで質点は放物線軌道を描く^{††}ことが結論される。

この運動を、オイラー・ラグランジュ方程式の導出のもととなった最小作用の原理から直接考察しておこう。そうすることにより、最小作用の原理による質点の古典軌道の規定の仕方が理解されるであろう。まず、相互作用を表すポテンシャル項 V を無視してみよう。このときには、作用 S が最小となる運動は、質点の速度 \mathbf{v} が一定値をとるときである。実際、質点の速度 \mathbf{v} を、平均値 $\bar{\mathbf{v}}$ とその周りの揺動 $\delta\mathbf{v}$ にわけると $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \delta\mathbf{v}$ 。これを、作用の第 1 項に代入すれば

$$S = \int dt \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2} m \bar{\mathbf{v}}^2 \int dt + m \bar{\mathbf{v}} \int dt \delta\mathbf{v} + \frac{1}{2} m \int dt \delta\mathbf{v}^2$$

となる。右辺第 2 項は、 $\bar{\mathbf{v}}$ が平均値であるという定義から、 $\int dt \delta\mathbf{v} = 0$ となり、消える。従って、速度 \mathbf{v} が平均値からずれると、必ず作用は大きくなる ($\int dt \delta\mathbf{v}^2 > 0$)。こうして、速度は平均値のまま一定であることにより、作用 S を小さくする。これは、相互作用が働かないとき、すでに述べた慣性の法則にほかならない。運動は、図 5 の左のように進む。

しかしながら、相互作用 $V = mgz$ が存在する。今度は、相互作用項による作用 S への寄与 $-\int dt V$ のみを考察しよう。このときには、質点は早く高さ $z = h$ までたどりつき、高さ h のところで時間をゆっくり過ごすことにより作用 S を小さくしようとする。積分 $\int dt V = \int dt mgz$ を大きくすれば作用は小さくなるからである。こうして、図 5 中央の様に運動しようとするであろう。

実際には、作用 S の第 1 項と第 2 項の兼ね合いで、図 5 右のような運動が実現される。これが放物運動の本質である。

^{††}詳しくは §6.2 を見よ。

§§2.5.2 単位系

ここでは MKSA 単位系と呼ばれる単位系を用いる。まず、長さ ([L])、時間 ([T])、質量 ([M]) の単位を与える。

長さ (距離) : メートル (m)
 時間 : 秒 (s)
 質量 : キログラム (kg)

その他の力学量はこの 3 つの組み合わせで表せる。たとえば、

速度 : (距離) / (時間) \dots m/s
 加速度 : (速度の変化) / (変化に要した時間) \dots m/s²
 力 : $F = ma \quad \dots$ kg m/s² \equiv N

ここで、力の単位は、普通、kg m/s² の代わりに、N (ニュートン) を用いる。

2019 年 5 月 19 日までは、1 秒は「セシウム 133 原子の基底状態における 2 つの超微細構造準位間の遷移に対応する放射の 9192631770 周期の継続時間」、1m は、「光が 1/299792458 秒間に真空中を進行する距離」、1kg は「フランスのセヴレ市にある国際度量衡標準局に保存されているプラチナ・イリジウム合金円柱の質量」と定義されていた。また、電磁気現象では、長さ、時間、質量に加えて、電流の単位、アンペア ([A]) を用いた。1A は、「1m 離して真空中に平行おかれた導線に、同方向に流れる 2 本の直線電流間に働く力が導線 1m あたり 1N であるときの電流の大きさ」として導入された。

「時間」はもともと、地球の自転、つまり太陽の南中時（高度が最も高くなる時刻）から、次の南中までを 24 時間とし、1 時間を 60 分、1 分を 60 秒として 1 秒を決めていた。「長さ」は、地球の北極から赤道までの距離の 1 万分の 1 を 1 メートルとした。「質量」は 0.1 メートル (10 センチメートル) 四方の直方体に入れた水の質量を 1 キログラムとしていた。これらの量を精確に決めたものが上記の単位の定義であった。

しかしながら、2019 年 5 月 20 日からは、物理の基礎定数を基にして、新たに単位の定義が決め直され、より精度良い定義となった。正確な言い回しではないが、概ね、次のようになった。

- ・ 温度が零ケルビンのセシウム 133 原子の基底状態の 2 つの超微細構造の準位間の遷移に対応する放射の周波数が、秒 (s) を単位として 9192631770 (91 億 9263 万 1770) s⁻¹ (Hz、ヘルツ) と定めることによって秒を定義する。
- ・ 真空中の光の速さが 299792458 m/s となる長さの単位をメートル (m) と定義する。
- ・ プランク定数 h の値を $6.62607015 \times 10^{-34}$ kg m²/s と定めることによって質量の単位、キログラム (kg) を定義する。
- ・ 電気素量 e の値を $1.602176634 \times 10^{-19}$ C (クーロン) として電荷の単位クーロン (C) を定義する。1 秒間に 1 クーロンの電荷を運ぶ電流が 1 アンペア (A) となる。ついでに、1 秒の定義に出てきた“温度”であるが、次のように定義される。
- ・ ボルツマン定数の値を 1.380649×10^{-23} kg m² / (s² K) と定めることによって温度の単位ケルビン (K) を定義する。

長さ、時間、質量は、3 つの基本定数、光速 c 、プランク定数 h 、万有引力定数 G を組み合わせることで得られる。これに加えて、電荷の基本定数、素電荷 e を用いればよい*。

* c は §11.1.1、 h は §5.1、 G は §12.5.1、 e は §11.3.1 を見よ。

3章 対称性と保存則

§3.1 運動量

一般化座標 q_i に対して、ラグランジアン L を一般化速度 \dot{q}_i で微分した量 p_i を一般化運動量と呼ぶ。

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (3.1)$$

ここで、 q_i は一般化座標であれば良いのであるが、特にデカルト座標 \mathbf{r}_a をとってみよう。添え字 a は質点を区別するためのものである。このときには、運動量 \mathbf{p}_a として、

$$\mathbf{p}_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} = m\dot{\mathbf{r}}_a \quad (3.2)$$

が定義される。ここで、ラグランジアンは (2.10) 式の形に得られているので（ただし、 $\mathbf{v}_a \equiv \dot{\mathbf{r}}_a$ ）最右辺の形が得られる。

さて、空間の一様性については §2.2 で述べたが、空間の一様性は空間並進によっても物理法則は変わらないことを意味しており、座標原点をどこにとっても物理法則は不変であるべきである。よって、位置座標を \mathbf{r}_a を $\mathbf{r}_a + \boldsymbol{\epsilon}$ と一様にずらしても物理法則は不変であるべきである。このとき、ラグランジアンの変化 δL は、

$$\delta L = \sum_a \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \boldsymbol{\epsilon} = 0$$

と、ラグランジアンが不変であるべきであるので、最右辺の様に零であるべきである。任意の $\boldsymbol{\epsilon}$ に対して成り立つので

$$\sum_a \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = 0$$

が成り立つ。ここで、オイラー・ラグランジュ方程式 (2.4) から、一般化座標 q_i をデカルト座標 \mathbf{r}_{aj} (a は質点の区別、 j は x または y または z) で読み替えた方程式 $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} \right)$ から、上式は

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_a \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} \right) = 0$$

が成り立つ。式 (3.2) から、運動量を用いて、上式は

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_a \mathbf{p}_a \right) = 0 \quad (3.3)$$

すなわち

$$\sum_a \mathbf{p}_a = \text{時間に依らず一定} \quad (3.4)$$

が得られる。すなわち、系の各質点の運動量の総和は、時間が経っても変化しない一定量をとる。この事実を運動量保存則と呼ぶ。運動量保存則は空間の一様性、すなわち空間並進の不変性から直ちに導かれる物理法則である。我々の空間は3次元、すなわち3方向に拡がっている。そこで、3方向への空間並進が可能である。こうして、空間並進の不変性にに基づき保存する運動量は3つの成分を持ち、ベクトル量 \mathbf{p} となる。

§ 3.2 角運動量

空間の等方性から、空間には特別の方向が存在しない。すなわち、座標軸をどの向きにとっても、物理法則は不変である。

座標系をデカルト座標に限って議論を進めよう。まず、空間の等方性から、空間座標を回転しても物理法則は不変のはずである。このことから、空間回転を表す方法を考えよう。無限小の角度 $\delta\varphi$ だけ、ある軸の周りに回転したとしよう。このとき、デカルト座標で記述した質点 a の位置ベクトル \mathbf{r}_a は回転し、新しく \mathbf{r}'_a となるであろう。その変位 $\delta\mathbf{r}_a = \mathbf{r}'_a - \mathbf{r}_a$ を考えよう。変位ベクトルの向きは回転軸に垂直な平面内にあり、その大きさ $|\delta\mathbf{r}_a|$ は、図 6 から理解されるように、

$$|\delta\mathbf{r}_a| = r_a \sin\theta \delta\varphi$$

となる。変位ベクトル自身はベクトル積を用いると簡単に書き表すことができ、

$$\delta\mathbf{r}_a = \delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_a$$

となる。ただし、ベクトル $\delta\boldsymbol{\varphi}$ は、大きさが回転角 $\delta\varphi$ に等しく、向きは回転軸の方向を向くベクトルとして定義される。一般に、空間回転に対して、ベクトルは同様な変換を受けるので、速度ベクトル \mathbf{v}_a の変化 $\delta\mathbf{v}_a$ に関する関係式が得られる。

$$\delta\mathbf{v}_a = \delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{v}_a$$

空間の等方性から、ラグランジアンは我々が採用したデカルト座標の向き、すなわち、ラグランジアンが依存するベクトルの向きには依らないはずである。したがって、空間回転の下でラグランジアンは不変である。すなわち、空間回転のもとでの位置ベクトル \mathbf{r}_a と速度ベクトル \mathbf{v}_a の変化の下で、ラグランジアンの変化 δL は無く、

$$\delta L = \sum_a \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \delta\mathbf{r}_a + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot \delta\mathbf{v}_a \right) = 0$$

となるべきである。ここで、オイラー・ラグランジュ方程式から、 $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} = \dot{\mathbf{p}}_a$ 、また、一般化運動量の定義より $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} = \mathbf{p}_a$ であるので、空間回転の下でのラグランジアンの変化 δL は、 $\delta\mathbf{r}_a$ 、 $\delta\mathbf{v}_a$ の式を用いて

$$\delta L = \sum_a [\dot{\mathbf{p}}_a \cdot (\delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_a) + \mathbf{p}_a \cdot (\delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{v}_a)] = 0$$

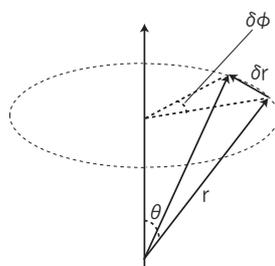


図 6:

が得られる。ベクトルの外積と内積の公式 $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A})$ を用いて、ラグランジアンの変化 δL は

$$\begin{aligned}\delta L &= \delta\varphi \cdot \sum_a [\mathbf{r}_a \times \dot{\mathbf{p}}_a] + (\dot{\mathbf{r}}_a \times \mathbf{p}_a) \\ &= \delta\varphi \cdot \frac{d}{dt} \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) = 0\end{aligned}$$

が得られる。任意の微小回転角 $\delta\varphi$ について成り立つので、結局、

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \mathbf{L} &= 0, \\ \mathbf{L} &\equiv \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a = \text{定数}\end{aligned}\tag{3.5}$$

が得られる。 \mathbf{L} を角運動量と呼び、角運動量が時間に関わらず一定値を取るという空間の等方性に起因した保存法則を、角運動量保存則と呼ぶ。3つの空間次元が存在することから、それぞれ3つの方向を決める座標軸の周りに空間を回転することが可能である。こうして、各空間回転に対してそれぞれ角運動量が保存するので、角運動量 \mathbf{L} は3つの成分を持つ3次元ベクトルを構成する。

§3.3 エネルギー

我々が認識している空間は3次元であるので、並進・回転の不変性を考察した。我々が認識している時間は1次元であるので、時間については並進の自由度しか存在しない。時間の一様性から、時間の原点をずらしても物理法則は不変であるべきである。すなわち、時間並進についての不変性が存在する。こうして、時間の原点をずらしても物理法則が変わらないことから、物理法則を支配するラグランジアンは時間をあからさまに含んではならない。すなわち、

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

したがって、ラグランジアンの時間に関する全微分を考えると、一般化座標 q_i と一般化速度 \dot{q}_i を通してのみ時間変化を考えれば良いことになり、

$$\begin{aligned}\frac{dL}{dt} &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \\ &= \sum_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \\ &= \sum_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \\ &= \sum_i \frac{d}{dt} (p_i \dot{q}_i)\end{aligned}\tag{3.6}$$

と変形できる。ここで、1行目から2行目へはオイラー・ラグランジュ方程式を用い、3行目から4行目へは一般化運動量の定義を用いた。こうして、時間の全微分でまとめて、

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right] = 0$$

が得られる、すなわち、

$$E \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - L = \text{一定}\tag{3.7}$$

という式が得られる。ここで、 E を、系の力学的エネルギーと呼ぶ。

今、系の相互作用を表すポテンシャル関数 $V(q)$ と、一般化速度の 2 乗の関数 $T(q, \dot{q}) \propto \dot{q}_i^2$ から、ラグランジアンは一般に

$$L = T(q, \dot{q}) - V(q)$$

と書けていた。したがって、 $\partial T / \partial \dot{q}_i \propto 2\dot{q}_i$ となるので、

$$\sum_i p_i \dot{q}_i = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T$$

となる。こうして、保存する系の力学的エネルギー E は

$$E = 2T - L = 2T - (T - V) = T + V \quad (3.8)$$

となる。ここで、系の相互作用を表すポテンシャル関数 V をポテンシャル・エネルギー、一般化速度の 2 乗に比例した自由粒子の場合のラグランジアン T を運動エネルギーと呼ぶ。式 (3.8) の E が時間に関わらず一定値を取ることを、力学的エネルギー保存則と呼ぶ。

§ 3.4 ネーターの定理

一般化座標 q 、あるいは時間 t があるパラメータ a で変換されたとき、ラグランジアン L が不変であったとしよう。すなわち、変換 a のもとで物理法則は不変であるとする。

時間 t は一般化座標ではないので、時間 t も一般化座標と同様に扱うために、本節では少し工夫を凝らす。つまり、時間 t はあるパラメータ τ の関数とみなすことにする。このとき、一般化速度は $\dot{q}_i = dq_i/dt = (dq_i/d\tau)/(dt/d\tau)$ と書ける。こうして、パラメータ τ の微分を $'$ で表わすことにして、

$$q'_i \equiv \frac{dq_i}{d\tau}, \quad \dot{q}_i \equiv \frac{dq_i}{dt} = \frac{dq_i}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{dt} = q'_i \cdot \frac{d\tau}{dt}$$

と書くことができる。こうして、作用 S は

$$\begin{aligned} S &= \int L(q, \dot{q}, t) dt = \int L\left(q, \frac{dq}{d\tau} \frac{d\tau}{dt}, t(\tau)\right) \frac{dt}{d\tau} d\tau \\ &\equiv \int \tilde{L}(q_i, q'_i, q_{s+1}, q'_{s+1}) d\tau = \int \tilde{L}(q, q') d\tau \end{aligned} \quad (3.9)$$

と書き直される。ここで、

$$\tilde{L} = L \frac{dt}{d\tau}, \quad q_{s+1} = t, \quad q'_{s+1} = \frac{dt}{d\tau}$$

と定義した。系の自由度は s である。

さて、ここまでの準備の下で、一般化座標 q_i ($i = 1, 2, \dots, s$)、時間 q_{s+1} が、あるパラメータ a で変換されたとしよう。この変換のもとで物理法則は不変であるとしよう。すなわち、ラグランジアン \tilde{L} が不変であると要請する。すなわち、

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d\tilde{L}(q(a), q'(a))}{da} \\ &= \sum_{i=1}^{s+1} \left[\frac{\partial \tilde{L}(q(a), q'(a))}{\partial q_i(a)} \cdot \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} + \frac{\partial \tilde{L}(q(a), q'(a))}{\partial q'_i(a)} \cdot \frac{\partial q'_i(a)}{\partial a} \right] \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $a \rightarrow 0$ ととると、 $q_i(a \rightarrow 0) = q_i$ 、 $q'_i(a \rightarrow 0) = q'_i$ であり、上式は、

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^{s+1} \left[\left. \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q_i} \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} \right|_{a=0} + \left. \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q'_i} \frac{\partial q'_i(a)}{\partial a} \right|_{a=0} \right] \\ &= \sum_{i=1}^{s+1} \left[\left(\frac{d}{d\tau} \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q'_i} \right) \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} \right]_{a=0} + \left. \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q'_i} \left(\frac{d}{d\tau} \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} \right) \right|_{a=0} \\ &= \frac{d}{d\tau} \left[\sum_{i=1}^{s+1} \left(\left. \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q'_i} \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} \right|_{a=0} \right) \right] \end{aligned}$$

となる。ここで、1行目から2行目へはオイラー・ラグランジュ方程式と、 a と τ に関する微分が交換することを用了。こうして、次の重要な結論を得る。

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\tau} &= 0, \tag{3.10} \\ I &\equiv \sum_{i=1}^{s+1} \left. \frac{\partial \tilde{L}(q, q')}{\partial q'_i} \frac{\partial q_i(a)}{\partial a} \right|_{a=0} \end{aligned}$$

すなわち、変換 a に対して物理法則が不変であれば、“時間” τ に関して、 I は保存する。これをネーターの定理という。

§§3.4.1 空間並進対称性と運動量保存則

一般化座標 q_i ($i = 1, 2, \dots, s$) としてデカルト座標 \mathbf{r}_a をとる。ここで、添え字 a は質点を区別する指標である。空間並進

$$\mathbf{r}_a \longrightarrow \mathbf{r}_a + \mathbf{a}$$

のもとで、物理法則は不変である。このとき、時間に変換を受けない。すなわち、

$$q_{s+1} = t \longrightarrow q_{s+1} = t$$

すなわち、

$$\tau = t$$

ととればよい。従って、 $\tilde{L} = L$ 、 $q'_i = \dot{q}_i$ となり、ラグランジアンは $L(\mathbf{r}_a(\mathbf{a}), \dot{\mathbf{r}}_a(\mathbf{a}), t)$ と変数を持つ。こうして、ネーターの定理からただちに

$$\begin{aligned} I &= \sum_{k=1}^{s+1} \left. \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_k} \frac{\partial q_k}{\partial \mathbf{a}} \right|_{\mathbf{a}=\mathbf{0}} = \sum_a \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \frac{\partial \mathbf{r}_a}{\partial \mathbf{a}} \right|_{\mathbf{a}=\mathbf{0}} \\ &= \sum_a \mathbf{p}_a \end{aligned} \tag{3.11}$$

は保存する。ここで、運動量の定義 (3.2) を用いた。時間 $\tau = t$ から、この量は

$$\frac{dI}{dt} = 0 \tag{3.12}$$

となるのがネーターの定理から結論される。こうして、空間並進の対称性から運動量保存法則が再び得られた。

§§3.4.2 空間回転対称性と角運動量保存則

デカルト座標に基づき考えよう。簡単のため1質点に対し、 z 軸周りに回転角 a で回転しよう。

$$x = r \cos(\theta + a), \quad y = r \sin(\theta + a), \quad z = z$$

もちろん時間は変換せず、 $\tau = t$ ととればよい。こうして、ネーターの定理から、保存する I は

$$\begin{aligned} I &= \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{\partial x}{\partial a} \right|_{a=0} + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \frac{\partial y}{\partial a} \right|_{a=0} = p_x(-r \sin \theta) + p_y r \cos \theta = -p_x y + p_y x \\ &= L_z \end{aligned} \quad (3.13)$$

となり、 z 軸周りの回転不変性に起因する保存する物理量として、確かに角運動量の z 成分が得られる。他の成分、多粒子系についても同様である。

§§3.4.3 時間並進対称性とエネルギー保存則

時間並進のもとで、物理法則は不変である。この変換は

$$q_i \longrightarrow q_i \quad (i = 1, 2, \dots, s), \quad q_{s+1} (= t) \longrightarrow q_{s+1} + a (= t + a)$$

である。このとき保存する物理量 I は

$$I = \left. \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_{s+1}} \frac{\partial q_{s+1}}{\partial a} \right|_{a=0}$$

である。以下、この量を具体的に計算していこう。まず、 $q'_{s+1} = dt/d\tau$ であること等を思い出すと、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_{s+1}} &= \frac{\partial}{\partial \left(\frac{dt}{d\tau}\right)} \left(L \left(q_i, \frac{dq_i}{d\tau} / \frac{dt}{d\tau}, t \right) \frac{dt}{d\tau} \right) = L + \sum_{i=1}^s \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{dq_i}{d\tau} / \frac{dt}{d\tau}\right)} \frac{\partial}{\partial \left(\frac{dt}{d\tau}\right)} \left(\frac{dq_i}{d\tau} \right) \cdot \frac{dt}{d\tau} \\ &= L + \sum_{i=1}^s \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{dq_i}{dt}\right)} \cdot \left(-\frac{\frac{dq_i}{d\tau}}{\left(\frac{dt}{d\tau}\right)^2} \right) \cdot \frac{dt}{d\tau} = L - \sum_{i=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{dq_i}{dt} \\ &= L - \sum_{i=1}^s p_i \dot{q}_i \\ &\equiv -E \end{aligned} \quad (3.14)$$

ここで、2行目から3行目へは一般化運動量の定義を、3行目から4行目へはすでに定義した力学的エネルギー E を用いた。時間の変換から $\frac{d}{d\tau} = \frac{d}{dt}$ であるので、結局ネーターの定理から

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{dE}{dt} = 0 \quad (3.15)$$

が得られる。すなわち、力学的エネルギー E は時間に依存しない保存量であることが再び示される。

§ 3.5 力学的相似則

ラグランジアンを定数倍しても、オイラー・ラグランジュ方程式は変わらない。そこで、ラグランジアン中の相互作用を表すポテンシャル・エネルギー項 $V(q)$ が、すべての一般化座標 q_i を α 倍したとき、

$$V \longrightarrow V' \equiv V(\alpha q_1, \alpha q_2, \dots, \alpha q_s) = \alpha^k V(q_1, q_2, \dots, q_s)$$

という関係式を満たしているとしよう。すなわち、 V が k 次の同次関数である場合を考える。このとき、変換

$$q_i \longrightarrow q'_i \equiv \alpha q_i, \quad t \longrightarrow t' \equiv \beta t$$

を考える。座標をすべて α 倍したとき、時間は β 倍しておく。このとき、運動エネルギー T は $\sum_i (m/2)(dq_i/dt)^2$ であるので、座標、時間の上式の変換のもとで、

$$T \longrightarrow T' \equiv \frac{\alpha^2}{\beta^2} T$$

と変換される。こうして、

$$\alpha^k = \frac{\alpha^2}{\beta^2}, \quad \text{すなわち} \quad \beta = \alpha^{1-\frac{k}{2}}$$

という関係があれば、ラグランジアンは定数倍 (α^k 倍) されるだけであることがわかる。したがって、全ての質点の座標を α 倍した軌道に移り、時間が β 倍されるのであれば運動方程式は変わらず、同じ運動が起きる。すなわち、幾何学的に相似な別の軌跡に移るのみである。これを力学的相似則と呼ぶことにする。

典型的な軌跡の大きさを l と書こう。相似な別の軌跡の大きさは $l' = \alpha l$ と α 倍されているとする。質点がこの軌跡の運動に要する時間をそれぞれ、 t 、 $t' = \beta t$ とすると、運動に要する時間は

$$\frac{t'}{t} = \beta = \alpha^{1-\frac{k}{2}} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{1-\frac{k}{2}} \quad (3.16)$$

という関係があることがこれまでの議論からわかる。種々の力学量についても考えよう。たとえば、質点の速さ v については、

$$\frac{v'}{v} = \frac{\frac{l'}{t'}}{\frac{l}{t}} = \frac{l'}{l} \frac{t}{t'} = \frac{l'}{l} \left(\frac{l'}{l}\right)^{-(1-\frac{k}{2})} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{\frac{k}{2}}$$

という関係があることがわかる。同様に、角運動量 $L (= |\mathbf{r} \times (m\mathbf{v})|)$ 、エネルギー E は

$$\frac{L'}{L} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{1+\frac{k}{2}}, \quad \frac{E'}{E} = \left(\frac{l'}{l}\right)^k$$

という関係を有することがわかる。

具体的な例を3つだけ挙げておこう。

§3.5.1 地表付近での落体運動

地表付近では、物体は鉛直下向きに力 $F = mg$ を受ける。ここで g は重力加速度と呼ばれる*。このとき、ポテンシャル・エネルギーは、鉛直上向きに z 軸をとると

$$V(z) = mgz$$

であり、座標 z を α 倍したとき、

$$V(\alpha z) = \alpha V(z)$$

となることから、 $k = 1$ であることがわかる。したがって、落体運動に要する時間は (3.16) から

$$\frac{t'}{t} = \sqrt{\frac{l'}{l}}$$

となることがわかる。すなわち、落下距離 l は落下時間 t の2乗に比例する ($l \propto t^2$)。これはガリレオ・ガリレイが発見した落体の法則にほかならない。

*§6.1.2 で示される。

§§3.5.2 振り子の等時性

次に、力が変位に比例する場合[†]を考える。このとき、ポテンシャル・エネルギー $V(q)$ と力 F は

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2, \quad F = -\frac{dV(q)}{dq} = -m\omega^2q$$

となる。ここで、 ω は或る定数である。振れ幅の小さな振り子は、このように変位に比例した力を受けて周期的な運動を行なう。今、座標 q を α 倍すれば、

$$V(\alpha q) = \alpha^2 V(q)$$

であるので、 $k = 2$ の場合の例になっている。このときには (3.16) から、

$$\frac{t'}{t} = 1$$

が得られる。すなわち、周期運動の周期は振れ幅（振幅）に依存せず一定値をとる。振り子の場合、この事実を振り子の等時性と呼び、ガリレオ・ガリレイにより発見された知見である。

§§3.5.3 ケプラーの第3法則

質量を持つすべての物体には、2 質点間の距離 r の 2 乗に反比例し、2 質点の質量の積 m_1m_2 に比例した引力が働く[‡]。ポテンシャル・エネルギー V 、及び万有引力 \mathbf{F} は

$$V(r) = -G\frac{m_1m_2}{r}, \quad \mathbf{F} = -G\frac{m_1m_2}{r^2}\hat{\mathbf{r}}$$

と書ける。ここで、 G は万有引力定数と呼ばれる或る定数である。また $\hat{\mathbf{r}}$ は大きさ 1 で、2 点間を結ぶ方向に沿う外向きの単位ベクトルである。このとき、座標 r を α 倍すると、

$$V(\alpha r) = \frac{1}{\alpha} V(r)$$

となるので、 $k = -1$ の場合に相当する。こうして、(3.16) から、質点の軌跡の大きさ l と、軌道運動に要する時間 t の間には、

$$\frac{t'}{t} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{\frac{3}{2}}$$

の関係が存在することがわかる。太陽との万有引力を受けて公転する惑星運動に適用した場合、 t を公転周期、 l を軌道の大きさ[§]として、両辺を 2 乗しておいて、公転周期の 2 乗は軌道の大きさの 3 乗に比例すると言える。この事実はケプラーの第 3 法則と呼び慣らわされている。

§ 3.6 ビリアル定理

§§3.6.1 ビリアル定理

系の運動が有界でかつポテンシャルエネルギーが座標の同次関数であるとき、ビリアル定理とよばれる定理が成り立つことをみておこう。

[†]フックの法則と呼ばれる。

[‡]詳しくは、§6.1.2 を見よ。

[§]正確には楕円軌道の長半径

今、運動エネルギー T を速度 \mathbf{v}_a で微分すると、

$$\sum_a \mathbf{v}_a \frac{\partial T}{\partial \mathbf{v}_a} = 2T$$

となるが、左辺は運動量の定義から

$$\sum_a \mathbf{v}_a \frac{\partial T}{\partial \mathbf{v}_a} = \sum_a \mathbf{v}_a \cdot \mathbf{p}_a = \frac{d}{dt} \left(\sum_a \mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}_a \right) - \sum_a \mathbf{r}_a \cdot \dot{\mathbf{p}}_a$$

となる。こうして、

$$2T = \frac{d}{dt} \left(\sum_a \mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}_a \right) - \sum_a \mathbf{r}_a \cdot \dot{\mathbf{p}}_a$$

長時間平均をとると、上の式の右辺第1項は運動が有界であることから零となる。すなわち、 F の長時間平均を \overline{F} と表わして

$$\frac{\overline{dF}}{dt} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dF}{dt} dt = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{F(\tau) - F(0)}{\tau} = 0$$

である。ここで、 $F(\tau)$ は有界であるので、有限値をとることを考慮した。こうして、時間の完全微分の長時間平均は零になり、右辺第1項が0になることが言えた。また、 $\dot{\mathbf{p}}_a = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_a}$ より、上式の長時間平均をとると、 V が \mathbf{r}_a に関して k 次の同時関数 $\left(\sum_a \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \mathbf{r}_a = kV \right)$ として

$$2\overline{T} = \overline{\sum_a \mathbf{r}_a \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_a}} = k\overline{V}$$

が得られる。これをビリアル定理と呼ぶ。

例を2つ挙げておこう。1次元単振動のときには、 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ であり、ポテンシャルエネルギーは座標 x について2次の同次関数、すなわち $k = 2$ である。こうして、運動エネルギーの長時間平均とポテンシャルエネルギーの長時間平均は等しい： $\overline{T} = \overline{V}$ 。次に万有引力の場合を見ておこう。ポテンシャルエネルギーは $V(r) = -G\frac{m_1 m_2}{r}$ であり、 $k = -1$ である。こうして、 $2\overline{T} = -\overline{V}$ が得られる。

§§3.6.2 ビリアル定理の適用例

ビリアル定理の適用例の一つとして、恒星の重力崩壊を考えてみよう。前節でみたように重力の場合には $k = -1$ であり、

$$\begin{aligned} 2\overline{T} &= -\overline{V} \\ &= G \frac{Mm}{r} \equiv \overline{\Omega} \end{aligned} \quad (3.17)$$

である。ここで、 M は考えている星の内部の質量で、 m は星を構成する物質の質量と考えればよい。また便宜の為 $\overline{\Omega}$ を定義した。崩壊前の星を構成する物質のエネルギーは

$$E = \overline{T} + \overline{V} = \frac{\overline{\Omega}}{2} - \overline{\Omega} = -\frac{\overline{\Omega}}{2}$$

である。恒星が重力崩壊し、星の質量はそのまま半径 r が縮んでいったとする。初めは図7(a)のように、 $-\overline{\Omega}/2$ のエネルギーであるが、星が収縮し、半径 r が小さくなると (3.17) から $\overline{\Omega}$ が大きくなることがわかる。

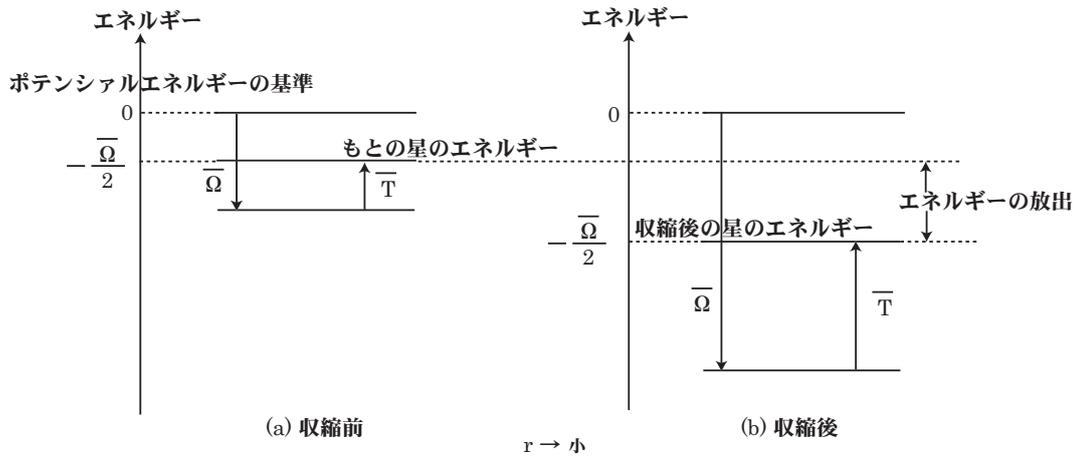


図 7:

結果的に星のエネルギーは、図 7(b) のように、 $\bar{\Omega}$ が大きくなったために低くなる。そうすることで、図のように収縮後と収縮前のエネルギー差の分だけエネルギーを放出する。一方、星を構成する物質の運動エネルギー \bar{T} も、 $\bar{\Omega}$ の増加に伴って増加していることは (3.17) からわかる。乱雑な運動をしている物質の運動エネルギーの平均は、気体分子運動論から知られているように温度であるので[¶]、 \bar{T} の増加は星の温度の上昇につながる。こうして、星が重力崩壊する際には、星の外部にエネルギーを放出しながら、星自身の温度も上昇することが言える。

[¶]絶対温度 T と

$$\bar{T} \equiv \frac{1}{2} \overline{mv^2} = \frac{3}{2} k_B T$$

の関係がある。ここで、 $k_B = 1.38 \times 10^{23}$ [J/K] はボルツマン定数である。

4章 ハミルトン形式

§ 4.1 ハミルトン方程式

ラグランジアン L は一般化座標 q 、一般化速度 \dot{q} 、及び時間 t の関数である。ここでは、時間に依存しないとして、一般化座標と一般化運動量に基づく運動の記述法を構成する。

ラグランジアンは一般化座標と一般化速度の関数であるので、その全微分 dL は

$$\begin{aligned} dL &= \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) \\ &= \sum_i \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \\ &= \sum_i (\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i) \\ &= \sum_i \dot{p}_i dq_i - \sum_i dp_i \dot{q}_i + d \left(\sum_i p_i \dot{q}_i \right) \end{aligned}$$

と変形できる。ここで、1行目から2行目へはオイラー・ラグランジュ方程式を用い、2行目から3行目へは一般化運動量の定義を用いた。全微分でまとめると、

$$d \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right) = - \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i \quad (4.1)$$

となる。ここで、ハミルトン関数 H を以下のように定義する。

$$H \equiv \sum_{i=1}^s p_i \dot{q}_i - L \quad (4.2)$$

ここで、(3.7)、(3.8) 式を思い出すと、(4.2) は

$$\begin{aligned} H &\equiv \sum_{i=1}^s p_i \dot{q}_i - L \\ &= T + V \end{aligned} \quad (4.3)$$

となり、ハミルトン関数は系のエネルギーを一般化座標 q_i と一般化運動量 p_i の関数とみなしたものと言える。ハミルトン関数 H が q_i と p_i の関数であることは、(4.1) と (4.2) から

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i$$

であることからわかる。

上式よりただちに、

$$\begin{aligned} \dot{q}_i \left(= \frac{dq_i}{dt} \right) &= \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i \left(= \frac{dp_i}{dt} \right) &= - \frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (4.4)$$

が得られる。これをハミルトン方程式または正準方程式と呼ぶ。オイラー・ラグランジュ方程式は時間に関する2階の微分方程式であったが、ハミルトン方程式は一般化運動量を用いることで、時間に関する1階の微分方程式の形を持たせている。ただし、方程式の数が2倍になっている。

ハミルトン関数は一般化運動量と一般化座標を用いて書いた力学的エネルギーの形をしていたので、簡単に

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(q)$$

の形を持つ場合が多い。このときには、ハミルトン方程式 (4.4) は

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial V(q)}{\partial q_i} (\equiv F_i)\end{aligned}$$

となる。運動量 p_i を消去すれば、オイラー・ラグランジュ方程式（またはニュートン方程式）に帰着することがわかる。

§ 4.2 ポアソン括弧とハミルトン方程式

一般化座標 q_i 、一般化運動量 p_i 、及び時間 t の関数 $f(q, p, t)$ を考えよう。この関数の時間導関数は、一般化座標、一般化運動量が時間 t の関数であることに留意して

$$\begin{aligned}\frac{df(q, p, t)}{dt} &= \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial f}{\partial t} \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}\end{aligned}$$

となる。ここで、1行目から2行目へはハミルトン方程式 (4.4) を用いた。このとき、関数 $A(q, p)$ 、 $B(q, p)$ に対して、次のポアソン括弧を定義する。

$$\{A(q, p), B(q, p)\}_P \equiv \sum_k \left(\frac{\partial A}{\partial q_k} \frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \frac{\partial B}{\partial q_k} \right) \quad (4.5)$$

このポアソン括弧を用いると、先ほどの関数 f の時間導関数はハミルトン関数 H を用いて

$$\frac{df(q, p, t)}{dt} = \{f, H\}_P + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (4.6)$$

と簡潔に書ける。

今、関数 f が時間 t をあからさまに含んでいないとしよう。すなわち、 $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ であるときには関数 f の時間に関する全微分 (4.6) は

$$\frac{df(q, p)}{dt} = \{f, H\}_P$$

となる。ここで、 f が保存量、すなわち、時間に拘わらず一定値をとるならば、 $\frac{df}{dt} = 0$ であるので、

$$\{f, H\}_P = 0$$

となる。保存量とハミルトン関数のポアソン括弧は零となる。このように保存法則を表す表式がポアソン括弧を用いて新たに得られる。

さて、一般化座標 q_i と一般化運動量 p_i はハミルトン形式の下でハミルトン関数 H を決定する独立変数であるので、互いに独立である。したがって、例えば一般化座標 q_i 、または一般化運動量 p_i とハミルトン関数 H のポアソン括弧は、

$$\begin{aligned}\{q_i, H\}_P &= \sum_k \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \\ \{p_i, H\}_P &= \sum_k \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \dot{p}_i\end{aligned}$$

となる。ここで、それぞれ2番目の等式は q_i と p_i が独立であることから、

$$\begin{aligned}\frac{\partial q_i}{\partial p_k} &= 0, & \frac{\partial p_i}{\partial q_k} &= 0, \\ \frac{\partial q_i}{\partial q_k} &= \frac{\partial p_i}{\partial p_k} = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & (\text{for } i = k) \\ 0 & (\text{for } i \neq k) \end{cases}\end{aligned}$$

となることを用いた。ここで、 δ_{ik} はクロネッカーのデルタと呼ばれ、 $i = k$ のときは値1を、それ以外は0をとる。また、最後の等式はハミルトン方程式 (4.4) を用いた。こうして、ハミルトン方程式は、ポアソン括弧を用いて、

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}_P, \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}_P \quad (4.7)$$

と書けることがわかる。

ここで、ポアソン括弧の幾つかの性質を挙げておこう。証明は容易である。まず、ポアソン括弧は反可換であり、

$$\{f, g\}_P = -\{g, f\}_P$$

となる。また、双線形であり

$$\begin{aligned}\{f_1 + f_2, g\}_P &= \{f_1, g\}_P + \{f_2, g\}_P \\ \{f_1 f_2, g\}_P &= f_1 \{f_2, g\}_P + \{f_1, g\}_P f_2 \\ \{f, g_1 g_2\}_P &= g_1 \{f, g_2\}_P + \{f, g_1\}_P g_2\end{aligned}$$

が示される。さらに重要なことに、次のヤコビ恒等式を満たす。

$$\{f, \{g, h\}_P\}_P + \{g, \{h, f\}_P\}_P + \{h, \{f, g\}_P\}_P = 0$$

§ 4.3 正準変換

ハミルトン形式では、一般化座標と一般化運動量により運動は記述される。しかしながら、一般化座標とそれにより定義される一般化運動量は様々な形式でとることができる。例えば1質点系での一般化座標としてデカルト座標を採ることもできるし、極座標を採ることも可能である。ここでは、ハミルトン方程式（正準方程式）を不変に保つような一般化座標、一般化運動量の変換を考える。正準方程式を不変に保つ変換を正準変換と呼ぶ。

一般化座標と一般化運動量をそれぞれ、 q_i 、 p_i としよう。正準変換により、これらは新しい一般化座標 Q_i と一般化運動量 P_i に変換されたとする。すなわち、

$$Q_i = Q_i(q, p), \quad P_i = P_i(q, p)$$

この変換のもとで正準方程式が不変であるので、

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, & \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ \dot{Q}_i &= \frac{\partial H'}{\partial P_i}, & \dot{P}_i &= -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \end{aligned}$$

となるべきである。ここで、 H' は変換後のハミルトン関数である。

ここで、最小作用の原理に立ち返ろう。元の一般化座標、一般化運動量 (q_i, p_i) のもとで、ラグランジアン L は

$$L = \sum_k p_k \dot{q}_k - H$$

であり、作用 S は

$$\begin{aligned} S &= \int dt L = \int dt \left(\sum_k p_k \frac{dq_k}{dt} - H \right) \\ &= \int \left(\sum_k p_k dq_k - H dt \right) \end{aligned}$$

と書け、最小作用の原理は変分 δS が零であることを要求する。すなわち、

$$\delta S = \delta \int \left(\sum_k p_k dq_k - H dt \right) = 0$$

変換後の一般化座標、一般化運動量 (Q_i, P_i) の下でも同じ形の正準方程式が導かれるためには最小作用の原理が同じ形、すなわち

$$\delta S = \delta \int \left(\sum_k P_k dQ_k - H' dt \right) = 0$$

を持たねばならない。したがって、 (q_i, p_i) と (Q_i, P_i) による最小作用の原理を見比べて、

$$\sum_k p_k dq_k - H dt = \sum_k P_k dQ_k - H' dt + dF \quad (4.8)$$

であれば良い。ここで、 dF は関数 $F(q, Q)$ の全微分である。全微分 dF だけの不定性が許されるのは、最小作用の原理では積分の上端と下端の一般化座標が固定されていることによる。すなわち、 $\delta q(t_2) = \delta q(t_1) = \delta Q(t_2) = \delta Q(t_1) = 0$ である。こうして、

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dF = \delta [F(q(t_2), Q(t_2)) - F(q(t_1), Q(t_1))] = 0$$

が得られ、関数 F だけの不定性が存在しても運動方程式には影響しない。一旦整理しておこう。旧・新の一般化座標 q_i, Q_i の関数 F を、改めて $F_1(q, Q, t)$ と表すことにする。こうして、

$$\begin{aligned} dF_1 &= \sum_k p_k dq_k - \sum_k P_k dQ_k + [H'(Q, P, t) - H(q, p, t)] dt \\ &= \sum_k p_k dq_k + \sum_k Q_k dP_k - d \left(\sum_k P_k Q_k \right) + [H' - H] dt \\ &= -\sum_k q_k dp_k + d \left(\sum_k q_k p_k \right) - \sum_k P_k dQ_k + [H' - H] dt \\ &= -\sum_k q_k dp_k + \sum_k Q_k dP_k + d \left(\sum_k q_k p_k - \sum_k P_k Q_k \right) + [H' - H] dt \end{aligned}$$

のように、種々変形できる。こうして、まず、等式の2行目から、関数 $F_2(q, P, t)$ として

$$\begin{aligned} dF_2 &\equiv d\left(F_1 + \sum_k P_k Q_k\right) \\ &= \sum_k p_k dq_k + \sum_k Q_k dP_k + [H' - H]dt \end{aligned}$$

また、3行目から関数 $F_3(p, Q, t)$ として、

$$\begin{aligned} dF_3 &\equiv d\left(F_1 - \sum_k q_k p_k\right) \\ &= -\sum_k q_k dp_k - \sum_k P_k dQ_k + [H' - H]dt \end{aligned}$$

さらに4行目から関数 $F_4(p, P, t)$ として

$$\begin{aligned} dF_4 &\equiv d\left(F_1 - \sum_k q_k p_k + \sum_k P_k Q_k\right) \\ &= -\sum_k q_k dp_k + \sum_k Q_k dP_k + [H' - H]dt \end{aligned}$$

をそれぞれ定義することにする。以上より、ただちに

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad &F_1(q, Q, t) \\ &p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad H' = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \\ \text{(ii)} \quad &F_2(q, P, t) \\ &p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad H' = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \\ \text{(iii)} \quad &F_3(p, Q, t) \\ &q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i}, \quad H' = H + \frac{\partial F_3}{\partial t} \\ \text{(iv)} \quad &F_4(p, P, t) \\ &q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}, \quad H' = H + \frac{\partial F_4}{\partial t} \end{aligned} \tag{4.9}$$

が得られる。これらの変換ではすべて正準方程式は不変に保たれる。変換を引き起こす関数 $F_1 \sim F_4$ を正準変換の母関数と呼ぶ。

§§4.3.1 正準変換の例

(i) 恒等変換

変換の母関数を

$$F_2(q, P, t) = \sum_k q_k P_k$$

ととる。このとき、(4.9) の (ii) から、

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i, \\ Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i, \\ H' &= H + \frac{\partial F_2}{\partial t} = H \end{aligned}$$

が得られる。これは、一般化座標、一般化運動量ともに変換されていない。これを恒等変換と呼び、正準変換の自明な例である。

(ii) 点変換

変換の母関数を

$$F_3(p, Q, t) = - \sum_k g_k(Q) p_k$$

ととる。ここで、 $g_k(Q)$ は新しい一般化座標 Q_i の関数である。このとき、(4.9) の (iii) から、

$$\begin{aligned} q_i &= - \frac{\partial F_3}{\partial p_i} = g_i(Q), \\ P_i &= - \frac{\partial F_3}{\partial Q_i} = \sum_k \frac{\partial g_k(Q)}{\partial Q_i} p_k, \\ H' &= H + \frac{\partial F_3}{\partial t} = H \end{aligned}$$

が得られる。もとの一般化座標 q_i と新しい一般化座標 Q_i の関係は座標間同士の関係であり、座標間の変換に運動量が関与しないという意味で通常座標変換に他ならない。この変換を点変換と呼ぶ。

(ii-a) 極座標変換

デカルト座標 (x, y, z) から極座標 (r, θ, ϕ) へは、

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

である。この変換は正準変換であり、変換の母関数は

$$F_3(p, Q, t) = -(p_x r \sin \theta \cos \phi + p_y r \sin \theta \sin \phi + p_z r \cos \theta)$$

と取ればよい。実際、(4.9) の (iii) から

$$x = - \frac{\partial F_3}{\partial p_x}, \quad y = - \frac{\partial F_3}{\partial p_y}, \quad z = - \frac{\partial F_3}{\partial p_z},$$

を確かめるのは容易である。したがって、デカルト座標で表した運動量と、極座標で表した運動量の関係は(4.9) の (iii) から容易に計算でき、

$$\begin{aligned} p_r &= - \frac{\partial F_3}{\partial r} = p_x \sin \theta \cos \phi + p_y \sin \theta \sin \phi + p_z \cos \theta, \\ p_\theta &= - \frac{\partial F_3}{\partial \theta} = p_x r \cos \theta \cos \phi + p_y r \cos \theta \sin \phi - p_z r \sin \theta, \\ p_\phi &= - \frac{\partial F_3}{\partial \phi} = -p_x r \sin \theta \sin \phi + p_y r \sin \theta \cos \phi \end{aligned}$$

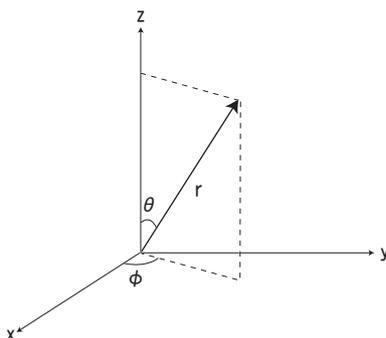


図 8: デカルト座標と極座標

と得られる。

(iii) 一般化座標と一般化運動量の交換
変換の母関数を

$$F_1(q, Q, t) = \sum_k q_k Q_k$$

ととる。このとき、(4.9) の (i) から、

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i, \\ P_i &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i, \\ H' &= H + \frac{\partial F_1}{\partial t} = H \end{aligned}$$

が得られる。もとの一般化座標と一般化運動量は符号を除いて新しい一般化運動量と一般化座標に変換されてしまう。このように、正準方程式を不変に保つ変換としては座標と運動量を交換してしまう変換も可能である。

(iv) ガリレイ変換
ハミルトン関数が

$$H = \sum_a \frac{p_a^2}{2m_a} + \sum_a \sum_{b(>a)} V(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)$$

である一般的な系を考えよう。正準変換の母関数として、(4.9)(ii) のタイプの次の関数を考える。

$$F_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{P}_a, t) = \sum_a \left(\mathbf{P}_a \cdot \mathbf{r}_a - \mathbf{V} \cdot (\mathbf{P}_a t - m_a \mathbf{r}_a) - \frac{1}{2} m_a \mathbf{V}^2 t \right)$$

ここで、小文字で記された量 (\mathbf{r}_a 等) は変換前の量であり、大文字で記された量 (\mathbf{P}_a 等) は変換後の量である。また、 a は質点を識別する添え字である。さらに、 \mathbf{V} は速さの次元を持ったある定ベクトルである。母関数 F_2 が引き起こす正準変換は、(4.9) の (ii) より、

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_a &= \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{P}_a} = \mathbf{r}_a - \mathbf{V} t, \\ \mathbf{p}_a &= \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{r}_a} = \mathbf{P}_a + m_a \mathbf{V}, \quad \text{すなわち} \quad \mathbf{P}_a = \mathbf{p}_a - m_a \mathbf{V} \end{aligned}$$

となる。運動量 \mathbf{p}_a と速度 \mathbf{v}_a には $\mathbf{p}_a = m_a \mathbf{v}_a$ の関係があることを思い出せば、これは §§2.3.1 で述べたガリレイ変換に他ならないことが理解される。したがって、ガリレイ変換は正準変換の一種である。このとき、ハミルトン関数 H は H' へ変換される。

$$\begin{aligned} H' &= H + \left. \frac{\partial F_2}{\partial t} \right|_{\mathbf{p}_a = \mathbf{P}_a + m_a \mathbf{V}, \mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a + \mathbf{V}t} \\ &= \sum_a \frac{1}{2m_a} (\mathbf{P}_a + m_a \mathbf{V})^2 + \sum_a \sum_{b(>a)} V(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b) + \left(-\mathbf{V} \cdot \sum_a \mathbf{P}_a - \sum_a \frac{1}{2} m_a \mathbf{V}^2 \right) \\ &= \sum_a \frac{\mathbf{P}_a^2}{2m_a} + \sum_a \sum_{b(>a)} V(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b) \end{aligned}$$

こうして、ハミルトン関数はガリレイ変換の下で不変である。

§4.4 保存量と対称性

ネーターの定理から、連続的なある変換のもとで物理法則が不変であれば、時間とともに変化しない保存量が存在することが結論された。この節では、逆に保存量が連続的な変換に対する役割を考察する。

§§4.4.1 運動量と並進

演算子

$$\hat{\mathcal{L}}_i^p \equiv \{ p_i, \}_P$$

を考える。この演算子は、ある物理量 \mathcal{O} に対して次の演算を行うことを意味している：

$$\hat{\mathcal{L}}_i^p[\mathcal{O}] = \{ p_i, \mathcal{O} \}_P$$

このとき、

$$\begin{aligned} e^{-a\hat{\mathcal{L}}_i^p} q_j &= \left(1 - a\hat{\mathcal{L}}_i^p + \frac{1}{2}a^2 (\hat{\mathcal{L}}_i^p)^2 + \dots \right) [q_j] \\ &= q_j - a\hat{\mathcal{L}}_i^p[q_j] + \frac{1}{2}a^2 \hat{\mathcal{L}}_i^p [\hat{\mathcal{L}}_i^p[q_j]] + \dots \\ &= q_j - a\{ p_i, q_j \}_P + \frac{1}{2}a^2 \{ p_i, \{ p_i, q_j \}_P \}_P + \dots \\ &= q_j - a(-\delta_{ij}) \\ &= q_j + a\delta_{ij} \end{aligned}$$

となる。よって、演算子 $\hat{\mathcal{L}}_i^p \equiv \{ p_i, \}_P$ は、 $j = i$ のとき座標 q_i を $q_i + a$ だけ一様にずらす演算子として働く。すなわち、運動量 p_i を指数関数の肩にポアソン括弧の意味で載せた演算子は、空間並進を引き起こす演算子となっていることがわかる。

§§4.4.2 角運動量と回転

演算子

$$\hat{\mathcal{L}}_i^L \equiv \{ L_i, \}_P$$

を考える。ここで、 L_i は角運動量の i 成分であり、簡潔に

$$L_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} q_j p_k,$$

$$\epsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} 1 & \text{for } (i, j, k) = (1, 2, 3) \text{ 及びこの巡回置換} \\ -1 & \text{for } (i, j, k) = (3, 2, 1) \text{ 及びこの巡回置換} \\ 0 & \text{上記以外} \end{cases}$$

と書ける。ここに ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルである。たとえば、角運動量の第 3 成分、すなわち z 成分は

$$\begin{aligned} L_3 &= \epsilon_{312} q_1 p_2 + \epsilon_{321} q_2 p_1 \\ &= q_1 p_2 - q_2 p_1 = q_x p_y - q_y p_x \end{aligned}$$

であり、確かに各運動量の z 成分を与える。他の成分についても同様に確かめられる。以後、簡単のため各運動量の第 3 成分を例にとり考えていこう。今、 $\hat{L}_3^L = \{ q_1 p_2 - q_2 p_1, \}$ であり、ポアソン括弧を計算することで、

$$\hat{L}_3^L[q_1] = -q_2 \{ p_1, q_1 \}_P = q_2, \quad \hat{L}_3^L[q_2] = q_1 \{ p_2, q_2 \}_P = -q_1$$

が得られる。したがって、

$$\begin{aligned} e^{-\theta \hat{L}_3^L} q_1 &= \left(1 - \theta \hat{L}_3^L + \frac{1}{2} \theta^2 (\hat{L}_3^L)^2 + \dots \right) [q_1] \\ &= q_1 - \theta \hat{L}_3^L[q_1] + \frac{1}{2} \theta^2 \hat{L}_3^L [\hat{L}_3^L[q_1]] + \dots \\ &= q_1 - \theta q_2 - \frac{1}{2} \theta^2 q_1 + \frac{1}{3!} \theta^3 q_2 + \dots \\ &= q_1 \left(1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right) - q_2 \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots \right) \\ &= q_1 \cos \theta - q_2 \sin \theta \end{aligned}$$

となる。同様な計算により

$$e^{-\theta \hat{L}_3^L} q_2 = q_2 \cos \theta + q_1 \sin \theta$$

となることが示される。こうして、

$$e^{-\theta \hat{L}_3^L} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}$$

とまとめることができる。こうして、演算子 \hat{L}_3^L は、3 軸に垂直な座標平面 (q_1, q_2) を角 θ だけ一様に回転させる演算子として働く。同様に、すなわち、角運動量 L_i を指数関数の肩にポアソン括弧の意味で載せた演算子は、 i 軸に垂直な平面内で空間回転を引き起こす演算子となっていることがわかる。

§ 4.5 関数としての作用

§§4.5.1 一般化座標微分と一般化運動量

始点は同じであるが終点が異なる 2 つの古典軌道、経路 1 と経路 2 を考えよう。どちらの軌道も実際に起こり得る軌道である。経路 1 に従って求められる作用を S_1 、経路 2 に従って求められる作用を S_2 としよう。経

路1から経路2に移ると、軌道は $\delta q(t) = q_2(t) - q_1(t)$ だけ変化する。ここで、 $q(t)$ は経路1で実現される一般化座標である。但し、始点は一致しているので、 $\delta q(t_0) = 0$ である。ここで、 t_0 は出発時の始点での時刻である。作用の変化 δS は

$$\begin{aligned} \delta S &= S_2(q_2, \dot{q}_2) - S_1(q_1, \dot{q}_1) \\ &= \int_{t_0}^t dt \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) \\ &= \int_{t_0}^t dt \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right) - \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i \right) \\ &= \int_{t_0}^t dt \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \Big|_{t_0} \end{aligned}$$

と計算される。ここで、最終行の被積分関数は、オイラー・ラグランジュ方程式により零となり消える。従って、作用の変化 δS は、始点は一致しているので時刻 t_0 での一般化座標の変化は零($\delta q_i(t_0) = 0$)であることと、一般化運動量の定義 $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ を用いて

$$\begin{aligned} \delta S &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i(t) \\ &= \sum_i p_i \delta q_i \end{aligned}$$

と得られる。こうして、作用 S は一般化座標 q_i の関数であることがわかり、上式から、

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (4.10)$$

であることが言える。

一般化運動量の保存法則を、作用を用いて見直してみよう。図10のように、経路1と経路1'を考える。2つの経路は点Aから点Bへ、また点Dから点Cへのように一様に並進した経路である。もちろん、一様に回転したものと考えても良い。空間の一様性、または等方性から、経路1と経路1'で作用は等しい。すなわち、

$$S_1 = S_{1'}$$

点Aから点Dまで質点が運動するが、経路をA→B→C→Dと考えてみよう、ただし、A→B、C→Dは微少であるとする。経路1が本当の古典軌道であるなら、作用は最小であり、微少変換のもとで不変に保たれるは

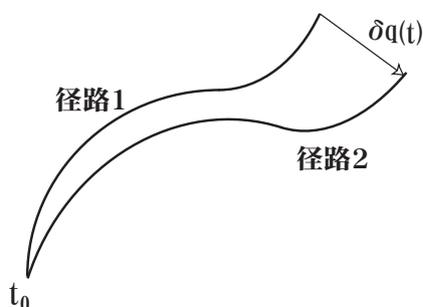


図 9:

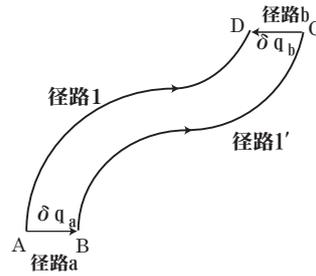


図 10:

ずである。すなわち、図 10 の径路 a と径路 b が微小である限り

$$S_1 = \delta S_a + S_{1'} + \delta S_b$$

となる。ここで、 δS_a 、 δS_b は径路 a、b での作用である。ところが、並進（または回転）対称性から、 $S_1 = S_{1'}$ が成り立ったので、上式は

$$\delta S_a + \delta S_b = 0, \quad \text{すなわち} \quad \delta S_a = -\delta S_b$$

が成り立つことを意味する。ここで、

$$\begin{aligned} \delta S_a &= \left. \frac{\partial S}{\partial q} \right|_a \delta q_a = p_a \delta q_a, \\ \delta S_b &= \left. \frac{\partial S}{\partial q} \right|_b \delta q_b = p_b \delta q_b, \end{aligned}$$

と表される。ここで p_a 、 p_b は A 点、D 点での一般化運動量である。図 10 より $\delta q_a = -\delta q_b$ であるので、 $\delta S_a = -\delta S_b$ の関係を用いると、

$$p_a = p_b$$

が導かれる。すなわち、空間の対称性（並進または回転）から、一般化運動量は A、D において同じ値を持つ、すなわち保存することが再び得られた。

§§4.5.2 時間微分とエネルギー

今度は始点と終点ともに固定して考えよう。ただし、2つの異なる軌道で、質点が終点に到達する時刻が異なるとする。作用 S はラグランジアン L の時間積分 $S = \int dt L$ であるので、作用の時間導関数はラグランジアン L そのものであり、

$$\frac{dS}{dt} = L$$

が成り立つ。一方、作用は前節で見たように一般化座標 q の関数でもあったので、時間に関する全微分は

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} \\ &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i p_i \dot{q}_i \end{aligned}$$

と書き表わされる。ここで、(4.10)を用いた。こうして、 $\frac{dS}{dt} = L$ であることを用いて、上式は、

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} &= -\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - \frac{dS}{dt}\right) \\ &= -\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) \\ &= -H\end{aligned}$$

となる。ここで、ラグランジアン L とハミルトン関数 H の関係 (4.2) を用いた。まとめると、

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \quad (4.11)$$

が得られる。すなわち、作用の時間偏微分はハミルトン関数 H に負号を付けたものを与える。

§§4.5.3 簡約化された作用

ラグランジアン L とハミルトン関数 H を結ぶ関係式 $L = \sum_i p_i \dot{q}_i - H$ から、作用 S は

$$S = \int_{t_0}^t dt L = \int_{t_0}^t dt \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H \right)$$

と書ける。ハミルトン関数 $H(q, p, t)$ が時間に依存しないとき、 $H(q, p) = E = \text{定数}$ として、作用 S は

$$\begin{aligned}S &= \int_{t_0}^t dt \sum_i p_i \dot{q}_i - E(t - t_0) \\ &\equiv S_0 - E(t - t_0)\end{aligned}$$

となる。ここで、 S_0 として

$$S_0 = \int_{t_0}^t dt \sum_i p_i \dot{q}_i = \sum_i \int p_i dq_i \quad (4.12)$$

と定義する。この S_0 を簡約化された作用と呼ぶ。

§ 4.6 ハミルトン・ヤコビ方程式

ハミルトン関数 $H(q, p, t)$ は一般化座標 q と一般化運動量 p 、及び時間 t の関数であるが、一般化運動量 p_i は作用を一般化座標で偏微分したものの $\frac{\partial S}{\partial q_i}$ であることが前節で示された。従って、(4.11) 式は、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_1, q_2, \dots, q_s, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, t\right) = 0 \quad (4.13)$$

と書き表される。これはハミルトン・ヤコビ方程式と呼ばれる。

ハミルトン・ヤコビ方程式が解ければ、運動は解けたことになる。一般的な方法を述べておこう。作用 S は s 個の一般化座標 q_i ($i = 1, 2, \dots, s$) と 1 個の時間 t の、あわせて $s + 1$ 個の変数を持つ関数である。ハミルトン・ヤコビ方程式はこの $s + 1$ 個の変数を持つ関数 S に対する 1 階偏微分方程式に他ならない。したがって、この方程式が解ければ $s + 1$ 個の積分定数 ($\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s, \alpha_0$) が出てくるはずである。ハミルトン・ヤコビ方程

式は S 自身は含まず、 S の導関数のみ含んでいるので、方程式が解けた場合には積分定数のうちの一つは必ず加法的になっている。つまり、微分したら積分定数の内の一つは消える。したがって、解 S は、

$$S = S_{\text{sol}}(q_1, q_2, \dots, q_s, t; \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s) + \alpha_0$$

という形を持つ。このとき、 $S_{\text{sol}}(q, \alpha)$ を、 q を一般化座標、 α を新しい運動量 P とする正準変換の母関数と考えよう。式 (4.9) では $F_2 = S_{\text{sol}}$ ということを意味する。こうして、(4.9) の (ii) から

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial S_{\text{sol}}}{\partial q_i}, \\ Q_i &= \frac{\partial S_{\text{sol}}}{\partial \alpha_i} (\equiv \beta_i), \\ H' &= H + \frac{\partial S_{\text{sol}}}{\partial t} (= 0) \end{aligned}$$

となる。第 3 式は、ハミルトン・ヤコビ方程式から零になる。新しい一般化座標 $Q_i (= \beta_i)$ と一般化運動量 $P_i (= \alpha_i)$ は、ハミルトン関数 H' が 0 であることから、時間発展しない $\left(-\frac{\partial H'}{\partial Q_i} = \frac{\partial H'}{\partial P_i} = 0\right)$ 。すなわち定数である。こうして、運動は解けたことになる。

§§4.6.1 振動

一様な重力場のもとに置かれた単振り子を考えよう。振り子の鉛直線からの角を θ 、振り子に付けられた質点の質量を m 、振り子の糸の長さを l 、重力加速度を g とし、位置エネルギーの基準を振り子の支点の高さに取ると、ラグランジュ関数 L は

$$L = \frac{m}{2} l^2 \dot{\theta}^2 + mgl \cos \theta$$

で与えられる。ここで、 t を時間として $\dot{\theta} \equiv \frac{d\theta}{dt}$ である。変数 θ に関する運動方程式（オイラー・ラグランジュ方程式）は

$$ml^2 \ddot{\theta} + mgl \sin \theta = 0$$

となる。一般化運動量 p_θ は定義により

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2 \dot{\theta}$$

であるので、ハミルトン関数 $H(\theta, p_\theta)$ は

$$H(\theta, p_\theta) = p_\theta \dot{\theta} - L = \frac{p_\theta^2}{2ml^2} - mgl \cos \theta$$

となる。ハミルトン関数 $H(\theta, p_\theta)$ に対して、ハミルトン・ヤコビ方程式を書こう。簡約化された作用を S_0 とし、 $p_\theta = \frac{\partial S}{\partial \theta} = \frac{dS_0}{d\theta}$ であるので、

$$\frac{1}{2ml^2} \left(\frac{dS_0}{d\theta} \right)^2 - mgl \cos \theta = E$$

となる。このハミルトン・ヤコビ方程式を解くと、 $S = S_0 - Et$ より

$$S = -Et \pm \sqrt{2ml^2} \int \sqrt{E + mgl \cos \theta} d\theta$$

と形式的に書ける。この S の両辺を E で微分すると、

$$\frac{\partial S}{\partial E} = -t \pm \sqrt{\frac{ml^2}{2}} \int \frac{d\theta}{\sqrt{E + mgl \cos \theta}}$$

となるが、左辺の $\frac{\partial S}{\partial E} \equiv \beta$ は、ハミルトン・ヤコビの一般論から定数であることがわかる。以下では、簡単のために複号 + を取っておこう。上の式は

$$\frac{1}{2} \left(\frac{E}{mgl} + 1 \right) \equiv k^2, \quad \sin \frac{\theta}{2} \equiv k \sin \phi$$

とおくと、

$$t + \beta = \sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^\phi \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}}$$

と書き直される。右辺に現れた積分

$$F(\phi, k) \equiv \int_0^\phi \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}} \equiv u$$

は第 1 種の楕円積分と呼ばれる。逆にこれを $\sin \phi$ について解いたと考え、

$$\sin \phi = \operatorname{sn}(u, k)$$

と書く。この $\operatorname{sn}(u, k)$ をヤコビの楕円関数と呼ぶ。こうして、振動の運動方程式は

$$\sin \frac{\theta}{2} = k \operatorname{sn} \left(\sqrt{\frac{g}{l}}(t + \beta), k \right)$$

と楕円関数で表わされることになる。求めたいのは $\theta(t)$ であったことを思い出そう。この式により、 $\theta(t)$ は完全に解けており、解は逆三角関数と楕円関数で表わされることになる。4 つ前の式と 5 つ前の式から、積分の上端が $\phi = \frac{\pi}{2}$ になったときに振れの角 θ は最大に達する ($\sin \frac{\theta}{2} = k \sin \phi \rightarrow k$) ことがわかる。振り子の周期を T とすると、これは 4 分の 1 周期の時におきるので、4 つ前の式から $t + \beta = 0$ で $\phi = 0$ 、 $t + \beta = \frac{T}{4}$ のときに $\phi = \frac{\pi}{2}$ として

$$T = 4 \sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}} \equiv 4 \sqrt{\frac{l}{g}} K(k)$$

となる。ここで、

$$K(k) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}}$$

は第 1 種の完全楕円積分と呼ばれる。この被積分関数を k が小さいとして展開してから積分する。ここで、振れの角の最大値を θ_0 として、 $k = \sin \frac{\theta_0}{2}$ であるので、 k が小さいと言うことは、振れの角の最大、すなわち振り子の振幅が小さいということである。積分を実行していくと、

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \left(1 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 k^2 + \left(\frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}\right)^2 k^4 + \left(\frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6}\right)^2 k^6 + \dots \right)$$

となる。こうして、右辺の級数の第 2 項以降は振れ幅に関係した量 k の 2 乗またはそれ以上のべきに比例し、振れ幅が小さいときには無視して良い。こうして、振幅が小さい場合には、振り子の周期として

$$T \approx 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$$

が得られる。これは、ガリレオ・ガリレイが発見したとされる振り子の等時性に他ならない。

§ 4.7 リュービルの定理

一般に、 n 変数の 1 階連立微分方程式系

$$\frac{d\xi_i}{dt} = P_i(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, t) \quad (4.14)$$

があったとしよう。この方程式系が積分定数 a_i ($i = 1, 2, \dots, n$) を用いて

$$\xi_i = \xi_i(a_1, a_2, \dots, a_n, t)$$

と解けたとする。このとき、次のヤコビ行列式

$$u(t) = \det \left| \frac{\partial \xi_i}{\partial a_j} \right| = \sum_P (-)^P \frac{\partial \xi_1}{\partial a_{j_1}} \frac{\partial \xi_2}{\partial a_{j_2}} \dots \frac{\partial \xi_n}{\partial a_{j_n}}$$

について考察しよう。ここで、 (j_1, j_2, \dots, j_n) は $(1, 2, \dots, n)$ の互換であり、それを P で表している。和はすべての互換についてとり、偶置換では $(-)^P = 1$ 、奇置換では $(-)^P = -1$ である。最右辺は行列式の定義である。

今、ヤコビ行列式 u を変数 t で微分しよう。このとき、

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= \sum_P \sum_{k=1}^n (-)^P \frac{\partial \xi_1}{\partial a_{j_1}} \dots \frac{\partial \frac{d\xi_k}{dt}}{\partial a_{j_k}} \dots \frac{\partial \xi_n}{\partial a_{j_n}} \\ &= \sum_P \sum_{k=1}^n (-)^P \frac{\partial \xi_1}{\partial a_{j_1}} \dots \frac{\partial P_k}{\partial a_{j_k}} \dots \frac{\partial \xi_n}{\partial a_{j_n}} \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \frac{\partial P_k}{\partial \xi_l} \sum_P (-)^P \frac{\partial \xi_1}{\partial a_{j_1}} \dots \frac{\partial \xi_l}{\partial a_{j_l}} \dots \frac{\partial \xi_n}{\partial a_{j_n}} \end{aligned}$$

と計算できる。1 行目から 2 行目へは (4.14) を用いた。最終行の置換 P についての和は行列式の定義になっているが、 $l \neq k$ では行または列に同じものが現れ、行列式は零となる。よって、 l についての和は $l = k$ のみが残る。こうして、 P についての和はヤコビ行列式 u に戻り、結局、

$$\frac{du(t)}{dt} = \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial P_k}{\partial \xi_k} \right) u(t) \quad (4.15)$$

が得られる。

このとき、(4.15) の右辺の括弧内が零であれば、 u は t に依らない定数となることがわかる。解を求めたときの積分定数 a_i を、 $t = 0$ での値 $a_i = \xi_i(t = 0)$ にとれば、ヤコビ行列式 u は $u(t = 0) = \det \frac{\partial \xi_i(t = 0)}{\partial \xi_j(t = 0)} = 1$ となり、 u が t に依らないことから、このときには、

$$u(t) = \det \left| \frac{\partial \xi_i(t)}{\partial \xi_j(0)} \right| = 1 \quad (4.16)$$

が得られる。これをリュービルの定理と呼ぶ。

この定理を力学に適用しよう。ハミルトン方程式は 1 階の連立微分方程式系であり

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, s)$$

であったので、リュービルの定理にあわせて

$$\begin{aligned}\xi_i &= q_i, & \xi_{s+i} &= p_i, & (i = 1, 2, \dots, s) \\ P_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, & P_{s+i} &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}, & (i = 1, 2, \dots, s)\end{aligned}$$

と書こう。このとき、 $n = 2s$ である。式 (4.15) の括弧内は

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial P_k}{\partial \xi_k} = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial}{\partial p_i} \left(-\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \right) = 0$$

より、ヤコビ行列式は定数 1 となる。ハミルトン形式では位置と運動量は対等に扱われているので、位置と運動量を纏めた空間 (q, p) を位相空間 (相空間)† と呼ぼう。相空間の体積

$$\Gamma = \int \int \cdots \int dq_1 dq_2 \cdots dq_s dp_1 dp_2 \cdots dp_s$$

を考える。これは時間発展とともに不変である。すなわち、

$$\begin{aligned}\Gamma(t) &= \int \int \cdots \int dq_1(t) dq_2(t) \cdots dq_s(t) dp_1(t) dp_2(t) \cdots dp_s(t) \\ &= \int \int \cdots \int \det \left| \frac{\partial \xi_i(t)}{\partial \xi_j(0)} \right| dq_1(0) dq_2(0) \cdots dq_s(0) dp_1(0) dp_2(0) \cdots dp_s(0) \\ &= \Gamma(0)\end{aligned}$$

となる。ここで、ヤコビ行列式が定数 1 であることを用いた。

さて、系の時間発展は正準変換として表すことができた。時間発展で相空間の体積素片が不変であるので、一般に正準変換のもとでも相空間の体積は不変であることが予想される。以下にこれを示そう。今、相空間の変数をまとめて、

$$\mathbf{a} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_s, p_1, p_2, \dots, p_s)$$

と記す。正準変換後は

$$\mathbf{A} \equiv (Q_1, Q_2, \dots, Q_s, P_1, P_2, \dots, P_s)$$

である。ハミルトン方程式は正準変換の下で不変であるので、

$$\frac{da_i}{dt} = \sum_{l=1}^{2s} J_{il} \frac{\partial H}{\partial a_l}, \quad \frac{dA_i}{dt} = \sum_{l=1}^{2s} J_{il} \frac{\partial H}{\partial A_l} \quad (4.17)$$

と書ける。ただし、 J_{il} として

$$J_{il} = \begin{cases} \delta_{i+s,l} & (i, l = 1, 2, \dots, s) \\ -\delta_{i,l-s} & (i, l = s+1, s+2, \dots, 2s) \end{cases}$$

である。このとき、(4.17) の第 2 式の左辺は

$$\begin{aligned}\frac{dA_i}{dt} &= \sum_j \frac{\partial A_i}{\partial a_j} \frac{da_j}{dt} \\ &= \sum_j \frac{\partial A_i}{\partial a_j} \sum_k J_{jk} \frac{\partial H}{\partial a_k} = \sum_j \sum_k \frac{\partial A_i}{\partial a_j} J_{jk} \sum_l \frac{\partial H}{\partial A_l} \frac{\partial A_l}{\partial a_k} \\ &= \sum_l \left(\sum_j \sum_k \frac{\partial A_i}{\partial a_j} J_{jk} \frac{\partial A_l}{\partial a_k} \right) \frac{\partial H}{\partial A_l}\end{aligned}$$

†数学で言う topological space ではなく、物理学で用いる phase space のことであるが、訳語が同じになってしまうので、相空間と呼ぶことにする。

となる。ここで、1行目から2行目へはハミルトン方程式 (4.17) を用いている。これをハミルトン方程式 (4.17) の第2式と比較すると、

$$\sum_j \sum_k \frac{\partial A_i}{\partial a_j} J_{jk} \frac{\partial A_l}{\partial a_k} = J_{il}$$

が得られる。表記を簡単にするために、 $M_{ij} \equiv \frac{\partial A_i}{\partial a_j}$ を導入すると、上式は

$$\sum_j \sum_k M_{ij} J_{jk} M_{lk} = J_{il}, \quad \text{または} \quad MJ {}^tM = J$$

と書ける。ここで、第2式は行列表記をした。 tM は行列 M の転置行列である。行列式をとると $\det M = \det {}^tM$ より、

$$(\det M)^2 = 1$$

が得られるが、恒等変換のときには明らかに $M = 1$ と単位行列になることから、上式から

$$\det M \left(= \det \left| \frac{\partial A_i}{\partial a_j} \right| \right) = 1$$

となる。こうして、正準変換前の相空間の体積 Γ と変換後の相空間の体積 Γ' は

$$\begin{aligned} \Gamma' &\equiv \int \int \cdots \int dQ_1 dQ_2 \cdots dQ_s dP_1 dP_2 \cdots dP_s \\ &= \int \int \cdots \int \det \left| \frac{\partial A_i}{\partial a_j} \right| dq_1 dq_2 \cdots dq_s dp_1 dp_2 \cdots dp_s \\ &= \int \int \cdots \int dq_1 dq_2 \cdots dq_s dp_1 dp_2 \cdots dp_s \\ &= \Gamma \end{aligned} \tag{4.18}$$

となり、正準変換の下で相空間の体積は不変であることが示される。これをリュウビルの定理と呼ぶ。

5章 物質粒子の波動性—量子力学—

第1章では、物質粒子には波動性が伴うことを主張した。電子による二重スリットの実験結果から、物質粒子に伴う波は、粒子を見いだす確率密度を表すものであることを述べた。この波動の伝搬を表すファインマンの径路積分を導いたが、そこに現れる作用 S が決まらないので、第2章で粒子の古典軌道運動を頼りに作用を決めることになった。

ここでは、粒子の波動性については話の本流から離れてしまったので、本章では再び粒子の波動性に焦点を当てて、粒子に伴う確率波が従う方程式を導くことにする。また、導かれた波の方程式から、どのように古典運動と対応関係が存在するかを、“ファインマンの径路積分での作用が最小となる径路”という以外の対応関係を見ておこう。

§5.1 アインシュタイン・ドブロイの関係

簡単のために1次元の古典運動を考えよう。ハミルトン関数 H は

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

と書ける。ハミルトン・ヤコビ方程式は

$$\frac{\partial S(q, t)}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = 0$$

である。今、ハミルトン関数は時間をあからさまに含まないで、エネルギーは保存される。系のエネルギーを E として、 $H = E$ より、ハミルトン・ヤコビ方程式と一般化運動量 p は

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= -E, \\ \frac{\partial S}{\partial q} &= p = \sqrt{2m(E - V(q))} \end{aligned}$$

となる。以上より、作用 S は

$$S(q, t) = -Et + \int dq \sqrt{2m(E - V(q))}$$

と得られる。

自由粒子のときには、相互作用ポテンシャル $V(q)$ は0である。このときには運動量 p も保存量であり、積分は実行でき、

$$\begin{aligned} S(q, t) &= -Et + q\sqrt{2mE} \\ &= -Et + pq \end{aligned}$$

と得られる。ここで、 $p = \sqrt{2mE}$ である。

ここまでは、古典運動を考えていただけであるが、1章に立ち返り、粒子に伴う確率波の伝搬を考えよう。我々は、自由粒子の場合には、確率波の伝搬に必要な作用 S をすでに手にしている。初期には $t_0 = 0$ 、 $q_0 = 0$ とし、 $q = x$ と記すと、ファインマンの径路積分は

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int \mathcal{D}[x(t)] K(x, 0; t, 0) \psi(0, 0), \\ K(x, 0; t, 0) &= \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} = \mathcal{N} e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - px)} \end{aligned}$$

となる。従って、“波” $\psi(x, t)$ は平面波

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

のように振る舞う。

一方、一般の波動現象では、代表的な正弦波では、

$$\sin(\omega t - kx) = \sin\left(2\pi\nu t - \frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

の様に記述される。ここで、 ω は角振動数、 ν は振動数、 k は波数、 λ は波長であり、各々

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

という関係がある。ここで、 T は周期である。数学的には、 $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ の関係があるので、複素数の波 $e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$ も同じ角振動数、波数を持つ正弦波の重ね合わせで書かれている。従って、粒子に伴う確率波を、通常の角振動数、波数を持つ波で表せば、

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = e^{-i(\omega t - kx)}$$

と書かれるべきものである。両辺を見比べると、粒子のエネルギー E 、運動量 p と、波の角振動数 ω 、波数 k の間に、次の関係が存在することがわかる。

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega (= h\nu), \\ p &= \hbar k \left(= \frac{h}{\lambda} \right) \end{aligned} \quad (5.1)$$

ここで、 $h \equiv 2\pi\hbar$ と定義した。関係 (5.1) を、アインシュタイン・ド・ブロイの関係と呼ぶ。定数 h をプランク定数と呼ぶ。これを 2π で割った \hbar がよく使われる。

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545716 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

§ 5.2 シュレーディンガー方程式

粒子に伴う波の伝搬を記述するために、ホイヘンスの原理に基づき、(1.1)、(1.2) 式から出発した。再掲しておこう。

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t + dt) &= \int d^3\mathbf{r}' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt) \psi(\mathbf{r}', t), \\ K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; dt) &= \mathcal{N} e^{iS(\mathbf{r}, \mathbf{r}', dt)/\hbar} \end{aligned} \quad (5.2)$$

確率波を扱うだけでは作用 S は決まらなかったが、空間の一様・等方性、時間の一様性、ガリレイの相対性原理から決定された。時間間隔 dt は微少であるので、作用 S は

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', dt) = \int dt L \sim Ldt = \left(\frac{1}{2}m \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{dt} \right)^2 - V(\mathbf{r}) \right) dt$$

となる。ここで、速度ベクトルは 2 点間の位置ベクトルの差 $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ を、要した時間 dt で割ったものであり、また、時間間隔 dt が微少であることから位置エネルギー V の引き数は \mathbf{r} を採用した。こうして、確率波の時間発展 (5.2) 式は

$$\psi(\mathbf{r}, t + dt) = \mathcal{N} \int d^3\mathbf{r}' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2dt} - V(\mathbf{r})dt \right)\right) \psi(\mathbf{r}', t) \quad (5.3)$$

となる。以下では計算を簡単化するために、1次元で考え、 \mathbf{r} を x と記すことにする。

$$\psi(x, t + dt) = \mathcal{N} \int dx' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(x-x')^2}{2dt} - V(x)dt\right)\right) \psi(x', t) \quad (5.4)$$

右辺の被積分関数中の $\psi(x', t)$ を x の周りで展開すると

$$\psi(x', t) = \psi(x, t) + \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x}(x' - x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2}(x' - x)^2 + \dots$$

となる。この展開式を (5.4) 式に代入すると

$$\begin{aligned} \psi(x, t + dt) &= \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(x-x')^2}{2dt} - V(x)dt\right)\right) \\ &\quad \times \left(\psi(x, t) + \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x}(x' - x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2}(x' - x)^2 + \dots\right) \end{aligned}$$

と書けるが、ガウス・フレネル積分の公式

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\alpha z^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \\ \text{すなわち} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{i\frac{m}{2\hbar dt}(x-x')^2} &= \sqrt{\frac{\pi\hbar 2dt}{m}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx' (x-x')^2 e^{i\frac{m}{2\hbar dt}(x-x')^2} = i\frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\hbar 2dt}{m}\right)^{\frac{3}{2}}, \\ \text{および} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx' (x-x') e^{i\frac{m}{2\hbar dt}(x-x')^2} &= 0, \end{aligned}$$

を用いれば、時刻 $t + dt$ での波 $\psi(x, t + dt)$ は

$$\psi(x, t + dt) = \psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)dt} + \frac{1}{2} i \frac{1}{2} \left(\frac{2\hbar dt}{m}\right) \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)dt} + \dots$$

と書ける。ここで、 $dt \rightarrow 0$ で左辺と右辺が一致するように、規格化因子 \mathcal{N} として $\mathcal{N} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar dt}}$ ととった。

さらに、 dt が微少であることから、 $e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)dt} = 1 - \frac{i}{\hbar} V(x)dt + \dots$ と展開し、後で $dt \rightarrow 0$ の極限操作をすることをあらかじめ考慮して、 dt^2 以上の微量を無視すると、

$$\psi(x, t + dt) = \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{i}{\hbar} V(x)dt + i\hbar \frac{1}{2m} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} dt + \dots$$

となる。微分の定義 $\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\psi(x, t + dt) - \psi(x, t)}{dt}$ を思い出すと、上式で両辺 dt で割ってから $dt \rightarrow 0$ の極限をとると

$$\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V(x)\psi(x, t) + i\hbar \frac{1}{2m} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2}$$

となる。ここまでは、空間1次元として考えてきたが、3次元空間に戻すと $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ のところが、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

と、ラプラシアンに変わる。こうして、物質粒子に伴う確率波の従う方程式が得られる。

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.5)$$

波動性を決定するこの方程式はシュレーディンガー方程式とよばれ、確率波 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は波動関数と呼ばれる。

自由粒子では、相互作用のポテンシャル関数 $V(\mathbf{r}) = 0$ であるので、シュレーディンガー方程式の解として、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (5.6)$$

が得られる。ここで、 A は方程式だけでは決まらない定数である。これは §5.1 での平面波であり、自由粒子では確かに平面波として波は伝搬していくことがわかる。この解を用いると、たとえば、ベクトル \mathbf{p} の x 成分を p_x などとして

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}, t) = p_x \psi(\mathbf{r}, t), \quad \text{すなわち} \quad -i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}, t)$$

となっている。§5.1 で記述したように、平面波の \mathbf{p} は粒子の運動量に対応していたので、古典力学での運動量 \mathbf{p} は、演算子 $\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar \nabla$ に置き換わったとも言える。こうして、シュレーディンガー方程式 (5.5) は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \\ \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \\ \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar \nabla \left(= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \end{aligned} \quad (5.7)$$

こうして、 $\hat{\mathbf{p}}$ は運動量演算子と呼ばれ、 \hat{H} は古典力学のハミルトン関数と形式的に同じ形を持つことになるので、演算子 \hat{H} をハミルトニアンと呼ぶ。

ポテンシャル関数 $V(\mathbf{r})$ が零でない場合でも、系のエネルギーは確定した値を持つことが多い。このときには、シュレーディンガー方程式 (5.7) の解を $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r})$ として時間に依存する部分と座標に依存する部分に変数分離し、シュレーディンガー方程式に代入することにより、

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\mathbf{r}), \\ \hat{H} \psi(\mathbf{r}) &= E \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (5.8)$$

という第 2 の式が得られる。これを時間に依存しないシュレーディンガー方程式、または単にシュレーディンガー方程式とよぶ。

粒子の波動性が顕著に現れる物理現象では、作用を最小にする古典軌道を考えているだけでは不十分であり、相互作用の場 $V(\mathbf{r})$ のもとでシュレーディンガー方程式を解いて系を記述することが必要となる。これに関しては第 4 部で詳述しよう。

§ 5.3 重ね合わせの原理

第 1 章において、系の波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の絶対値の 2 乗は、時刻 t に位置 \mathbf{r} に粒子を見出す確率密度を表すと考えることが、電子の 2 重スリットの実験結果を理解する上で必要な解釈であることを述べた。系の波動性は波動関数 ψ で表わされることになり、系の状態は波動関数で決定される。古典物理学では系の状態は物理量の組によって決定され、その時間発展は物理量自身の時間発展を考えることで決定された。すなわち、古典物理学では系の状態と物理量は不可分のものであった。ところが、粒子の波動性をも対象にする量子物理学では、系の状態は波動関数で記述されるが、物理量は演算子となっており、状態と物理量は分離される。

例えば平面波 $\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}$ に対して、物理量としての運動量は、運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ である。では、系の状態からいかにして物理量を引き出すのだろうか。数学的には、状態関数である波動関数に物理量である演算子を作用させることで、数値としての物理量を得ることになる。平面波と運動量の例では

$$\hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \nabla Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}, t)$$

となる。

一般に、状態関数としての波動関数 $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ に、物理量 \hat{A} を作用させたとき、結果 a_n が得られたとする。このとき、

$$\hat{A}\psi_n(\mathbf{r}, t) = a_n\psi_n(\mathbf{r}, t)$$

となるであろう。このとき、 a_n を物理量 \hat{A} に対する固有値、 $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ を \hat{A} に対する固有関数と呼ぶ。この操作は、物理的には、系の状態 ψ_n に対して物理量 \hat{A} の測定を行った結果、測定値 a_n が得られ、かつ系の状態は変化しなかったことを意味しており、測定過程を数学的にあらわしたものと考えられる (図 11)。

シュレーディンガー方程式は波動関数 ψ に対して線形な微分方程式であるので、波動関数 ψ_1 、 ψ_2 がともにシュレーディンガー方程式の解

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hat{H}\psi_1, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hat{H}\psi_2$$

であるなら、 c_1 、 c_2 を定数として $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ もまた同じシュレーディンガー方程式の解である。これを重ね合わせの原理と呼ぶ。一般に、任意の波動関数は、ある演算子の固有関数の重ね合わせで書ける。すなわち、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r}) \quad (5.9)$$

もちろん、固有関数の指標 n が連続量である場合には、 n についての和は積分に置き換わる。たとえば、運動量演算子の固有関数である平面波を ψ_n とする場合には、 $n \rightarrow \mathbf{p}$ となり、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \iiint d^3\mathbf{p} c_{\mathbf{p}}(t)e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$$

と表わされる。これは数学的には \mathbf{r} から \mathbf{p} へのフーリエ変換に他ならない。

§ 5.4 波動関数の確率解釈

§§5.4.1 波動関数の確率解釈

波動関数が (5.9) のように、演算子 \hat{A} の固有状態の重ね合わせで書かれているときには、物理量 \hat{A} の確定値を与えることはできない。実際

$$\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\hat{A}\psi_n(\mathbf{r}) = \sum_n a_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r}) \neq A\psi(\mathbf{r}, t)$$

であり、もとの状態 ψ に比例しない。この状態関数 ψ には、固有値 a_n を与える固有状態 ψ_n が複数の n について混じっている。では、この状態関数 ψ はどのように解釈されるべきであろうか。

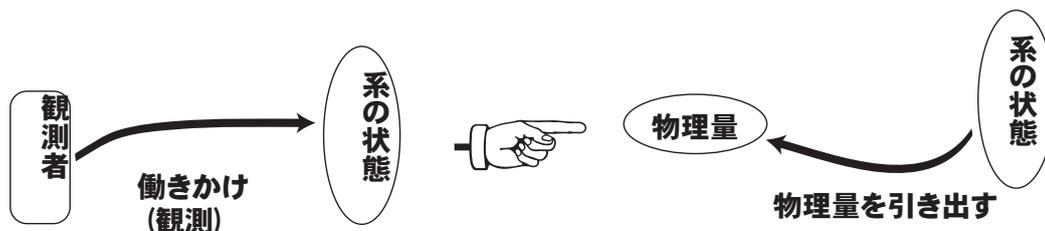


図 11:

波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ は粒子を \mathbf{r} の位置に見いだす確率密度であったことを思い起こそう。粒子を確実に位置 \mathbf{r}_0 に見いだす “位置の固有状態” は

$$\hat{\mathbf{r}}\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_0\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$$

という固有値方程式を満たすべきである。この解は

$$\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

である。ここで右辺の $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ はディラックのデルタ関数と呼ばれ、

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty & x = x_0 \\ 0 & x \neq x_0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) = 1, \quad x\delta(x) = 0$$

を満たす。よって、任意の波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}_0 c_{\mathbf{r}_0} \psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$$

と重ね合わせで書けるはずであるが、 $\psi_{\mathbf{r}_0}$ として上式のデルタ関数を代入して積分を実行すると、展開係数 $c_{\mathbf{r}_0}$ は

$$c_{\mathbf{r}} = \psi(\mathbf{r})$$

となる。こうして、 $|c_{\mathbf{r}}|^2$ は $|\psi(\mathbf{r})|^2$ と一致し、位置の固有関数で波動関数を展開した場合の展開係数の絶対値の2乗は、位置 \mathbf{r} に粒子を見いだす確率密度に一致することがわかる。言い換えれば、 $|c_{\mathbf{r}}|^2$ は状態が位置の固有状態 $\psi_{\mathbf{r}}$ である確率を表していると言って良い。

こうして、一般に、展開係数 c_n の絶対値の2乗、 $|c_n|^2$ は、ある物理量 \hat{A} の固有状態 ψ_n に系の状態を見いだす確率を表していると考えられる。これは波動関数の確率解釈である。

§§5.4.2 物理量とエルミート演算子

観測される物理量は実数であるから、固有値方程式 $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ の両辺を転置して複素共役をとると

$$\psi_n^* \hat{A}^\dagger = a_n \psi_n^*$$

が得られる。ここで、 $\hat{A}^\dagger \equiv {}^t\hat{A}^*$ は \hat{A} のエルミート共役である。両辺に右から ψ_n を掛けてから積分すると

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_n^* \hat{A}^\dagger \psi_n = a_n \int d^3\mathbf{r} \psi_n^* \psi_n = a_n$$

となる。ここで、全空間にわたって粒子を見いだす確率は1であるので、 $\int d^3\mathbf{r} \psi_n^* \psi_n (= \int d^3\mathbf{r} |\psi_n(\mathbf{r})|^2) = 1$ を用いた。一方、もとの固有値方程式 $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ に左から ψ_n^* を掛けてから積分すると

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_n^* \hat{A} \psi_n = a_n \int d^3\mathbf{r} \psi_n^* \psi_n = a_n$$

が得られる。ともに右辺は a_n であるので、固有値が実数であるという条件から、物理量を表す演算子 \hat{A} に条件がついて、

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

となる。すなわち、演算子 \hat{A} は自己共役である。この性質を持つ演算子のことをエルミート演算子と呼ぶ。さて、物理量 \hat{A} に対し、異なる固有値を与える固有状態 ψ_n 、 ψ_m があったとしよう。

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n, \quad \hat{A}\psi_m = a_m\psi_m, \quad a_n \neq a_m \text{ for } n \neq m$$

このとき、第1式に左から ψ_m^* を掛け、第2式のエルミート共役な式に右から ψ_n を掛けてそれぞれ積分すると

$$\int d^3\mathbf{r}\psi_m^*\hat{A}\psi_n = a_n \int d^3\mathbf{r}\psi_m^*\psi_n, \quad \int d^3\mathbf{r}\psi_m^*\hat{A}^\dagger\psi_n = a_m \int d^3\mathbf{r}\psi_m^*\psi_n$$

が得られる。第2式で \hat{A} がエルミート演算子である ($\hat{A} = \hat{A}^\dagger$) ことを用い、辺々引き算すると

$$0 = (a_n - a_m) \int d^3\mathbf{r}\psi_m^*\psi_n$$

が得られる。ここで、 $n \neq m$ のときに $a_n \neq a_m$ であることと、 $n = m$ では波動関数の確率解釈から全空間にわたっての波動関数の絶対値の2乗の積分は1であることから、

$$\int d^3\mathbf{r}\psi_m^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{for } n = m \\ 0 & \text{for } n \neq m \end{cases} \quad (5.10)$$

と書ける。これを波動関数の規格直交性と呼ぶ。

§§5.4.3 物理量の期待値

ある物理量の固有状態が重ね合わされた波動関数は、その物理量が確定した値を持たないことがわかった。したがって、この状態に対しては、測定毎に違う観測値 a_n が、確率 $|c_n|^2$ で得られることになる。どの固有値 a_n を得るかは確率的 ($|c_n|^2$) である。ここで、次の量を考えてみる。

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\equiv \int d^3\mathbf{r}\psi^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\psi(\mathbf{r},t) = \int d^3\mathbf{r}\psi^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3\mathbf{r}\sum_m c_m^*(t)\psi_m^*(\mathbf{r}) \cdot \sum_n c_n a_n(t)\psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \sum_m \sum_n a_n c_m^*(t)c_n(t) \int d^3\mathbf{r}\psi_m^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \sum_n a_n |c_n(t)|^2 \end{aligned}$$

ここで、3行目から4行目へは波動関数の規格直交性を用いた。最終行は、固有値 a_n を、その固有値が得られる確率 $|c_n|^2$ で重みを付けて全ての n について和をとったものである。物理量 \hat{A} の期待値である。こうして、1行目の定義である、物理量 \hat{A} を波動関数（とその複素共役）で挟んで積分した量は、その物理量の期待値を表すことがわかる。

§5.4.4 確率の流れの密度と確率の保存

ある領域 V 中に粒子を見いだす確率は、 $\int_V d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ である。もちろん V として全空間をとれば積分は 1 に帰着する。時間微分を考えよう。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 &= \int_V d^3\mathbf{r} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \psi + \psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_V d^3\mathbf{r} \left\{ \left(\hat{H}^* \psi^*(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) - \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \right) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_V d^3\mathbf{r} \left\{ \psi(\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_V d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \right] \end{aligned}$$

ここで、2番目の等式へはシュレーディンガー方程式を用い、3番目の等式へはハミルトニアン \hat{H} がエルミート[‡]であることを使った。最後の等式は、

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

より得られる式

$$\begin{aligned} \psi \hat{H} \psi^* - \psi^* \hat{H} \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \end{aligned}$$

より示される。以上をまとめて、

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = - \int_V d^3\mathbf{r} \operatorname{div} \mathbf{j} = - \int_S dS \mathbf{j} \cdot \mathbf{n}$$

ここで、

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (5.11)$$

を定義した。これを確率の流れの密度と呼ぶ。任意の V について成り立つので

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \operatorname{div} \mathbf{j} &= 0 \\ \mathbf{j} &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)] \end{aligned} \quad (5.12)$$

この式は、確率密度 $|\psi|^2$ に対する連続の方程式であり、確率の保存を意味している。

簡単な例を挙げておこう。自由粒子の場合、波動関数は $\psi(\mathbf{r}, t) = N \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right]$ となっていた。このとき、確率の流れの密度 \mathbf{j} は、

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = (\text{速度}) \times (\text{確率密度})$$

と表されることがわかる。

[‡]すなわち、 $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ 、今の場合 $\rightarrow \hat{H}^* = {}^t \hat{H}^\dagger = {}^t \hat{H}$ 。

§ 5.5 古典力学との対応

§§5.5.1 エーレンフェスト (Ehrenfest) の定理

粒子に伴う波動性について吟味してきたが、今一度、古典論との対応を考察しておこう。もちろん、ファインマンの径路積分に立ち返り、作用が最小となる軌道が実現する古典軌道ではあるが、本節では別の見方について考察する。

古典論では実現する軌道の運動方程式が基本となっている。ここでは、ニュートン方程式を考えよう。ニュートン方程式では位置の2階時間導関数が力に比例した。粒子の波動性に基づくこれまでの記述では、このような運動方程式は現れるのであろうか。

まず、粒子の位置の期待値 $\langle \mathbf{r} \rangle$ は、前節から

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t)^* \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t)$$

と表わされる。この期待値の時間微分をとろう。このとき、

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} &= \int d^3\mathbf{r} \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) + \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left\{ \psi^* \mathbf{r} \cdot \hat{H} \psi - \hat{H}^* \psi^* \cdot \mathbf{r} \psi \right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left\{ \psi^* \mathbf{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* \right) \mathbf{r} \psi \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3\mathbf{r} \psi^* (\mathbf{r} \nabla^2 \psi - \nabla^2 (\mathbf{r} \psi)) \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \int d^3\mathbf{r} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{m} \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle \end{aligned}$$

と計算される。ここで、1行目から2行目へはシュレーディンガー方程式とその複素共役な方程式を用い、2行目から3行目へはハミルトニアンが $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) = \hat{H}^*$ である事実を用いた。さらに3行目から4行目へは被積分関数の第2項を部分積分し、最後に運動量演算子とその期待値の定義を用いた。以上をまとめておくと、

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle \quad (5.13)$$

となる。これは、速度と運動量の古典的な関係式に一致している。ただし、期待値の意味で成り立つ関係式である。

同様に、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle &= -i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \\
&= -i\hbar \int d^3\mathbf{r} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} + \psi^* \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\
&= -i\hbar \int d^3\mathbf{r} \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} - \psi^* \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{H} \psi \right) \\
&= \int d^3\mathbf{r} \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi^* \nabla \psi - \psi^* \nabla \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi \right\} \\
&= \int d^3\mathbf{r} \{ V \psi^* \nabla \psi - \psi^* \nabla (V \psi) \} \\
&= - \int d^3\mathbf{r} \psi^* \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \psi \\
&= \left\langle -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle
\end{aligned}$$

と計算される。ここで、1行目から2行目へは時間微分を実行し、2行目から3行目へは波動関数の時間微分をシュレーディンガー方程式とその複素共役な方程式を用いてハミルトニアンを用いてあらわした。3行目から4行目へはハミルトニアンを具体形を代入し、運動エネルギー項は部分積分を用いると消えてしまい、ポテンシャル項のみ残ることを用いて5行目の式を得る。それを整理したものが6行目であり、これはポテンシャル・エネルギーを座標で微分したものの期待値になっている。以上をまとめておくと、

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle \quad (5.14)$$

が得られる。これは、ニュートン方程式の形をしている。すなわち、期待値の意味で、運動量の時間微分はポテンシャル関数の座標微分に負号を付けたもの、すなわち“力”に等しいというニュートン方程式が得られることになる。こうして、量子論から古典論への橋渡しが得られた。本小節の内容は、エーレンフェストの定理として知られている。

ニュートン方程式の対応が得られたが、得られた方程式は $\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -\frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \mathbf{r}}$ であることに注意しておこう。

§5.5.2 半古典近似

次に、シュレーディンガー方程式から古典論の方程式を導く対応関係を見ておこう。粒子に伴う波の伝搬では $e^{iS/\hbar}$ という因子が重要であった。そこで、波動関数自身を

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) = \exp\left(\frac{1}{\hbar} (iS + \hbar \ln a)\right) \quad (5.15)$$

ととる。但し、 S は作用であり、

$$\begin{aligned}
S &\equiv \int dt L = \int dt \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}) \right] \\
&= \int dt (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - H)
\end{aligned}$$

と書ける。波動関数 (5.15) をシュレーディンガー方程式 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi$ に代入すると、

$$i\hbar \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} a + \frac{\partial a}{\partial t} \right\} e^{\frac{i}{\hbar} S} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 (\nabla S)^2 a + 2 \frac{i}{\hbar} \nabla a \cdot \nabla S + \frac{i}{\hbar} a \nabla^2 S + \nabla^2 a \right\} e^{\frac{i}{\hbar} S} + V a e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (5.16)$$

となる。ここで、物理定数 \hbar を小さいとして、 \hbar の冪展開をし、 \hbar の各冪で比較しよう。

$$\begin{cases} \hbar^0 ; -\frac{\partial S}{\partial t} a = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 a + V a \\ \hbar ; i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla a \cdot \nabla S - \frac{i\hbar}{2m} a \nabla^2 S \end{cases}$$

整理して、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V = 0 \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} \nabla^2 S + \frac{1}{m} \nabla S \cdot \nabla a = 0 \quad (5.18)$$

となる。ここで、(5.17) 式は、古典力学のハミルトン・ヤコビ方程式に他ならない。すなわち、

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = -H \left(= -\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V \right) \right) \\ \nabla S = \mathbf{p} \end{cases}$$

が、 \hbar の零次の次数で得られたことになる。こうして、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限で、再び量子論は古典論を再現する。

さて、次に (5.18) を見ていこう。この式の両辺に $2a$ をかけると

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0$$

が得られる。ここで

$$\begin{aligned} \frac{\nabla S}{m} &= \frac{\mathbf{p}}{m} \equiv \mathbf{v} \\ a^2 &= |\psi|^2 \equiv \rho \end{aligned}$$

である。ただし、 \mathbf{v} は粒子の古典的な速度、 ρ は粒子を見出す確率密度の意味で用いている。これらを用いて上式は、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

が得られる。これは確率の保存を表す連続の方程式に他ならない。こうして、 \hbar の1次の次数では、古典論を超えた確率概念が現われていることが理解されよう。

半古典近似については、第4部で改めて記述することにしよう。

第II部 古典力学

6章 地上物体の運動

§6.1 質量のある物体間に働く力に関する観測事実

§§6.1.1 地上物体の運動の実験事実

図 12 のように、斜面を転がる球の進む距離は、最初の単位時間に進んだ距離を 1 とすると、引き続き単位時間に進む距離は 3、引き続き 5、7、9 … と進んでいくことが、ガリレオにより実験事実として認められた[†]。これを数式で表現すると、単位時間 $t = 1$ に進む距離を $a/2$ として、時刻 t に進む距離 s は、

$$s = \frac{1}{2}at^2$$

と表すことができる。ここで、 a は定数であり、動いた距離を時間で微分したものが速度 v 、すなわち $v = \frac{ds}{dt} = at$ であり、さらに速度の時間変化率 $\frac{dv}{dt} = \frac{d^2s}{dt^2} = a$ は加速度である。加速度が一定のこの運動を等加速度運動と呼ぶ。斜面の傾きを 90° にすると、物体の自由落下になる。このときの加速度はおおよそ 9.8 m/s^2 であり、重力加速度と呼び、 g と書く。

§§6.1.2 惑星運行の観測事実と万有引力の法則

惑星運動の観測事実から、質量を持つ 2 物体間に働く重力を求めておこう[‡]。

万有引力の法則を導出するため、ケプラーの観測事実を用いよう。ケプラーは (I) 全ての惑星は太陽を焦点の一つとする楕円軌道を描く、(II) 惑星と太陽を結ぶ線分が単位時間に掃いていく面積速度は一定である、という事実を惑星の観測データから導いていた。観測事実 (I) から、惑星は、太陽を原点として

$$r = \frac{C}{1 + e \cos \theta} \quad (6.1)$$

という楕円軌道を描くことが言える。ここで、 r は太陽と惑星を結ぶ距離であり、 θ は太陽と惑星が最短距離となる惑星の位置の方向に x 軸をとったとき、惑星が居る位置の x 軸からの角度である。このとき、 $x = r \cos \theta$ 、 $y = r \sin \theta$ より、 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ 、 $\cos \theta = \frac{x}{r} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}$ となるので、(6.1) から、[§]

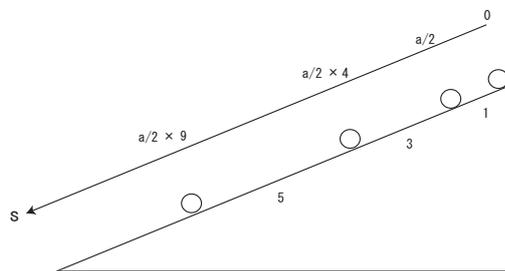


図 12:

[†]次節 (§§6.1.2) でこの事実が成立する理由を述べる。したがって、基本的な実験事実として採用する必要はない。

[‡]2 物体に働く重力は、理論的には 14 章 (§§14.8.1) で導出されるので本来この節は不要であり、実験事実を基礎にとらなくても導出できるものである。

[§](6.1) を両辺逆数をとってから計算すると容易。

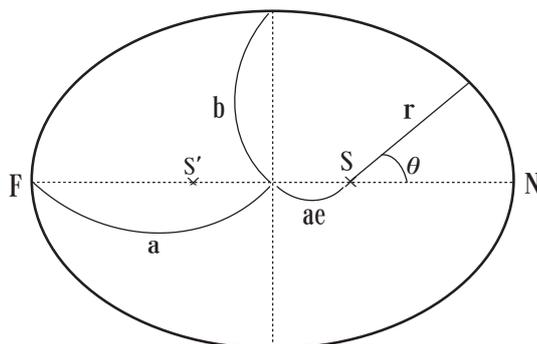


図 13:

$$\frac{(x + ea)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (6.2)$$

ここで $a = \frac{C}{1 - e^2}, \quad b = \frac{C}{\sqrt{1 - e^2}} = a\sqrt{1 - e^2}$

と変形できる。これは図 13 に示されるように、 $x = -ae$ を中心に持つ楕円そのものである。 a は長半径、 b は短半径である。

さて、太陽を原点にとり、太陽から惑星に向く大きさ 1 の単位ベクトルを e_r 、それに直交する単位ベクトルを e_θ とする (図 14)。このとき、

$$e_r = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad e_\theta = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

となることは図から読み取れる。惑星の運動とともに、これらの単位ベクトルも θ とともに時間変化する。こうして、

$$\frac{de_r}{dt} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \frac{d\theta}{dt} = \frac{d\theta}{dt} e_\theta, \quad \frac{de_\theta}{dt} = \begin{pmatrix} -\cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \frac{d\theta}{dt} = -\frac{d\theta}{dt} e_r \quad (6.4)$$

が得られる。今、惑星は

$$\mathbf{r} = r\mathbf{e}_r \quad (6.5)$$

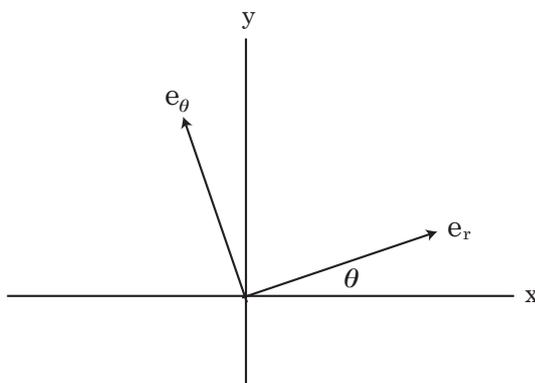


図 14:

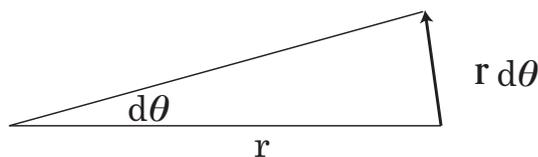


図 15:

に居るので、惑星の速度 \mathbf{v} 、加速度 \mathbf{a} は

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d}{dt}(r\mathbf{e}_r) = \frac{dr}{dt}\mathbf{e}_r + r\frac{d\theta}{dt}\mathbf{e}_\theta, \\ \mathbf{a} &= \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left(\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right)\mathbf{e}_r + \left(2\frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt} + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\right)\mathbf{e}_\theta\end{aligned}\quad (6.6)$$

と計算される。

ここで、ケプラーの観測事実 (II) 面積速度一定の事実を用いよう。図 15 のように惑星が運動し、微小な角 $d\theta$ だけ移動したとしよう。太陽と惑星を結ぶ線分が掃く面積 dS は、図から三角形を直角三角形と近似して

$$dS = \frac{1}{2}r \cdot r d\theta \quad (6.7)$$

となる。面積の時間変化 $\frac{dS}{dt}$ が面積速度であるので、面積速度を σ で表すと

$$\sigma = \frac{dS}{dt} = \frac{1}{2}r^2\frac{d\theta}{dt} \quad (6.8)$$

となる。今、ケプラーの観測事実から、面積速度は時間に依らず一定なのであるから、

$$\begin{aligned}0 &= \frac{d\sigma}{dt} = \frac{1}{2}\left(2r\frac{dr}{dt}\cdot\frac{d\theta}{dt} + r^2\frac{d^2\theta}{dt^2}\right) \\ &= \frac{r}{2}\left(2\frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt} + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\right)\end{aligned}\quad (6.9)$$

が成り立つ。もちろん $r \neq 0$ より、第 2 行の右辺の括弧の中が 0 でなければならない。これは、(6.7) の加速度の式の第 2 項と同じなので、 \mathbf{e}_θ の項は零になり、惑星が感じる加速度は

$$\mathbf{a} = \left(\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right)\mathbf{e}_r \quad (6.10)$$

となる。すなわち、加速度は太陽と惑星を結ぶ線分の方角であることがわかった。

さて、(6.10) を計算するために、ケプラーの観測事実 (I)、すなわち惑星は太陽を楕円の焦点に持つ楕円軌道を描くこと、(6.1) に戻ろう。この式を時間で微分すると

$$\frac{dr}{dt} = \frac{Ce\frac{d\theta}{dt}\sin\theta}{(1+e\cos\theta)^2} = \frac{2e\sigma}{C}\sin\theta \quad (6.11)$$

が得られる。ここで、2 番目の等号では、面積速度 (6.8) と楕円の式 (6.1) を用いて、

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{2\sigma}{r^2} = \frac{2\sigma(1+e\cos\theta)^2}{C^2} \quad (6.12)$$

と変形できることを用いた。(6.11)をもう一度時間で微分すると

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{2e\sigma}{C} \frac{d\theta}{dt} \cos\theta = \frac{4e\sigma^2}{Cr^2} \cos\theta \quad (6.13)$$

が得られる。ここで、面積速度一定から $\frac{d\sigma}{dt} = 0$ を用い、さらに (6.12) を用いて $\frac{d\theta}{dt}$ を消去した。一方、(6.12) を再び用いると

$$r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = r \left(\frac{2\sigma}{r^2} \right)^2 = \frac{4\sigma^2}{r^3} = \frac{4\sigma^2}{Cr^2} (1 + e \cos\theta) \quad (6.14)$$

が得られる。最後の等式で、一つだけ r に (6.1) を用いた。こうして、惑星の加速度 (6.10) は、(6.13) と (6.14) を用いて

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \left(\frac{d^2r}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right) \mathbf{e}_r \\ &= -\frac{4\sigma^2}{Cr^2} \mathbf{e}_r \end{aligned} \quad (6.15)$$

と得られる。こうして惑星が受ける力 $m\mathbf{a}$ は、

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = -\frac{4\sigma^2}{C} \cdot \frac{m}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (6.16)$$

となる。 σ^2 も C も正の量であるので、惑星が受ける力は $-\mathbf{e}_r$ の方向、すなわち太陽を向く引力となることがわかる。また、作用・反作用の法則を考えると、力の大きさが同じで逆向きの力を太陽は受ける。太陽が受ける力も $\mathbf{F}_\odot = M\mathbf{a}'$ の形をしているはずである。ここで、 M は太陽の質量である。 \mathbf{F} と \mathbf{F}_\odot は向きが逆で大きさが等しいので、 \mathbf{F} にも M が積でかからなければならない。こうして、太陽から惑星が受ける力は、未定の定数を G として ($\frac{4\sigma^2}{C} = GM$ として)、

$$\mathbf{F} = -G \frac{Mm}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (6.17)$$

と得られる。質量 M 、 m の2物体が距離 r だけ離れているときに働く上記の力 \mathbf{F} は万有引力または重力と呼ばれる。

§§6.1.3 地表面付近の重力場

地球を一様な球とし、その質量を M 、半径を R 、地表から物体までの距離を h とすると、質量 m の地上物体に働く力の大きさは $f = G \frac{mM}{(R+h)^2}$ である。地表から物体までの距離 h が地球の半径 R に比べて十分小さいとすると、分母の h を R に対して無視して良いであろう。この力 f により物体は力を受けて加速度が生じるとすると、その加速度を g と書くことにして、

$$mg = f \approx G \frac{mM}{R^2}, \quad \text{すなわち} \quad g = G \frac{M}{R^2}.$$

よって、重力の法則から、地表付近では物体に依らず、物体は一定の加速度 g のもとで鉛直下向きに $f = mg$ の力を受けて運動することが言える。この g が重力加速度である。

§ 6.2 地表面付近の運動

§§6.2.1 自由落下

質点に働く力を \mathbf{F} 、質点の質量を m とし、速度を \mathbf{v} とする。(以下では関数の引数 t をしばしば省略する。) オイラー・ラグランジュ方程式としてのニュートンの第2法則は (2.13) のように、時間に関する微分方程式として表されている。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}, \quad \text{または} \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}, \quad \left(\mathbf{p} = m\mathbf{v} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right)$$

例として、地表付近の質量 m の物体の鉛直方向の運動を考えてみよう。鉛直下向きに z 軸をとる。地上付近では、重力加速度を g として mg の力が鉛直下向きに働く。運動方程式は

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{dz(t)}{dt} \right) = mg$$

と書ける。両辺を質量 m で割ってから時間について積分すると

$$v_z \equiv \frac{dz(t)}{dt} = \int \frac{d}{dt} \left(\frac{dz(t)}{dt} \right) dt = \int g dt = gt + v_0$$

となる。ここで、 v_0 は時刻 $t = 0$ での速度であり、“初速度”と呼ばれる。さらに時間について積分すると

$$z(t) = \int \left(\frac{dz(t)}{dt} \right) dt = \int (gt + v_0) dt = \frac{1}{2}gt^2 + v_0t + z_0$$

が得られる。ここで、 z_0 は $t = 0$ での質点の位置である。こうして、運動は完全に解けたことになる。

ニュートンの運動方程式は物体の位置 $z(t)$ の時間 t に関する2階微分方程式であるので、 $z(t)$ を得るためには運動方程式を2回積分する必要がある。その際、積分定数として v_0 、 z_0 の2つの値が必要となる。これは方程式自体からは決まらず、ある時刻での速度、位置の初期条件として与えなければならない。

初速度 $v_0 = 0$ のとき、質点は自由落下するという。このとき、質点の進む距離は、 $\frac{1}{2}g$ を単位にして、 $t = 0 \sim 1$ 、 $1 \sim 2$ 、 $2 \sim 3$ 、 $3 \sim 4$ 、 \dots に対して、 1 、 3 、 5 、 7 、 \dots である。これは §§6.1.1 で述べたガリレイが発見した落体の等加速度運動に他ならない。

§§6.2.2 単振り子

地上物体の運動の別の例として、単振り子を見ておこう。質量の無視できる長さ l のひもの先に、重りとして質量 m の質点がついていて、振り子運動をしているとする (図 16)。ただし時刻 $t = 0$ で重りは鉛直から測った角度 θ_0 にあり、初速度は0とする。重力加速度を g とし、重りが動く方向 (接線方向) の運動方程式は

$$m \frac{d^2}{dt^2} (l\theta) = -mg \sin \theta$$

となる。ここで θ は鉛直から測ったひもの角度である。今、振幅が小さいとすると、角度 θ は微小だから三角関数を近似して $\sin \theta \approx \theta$ とできる。このとき運動方程式は

$$ml \frac{d^2 \theta}{dt^2} \approx -mg\theta, \quad \text{すなわち} \quad \frac{d^2 \theta}{dt^2} \approx -\frac{g}{l}\theta$$

と書ける。2階微分して負号がついて (係数を除いて) 元に戻る関数は三角関数であるので、この運動方程式の解としては、一般に

$$\theta(t) = A \cos \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t + \alpha \right)$$

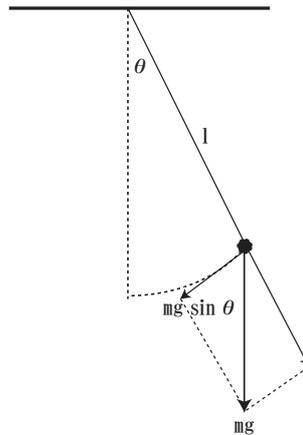


図 16:

が得られる。ここで、 A 、 α は初期条件で決められるべき定数である。時刻 $t = 0$ で $\theta = \theta_0$ としたので、 $A \cos \alpha = \theta_0$ が得られる。また速度は $v = l \frac{d\theta}{dt} = -lA \sqrt{\frac{g}{l}} \sin \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t + \alpha \right)$ より、 $t = 0$ で $v = 0$ から $-A \sqrt{lg} \sin \alpha = 0$ が得られる。これより $\alpha = 0$ 、よって $A = \theta_0$ となるので、最終的に求める解は

$$\theta(t) = \theta_0 \cos \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t \right)$$

である。

振り子が一振れして元に戻ってくるまでに要する時間 T は、上で求めた解より、三角関数がもとの値に戻る時間であるので

$$\sqrt{\frac{g}{l}} T = 2\pi, \quad \text{すなわち} \quad T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$$

となる。この T を振り子の周期と呼ぶ。今扱ったように振れ幅が小さいとした範囲では、周期は振れ幅に依存せず、ひもの長さ (と重力加速度) にのみ依存する。これが、ガリレイの発見した振り子の等時性と呼ばれることである。この事実はすでに §4.6.1 で述べられていることである。

§6.2.3 大気から速さ v に依存した抵抗を受けて自由落下する質点

§6.2.1 では自由落下の問題を取り上げたが、実際には空気中での物体の運動は、空気から抵抗力を受けているはずである。ここでは、(i) 速さに比例する抵抗力 μv (μ は定数) を受ける場合、及び (ii) 速さの 2 乗に比例した抵抗力 γv^2 (γ は定数) を受ける場合、の 2 つの場合について* 地表面付近での落下運動を簡単に見ておこう。

*物体の速さが小さいときは、大気からの抵抗力を速度の大きさに展開して、第 1 項が速度の 1 乗、第 2 項が速度の 2 乗、以下… のようになると思われるが、以下で見るとある程度の大きさの物体は速度の 2 乗に比例した抵抗が主要となる。速度の 1 乗に比例した抵抗は粘性抵抗と呼ばれ、大気の粘性による抵抗であり、物体の接線方向に働く。一方、速度の 2 乗に比例する抵抗は慣性抵抗と呼ばれ、大気中の分子が物体表面に垂直に衝突することによって生じる抵抗力である。物体が速さ v [m/s] で運動していると、物体の静止系から見て大気中の分子は速さ v で物体に衝突してくる。大気の密度を ρ [kg/m³] とすると、単位体積あたり運動量 $p = \rho v$ [kg m/s/m³] を持って衝突してくる。この運動量をすべて物体が受けるとすると、単位時間・単位面積あたり物体から v [m³/(sm²)] まで離れた領域中の分子が物体に衝突するので、このとき物体が受ける単位時間・単位面積あたりの運動量は $p v$ [kg m/s/(sm²)] となる。微小時間 Δt [s] に物体が受ける単位面積あたりの運動量 Δp は $\Delta p = p v \Delta t = \rho v^2 \Delta t$ となり、単位面積あたり物体が受ける力 f は $f = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \rho v^2$ となり、速さの 2 乗に比例することがわかる。また、慣性抵抗と粘性抵抗の比をレイノルズ数と呼び、流体力学で重要な量となる。一般にレイノルズ数 Re は、物体の典型的な大きさを l 、速度を u 、媒質の密度を ρ 、粘性係数を η として $Re = \frac{\rho u l}{\eta}$ と表わされる。(6.18) 式と (6.20) 式を用いて確かめてみよ。ただし、数係数は除く。

鉛直下向きに z 軸をとる。重力加速度を g と書くと、運動方程式は、(i)、(ii) の場合それぞれについて

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = m \frac{dv}{dt} = mg - \mu v, \quad \text{for (i)}$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = m \frac{dv}{dt} = mg - \gamma v^2, \quad \text{for (ii)}$$

と書ける。ここで、 z 方向の速度成分を v と書いた。速さと共に抵抗力は増大するが、やがて重力と抵抗力が釣り合った状況では速度に変化はなく、一定の速度で落下することになる。このときの速度を終端速度と呼ぶ。終端速度では

$$mg = \mu v, \quad \text{for (i)}$$

$$mg = \gamma v^2, \quad \text{for (ii)}$$

となる。よって、(i)、(ii) の場合の終端速度をそれぞれ v_1 、 v_2 と書くと、それらは、鉛直下向きで、

$$v_1 = \frac{mg}{\mu}, \quad \text{for (i)}$$

$$v_2 = \sqrt{\frac{mg}{\gamma}}, \quad \text{for (ii)}$$

となる。

速さに比例した抵抗力のことを粘性抵抗と呼ぶ。詳しいことは連続体力学に譲り、結果のみ示しておこう。粘性係数と呼ばれる量を η とし、落下物体が球だとしてその半径を a とすると、速さに比例した抵抗の係数 μ は

$$\mu = 6\pi a \eta, \quad \text{抵抗力} = F = \mu v. \quad (6.18)$$

と表わされることが知られている。終端速度 ($v(t \rightarrow \infty) \equiv v_1$) は

$$v_1 = \frac{mg}{\mu} = \frac{\frac{4}{3}\pi a^3 \rho \cdot g}{6\pi a \eta} \quad (6.19)$$

となる。

速さの 2 乗に比例した抵抗力を考えてみよう。これは慣性抵抗と呼ばれる。速さの 2 乗に比例した抵抗の係数 γ は、物体の周りの空気の密度を ρ として、

$$\gamma = \frac{\pi}{4} \rho a^2, \quad \text{抵抗力} = F = \gamma v^2 \quad (6.20)$$

と表わされる。こうして終端速度 v_2 は、

$$v_2 = \sqrt{\frac{mg}{\gamma}} = \sqrt{\frac{mg}{\frac{\pi}{4} \rho a^2}} \quad (6.21)$$

と書ける。

(例) 速度の 1 乗に比例した抵抗が働くときの運動方程式を解いておこう。

鉛直下向きに z 軸をとると、運動方程式は

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = mg - \mu v$$

$$= mg - \mu \frac{dz}{dt}.$$

と書ける。速度 v について解く。運動方程式は v を用いて

$$m \frac{dv}{dt} = mg - \mu v .$$

と書けるので、左辺に v 、右辺に t に関する量を分離して

$$\frac{mdv}{mg - \mu v} = dt .$$

となる。この式の両辺を積分すると

$$-\frac{m}{\mu} [\ln(mg - \mu v)]_{v_0}^v = t - t_0 .$$

となる。ただし、初期時刻 $t = t_0$ で初速 $v = v_0$ とした。今、 $t_0 = 0$ としても一般性を失わないので $t_0 = 0$ としておく。よって、

$$-\frac{m}{\mu} \ln \left(\frac{mg - \mu v}{mg - \mu v_0} \right) = t .$$

これを整理して、

$$v \equiv \frac{dz}{dt} = \frac{mg}{\mu} \left[1 - \left(1 - \frac{\mu v_0}{mg} \right) \exp \left(-\frac{\mu}{m} t \right) \right]$$

を得る。さらに t で積分して、 $t = 0$ で質点の位置を $z = z_0$ とすると、

$$z = \frac{mg}{\mu} t + \frac{m^2 g}{\mu^2} \left(1 - \frac{\mu v_0}{mg} \right) (e^{-\mu t/m} - 1) + z_0$$

を得る。時刻 t が $t \rightarrow \infty$ での速度が終端速度である。2つ前の式で、 $t \rightarrow \infty$ とすると、

$$v = \frac{mg}{\mu} .$$

が得られる。これは先に求めた終端速度に一致している。

7章 中心力の問題—惑星運動の解析—

§ 7.1 角運動量保存則の役割

空間の等方性から、ラグランジアンは座標 \mathbf{r} の大きさにしか依らない。したがって、ラグランジアン相互作用を表すポテンシャルエネルギーも \mathbf{r} の大きさにしかよらない。このポテンシャルエネルギーから導かれる力を中心力と呼ぶ。力の中心を原点にとると

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial V(r)}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{dV(r)}{dr} \mathbf{e}_r$$

となる。ここで \mathbf{e}_r は \mathbf{r} -方向の単位ベクトル $\left(\mathbf{e}_r = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r}\right)$ である。例えば中心力として重力を考えよう。

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{\alpha}{r}, & \rightarrow \mathbf{F} &= -\frac{\alpha}{r^2} \mathbf{e}_r, \\ \alpha &= Gm_1m_2 \end{aligned}$$

ここで、 α として $\alpha = \frac{q_1q_2}{4\pi\epsilon_0}$ ととり、 q_1, q_2 を物体が持つ電荷、 ϵ_0 を誘電率とすると、2つの荷電粒子間のクーロン力を扱うことになる。

力が中心力の場合には当然、角運動量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ は保存するベクトルである。ここで、 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{r} = 0$ となることはベクトルの計算から簡単に確かめられるので、角運動量ベクトルと質点の位置ベクトルは互いに直交していることがわかる。したがって、角運動量が保存しているときには、位置ベクトル \mathbf{r} は、時間と共に変化しない保存するベクトル \mathbf{L} に垂直であり、質点の位置ベクトルは常に \mathbf{L} に垂直な平面内にあることになる。すなわち質点は角運動量ベクトルに垂直な、ある平面内ではしか運動できない。この事実は物体の運動の軌道面が存在することを意味する。よって、中心力場の問題は、2次元平面で考えればよい。

そこで、この平面を x - y -平面にとる。さらに x, y の代わりに、“極座標” (r, θ) をとる。すなわち、

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta$$

の関係から、 r と θ を導入する。ここで、 r は原点から質点までの距離、 θ は原点と質点を結ぶ線分が x -軸となす角である (図 17)。このとき、

$$\frac{dx}{dt} = \frac{dr}{dt} \cos \theta - r \sin \theta \cdot \frac{d\theta}{dt}, \quad \frac{dy}{dt} = \frac{dr}{dt} \sin \theta + r \cos \theta \cdot \frac{d\theta}{dt}$$

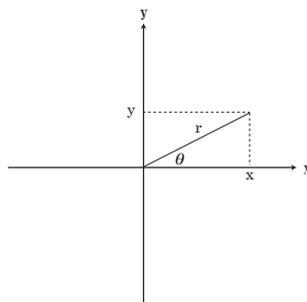


図 17:

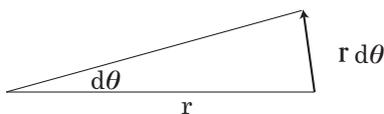


図 18:

となる。角運動量をこの座標系で計算しておこう。 L_x と L_y はともに 0 になる。 L_z は

$$\begin{aligned} L_z &= xp_y - yp_x \\ &= m \left[r \cos \theta \left(\frac{dr}{dt} \sin \theta + r \cos \theta \cdot \frac{d\theta}{dt} \right) - r \sin \theta \left(\frac{dr}{dt} \cos \theta - r \sin \theta \cdot \frac{d\theta}{dt} \right) \right] \\ &= mr^2 \frac{d\theta}{dt} \end{aligned}$$

となる。

ここで、角運動量の保存則を幾何学的に見ておこう。原点と質点を結ぶ線分が微小な時間に掃いていく面積を dS として表すと、それは近似的に三角形として

$$dS = \frac{1}{2} r \cdot r d\theta$$

と表せる (図 18)。微小時刻 dt で割った後、 $dt \rightarrow 0$ の極限を取り、微分で表すと

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} r^2 \frac{d\theta}{dt}$$

となるが、先ほど導いた角運動量で表すと

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2m} L_z$$

となる。角運動量保存則から L_z は一定値をとるので、結局 $\frac{dS}{dt}$ は時間に依存せず一定であることがわかる。これは面積速度一定の法則、またはケプラーの第 2 法則と呼ばれる、ケプラーの発見した惑星運動の観測事実に他ならない。

§ 7.2 中心力場のもとでの運動

さて、ここからは角運動量の大きさを L と書くことにする。今、 $L_x = L_y = 0$ なので、 $L_z = L$ である。上で導いた式 $\left(L_z = mr^2 \frac{d\theta}{dt} \right)$ より

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{L}{mr^2}$$

と表される。この関係を用いると、エネルギーは、極座標表示で

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} m \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 \right] + V(r) \\ &= \frac{1}{2} m \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right] + V(r) \\ &= \frac{1}{2} m \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + \left[V(r) + \frac{L^2}{2mr^2} \right] \end{aligned}$$

と書ける。ここに現れた $U_{\text{cf}} \equiv \frac{L^2}{2mr^2}$ は、遠心力ポテンシャルと見なせる。実際、 U_{cf} をポテンシャルエネルギーと見なしてこの項から導かれる力は、

$$\mathbf{F}_{\text{cf}} = -\frac{d}{dr} \left(\frac{L^2}{2mr^2} \right) \frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}} = \frac{L^2}{mr^3} \mathbf{e}_r$$

であり、方向は中心から外に向かう方向、すなわち、遠心力である。運動が円運動のときには、角運動量 L は簡単に $|\mathbf{L}| = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = mrv$ となるので遠心力の大きさは、 $\frac{mv^2}{r}$ の形になる。

さて、先程導かれたエネルギーの表式を使うと

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2}}$$

が得られる。さらに $\frac{d\theta}{dt} = \frac{L}{mr^2}$ の関係を使うと、

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \frac{L}{mr^2}$$

となるので、これらの上記2式より、

$$\frac{dr}{d\theta} = \frac{mr^2}{L} \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2}}$$

が得られ、結局これを積分することにより

$$\theta = \int \frac{\frac{L}{r^2}}{\sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{L^2}{r^2}}} dr + (\text{積分定数}) \quad (7.1)$$

が得られる。この右辺の積分を、与えられた $V(r)$ のもとで実行すれば、 r と θ の関係、すなわち質点の軌道が得られることになる。

§ 7.3 ケプラー問題

中心力が距離の2乗に反比例する場合の問題（ケプラー問題）を考えよう。力は $\mathbf{F} = -\frac{\alpha}{r^2} \mathbf{e}_r$ という形をとり、そのときのポテンシャルエネルギーは $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ である。ここで $\alpha = GM_{\odot}m$ と取れば M_{\odot} を大きな太陽質量として太陽は動かないものとしたときの、万有引力のもとでの質量 m の惑星運動を扱うことになる。ここで $\alpha > 0$ （引力）としておく。軌道は、前節の最後の式 (7.1) に、 $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ を代入して積分を実行することにより簡単に求まる。今、 $u \equiv \frac{1}{r}$ と変数変換した後、 $a < 0$ の場合に成り立つ次の積分公式

$$\int \frac{du}{\sqrt{au^2 + bu + c}} = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \arccos \left(-\frac{2au + b}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \right)$$

を用いると

$$\begin{aligned} r &= \frac{C}{1 + e \cos(\theta - \theta_0)}, \\ C &= \frac{L^2}{m\alpha}; \quad (\text{半通径}), \\ e &= \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\alpha^2}}; \quad (\text{離心率}) \end{aligned} \quad (7.2)$$

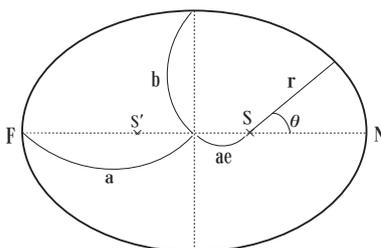


図 19:

を得る[†]。また、積分定数を θ_0 と書いた。以後、簡単のために $\theta_0 = 0$ としておく。この r と θ の関係は、円錐曲線と呼ばれる一群の曲線を与える。保存する角運動量 L が与えられると、軌道の大きさを決める半通径 C が決まり、さらに保存するエネルギー E を与えると軌道の形を決める離心率 e が決まる。

具体的にどのような軌道が得られるか見ていこう。

- (1) $e = 0$; $E = -\frac{m\alpha^2}{2L^2}$; 円
このとき

$$r = C = (\text{一定}).$$

すなわち、 $r = \text{一定}$ の曲線、円軌道を描く。

- (2) $0 < e < 1$; $-\frac{m\alpha^2}{2L^2} < E < 0$; 楕円
このとき、図 19 のように

$$a = \frac{C}{1 - e^2} = \frac{\alpha}{2|E|} \quad b = \frac{C}{\sqrt{1 - e^2}} = \frac{L}{\sqrt{2m|E|}}$$

となっている。惑星は太陽を一つの焦点とする楕円軌道を描く。これをケプラーの第 1 法則と呼ぶ。

楕円を一周まわるのに要する時間、すなわち公転周期を求めておこう。これには角運動量保存則を表現し直した面積速度一定の法則を用いるのが便利である。 $L = 2m \frac{dS}{dt}$ だったので、この両辺を時間 0 から公転周期 T まで積分する。左辺の L は角運動量保存則により時間に依存しないので、積分は単に時間 T を掛けるだけである。よって

$$LT = 2mS$$

が得られる。ここで右辺の S は楕円の面積、 $S = \pi ab$ である。上で見た楕円の関係から、 $b^2 = Ca$ が得られるので、半通径 C の具体的表式を用いて

$$T = \frac{2m}{L} \pi ab = 2\pi \sqrt{\frac{m}{\alpha}} a^{\frac{3}{2}}$$

が得られる。すなわち公転周期は軌道の大きさの $3/2$ 乗に比例する。または、公転周期の 2 乗は、軌道の大きさの 3 乗に比例するとも言える。これはティコ・ブラーエによる観測事実の、ケプラーによる解析結果である。ケプラーの第 3 法則と呼ばれる。

- (3) $e = 1$; $E = 0$; 放物線

このとき、 $\theta = \pm\pi$ で $r \rightarrow \infty$ となる。得られる軌道は放物線を与える。

[†]離心率を e と記したが、もちろん単位ベクトル (の大きさ) とは関係がない。

(4) $e > 1$; $E > 0$; 双曲線

このとき、 $\cos \theta < -\frac{1}{e}$ の領域では r が負となり、そこでは運動が許されない。このとき軌道は $\cos \theta = -\frac{1}{e}$ を漸近線に持つ双曲線を描く。

§ 7.4 逆 2 乗力問題再考

力の中心からの距離 r の 2 乗に反比例する力のもとでの運動、特にケプラー問題を異なる視点から扱ってみよう。逆 2 乗力のもとでの運動方程式は、

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\mu \frac{m \mathbf{r}}{r^2} \quad (7.3)$$

と表わされる。ここで、 $\frac{\mathbf{r}}{r}$ は r 方向の単位ベクトルである。また、前節とは $\alpha = \mu m$ とすればよい。(7.3) 式の両辺と \mathbf{r} の外積 (ベクトル積) をとることにより、角運動量ベクトル $\mathbf{L} \equiv m \mathbf{r} \times \mathbf{v}$ が保存するベクトルであることが示される。ここで、 $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ は速度ベクトルである。これは中心力のもとで角運動量が保存量であることの一例である。この知識のもとで、(7.3) 式の両辺と角運動量ベクトル \mathbf{L} との外積をとった式を利用すると以下の様に定義されるベクトル \mathbf{e}

$$\mathbf{e} \equiv \frac{1}{\mu m} (\mathbf{v} \times \mathbf{L}) - \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (7.4)$$

が保存するベクトルであることが示される。すなわち、 $\frac{d\mathbf{e}}{dt} = \mathbf{0}$ 。続いて、 \mathbf{e} と \mathbf{L} の内積を具体的に計算すると零であることが示される。すなわち、 $\mathbf{e} \cdot \mathbf{L} = 0$ である。こうして、ベクトル \mathbf{e} は角運動量ベクトルに垂直な平面、すなわち粒子の軌道面にあることがわかる。最後に、 \mathbf{e} と \mathbf{r} のなす角を φ として、 \mathbf{e} と \mathbf{r} の内積をとることから質点 m の軌道 (r と φ との関係) が導きだせる。すなわち、

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} &= \frac{1}{\mu m} (\mathbf{v} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}}{r} = \frac{1}{\mu m} (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{L} - r = \frac{1}{\mu m^2} L^2 - r \\ &= er \cos \varphi \end{aligned}$$

となる。但し、 \mathbf{L} の大きさを L とし、 \mathbf{e} の大きさを e とした。整理すると、軌道の式として次が得られる：

$$r = \frac{\frac{L^2}{\mu m^2}}{1 + e \cos \varphi} .$$

8章 粒子の散乱

§ 8.1 2体問題と換算質量

粒子1 (質量 m_1) が位置 \mathbf{r}_1 に、粒子2 (質量 m_2) が位置 \mathbf{r}_2 に居たとする。この2物体は互いに力を及ぼしているとしよう。このとき、慣性中心の座標 \mathbf{R} と、相対座標 \mathbf{r} を導入する。

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

逆に、慣性中心の座標 (重心座標) と相対座標を粒子の位置座標で表わすと

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}$$

但し $M = m_1 + m_2$

となる。粒子1 が粒子2 から及ぼされる力を \mathbf{F}_{12} 、粒子2 が粒子1 から及ぼされる力を \mathbf{F}_{21} とすると、作用・反作用の法則から $\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21}$ となる。こうして、ニュートン方程式は

$$m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} = \mathbf{F}_{12} \quad m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} = \mathbf{F}_{21} = -\mathbf{F}_{12}$$

と書ける。今、 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 を \mathbf{R} と \mathbf{r} で表すと、上のニュートン方程式は

$$m_1 \left(\frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} + \frac{m_2}{M} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \right) = \mathbf{F}_{12}, \quad m_2 \left(\frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} - \frac{m_1}{M} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \right) = -\mathbf{F}_{12}$$

となるが、辺々足したり引いたりすることで、

$$M \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = \mathbf{0}, \quad \mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}_{12}, \quad (8.1)$$

ここで $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

を得る。ここで、 μ は換算質量と呼ばれる。上の第1式は、2粒子の慣性中心 \mathbf{R} は等速直線運動、 $\frac{d\mathbf{R}}{dt} = (\text{一定})$ をすることを示している。第2番目の運動方程式は、相対座標 \mathbf{r} の変化が力を受けて起きることを意味する。こうして、互いに相互作用を及ぼす2粒子問題は、あたかも換算質量 μ を持った1粒子が力を受けて運動しているとのみ考えればよいことになる。

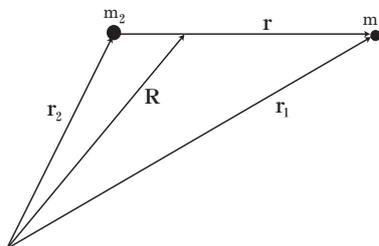


図 20:

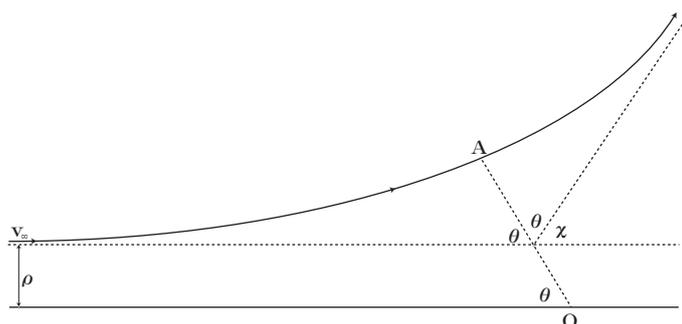


図 21: 点 A は軌道上で力の中心 O に最も近い点。軌道は \overline{OA} に対して対称である。また、 χ は慣性中心系での散乱角であり、 θ は入射粒子の無限遠での軌道と、 \overline{OA} の為す角である。ここで、 $\overline{OA} = r_{\min}$

§ 8.2 散乱角

力の中心を原点 O にとる。無限遠方から力の中心に向かってやってきた質量 m の粒子が、力を受けてどれくらい軌道が曲げられるかを考察しよう。これは粒子の散乱の問題に他ならない。問題とするのは、無限遠方からやってきた粒子がどれくらい曲げられて無限遠方に去っていくかの角、すなわち散乱角 χ の決定である。

図 21 より、散乱角 χ は

$$\chi = |\pi - 2\theta|$$

となる。ここで、前章「中心力の問題」の (7.1) 式から、 θ と r の関係は、

$$\theta = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{L}{r^2}}{\sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{L^2}{r^2}}} dr$$

と得られている。但し、 $r_{\min} = \overline{OA}$ は、分母のルートの中の根として求められる。なぜなら、点 A で粒子の r 方向の速さは 0 となるからである。すなわち、 $\frac{dr}{dt} = 0$ 。今、

$$\rho: \text{衝突径数 (図 21 を参照)}, \quad v_{\infty}: \text{無限遠方での粒子の入射速度}$$

を用いると、保存する粒子のエネルギー E と角運動量 L は、無限遠方での値を用いて、常に

$$E = \frac{1}{2}mv_{\infty}^2, \quad L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = m\rho v_{\infty}$$

となるので、上の角度 θ の式は、

$$\theta = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r^2}}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2V(r)}{mv_{\infty}^2}}} dr \quad (8.2)$$

となる。

ポテンシャルエネルギー $V(r)$ が r の関数としてわかっているとき、入射粒子の ρ と v_{∞} を与えれば、散乱角 χ は $\chi = |\pi - 2\theta|$ として、決定される。

§ 8.3 散乱断面積

粒子のビームを散乱中心（力の中心）に向けて投入したとしよう。散乱中心へ向けて、単位時間、単位面積あたり n 個の粒子が通過するとする。衝突径数 ρ とその周りの微小な半径方向の長さ $\delta\rho$ を考え、 ρ と $\rho + d\rho$

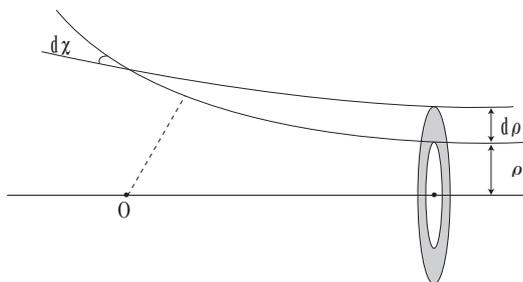


図 22:

の間から来る粒子が、散乱角 χ と $\chi + d\chi$ の間に散乱された粒子数を dN とする。このとき、比 $\frac{dN}{n}$ を微分断面積と呼び、散乱過程を特徴付ける量となる。

$$d\sigma = \frac{dN}{n} : \text{微分断面積}$$

このとき、図 22 より

$$dN = 2\pi\rho d\rho \cdot n$$

であるので、衝突径数 ρ を散乱角 χ の函数と見て、 $d\rho/d\chi$ が負になる場合までを考慮して絶対値をとっておくと、微分断面積 $d\sigma$ は

$$d\sigma = 2\pi\rho(\chi) \left| \frac{d\rho(\chi)}{d\chi} \right| d\chi \quad (8.3)$$

と書ける。ここで、“立体角” $d\Omega$ は、 $d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ となっているので、微分断面積は

$$d\sigma = \frac{\rho(\chi)}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho(\chi)}{d\chi} \right| d\Omega \quad (8.4)$$

と得られる。

全断面積 σ は、微分断面積を全立体角で積分して、

$$\sigma = \int d\sigma = \int \frac{\rho(\chi)}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho(\chi)}{d\chi} \right| d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \rho(\chi) \left| \frac{d\rho(\chi)}{d\chi} \right| d\chi \quad (8.5)$$

と得られる。

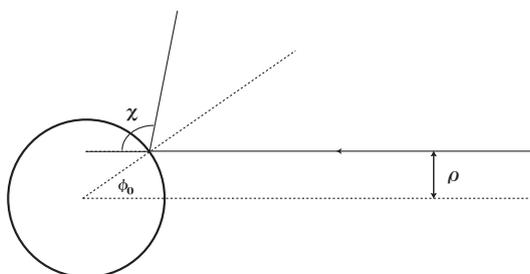


図 23:

簡単な例を挙げておこう。半径 a の剛体球 ($r < a$ で、 $V(r) = \infty$ 、 $r > a$ で、 $V(r) = 0$) による粒子の散乱断面積を求めてみる。衝突径数 ρ と散乱角 χ の間の関係は、図 23 より、明らかに

$$\rho = a \sin \varphi_0 = a \sin \frac{\pi - \chi}{2} = a \cos \frac{\chi}{2}$$

である。よって、微分断面積 (8.3) は、

$$d\sigma = 2\pi a \cos \frac{\chi}{2} \left| -\frac{a}{2} \sin \frac{\chi}{2} \right| d\chi = \frac{\pi a^2}{2} \sin \chi d\chi = \frac{a^2}{4} d\Omega \quad (\text{ここで、} d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi)$$

となる。したがって、全断面積 σ は、

$$\sigma = \int \frac{a^2}{4} d\Omega = \frac{\pi a^2}{2} \int_0^\pi \sin \chi d\chi = \pi a^2$$

と得られる。この場合には、入射粒子が剛体球を見込む幾何学的断面積に一致していることがわかる。

§ 8.4 ラザフォード散乱

クーロン場 (静電場) による質量 m の荷電粒子の散乱を考えよう。ポテンシャルエネルギー $V(r)$ は

$$V(r) = \frac{\alpha}{r}, \quad \alpha = \frac{Ze \cdot ze}{4\pi\epsilon_0}$$

とかける。ここで、 e は素電荷 ($e = 1.6 \times 10^{-19}[\text{C}]$)、 Z は標的の原子核の電荷 (陽子数)、 z は入射粒子の原子核の電荷 (陽子数)、 ϵ_0 は真空の誘電率 ($\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}[\text{F/m}]$) である。このとき、(8.2) 式から、衝突係数を ρ 、入射粒子の初速を v_∞ として、

$$\theta = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r^2}}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2\alpha}{mv_\infty^2} \cdot \frac{1}{r}}} dr = -\arccos \frac{\frac{\alpha}{mv_\infty^2 \rho}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{mv_\infty^2 \rho}\right)^2}}$$

となり、少し整理すると、

$$\rho^2 = \frac{\alpha^2}{m^2 v_\infty^4} \tan^2 \varphi_0 = \frac{\alpha^2}{m^2 v_\infty^4} \cdot \frac{1}{\tan^2 \frac{\chi}{2}}, \quad \left(\varphi_0 = \frac{\pi - \chi}{2} \right)$$

が得られる。よって、散乱の微分断面積 $d\sigma$ は、(8.3) 式にあてはめると、($d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ に注意して)

$$\begin{aligned} d\sigma &= \pi \left(\frac{\alpha}{mv_\infty^2} \right)^2 \frac{\cos \frac{\chi}{2}}{\sin^3 \frac{\chi}{2}} d\chi \\ &= \left(\frac{\alpha}{2mv_\infty^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\chi}{2}} \end{aligned}$$

となる。

歴史的にはラザフォード散乱として知られる、金原子核によるアルファ粒子の散乱を見ておこう。原子核にアルファ粒子 (ヘリウム原子核) をあてて、散乱実験を行う。ヘリウム原子核の電荷は $2e$ なので、 $z = 2$ 。よって、微分断面積は

$$d\sigma = \left(\frac{2Ze^2}{2mv_\infty^2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}$$

となる。今、散乱の微分断面積の定義から、立体角 $\Delta\Omega$ に散乱されてくるアルファ粒子の個数を ΔN とすると

$$\Delta N = n d\sigma = n \left(\frac{2Ze^2}{2mv_\infty^2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\Delta\Omega}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}$$

である。以下に実験データの一例を示しておこう。

χ	$\sin^4 \frac{\chi}{2}$	ΔN	$\Delta N \cdot \sin^4 \frac{\chi}{2}$
150°	0.8705	33	28.8
60°	0.0625	477	29.8
45°	0.0214	1435	30.7

上式から、 $\Delta N \times \sin^4 \frac{\chi}{2}$ は定数となるべきであるが、実験データもっその様になっており、散乱公式の有用性が確かめられる。ただし、実際には、原子核散乱は量子力学で扱わなければならない問題であり、古典力学に基づくラザフォードの結果が量子力学で求めた結果と一致したのは幸運である。

9章 振動

§9.1 単振動

ここでは1次元の運動のみを考えることにする。系がつり合いの状態にあり、静止することが可能であれば、必ずポテンシャルエネルギー $V(q)$ に極小の位置 q_0 があり、そこでは質量 m の質点には力が働かない。すなわち、力 F はポテンシャルエネルギーの座標微分に負号を付けたものであるので、 $V(q)$ の極小点では

$$F = - \left. \frac{dV(q)}{dq} \right|_{q=q_0} = 0$$

である*。こうして、ポテンシャルエネルギーを極小点 q_0 の周りで展開しよう。

$$V(q) = V(q_0) + \left. \frac{dV(q)}{dq} \right|_{q=q_0} (q - q_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V(q)}{dq^2} \right|_{q=q_0} (q - q_0)^2 + \dots$$

ここで、安定点としての極小点 q_0 からの変位 $q - q_0$ を x と書くことにしよう。また、極小点であるので右辺第2項は0、右辺第1項は単なる定数であるので運動には影響を与えないことから、落としてしまう。さらに、右辺第2項の係数を $\left. \frac{d^2V(q)}{dq^2} \right|_{q=q_0} \equiv k$ と書くことにする。もちろん極小点は時間とともに変化しないので、

$dq_0/dt = 0$ である。こうして、系のラグランジアン $L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - V(q)$ は、安定点の周りの変位が微小であると、変位の2次までとることで、

$$L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2}kx^2$$

となる。

このとき、質量 m の質点に働く力 F は

$$F = \frac{\partial L}{\partial x} = - \frac{dV(x)}{dx} = -kx$$

と、変位に比例する†。運動方程式は

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx .$$

となり、整理すると、

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 , \quad \text{ただし} \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} .$$

と書ける。こうして、一般に、安定点の周りの運動は、振幅が十分に小さいとしたときに単振動の方程式となる。ここで導入した ω を角振動数と呼ぶ。この方程式の解は、§6.2の振り子の運動で見たのと同じ運動方程式を与えるので、解は、

$$x(t) = A \cos(\omega t + \alpha)$$

となる。ここで、 A と α は初期条件で決まる定数である。 A は振動の振幅である。

§9.2 減衰振動

単振動している物体に、速度の1次に比例した抵抗力が働いているとする。抵抗力を $F = -\mu \frac{dx}{dt}$ とし、運動方程式は

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx - \mu \frac{dx}{dt}$$

となる。整理して

$$\frac{dx^2}{dt^2} + 2\lambda \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0, \quad \text{ただし} \quad \omega_0 \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad 2\lambda \equiv \frac{\mu}{m} \quad (9.6)$$

と書き直される。ラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2} e^{2\lambda t} (\dot{q}^2 - \omega_0^2 q^2)$$

と取れば良い。この方程式 (9.6) は形式的に

$$\left(\frac{d}{dt} - \gamma_1 \right) \left(\frac{d}{dt} - \gamma_2 \right) x(t) = 0, \\ \gamma_1 = -\lambda + \sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2}, \quad \gamma_2 = -\lambda - \sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2}$$

と書けるので、 $\frac{dx}{dt} - \gamma x = 0$ の解が[‡] $x(t) = ce^{\gamma t}$ であることから、上式の一般解は、 $\gamma_1 = \gamma_2$ の場合を除き、2つの解の線形結合として

$$x(t) = e^{-\lambda t} \left(c_1 e^{\sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2} t} + c_2 e^{-\sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2} t} \right)$$

となる。ここで、 c_1, c_2 は運動の初期条件で決まる定数である。こうして、 ω_0^2 と λ^2 の大小関係により、2つの場合が生じる。

(i) 減衰振動: $\omega_0^2 > \lambda^2$

このとき、 γ_i のルートの中は負になるので虚数が現れる。こうして一般解は三角関数で書き表わされ[†]

$$x(t) = Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t + \alpha), \quad \text{ただし} \quad \omega \equiv \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}$$

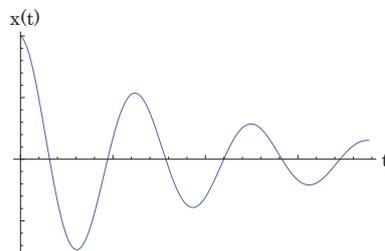


図 24:

*極大点では不安定なつり合いになってしまう。

†フックの法則と呼ばれることがある。

‡ $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いる。

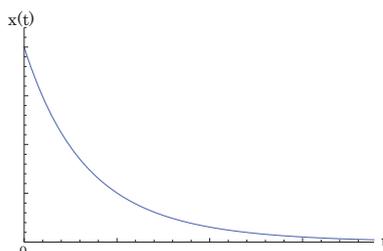


図 25:

と書き直される。A と α は初期条件により決まる定数である。この場合は図 24 のように、振動しながら減衰していく運動が見られる。これを減衰振動と呼ぶ。

(ii) 非周期的減衰 : $\omega_0^2 < \lambda^2$

一般解は

$$x(t) = e^{-\lambda t} (c_1 e^{\sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2} t} + c_2 e^{-\sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2} t})$$

である。ここで c_1 と c_2 は初期条件により決まる定数である。この場合は図 26 のように、単調に減衰していく。この運動は非周期的減衰、または過減衰と呼ばれる。

(iii) $\omega_0^2 = \lambda^2$ の場合

この場合には、 $\gamma_1 = \gamma_2$ となるので、先の一般解は成り立たない。運動方程式は

$$\left(\frac{d}{dt} - \gamma_1 \right)^2 x(t) = 0$$

となっている。両辺に $e^{-\gamma_1 t}$ をかけると、

$$e^{-\gamma_1 t} \left(\frac{d}{dt} - \gamma_1 \right)^2 x(t) = \frac{d^2}{dt^2} (e^{-\gamma_1 t} x(t)) = 0$$

となるので、時間に関する 2 階微分が 0 であることから

$$e^{-\gamma_1 t} x(t) = c_1 + c_2 t$$

と書ける。ここで、 $\gamma_1 = -\lambda$ であるので、こうして一般解は次の形を持つ。

$$x(t) = (c_1 + c_2 t) e^{-\lambda t}$$

ここで、 c_1 と c_2 は初期条件により決まる定数である。この解も振動せずに減衰していく振る舞いを示す。これは臨界減衰と呼ばれる。

§ 9.3 強制振動

単振動をしている質点が、外場のもとに置かれている状況を考えよう。外場のポテンシャルエネルギーを $V_{\text{ex}}(q)$ とすると、外場がない場合の質点の平衡点 $q = q_0$ の周りに展開する。前と同じように $x = q - q_0$ として、

$$V_{\text{ex}}(x, t) = V_{\text{ex}}(0, t) + \left. \frac{\partial V_{\text{ex}}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} x + \dots$$

となる。第1項は x に依らないので $V_{\text{ex}}(x, t) = \frac{d}{dt} \int^t V_{\text{ex}}(0, t') dt'$ と時間の完全微分となるので、2章のラグランジアン構成の際に行った議論により運動には寄与しない。第2項は $-\left. \frac{\partial V_{\text{ex}}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = F(t)$ と書くことにすると、 $F(t)$ は外力に他ならない。こうして、ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2}kx^2 + F(t)x$$

となる。オイラー・ラグランジュ方程式としてのニュートン方程式は

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx(t) + F(t)$$

と書ける。変位に比例した復元力 kx が単振動を引き起こすが、そこに時間に依存した外力 $F(t)$ が作用している系の運動方程式である。整理して、

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \omega^2x(t) = \frac{1}{m}F(t), \quad \text{ただし} \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

が得られる。これを強制振動と呼ぶ。

外力としては制限されていないが、ここでは

$$F(t) = f \cos(\gamma t + \beta)$$

で振動している場合を扱おう。このとき、運動方程式は

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = \frac{f}{m} \cos(\gamma t + \beta)$$

と書ける。この方程式の左辺は求めたい関数 $x(t)$ の1次であるが、右辺は0次であり、数学的には非同次線形微分方程式と呼ばれる。この場合には方程式の解の一つを見つけ（特解）、その解に右辺を0とおいた同次方程式の一般解を加えることで求めたい非同次線形微分方程式の一般解が得られることが知られている。特解を探すために、 $x = B \cos(\gamma t + \beta)$ とおいて上の運動方程式に代入してみると、 $-B\gamma^2 + \omega^2B = \frac{f}{m}$ が得られるので、未知の B が $B = \frac{f}{m} \frac{1}{\omega^2 - \gamma^2}$ と得られる。外力を零とおいた同次方程式の一般解は単振動の解としてすでに知っているので、結局求めたい一般解として、

$$x(t) = A' \cos(\omega t + \alpha') + \frac{f}{m} \cdot \frac{1}{\omega^2 - \gamma^2} \cos(\gamma t + \beta)$$

が得られる。このままでは $\omega = \gamma$ のときに発散するように見えるので、特解の B と外場の位相 β を用いて $A' \cos \alpha' \equiv A \cos \alpha - B \cos \beta$ 、 $A' \sin \alpha' \equiv A \sin \alpha - B \sin \beta$ と、 A' 、 α' の代わりに A 、 α を導入すると、最終的に

$$x(t) = A \cos(\omega t + \alpha) + \frac{f}{m} \cdot \frac{1}{\omega^2 - \gamma^2} \{ \cos(\gamma t + \beta) - \cos(\omega t + \beta) \}$$

が得られる。ここで、 A 、 α は初期条件により決まる定数である。

さて、強制力の角振動数 γ が、系の持つ固有の角振動数 ω に等しくなる場合を考えよう。このときには上の解で $\gamma \rightarrow \omega$ の極限をとると、

$$\begin{aligned} x(t) &= A \cos(\omega t + \alpha) + \frac{f}{m} \cdot \frac{1}{(\omega + \gamma)(\omega - \gamma)} \{ \cos(\gamma t + \beta) - \cos(\omega t + \beta) \} \\ &= A \cos(\omega t + \alpha) - \frac{f}{m} \cdot \frac{1}{\omega + \gamma} \frac{\cos(\gamma t + \beta) - \cos(\omega t + \beta)}{\gamma - \omega} \\ &\rightarrow A \cos(\omega t + \alpha) + \frac{f}{2m\omega} \cdot t \sin(\omega t + \beta) \end{aligned}$$

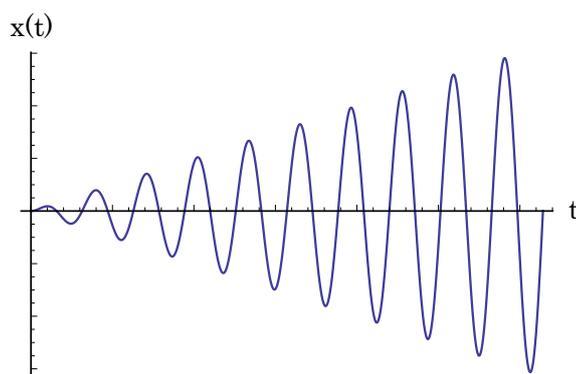


図 26: $A = 0$ 、 $\beta = 0$ の場合の概略図

となる。ここで、2行目から3行目は微分の定義を利用した。こうして、振幅は時間 t とともに増大していくことがわかる。この現象を、共鳴と呼ぶ。

§ 9.4 摩擦のあるときの強制振動

前節では振動する外場 $f \cos \gamma t$ を考えた。このときには振動の振幅が時間とともに増大することが見られたが、多くの現象では増大し続けるわけではなく、抵抗力を受けて振幅の増大は止まる。そこで、速度の1次に比例した抵抗力が働くとして、再び振動する外力の下での強制振動を考えよう。運動方程式は

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + 2\lambda \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{f}{m} \cos \gamma t$$

となる。ただし、 $\omega_0^2 > \lambda^2$ として、外力がない場合には減衰振動をしている系としよう。この方程式は非同次線形微分方程式であるので、解法は前節と同様である。まず、右辺の外力がない場合の一般解は減衰振動の解としてすでに知っている。すなわち、 $x(t) = Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t + \alpha)$ 、ただし $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}$ であった。特解を一つ見つければ良いので、 $x = B \cos(\gamma t - \delta)$ とおいて、 B と δ を決定しよう。運動方程式に代入すると

$$\begin{aligned} (\omega_0^2 - \gamma^2)B \cos(\gamma t - \delta) - 2\lambda\gamma B \sin(\gamma t - \delta) &= \frac{f}{m} \cos(\gamma t) \\ \text{すなわち} \quad [(\omega_0^2 - \gamma^2)B \cos \delta + 2\lambda\gamma B \sin \delta] \cos(\gamma t) \\ + [-2\lambda\gamma B \cos \delta + (\omega_0^2 - \gamma^2)B \sin \delta] \sin(\gamma t) &= \frac{f}{m} \cos(\gamma t) \end{aligned}$$

となる。ここで、2番目の式へは三角関数の加法定理を用いた。任意の時刻で成り立つには、 $\cos(\gamma t)$ 、 $\sin(\gamma t)$ の係数を両辺比較して等しいと置くと

$$\begin{aligned} [(\omega_0^2 - \gamma^2) \cos \delta + 2\lambda\gamma \sin \delta] B &= \frac{f}{m} \\ [-2\lambda\gamma \cos \delta + (\omega_0^2 - \gamma^2) \sin \delta] B &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。これを解くと B と δ が決定される。こうして、摩擦がある時の強制振動の解として

$$\begin{aligned} x(t) &= Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t + \alpha) + B \cos(\gamma t - \delta), \\ B &\equiv \frac{f}{m} \cdot \frac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \gamma^2)^2 + 4\lambda^2 \gamma^2}} \\ \tan \delta &\equiv \frac{2\lambda\gamma}{\omega_0^2 - \gamma^2} \end{aligned}$$

が得られる。ただし、 A 、 α は初期条件で決まる定数である。

十分時間がたつと、第 1 項の減衰振動項は零に近くなり、

$$x(t \rightarrow \text{大}) \rightarrow B \cos(\gamma t - \delta)$$

となる。十分時間が経つと、振動は強制力の振動の位相から δ だけ遅れるが、強制力と同じ振動数で振動していることがわかる。また、振動の振幅が最大 (B が最大) となる共鳴は、 $\gamma \rightarrow \omega_0$ で見られることがわかる。

§9.5 パラメータ共鳴

振動する物体の座標を $q(t)$ として、単振動の方程式を書くと

$$\frac{d^2 q(t)}{dt^2} + \omega^2 q(t) = 0 \quad (9.7)$$

となる。この微分方程式の解は

$$q(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

であった。 A と B は積分定数である。単振り子の場合、 ω と書いた“角振動数”は、振り子の紐の長さを l 、重力加速度を g として

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$$

となっていた。このとき、 $q(t)$ は、鉛直方向と振り子の紐が為す角度であった。

今度は ω が時間 t に依存している場合を考えよう。振り子の場合、ひもの長さ l が周期的に時間変化していると考えればよい。 l_0 を基準の紐の長さとして、その周りに周期的に伸び縮みするとしておこう。このとき、

$$l = l(t) = l_0(1 - h \cos \gamma t)$$

と仮定しておく。ここで、 h は 1 に比べて十分小さいとして、 $(1 - x)^{-1} \approx 1 + x + \dots$ と展開すると

$$\omega(t)^2 = \frac{g}{l(t)} = \frac{g}{l_0}(1 - h \cos \gamma t)^{-1} \approx \omega_0^2(1 + h \cos \gamma t)$$

となる。ここで、定数として、 $\omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l_0}}$ を定義した。運動方程式 (9.7) は

$$\frac{d^2 q(t)}{dt^2} + \omega_0^2(1 + h \cos \gamma t)q(t) = 0 \quad (9.8)$$

と書き直せる。これは、Mathieu (マシユー) 方程式として知られており、詳しい分析では、 γ が、基準の振り子の角振動数 ω_0 と

$$\gamma = \frac{2\omega_0}{n} \quad (n \text{ は自然数})$$

の関係にあるときにパラメータ共鳴と呼ばれる共鳴現象が起きることが知られている。 $n = 1$ の時に特に大きな共鳴が得られるので、ここではその場合に限って考えてみよう。そこで、

$$\gamma = 2\omega_0 + \epsilon$$

とおく。ただし、 ϵ は小さな量とする。これを代入すると、運動方程式 (9.8) は

$$\frac{d^2 q(t)}{dt^2} + \omega_0^2(1 + h \cos[(2\omega_0 + \epsilon)t])q(t) = 0 \quad (9.9)$$

と書き直される。

今、解 $q(t)$ を

$$q(t) = a(t) \cos \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right] + b(t) \sin \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right] \quad (9.10)$$

とにおいて、運動方程式 (9.9) に代入してみよう。ここで、 a と b の時間微分、 $\frac{da(t)}{dt}$ 、 $\frac{db(t)}{dt}$ が小さな量 ϵ と同じ程度の量だとする。そして、 a と b の時間についての 2 階微分、 $\frac{d^2a(t)}{dt^2}$ 、 $\frac{d^2b(t)}{dt^2}$ は ϵ の 2 乗ほど小さいとして無視する。さらに、運動方程式に代入した場合、 $\cos \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ や $\sin \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ の項が出てくるのだが、これらは小さい量 h の 2 乗程度になることがわかっているので、これらも無視しよう。この項まで考慮するには最初に仮定した解 $q(t)$ にも $\cos \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ や $\sin \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ の項を入れておく必要がある。ここでは ϵ も h も 1 次の項まで考慮する近似を取っているとして、出てきた $\cos \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ や $\sin \left[3 \left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$ の項を無視してしまう近似を使う。そうすると、仮定した解 (9.10) を運動方程式 (9.9) に代入し、上記の近似を行うことで、

$$\begin{aligned} & -\omega_0 \left(2 \frac{da(t)}{dt} + b(t)\epsilon + \frac{\omega_0 hb(t)}{2} \right) \sin \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right] \\ & + \omega_0 \left(2 \frac{db(t)}{dt} - a(t)\epsilon + \frac{\omega_0 ha(t)}{2} \right) \cos \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right] \approx 0 \end{aligned}$$

という式が得られる。任意の時間 t でこの式が成り立つためには

$$\begin{aligned} 2 \frac{da(t)}{dt} + b(t)\epsilon + \frac{1}{2} \omega_0 hb(t) &= 0 \\ 2 \frac{db(t)}{dt} - a(t)\epsilon + \frac{1}{2} \omega_0 ha(t) &= 0 \end{aligned}$$

の 2 式が成り立っていればよい。さらに、 a_0 、 b_0 を時間に依存しない定数として $a(t)$ 、 $b(t)$ を、

$$a(t) = a_0 e^{st}, \quad b(t) = b_0 e^{st}$$

とにおいて、上の 2 式に代入してから $2e^{st}$ で割ると

$$\begin{aligned} sa + \frac{1}{2} b\epsilon + \frac{1}{4} \omega_0 hb &= 0 \\ sb - \frac{1}{2} a\epsilon + \frac{1}{4} \omega_0 ha &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。行列とベクトルで上の 2 式を表すと

$$\begin{pmatrix} s & \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{1}{2}\omega_0 h) \\ -\frac{1}{2}(\epsilon - \frac{1}{2}\omega_0 h) & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と書ける。こうして、 $a = 0$ 、 $b = 0$ 以外の解を持つには、行列の行列式が 0 であれば良いことが解るので、行列式を 0 とすると

$$s^2 + \frac{1}{4} \left(\epsilon^2 - \frac{1}{4} \omega_0^2 h^2 \right) = 0$$

が得られる。こうして、

$$s = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\omega_0 h}{2} \right)^2 - \epsilon^2} \quad (9.11)$$

が得られる。結局、近似的ではあるが、 $q(t)$ が求まり、

$$q(t) = a_0 e^{st} \cos \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right] + b_0 e^{st} \sin \left[\left(\omega_0 + \frac{\epsilon}{2} \right) t \right]$$

が得られた。 s が純虚数、つまり (9.11) 式で、

$$\left(\frac{\omega_0 h}{2} \right)^2 - \epsilon^2 < 0$$

のときは、(9.11) のルートの中が負になるので $s = i \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon^2 - \left(\frac{\omega_0 h}{2} \right)^2} = i|s|$ とおくと $e^{i|s|t} = \cos(|s|t) + i \sin(|s|t)$ だから、振動する解になるので、共鳴は起きない。ところが

$$\left(\frac{\omega_0 h}{2} \right)^2 - \epsilon^2 > 0 \tag{9.12}$$

のときには s は実数なので、解 $q(t)$ は時間 t が経つと、 e^{st} でどんどん大きくなる。振り子であれば、振れる角度 $q(t)$ が時間とともにどんどん大きくなるということなので、時間とともに振幅が増大していく。これをパラメータ共鳴と呼ぶ。

振幅が増大し、パラメータ共鳴が起きるには、(9.12) の条件から、角振動数の $2\omega_0$ からのずれ ϵ が

$$-\frac{h\omega_0}{2} < \epsilon < \frac{h\omega_0}{2}$$

の範囲に収まっていれば良いことがわかる。

§9.6 多自由度系での微小振動

これまでは1次元で1自由度しかない場合の振動を扱ってきたが、ここでは1次元ではあるが自由度がたくさんある場合の振動を考える。質点が1次元的に並んでいるような系を想定してみよう。 i 番目の質点の座標を q_i とし、その釣り合いの位置を q_{i0} とする。釣り合いの位置からの変位は $x_i \equiv q_i - q_{i0}$ であるので、ポテンシャルエネルギーを各質点の釣り合いの位置の周りで展開すると

$$\begin{aligned} V(x_1, x_2, \dots, x_s) &= V(0, 0, \dots, 0) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s \frac{\partial V}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{x_i=x_j=0} x_i x_j + \dots \\ &\equiv V(0) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s k_{ij} x_i x_j \end{aligned} \tag{9.13}$$

となる。ここで、右辺で1次の項は、釣り合いの条件 $\frac{\partial V}{\partial x_i} \Big|_{x_i=0} = 0$ より消えている。また、右辺第2項は右辺第1項は定数であるので、運動に寄与しない。よって、一般にラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(m_{ij} \frac{dx_i}{dt} \frac{dx_j}{dt} - k_{ij} x_i x_j \right)$$

と書いてよい。ただし、 $m_{ij} = m_{ji}$ 、 $k_{ij} = k_{ji}$ であることは対称性から要求される。

運動方程式（オイラー・ラグランジュ方程式）は

$$\sum_j \left(m_{ij} \frac{d^2 x_j}{dt^2} + k_{ij} x_j \right) = 0 \tag{9.14}$$

と得られる。この運動方程式を解こう。まず、

$$x_j(t) = A_j \cos(\omega t) + B_j \sin(\omega t)$$

と置いてみよう。これを運動方程式に代入すると

$$\sum_j (-\omega^2 m_{ij} + k_{ij}) A_j = 0, \quad \sum_j (-\omega^2 m_{ij} + k_{ij}) B_j = 0$$

が得られる。たとえば、 A_j に関する式を行列表示してみると

$$\begin{pmatrix} -m_{11}\omega^2 + k_{11} & -m_{12}\omega^2 + k_{12} & \cdots \\ -m_{21}\omega^2 + k_{21} & -m_{22}\omega^2 + k_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

と書けるが、 $A_j = B_j = 0$ という意味のない解以外の解を持つためには、行列部分が逆行列を持つてはいけない。こうして、

$$\det | -m_{ij}\omega^2 + k_{ij} | = 0, \\ \text{すなわち} \begin{vmatrix} -m_{11}\omega^2 + k_{11} & -m_{12}\omega^2 + k_{12} & \cdots \\ -m_{21}\omega^2 + k_{21} & -m_{22}\omega^2 + k_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0$$

という行列式を解けば良いことになる。こうして、仮定した解 x_j の振動数 ω が行列式を解くことで系の自由度の数だけ得られることになる。ただし、 $\omega > 0$ とする。

$$\omega = \omega_\alpha, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, s)$$

この ω_α を固有振動数と呼ぶ。固有振動数 ω_α が決まると、その振動数に応じてもとの行列の方程式から A_j 、 B_j が決定される。こうして、

$$x_j^{(\alpha)} = A_j^{(\alpha)} \cos \omega_\alpha t + B_j^{(\alpha)} \sin \omega_\alpha t$$

と、運動方程式の解が得られる。

さらに A_j 、 B_j を決める行列の方程式で、行列部分是对称行列なので必ず対角化することが可能である。行列型で書いた A_j を決める方程式を、行列を O 、 A_j を纏めてベクトル \vec{A} と書くと、

$$O\vec{A} = 0, \rightarrow UOU^{-1}U\vec{A} = 0, \text{ただし } UOU^{-1} = \begin{pmatrix} \omega^2 - \omega_1^2 & 0 & \cdots \\ 0 & \omega^2 - \omega_2^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

と記される。このとき、 $U\vec{A}$ で決まるベクトルの成分を Q_α と書くと

$$Q_\alpha = a_\alpha \cos(\omega_\alpha t + \delta_\alpha)$$

と得られる。こうして、一般解は

$$x_j(t) = \sum_{\alpha=1}^s x_j^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} C_{j\alpha} Q_\alpha$$

と表すことができる。ここで、 $C_{j\alpha}$ は定数である。この Q_α を基準座標と呼ぶ。基準座標を用いると対角化されて

$$L = \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{2} m_\alpha \left(\frac{dQ_\alpha}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2 \right),$$

$$\frac{d^2 Q_\alpha}{dt^2} + \omega_\alpha^2 Q_\alpha = 0$$

と簡単化される。基準座標で表わされる振動を基準振動と呼ぶ。

§9.7 連続体の振動

前節では1次元的にばねで結ばれた振動を考えた。やはり、1次元的に質量 m の物体が、同じばね定数 k で繋がれている場合を考えておこう。 i 番目の質点に働く力は、 $i+1$ 番目の質点と結ばれたばねによる力 $-k(x_i - x_{i+1})$ と、 $i-1$ 番目の質点と結ばれたばねによる力 $-k(x_i - x_{i-1})$ によるものなので、運動方程式 (??) は

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -k(x_i - x_{i+1}) - k(x_i - x_{i-1})$$

$$= -k(2x_i - x_{i+1} - x_{i-1})$$

すなわち

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\kappa(2x_i - x_{i+1} - x_{i-1}), \quad \left(\kappa = \frac{k}{m} \right) \quad (9.15)$$

と書けることに注意してからこの節を始めよう。

今、長さ L の連続体の1次元の固体の棒を考える。断面積は S とし、両端を力 F で引っ張ったとしよう。その際、棒は長さ ΔL だけ伸びたとする。フックの法則が成り立つ範囲で、伸び率 $\frac{\Delta L}{L}$ は単位面積当たりの力 $\frac{F}{S}$ に比例するとしてよい。こうして、

$$\frac{F}{S} = E \frac{\Delta L}{L} \quad (9.16)$$

と書ける。ここで、比例定数は物質によって決まっており、弾性率、特に固体の棒に関してはヤング率と呼ばれる。(9.16) は

$$F = \frac{ES}{L} \Delta L$$

と書けるので、力がのび ΔL に比例するフックの法則であり、ばね定数に相当する量は $\frac{ES}{L}$ である。こうして、棒に力 F を及ぼすと、その仕事は棒の弾性エネルギー $\frac{1}{2} \frac{ES}{L} \Delta L^2$ となる[§]。こうして、単位体積あたりの弾性エネルギー ε は、体積 SL で割り算して、

$$\varepsilon = \frac{1}{2} F \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^2 \quad (9.17)$$

となる。

この弾性体の棒の振動を考えよう。

[§]フックの法則に従うばねのポテンシャルエネルギー V は、ばね定数を k 、自然の位置からの変位を x として $V = \frac{1}{2} kx^2$ であった (§9.1)。力 F は $F = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx$ 。

棒の方向に x 軸を取り、 x と $x + \Delta x$ の間の微小な部分を考える。 x では x 軸負の向きに力 $F(x)$ がかかっており、 $x + \Delta x$ では正の向きに $F(x + \Delta x)$ の力がかかって棒は引き伸ばされていると考えよう。 x の面は $u(x, t)$ だけ変位を受け、 $x + \Delta x$ の面は $u(x + \Delta x, t)$ の変位を被ったとする。この時、考えている領域の伸び縮みの量は $u(x + \Delta x, t) - u(x, t)$ である。こうして、 Δx の領域での伸びの割合は

$$\frac{u(x + \Delta x, t) - u(x, t)}{\Delta x} \rightarrow \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (9.18)$$

と偏微分で書ける。ここで $\Delta x \rightarrow 0$ の極限をとった。こうして、(9.16) より

$$\frac{F(x, t)}{S} = E \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (9.19)$$

となる。

棒の質量密度を ρ とすると、注目している部分の棒の質量は $\rho S \Delta x$ であるので、注目している部分の運動方程式は

$$\begin{aligned} \rho S \Delta x \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} &= F(x + \Delta x, t) - F(x, t) \\ &= SE \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x+\Delta x} - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_x \right) \end{aligned} \quad (9.20)$$

と書ける。ここで、偏微分の下付き添え字は $x + \Delta x$ 及び x での偏微分の値であることを意味する。こうして (9.20) は

$$\rho \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = E \frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x+\Delta x} - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_x \right)$$

となるが、 $\Delta x \rightarrow 0$ をとると、右辺は再び x についての微分になり、結局、

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (9.21)$$

が得られる。これが弾性体の棒に力を及ぼした時に得られる運動方程式である。

さて、この節の初めに、同じばね定数を持つばねで結ばれた同一質量の無限個の 1 次元鎖の方程式 (9.15) を与えておいた。これを (9.21) と比較してみよう。変位 x_i は $u(x, t)$ に対応しているので、質点を区別していた添え字 i は、連続体では位置 x に対応している。1 次元鎖の質点間の（平衡での）間隔を d とすると、連続体と 1 次元鎖は

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} &\longleftrightarrow \frac{1}{d} (x_{i+1}(t) - x_i(t)) \\ \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &\longleftrightarrow \frac{1}{d} \left(\frac{x_{i+1}(t) - x_i(t)}{d} - \frac{x_i(t) - x_{i-1}(t)}{d} \right) \\ &= -\frac{1}{d^2} (2x_i(t) - x_{i+1}(t) - x_{i-1}(t)) \end{aligned}$$

と対応するので、 $\frac{E}{\rho d^2}$ を κ とすれば、(9.21) は (9.15) に戻る。こうして、連続体としての弾性体の棒の振動は、1 次元鎖の振動問題と同一の構造を持つことがわかる。

(9.21) を解くためには、初期時刻、たとえば $t = 0$ での各点 x での変位 $u(x, 0)$ と速度 $\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0}$ が初期条件として必要である。§9.5 でみたように、 $u(x, t)$ が基準振動であれば

$$u(x, t) = a(x) \cos(\omega t + \alpha) \quad (9.22)$$

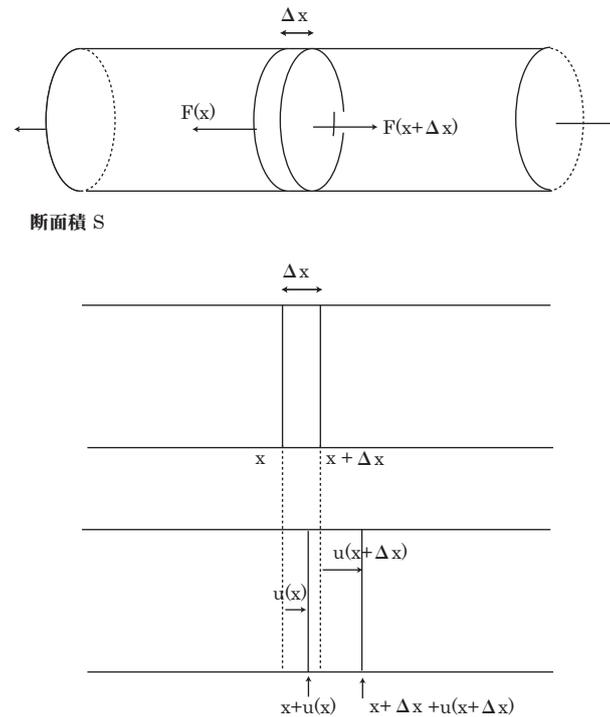


図 27:

とにおいて (9.21) に代入し、

$$-\omega^2 a(x) = \frac{E}{\rho} \frac{d^2 a(x)}{dx^2} \quad (9.23)$$

が得られるので、簡単に解けて

$$a(x) = a \cos(kx + \beta) \quad (9.24)$$

が得られる。ここで、 k と ω には

$$\omega \equiv \omega_k = \sqrt{\frac{E}{\rho}} k \quad (9.25)$$

の関係がある。こうして、

$$u(x, t) = \sum_k a_k \cos(kx + \beta) \cos(\omega_k t + \alpha) \quad (9.26)$$

が解になる。境界条件として、例えば両端では変位が無い固定端であれば

$$u(0, t) = u(L, t) = 0 \quad (9.27)$$

とにおいて $u(x, t)$ を解くことになる。また、両端で力が働かない自由端の場合には、両端で力 F が零なので、(9.19) より

$$\left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_{x=0} = \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_{x=L} = 0 \quad (9.28)$$

の境界条件の下で $u(x, t)$ を解くことになる。

10章 波動現象

§ 10.1 波動方程式

形を変えず、一定の速さで進む流体を考えよう。

時刻 t_0 での波の形（流体表面の“山”“谷”の形）が関数 $f(x)$ で表されるとする。この波が x 軸に沿って正の向きに進んでいるとしよう。時刻 $t_0 + t$ では、波の形は変わらず関数 f で表されるが、波が移動したので $f(x - vt)$ と書ける。波の各点は距離 vt 進んだので、 x が vt だけ大きいところが t_0 での元々の波の形と同じになっているからである。

よって“波動” ξ は、 x 軸正の向きに進むときには

$$\xi(x, t) = f(x - vt)$$

となり、負の向きに進むときには、速度の向きが異なるので v を $-v$ として

$$\xi(x, t) = g(x + vt)$$

というように、空間 x 、時間 t に対する依存性を持つ。

波を表す方程式を考えてみよう。方程式が時間の1階微分を含むとすると、“右”(x 軸正の向き)に動く波では $\frac{\partial \xi}{\partial t} = -v \frac{d\xi}{d(x - vt)}$ と、 $-v$ が現れる。一方、“左”(x 軸負の向き)に動く波では $\frac{\partial \xi}{\partial t} = v \frac{d\xi}{d(x + vt)}$ と、 $+v$ が現れる。右に進むか左に進むかという人為的なもの（“右”と“左”は座標の取り方で変わる人為的なもの）で結果が変わるのはおかしいので、基礎方程式としては時間に関して2階微分を含むことが必要になる（ $(-v) \times (-v) = v \times v = v^2$ ）。したがって、 $\xi(x, t) = f(x - vt)$ 、 $\xi(x, t) = g(x + vt)$ ともに満たされる方程式として

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 \quad (10.1)$$

が得られる。（座標微分は“右”に進む波も、“左”に進む波も、 $\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{d\xi}{d(x \pm vt)}$ となって、同じ結果を与えている。）今は波動の進行する方向を x 軸方向に限定したが、一般には空間は3次元であるから、空間微分を $\partial^2 / \partial x^2 \rightarrow \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$ に置き換えて

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - v^2 \nabla^2 \xi = 0$$

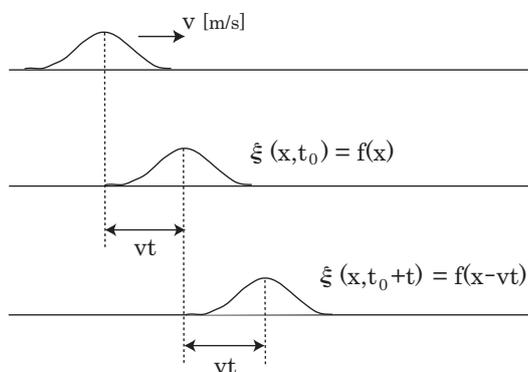


図 28:

とすれば良い。これを波動方程式と呼び、波という現象を記述する基礎方程式である。ここに現れた v は、導出から明らかなように波の進行する速さである。

§ 10.2 振動数・波長

波の簡単な例として、正弦波を考えてみよう。

$$\xi(x, t) = A \sin(\omega t - kx) = A \sin(-k(x - vt)) , \quad \text{但し } v^2 = \frac{\omega^2}{k^2}$$

は、1次元波動方程式 $\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0$ の解である。実際、代入して確かめてみればよい。

x を $x + \frac{2\pi}{k}$ としても、 $\xi(x, t)$ の形は全く変わらない。ここで、

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{2\pi}{k} & : \text{波長} \\ k & : \text{波数} \end{aligned}$$

と呼ぶ。波長は波の山（谷）から山（谷）までの長さ、波数は長さ 2π の中に含まれる波（の山または谷）の数である。

時間 t を $t + \frac{2\pi}{\omega}$ としても、 $\xi(x, t)$ の形は全く変わらない。ここで、

$$\begin{aligned} T = \frac{2\pi}{\omega} & : \text{周期} \\ \nu = \frac{1}{T} & : \text{振動数} \end{aligned}$$

と呼ぶ。周期は波の山（谷）から次の山（谷）がやってくるまでの時間、振動数は単位時間あたりやってくる波の数である。 $\omega = 2\pi\nu$ の関係があり、 ω を角振動数と呼ぶ。

また、波の速さ v と角振動数 ω 、波数 k の間には $v^2 = \frac{\omega^2}{k^2}$ の関係があった。よって、

$$v = \lambda\nu$$

の関係が成り立っていることがわかる。

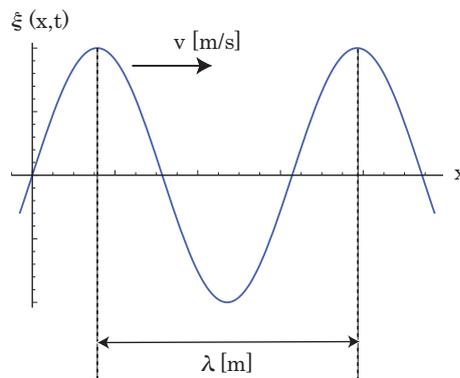


図 29:

§ 10.3 音波

音は空気の疎・密が伝わる波動現象である。

空気の密度を ρ 、考えている空気柱の断面積を S 、注目している空気の部分の幅を Δx 、1 及び 2 の面に働く圧力を P_1 、 P_2 、空気の変位を ξ と書く（図を参照）と、ニュートン方程式は

$$\rho S \Delta x \cdot \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = (P_1 - P_2) S \quad (10.2)$$

と書ける。時間 Δt における（注目している 1 と 2 の面で挟まれた）空気の体積変化 ΔV は、2 の面と 1 の面の移動した距離の差 $v_2 \Delta t - v_1 \Delta t$ に断面積 S を掛けたものである。ここで、 v_1 、 v_2 は 1、及び 2 の面が動く速度である：

$$\Delta V = (v_2 \Delta t - v_1 \Delta t) S$$

よって

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = S(v_2 - v_1) = \frac{V}{\Delta x} (v_2 - v_1) = V \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (V = S \cdot \Delta x) \quad (10.3)$$

空気の疎密の変化は熱量の変化無く早く行なわれる（断熱変化）ので、断熱変化では気体の体積 V と圧力 P の間には

$$PV^\gamma = \text{一定} \quad (10.4)$$

という関係があることが知られている（「熱力学」で習う）。ここで、 γ は“定圧熱容量” C_P と“定積熱容量” C_V の比で、 $\gamma = \frac{C_P}{C_V}$ である。(10.4) 式から、断熱変化での体積の変化 ΔV と圧力の変化 ΔP の関係は、

$$\Delta P = \Delta \left(\frac{\text{一定}}{V^\gamma} \right) = -\gamma \frac{\text{一定}}{V^{\gamma+1}} \Delta V = -\gamma \frac{P}{V} \Delta V$$

として得られる。

さて、(10.2) 式に戻ると、右辺は圧力の変化 $\Delta P = P_2 - P_1$ が表れているので、整理しておく

$$\rho \Delta x \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = -\Delta P$$

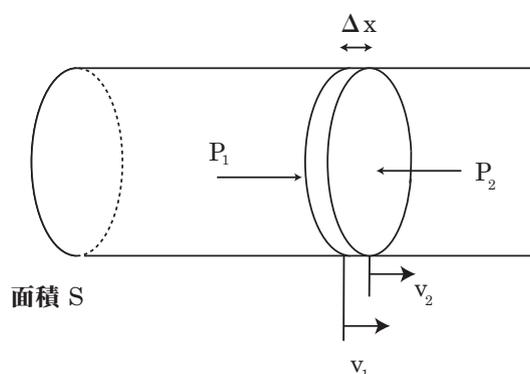


図 30:

となるが、断熱変化での圧力変化を代入して

$$\rho \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = -\frac{\Delta P}{\Delta x} = \gamma \frac{P}{V} \frac{\Delta V}{\Delta x} = \gamma \frac{P}{V} \frac{\Delta V}{\Delta t} \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

となる。ここで (10.3) 式を用いて、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとって微分で書く。このとき、速さ v は変位 ξ を使って $v = \frac{\partial \xi}{\partial t}$ であることから、上の式は

$$\rho \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = \gamma P \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial t}{\partial x} = \gamma P \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} \right) \frac{\partial t}{\partial x} = \gamma P \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$$

が得られる。最終的に整理して

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - \gamma \frac{P}{\rho} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 \quad (10.5)$$

となる。これは波動方程式であり、空気の疎密は波動として伝わるのがわかる。これが音波である。また波としての音の速さ v は波動方程式から

$$v = \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}} \quad (10.6)$$

であることがわかる。

[註] 空気中を伝わる音速を概算してみよう。空気は窒素（分子量 28）と酸素（分子量 32）が 4 対 1 で混合しているの、空気の密度は $0.8 \times 28 + 0.2 \times 32 = 28.8$ g/mol。1 モルあたり気体は 22.4 リットル占めるので

$$\rho = \frac{28.8 \times 10^{-3} \text{ [kg/mol]}}{22.4 \times 10^{-3} \text{ [m}^3\text{/mol]}} = 1.29 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

酸素も窒素も 2 原子分子なので、定積熱容量は $C_V = \frac{5}{2}R$ 、定圧熱容量は $C_P = \frac{7}{2}R (= C_V + R)$ である。ここで R は気体定数。こうして、

$$\gamma = \frac{C_P}{C_V} = \frac{7}{5} = 1.4$$

温度 0 °C で大気の圧力 P は

$$P = 1.013 \times 10^5 \text{ [N/m}^2\text{]} (= \text{[Pa]})$$

よって、音速 v は

$$v = \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}} = \sqrt{1.4 \times \frac{1.013 \times 10^5}{1.29}} = 332 \text{ [m/s]}$$

§ 10.4 弾性棒を伝わる波

さて、§9.6 では、弾性体の振動を扱った。これは同一質量の質点が同じばね定数のばねで 1 次元的に結びついた質点系の振動と、本質的には同じであった。運動方程式は (9.21) と求められているが、この方程式は波動方程式 (10.1) と同じである。こうして、弾性体の棒の振動は、波として伝わるのがわかる。このとき、変位の方向 (x 方向とした) と、波の伝わる方向は同じである。このような波を縦波と呼ぶ。波の伝わる速さ v は (10.1) と (9.21) を見比べて

$$v = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

であることがわかる。

§ 10.5 弦を伝わる波

両端を固定された弦を考える。すなわち、 x 軸に沿って張力 T で張られた線密度 ρ の弦を考えよう。この弦に x 軸に垂直な方向に変位 ζ を与えたところ、振動は伝わっていく。図のように各量をとろう。また、重力の影響は無視する。

x の位置での弦の変位を $\zeta(x)$ と書き、その位置での弦の張力を $T(x)$ とする。図の AB の部分の弦を考える。点 A での張力の鉛直 (変位の) 方向成分は

$$T(x) = -T \sin \theta(x)$$

であり、B 点での張力の鉛直 (変位の) 方向成分は

$$T(x + \Delta x) = T \sin \theta(x + \Delta x)$$

である。よって、AB 間の弦の部分に働く力の鉛直成分は

$$\begin{aligned} F &\equiv T(x) + T(x + \Delta x) = -T \sin \theta(x) + T \sin \theta(x + \Delta x) \\ &\approx -T \sin \theta(x) + T \left(\sin \theta(x) + \frac{\partial \sin \theta(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \right) \\ &= T \frac{\partial \sin \theta(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \end{aligned}$$

となる。ここで、角度 θ が小さいので、

$$\sin \theta(x) \approx \theta(x) \approx \tan \theta(x) \approx \frac{\Delta \zeta}{\Delta x} \approx \frac{\partial \zeta}{\partial x}$$

として良いので、働く力 F は、上式から

$$\begin{aligned} F &\approx T \frac{\partial \sin \theta(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \approx T \frac{\partial \tan \theta(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \approx T \frac{\partial (\partial \zeta / \partial x)}{\partial x} \cdot \Delta x \\ &= T \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \Delta x \end{aligned}$$

となる。

一方、変位の加速度 a は

$$a = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2}$$

より、AB 間の弦の運動方程式は

$$\rho \Delta x \frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \Delta x$$

となる。整理すると、

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} - \frac{T}{\rho} \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} = 0$$

となる。これは波動方程式であるので、弦の振動は波動として伝わるのがわかる。また、そのときの波の速さ v は

$$v = \sqrt{\frac{T}{\rho}}$$

であることも併せて示された。また、弦の振動の場合、変位の方向 (y 方向とした) と、波の伝わる方向 (x 方向であった) は直交している。このような波を横波と呼ぶ。

11 章 流体の運動方程式

§ 11.1 流体の運動方程式

水や空気等の流体を扱ってみよう。流体内の微小な部分を考えて、この部分の質量密度を $\rho(\mathbf{r})$ [kg/m³]、単位体積に働く力を \mathbf{f} [N/m³] とすると、ニュートン方程式は

$$\rho \mathbf{a} = \mathbf{f}$$

と書ける。ここで、 \mathbf{a} [m/s²] は流体内の注目している点での流体の加速度である。流体内の注目している点に働く力 \mathbf{f} を考えよう。まず、近傍の 2 点 x と $x + \Delta x$ を考え、そこでの圧力を $p(x)$ [Pa]、及び $p(x + \Delta x)$ とする。圧力は単位面積あたりの力であるので、圧力差に起因する力 F [N] は

$$F = (p(x) - p(x + \Delta x))S$$

となる。ここで、 S は x 軸に垂直な面積である。単位体積あたりの力が f であったので、 $F = f \times S \Delta x$ より、

$$f = \frac{p(x) - p(x + \Delta x)}{\Delta x} \rightarrow -\frac{\partial p(x)}{\partial x}$$

と書ける。力の各方向の成分は

$$\mathbf{f} = -\frac{\partial p(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}$$

となる。圧力 (単位面積あたりに働く力) の差に起因する力 (圧力の勾配) $-\nabla p$ となる。

ほかに、粘性による力 $\mathbf{f}_{\text{粘性}}$ 、外力によるもの $-\rho \nabla \phi$ がある。ここで、 ϕ [J/kg] は外力のポテンシャルエネルギーである。

$$\mathbf{f} = -\nabla p + \mathbf{f}_{\text{粘性}} - \rho \nabla \phi .$$

流体粒子の加速度を求めよう。近傍の 2 点 P_1 と P_2 を考え、点 P_2 は点 P_1 から、時間 Δt だけ後に流体粒子が到達した点とする。これら 2 点での速度の変化は

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(P_2) - \mathbf{v}(P_1) &= \mathbf{v}(x', y', z', t') - \mathbf{v}(x, y, z, t) \\ &= \mathbf{v}(x + v_x \Delta t, y + v_y \Delta t, z + v_z \Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{v}(x, y, z, t) \\ &\approx \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} v_x \Delta t + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} v_y \Delta t + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} v_z \Delta t + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Delta t \end{aligned}$$

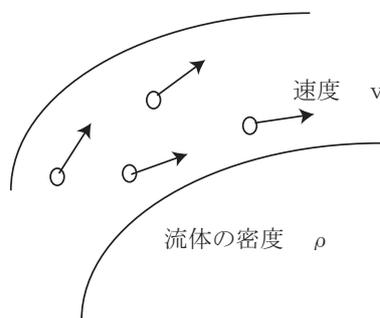


図 31:

となる。微小時間 Δt で割り、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとると、点 P_1 での速度の変化率、すなわち加速度が求まる。

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &\equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(P_2) - \mathbf{v}(P_1)}{\Delta t} \\ &= v_x \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \\ &= (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}. \end{aligned}$$

よって、流体を記述するための基礎になる運動方程式として、この節の最初に記したニュートン方程式より、加速度 \mathbf{a} 、力 \mathbf{f} を代入して、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\mathbf{f}_{\text{粘性}}}{\rho} - \nabla \phi$$

が得られる*。

§ 11.2 完全流体の場合

粘性による力が無視できる ($\mathbf{f}_{\text{粘性}} \approx 0$) 簡単な場合を考えてみよう。今導いた運動方程式 (前式を見よ) は

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p - \rho \nabla \phi$$

となる。ここで、左辺第2項は

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \frac{1}{2} \nabla (v^2) - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v})$$

と書き直せることに注意せよ。今、一様な流体 ($\rho = \text{一定}$)、かつ定常流 ($\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = 0$)、さらに渦無し ($\text{rot } \mathbf{v} \equiv \nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$) の場合を考える。このときには運動方程式は、さらに簡単に

$$\nabla \left(\frac{1}{2} v^2 + \frac{p}{\rho} + \phi \right) = 0$$

と書いてしまう。時間にあからさまに依存しない定常流であったことと、上式を空間変数で積分してしまうことにより、

$$\frac{1}{2} v^2 + \frac{p}{\rho} + \phi = (\text{時間} \cdot \text{空間に依存せず、一定})$$

が得られる。これはベルヌイの定理と呼ばれる。すなわち、外力のポテンシャル ϕ が等しいところでは、速さ v が小さいと圧力 p は大きく、逆もまた然り、ということがわかる。

* ずれ粘性率 η 及び体積粘性率 ζ が座標に依存しない定数である時、粘性による力 $\mathbf{f}_{\text{粘性}}$ は $\mathbf{f}_{\text{粘性}} = \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v})$ と計算される。ここで、 $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2}$ 、 $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial r}$ である。こうして、

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{v} = -\frac{\partial p}{\partial \mathbf{r}} + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \text{grad div } \mathbf{v} - \rho \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}}$$

が得られる。これは、粘性率が座標に依存しない場合のナビエ・ストークス方程式を構成している。

12章 剛体の回転

§12.1 回転の表現

§§12.1.1 回転の行列表示

この節では、回転を表す数学的方法について述べる。次節以降で直接必要なのはオイラーの定理とオイラー角であるが、回転を表す数学は後に素粒子論などで必要となる連続群の雛型であり、ここで記述する価値があると考えられる。*

空間回転で互いに移りあう2つの座標系を設定しよう。互いに原点を共有する直交単位ベクトルの組を $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ 、 $(\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3)$ としよう。このとき、ある $l = (l_{ij})$ が存在し、2つの座標を結び付けているものとする。

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_1 &= l_{11}\mathbf{e}_1 + l_{12}\mathbf{e}_2 + l_{13}\mathbf{e}_3, \\ \mathbf{e}'_2 &= l_{21}\mathbf{e}_1 + l_{22}\mathbf{e}_2 + l_{23}\mathbf{e}_3, \\ \mathbf{e}'_3 &= l_{31}\mathbf{e}_1 + l_{32}\mathbf{e}_2 + l_{33}\mathbf{e}_3 \end{aligned}$$

すなわち、

$$\mathbf{e}'_i = \sum_{j=1}^3 l_{ij}\mathbf{e}_j$$

と纏める。任意のベクトル \mathbf{x} は直交単位ベクトル $\{\mathbf{e}_i\}$ 、または $\{\mathbf{e}'_i\}$ を基底ベクトルとして

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 x_i\mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \xi_i\mathbf{e}'_i$$

と書けるが、 \mathbf{e}_i と \mathbf{e}'_i との変換から

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 x_i\mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \xi_i\mathbf{e}'_i = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \xi_i l_{ij}\mathbf{e}_j = \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 l_{ji}\xi_j \right) \mathbf{e}_i$$

と書ける。ここで、最後の等式では和の添え字を交換した。こうして、ベクトルの成分の変換として、

$$x_i = \sum_{j=1}^3 l_{ji}\xi_j$$

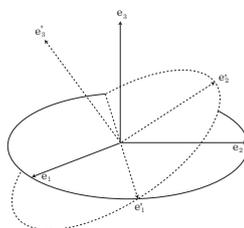


図 32:

*回転は空間座標を回すことであるが、相対論で出てくるローレンツ変換はミンコフスキー空間のある種の回転であり、本節の内容が活かされる。また、電磁気学などで現れるゲージ変換は、素粒子を記述するための“内部空間”の回転であり、やはり本節の内容が重要な雛型となる。

が得られる。これを行列表示して

$$\begin{aligned}\vec{x} &= R^t \vec{\xi}, \\ \vec{x} &\equiv \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad \vec{\xi} \equiv \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix}, \\ R &\equiv \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

と書ける。ただし、 R^t は行列 R の転置行列を意味する。ここで、行列 R を回転行列と呼ぼう。空間回転のもとで、ベクトルの長さは変わらないので

$$\sum_{i=1}^3 x_i^2 = \sum_{i=1}^3 \xi_i^2$$

が成り立つ。左辺を回転行列を用いて ξ_i で書き直すと

$$\sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 l_{ji} \xi_j \right) \left(\sum_{k=1}^3 l_{ki} \xi_k \right) = \sum_{i=1}^3 \xi_i^2$$

となるので、これより

$$\sum_{i=1}^3 l_{ki} l_{ji} = \delta_{jk} = \begin{cases} 1 & (j = k) \\ 0 & (j \neq k) \end{cases}$$

となっていなければならないことがわかる。ここで、 δ_{jk} はクロネッカーのデルタである。これを回転行列 $R = (l_{ij})$ で書くと

$$RR^t = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と書ける。この関係を満たす行列 R は数学的には直交行列と呼ばれている。また、直交行列によるベクトルの変換は直交変換と呼ばれる。空間回転は直交変換の一種である。上の関係を用いると、 \vec{x} から $\vec{\xi}$ への逆変換は

$$\vec{x} = R^t \vec{\xi}, \quad \rightarrow \vec{\xi} = R \vec{x}$$

となる。

直交変換としての3次元空間回転の性質をもう少し見ておこう。まず、 $R^t R = R R^t = 1$ から、6個の条件式が出てくる。行列 R は9個の成分を持つので、 $(9 - 6 =) 3$ 個の独立な成分が残る。これが、各軸の周りを回転させる3つの独立な回転角に対応する。また、 $R^t R = 1$ から、両辺の行列式をとると、 $\det R = \det R^t$ より $(\det R)^2 = 1$ となり、“回転しない”恒等変換 $R = 1$ の場合と連続的に繋がるためには $\det R = 1$ をとらなければならないことがわかる。数学的には $\det R = 1$ の直交変換は群をなすことが知られている。すなわち、

$$\begin{aligned}\text{積:} & \quad R_1 \cdot R_2 = R_3 \\ \text{単位元:} & \quad R_e = 1 \\ \text{逆元:} & \quad R^{-1} = R^t \\ \text{結合律:} & \quad (R_1 \cdot R_2) \cdot R_3 = R_1 \cdot (R_2 \cdot R_3)\end{aligned}$$

が成り立つ。3次元回転がなす群は3次元特殊直交群と呼ばれ、 $SO(3)$ と記す。

最後に1軸、2軸、3軸周りの θ_1 、 θ_2 、 θ_3 回転行列を記しておこう。

$$\begin{aligned} \vec{y} &= R_1(\theta_1)\vec{x}, & \vec{z} &= R_2(\theta_2)\vec{y}, & \vec{\xi} &= R_3(\theta_3)\vec{z}, \\ \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ 0 & -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \theta_2 & 0 & -\sin \theta_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta_2 & 0 & \cos \theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \theta_3 & \sin \theta_3 & 0 \\ -\sin \theta_3 & \cos \theta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} \\ \vec{\xi} &= R(\theta_1, \theta_2, \theta_3)\vec{x} = R_3(\theta_3)R_2(\theta_2)R_1(\theta_1)\vec{x} \end{aligned} \quad (12.1)$$

§§12.1.2 リー群とリー代数

本小節では、リー群とリー代数の最小限の数学的記述を与えておこう。

(i) 群

群 G とは、 G の要素 $\{x\}$ に“掛け算 \cdot ”が定義されていて、次の関係を満たすものである。

- (1) $x, y \in G, \rightarrow x \cdot y \in G$
- (2) $\exists 1 \in G, \rightarrow 1 \cdot x = x \cdot 1 = x \text{ for } \forall x \in G$
- (3) $\exists x^{-1} \in G, \rightarrow x^{-1} \cdot x = x \cdot x^{-1} = 1$
- (4) $x \cdot (y \cdot z) = (x \cdot y) \cdot z$

たとえば、整数 \mathbf{Z} は、“掛け算 \cdot ”を、足し算 $+$ とし、“単位元1”を0、逆元 x^{-1} を $-x$ とすれば上の(1)から(4)までを満たすので、足し算に関して群をなすことがわかる。

(ii) 群の表現

群の要素 g を、ある線形写像 ρ を用いて、具体的に表わす。これを $\rho(g)$ と書く。群の要素を表現した $\rho(g)$ はある線形空間 V に作用する。線形空間(ベクトル空間) V に属するベクトルを $|\psi\rangle$ と書こう。先の空間回転の例では、空間回転は群をなしており、群の要素を回転行列で表現した($\rho(g) = R$)。回転行列が作用する線形空間は3次元空間であり、ベクトルは \vec{x} などとした($|\psi\rangle = \vec{x}$)。群は掛け算が定義されていたので、群を表現した $\rho(g)$ においても同様に $\rho(g_1)\rho(g_2) = \rho(g_1g_2)$ となっていなければならない。このセット (ρ, V) を群 G の表現という。ここで、 V を表現空間と呼ぶ。

さて、線形空間 V の適当な正規直交基底 $\{|i\rangle\} (i = 1, 2, \dots, N)$ をとる。また、 V に双対な双対空間を考え、その正規直交基底を $\{\langle i|\} (i = 1, 2, \dots, N)$ と書く。空間回転では、 $|i\rangle = e_i (i = 1, 2, 3)$ 、 $\langle i| = e_i^\dagger$ である。ここで、 \dagger は転置をとって各要素の複素共役をとる操作(エルミート共役)を意味する。任意のベクトル $|\psi\rangle$ はこの基底で展開できるので、展開係数を c_j と書いて

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |j\rangle$$

となる。基底 $|i\rangle$ は正規直交基底にとったので、 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ であるので、

$$c_j = \langle j|\psi\rangle$$

となる。この展開係数を再び用いると

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |j\rangle = \sum_{j=1}^N \langle j|\psi\rangle |j\rangle = \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j|\psi\rangle$$

となる。こうして、重要な完全性の表式を得る。

$$\sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j| = 1$$

群の表現 $\rho(g)$ の行列表示を与えよう。線形空間 V とその双対空間の基底を用いて

$$[\rho(g)]_{ij} = \langle i|\rho(g)|j\rangle$$

とできる。線形空間への作用は、基底の完全性の条件を挿入し、

$$\rho(g)|i\rangle = \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j|\rho(g)|i\rangle = |j\rangle [\rho(g)]_{ji}$$

と表わすことができる。

(iii) リー群とリー代数

(a) リー群

群 G の内、群 G の要素 g があるパラメータの連続関数となるものを考える。すなわち

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n), \quad \alpha_a \quad (a = 1, 2, \dots, n) \in \mathbf{R} \text{ (実数)}$$

さらに“掛け算”は滑らかであるとする。

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \cdot g(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n) = g(\gamma_1(\alpha, \beta), \gamma_2(\alpha, \beta), \dots, \gamma_n(\alpha, \beta)),$$

$\gamma_a(\alpha, \beta)$ は、 α, β の実解析関数

このとき、群 G はリー群と呼ばれる。また、 n を群 G の次元と呼ぶ。2次元回転群は、引き続き2回の回転 θ, φ に対して $g(\theta)g(\varphi) = g(\theta + \varphi)$ となるので、リー群である。

(b) リー代数

リー群 G の要素 g を、単位元“1”の近傍で考える。ここで、単位元は $g(0, 0, \dots, 0) = 1$ (何も変換しない) である。このとき、

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = 1 + i \sum_{k=1}^n \alpha_k X_k + O(\alpha^2),$$

$$iX_k \equiv \left. \frac{\partial g}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha=0}$$

とできる。パラメータ α_i が有限の大きさを持つとすれば、 $g = \exp\left(i \sum_{k=1}^n \alpha_k X_k\right)$ となるが、 $e^{iX} \in G$ となる元 $\{X\}$ の全体を、リー群 G に対応するリー代数 \mathcal{G} と呼ぶ。また、上で導入された $\{X_k\}$ をリー代数の生成子と呼ぶ。

さて、 X, Y がリー代数 \mathcal{G} の要素であるときには、 $X+Y$ も $XY-YX$ も同じリー代数 \mathcal{G} の要素となる。証明は以下の様に簡単である。まず、 $1+i\epsilon X \in G, 1+i\epsilon Y \in G$ であるので、両者の積もリー群 G の要素である。すな

わち、 $(1+i\epsilon X)(q+i\epsilon Y) \in G$ 。左辺を計算して ϵ の1次までとると、 $(1+i\epsilon X)(q+i\epsilon Y) \approx 1+i\epsilon(X+Y) \in G$ となるので、 $X+Y$ はリー代数 \mathcal{G} の要素である。次に、 $e^{i\epsilon X} e^{i\epsilon Y} e^{-i\epsilon X} e^{-i\epsilon Y}$ を考えよう。各 e^{\dots} はリー群 G の要素であるので、これらの4つの積もリー群 G の要素である。こうして ϵ で展開し、 X や Y は行列のように互いに交換しないことに注意して、1を除く ϵ の最低次まで計算すると $e^{i\epsilon X} e^{i\epsilon Y} e^{-i\epsilon X} e^{-i\epsilon Y} = 1 - \epsilon^2(XY - YX) + O(\epsilon^3)$ となる。こうして、 $XY - YX$ はリー代数 \mathcal{G} の要素であることが示される。

(c) 構造定数

リー代数 \mathcal{G} は生成子 $\{X_a\}$ 、 $(a = 1, 2, \dots, n)$ により決定される。(b) で示したように、リー代数の要素 X_a と X_b の交換子 $[X_a, X_b] \equiv X_a X_b - X_b X_a$ もまたリー代数の要素であるので、 $\{X_a\}$ の組み合わせで表わされるはずである。そこで、生成子の線形結合として、

$$[X_a, X_b] \equiv X_a X_b - X_b X_a = i \sum_{c=1}^n f_{abc} X_c$$

と書けるだろう。ここで現れる定数 f_{abc} を構造定数と呼び、構造定数が与えられればリー代数は決定されることになる。

さて、上の交換子の式から構造定数は最初の2つの添え字に対して反対称であることは自明である。

$$f_{abc} = -f_{bac}$$

次に、3番目の添え字 c に関する対称性を決定したい。そのために、生成子を直交化しておく。

$$\text{tr}(X_a X_b) = c_a \delta_{ab}, \quad c_a = 1 \text{ または } -1 \text{ または } 0$$

ここで、 δ_{ab} はクロネッカーのデルタである。今後、 $c_a = 1$ となる代数を考えることにする[†]。このとき

$$\text{tr}(X_c [X_a, X_b]) = \text{tr}(X_c \sum_{d=1}^n i f_{abd} X_d) = i \sum_{d=1}^n f_{abd} \text{tr}(X_c X_d) = i f_{abc} = -i f_{bac}$$

となるが、左辺はまた

$$\text{tr}(X_c [X_a, X_b]) = \text{tr}(X_c X_a X_b - X_c X_b X_a) = \text{tr}([X_b, X_c] X_a) = i f_{bca}$$

となり、結局

$$f_{bac} = -f_{bca}$$

となる。つまり、後ろの2つの添え字 (a と c) の入れ替えに関しても反対称であることが言える。こうして、構造定数 f_{abc} は添え字の入れ替えに対して完全反対称であることが示される。

(d) 随伴表現

交換子に関しては、恒等的に次のヤコビ恒等式が成り立つ[‡]。

$$[X_a, [X_b, X_c]] + [X_b, [X_c, X_a]] + [X_c, [X_a, X_b]] = 0$$

実際、交換子を引き算の形で書いて行けば容易に示される。ここで、 X_a がリー代数 \mathcal{G} の生成子であるとき、 $[X_b, X_c] = i \sum_d f_{bcd} X_d$ を用いると、ヤコビ恒等式は

$$- \sum_d \sum_e (f_{bcd} f_{ade} + f_{cad} f_{bde} + f_{abd} f_{cde}) X_e = 0$$

[†]リー代数 \mathcal{G} のもとになる群 G がコンパクト (compact)、すなわちパラメータの変域が有限、かつ半単純 (semi-simple)、すなわち、アーベリアン不変部分群を持たない場合。

[‡]ポアソン括弧 (§4.2) との類似性に注意せよ。

となる。ここで、生成子 X_e は独立であるので、

$$\sum_d (f_{bcd}f_{ade} + f_{cad}f_{bde} + f_{abd}f_{cde}) = 0$$

が得られる。今、 $(T_a)_{bc} \equiv -if_{abc}$ として行列 T_a を定義する。行列 T_a の (bc) 成分が、リー代数の構造定数 f_{abc} を用いて、 $-if_{abc}$ であるということである。このとき、ヤコビ恒等式から導かれた構造定数の積に関する式は

$$(T_b T_a)_{ce} - (T_a T_b)_{ce} + \sum_d if_{abd}(T_d)_{ce} = 0$$

と変形できる。よって、行列の関係として

$$[T_a, T_b] = i \sum_d f_{abd} T_d$$

と書ける。これはもとのリー代数の生成子が満たす関係と同じである。すなわち、行列 T_a はリー代数の生成子 X_a の表現行列になっていることがわかる。次に、この表現行列に対応する表現空間を調べよう。一般に表現空間のベクトル $\{|i\rangle\}$ に働く作用 \mathcal{O} に対して

$$\rho(g)(\mathcal{O}|i\rangle) = \rho(g)\mathcal{O}\rho(g)^{-1}\rho(g)|i\rangle \equiv \mathcal{O}'|i\rangle'$$

と書ける。表現空間の基底を $\{\rho(g)|i\rangle\}$ と変換したと考えると、作用素 \mathcal{O} は

$$\mathcal{O} \longrightarrow \mathcal{O}' = \rho(g)\mathcal{O}\rho(g)^{-1} = \rho(g)\mathcal{O}\rho(g^{-1})$$

と変換される。無限小変換 $g = 1 + i \sum_a \alpha_a X_a$ を考えると、 $g^{-1} = 1 - i \sum_a \alpha_a X_a$ であり、よって、

$$\rho(g)\mathcal{O}\rho(g^{-1}) \approx \mathcal{O} + i \sum_a \alpha_a [\rho(X_a), \mathcal{O}] + \dots$$

となる。今、 \mathcal{O} として、 $X \in \mathcal{G}$ 全体を考えよう。ここで、 $\text{Ad}(g)$ として

$$\text{Ad}(g)X \equiv gXg^{-1}$$

のように、 X に対する作用を定義すると、

$$\begin{aligned} \text{Ad}(g_1)\text{Ad}(g_2)X &= \text{Ad}(g_1)g_2Xg_2^{-1} = g_1(g_2Xg_2^{-1})g_1^{-1} = (g_1g_2)X(g_1g_2)^{-1} \\ &= \text{Ad}(g_1g_2)X \end{aligned}$$

となるので、

$$\text{Ad}(g_1)\text{Ad}(g_2) = \text{Ad}(g_1g_2)$$

が得られ、 $\text{Ad}(g)$ は表現になっている。リー群の要素は指数関数の形に書けていたので、簡便に $g = e^Y$ と記しておこう。こうすると、 $\text{Ad}(g) = e^{\text{Ad}(Y)}$ となり、

$$\text{Ad}(g)X = gXg^{-1} = e^Y X e^{-Y} = X + [Y, X] + \dots$$

となるが、左辺を直接展開すると

$$\text{Ad}(g)X = e^{\text{Ad}(Y)}X = (1 + \text{Ad}(Y) + \dots)X$$

となる。両者を比較すると、

$$\text{Ad}(Y)X = [Y, X]$$

と得られる。こうして、 X 、 Y ともにリー代数 \mathcal{G} の基底 $\{X_a\}$ をとると、

$$\text{Ad}(X_a)X_b = [X_a, X_b] = i \sum_c f_{abc} X_c = \sum_c (-i f_{acb}) X_c = \sum_c (T_a)_{cb} X_c$$

となる。これを、リー代数の表現行列と表現空間の基底の満たす関係式 $\rho(X_a)|i\rangle = \sum_j \rho(X_a)_{ji}|j\rangle$ と見比べると、

$$(T_a)_{cb} (= -i f_{acb}) \text{ は } \text{Ad}(X_a) \text{ の表現行列 } (\rho(X_a)) \\ \{X_a\} \text{ は 表現空間の基底 } (|j\rangle)$$

となっていることがわかる。リー代数のこの表現を随伴表現と呼ぶ。

§§12.1.3 無限小回転と回転の生成子

3次元回転 R は群をなしていた。これはリー群である。この群を \mathbf{R} と書くことにしよう。 \mathbf{R} はベクトル空間上の線形作用素となる。このとき、

$$\mathbf{R}e_i = e'_i = \sum_j l_{ij} e_j$$

本章の最初の節 (§§10.1.1) で記されているように、 $R^t = (l^t_{ij})$ は回転群 \mathbf{R} の表現行列になっており、この表現での表現空間の基底は $\{e_i\}$ となっている。

これからは無限小回転を考えていこう。回転角は $\Delta\theta_i \ll 1$ 、すなわち、 $\cos \Delta\theta_1 \approx 1$ かつ $\sin \Delta\theta_i \approx \Delta\theta_i$ である。このとき、(12.1) より

$$R(\Delta\theta) = R_3(\Delta\theta_3)R_2(\Delta\theta_2)R_1(\Delta\theta_1) \equiv 1 + i \sum_{j=1}^3 \Delta\theta_j J_j$$

となる。但し、(12.1) と、無限小回転であることから読み取れるように

$$J_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

と定義される。リー代数の議論から、 J_i は3次元回転の生成子となる。今は無限小変換を考えているが、 $R_i(\Delta\theta) \approx 1 + i\Delta\theta_i J_i \approx e^{i\Delta\theta_i J_i}$ となり、無限小変換を繰り返していくと、 $R_i(\theta_i) = e^{i\theta_i J_i}$ と書ける[§]。

[§]有限の角 θ_i に対し、 $\Delta\theta_i \equiv \frac{\theta_i}{n}$ として微小な $\Delta\theta_i$ を導入する。このとき、

$$R_i(\theta_i) = R_i(\Delta\theta_i)R_i(\Delta\theta_i)\cdots R_i(\Delta\theta_i) = \prod_n (1 + i\Delta\theta_i J_i) = \lim_{\Delta\theta_i \rightarrow 0} (1 + i\Delta\theta_i J_i)^n \\ = \lim_{\Delta\theta_i/\theta_i \rightarrow 0} \left(1 + i \frac{\Delta\theta_i}{\theta_i} \theta_i J_i\right)^{\frac{\theta_i}{\Delta\theta_i}} = e^{i\theta_i J_i}$$

となる。ここで、 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left(1 + \frac{a}{x}\right)^x = e^a$ を用いた。

さて、3次元回転の生成子 J_i は以下の関係を持つ。

$$J_i^\dagger = J_i, \quad \text{tr} J_i = 0, \quad \text{tr}(J_i J_j) = 2\delta_{ij}$$

さらに、交換子を計算すると

$$[J_i, J_j] \equiv J_i J_j - J_j J_i = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} J_k,$$

$$\epsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} 1 & (i, j, k) = (1, 2, 3) \text{ 及びその偶置換} \\ -1 & (i, j, k) = (1, 2, 3) \text{ からの奇置換} \\ 0 & \text{上記以外} \end{cases}$$

が容易に得られる。ここで、 ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルであり、これが3次元回転の構造定数となる。すなわち、3次元回転群に対応するリー代数は $so(3)$ であり、 J_i はその一つの表現行列になっている。

無限小回転を具体的に書き下すと

$$R(\Delta\theta) = 1 + i \sum_{j=1}^3 \Delta\theta_j J_j = 1 + \begin{pmatrix} 0 & \Delta\theta_3 & -\Delta\theta_2 \\ -\Delta\theta_3 & 0 & \Delta\theta_1 \\ \Delta\theta_2 & -\Delta\theta_1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。ここで1は 3×3 の単位行列である。こうして、ベクトル \vec{x} の成分 x_i は回転により $x_i + dx_i$ と微小変換されるとすると、

$$(R(d\theta)\vec{x})_i = x_i + \begin{pmatrix} 0 & d\theta_3 & -d\theta_2 \\ -d\theta_3 & 0 & d\theta_1 \\ d\theta_2 & -d\theta_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_i \equiv x_i + dx_i$$

であり、こうして、

$$dx_1 = x_2 d\theta_3 - x_3 d\theta_2, \quad dx_2 = x_3 d\theta_1 - x_1 d\theta_3, \quad dx_3 = x_1 d\theta_2 - x_2 d\theta_1$$

が得られる。今、

$$d\varphi \equiv \begin{pmatrix} d\theta_1 \\ d\theta_2 \\ d\theta_3 \end{pmatrix}$$

と定義すると、 dx_i はベクトル表示で

$$d\mathbf{x} = \mathbf{x} \times d\varphi$$

と表わされる。

§§12.1.4 回転の2価表現

次の3つの 2×2 行列を導入する。

$$S_1 \equiv \frac{\sigma_1}{2} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 \equiv \frac{\sigma_2}{2} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_3 \equiv \frac{\sigma_3}{2} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ここで、 σ_i をパウリ行列と呼ぶ。パウリ行列は行列群 $SU(2)$ に対応するリー代数 $su(2)$ を構成する。行列要素は複素数なので、 $2 \times 2 \times 2 = 8$ 成分持つが、行列 U がユニタリーであることから $U^\dagger U = 1$ より 4 つの条件式が存在する。また、“特殊”ユニタリー行列であるので、行列式が 1、すなわち $\det U = 1$ より 1 つ条件が加わり、独立な成分は $8 - 4 - 1 = 3$ である。すなわち、3 つの独立なパラメータを持つ。パウリ行列から作られた 3 つの行列 S_i の交換子を計算すると

$$[S_i, S_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} S_k$$

となることが示される。こうして、リー代数 $su(2)$ は 3 次元回転のリー代数 $so(3)$ に準同型である。

今、ベクトルの成分を (x_1, x_2, x_3) として、

$$P \equiv 2 \sum_{i=1}^3 x_i S_i = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix}$$

を導入する。このとき、行列 P の行列式は、

$$\det P = -(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$$

となり、ベクトルの長さの 2 乗に負号を付けたものが得られる。したがって、行列 P の行列式を不変にする変換はベクトルの長さを変えない等長変換を与え、3 次元回転を表わすことが可能であることが期待される。そこで、ある $su(2)$ の元 Q を用いて

$$P' = QPQ^\dagger$$

という変換を考えよう。行列 Q は $su(2)$ に属するので、 $Q^\dagger = Q^{-1}$ であり、

$$\det P' = \det(QPQ^\dagger) = \det P$$

となり、等長変換を与える。次の 3 つの場合を考えよう。

$$Q_1 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad Q_2 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad Q_3 = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}$$

まず、 Q_1 を用いて

$$\begin{aligned} P' &= \begin{pmatrix} x'_3 & x'_1 - ix'_2 \\ x'_1 + ix'_2 & -x'_3 \end{pmatrix} \\ &= Q_1 P Q_1^\dagger = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_3 \cos \theta - x_2 \sin \theta & x_1 - i(x_2 \cos \theta + x_3 \sin \theta) \\ x_1 + i(x_2 \cos \theta + x_3 \sin \theta) & -x_3 \cos \theta + x_2 \sin \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

が得られる。実部、虚部に注意して両辺を比較することで、

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1, \\ x'_2 &= x_2 \cos \theta + x_3 \sin \theta, \\ x'_3 &= -x_2 \sin \theta + x_3 \cos \theta \end{aligned}$$

となることがわかる。こうして、 Q_1 による等長変換は、1 軸周りの角度 θ 回転を表わすことが理解される。

同様に、 Q_2 を用いて

$$\begin{aligned} P' &= \begin{pmatrix} x'_3 & x'_1 - ix'_2 \\ x'_1 + ix'_2 & -x'_3 \end{pmatrix} \\ &= Q_2 P Q_2^\dagger = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_3 \cos \theta + x_1 \sin \theta & (x_1 \cos \theta - x_3 \sin \theta) - ix_2 \\ (x_1 \cos \theta - x_3 \sin \theta) + ix_2 & -x_3 \cos \theta - x_1 \sin \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

が得られるので、実部、虚部に注意して両辺を比較することで、

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \theta - x_3 \sin \theta, \\ x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= x_1 \sin \theta + x_3 \cos \theta \end{aligned}$$

となることがわかる。こうして、 Q_2 による等長変換は、2 軸周りの角度 θ 回転を表わす。

さらに、 Q_3 を用いると、

$$\begin{aligned} P' &= \begin{pmatrix} x'_3 & x'_1 - ix'_2 \\ x'_1 + ix'_2 & -x'_3 \end{pmatrix} \\ &= Q_3 P Q_3^\dagger = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_3 & (x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) - i(-x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta) \\ (x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) + i(-x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta) & -x_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いた。実部、虚部に注意して両辺を比較することで、

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta, \\ x'_2 &= -x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta, \\ x'_3 &= x_3 \end{aligned}$$

となることがわかる。こうして、 Q_3 による等長変換は、3 軸周りの角度 θ 回転を表わすことが理解される。

以上より、3 次元回転は $su(2)$ 代数で表わされることがわかった。このとき、 $g(\theta_i) = e^{i\theta_i \frac{\sigma_i}{2}}$ として、

$$\begin{aligned} P &= \sum_{i=1}^3 x_i \sigma_i, \\ P' &= g P g^{-1} = \text{Ad}(g) P \end{aligned}$$

と書ける[¶]。したがって、パウリ行列 σ_i が表現空間の基底になっており、基底 σ_i で張られた表現空間のベクトル P は $\text{Ad}(g)P$ の変換を受けている。すなわち、回転を随伴表現で表わしたことになる。この表現を特に、 $so(3)$ のスピノール表現と呼ぶ。

[¶] $e^{i\alpha} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!}$, $\cos \alpha = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\alpha^{2n}}{(2n)!}$, $\sin \alpha = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!}$ $\sigma_i^2 = 1$

スピノール表現は3次元回転群の2価表現となっている。すなわち、3次元回転群の要素 $T_i(\theta_i)$ は

$$T_i(\theta_i) = e^{i\theta_i \frac{\sigma_i}{2}} = \cos \frac{\theta_i}{2} + i \sin \frac{\theta_i}{2} \cdot \sigma_i$$

と書けるが、ここで、

$$T_i(\theta = 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_i(\theta = 2\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T_i(\theta = 4\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

となるので、変域を $0 \leq \theta \leq 2\pi$ から $0 \leq \theta \leq 4\pi$ として初めて元に戻る事がわかる。

§§12.1.5 オイラーの定理とオイラー角

(i) オイラーの定理

原点を共有する2つの座標系は、1回の回転で移り変わる。この命題を示そう。1回の回転で移ると言うことは、回転軸が存在するという事である。回転軸上のベクトルはこの変換で不変に保たれる。回転行列を R 、任意のベクトル \mathbf{x} とすると、数学的には

$$R\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

で、固有値 λ が1である場合が存在するというのが、回転軸が存在することと等価である。これをオイラーの定理と呼ぶ。この定理を証明しよう。

回転行列は実行列であったので、 $R^* = R$ が成り立つ。よって、 \mathbf{x}^* は固有値 λ^* に対する固有ベクトルである。

$$R\mathbf{x}^* = \lambda^*\mathbf{x}^*$$

また、回転行列 R は直交行列であったので、 $R^t R = R R^t = 1$ である。ここで、 R^t は R の転置行列である。したがって、

$$R\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad \mathbf{x}^\dagger R^t = \lambda^*\mathbf{x}^\dagger$$

となる。ここで、 \dagger は転置して複素共役をとる操作を意味する。両辺かけ算すると

$$\mathbf{x}^\dagger R^t R \mathbf{x} = \lambda^* \lambda \mathbf{x}^\dagger \mathbf{x}$$

となるが、左辺の $R^t R$ は1であるので、両辺を零でないベクトルのノルム $\mathbf{x}^\dagger \mathbf{x}$ で割り算しておく

$$|\lambda|^2 = 1$$

が得られる。次に、直交行列はユニタリ行列 X を用いて対角化できるという数学の定理を用いる。ここではこの定理を証明するかわりに、実際に X を構成しておこう。行列 R の固有値 λ_k ($k = 1, 2, 3$) に対する固有ベクトル \mathbf{x} の j 成分を $x_j^{(k)}$ と書くと

$$\sum_{j=1}^3 R_{ij} x_j^{(k)} = \lambda_k x_i^{(k)}$$

と成分表示できるが、 $x_j^{(k)} = X_{jk}$ と、行列 X の jk 成分として新しい行列 X を定義すると、上の固有値方程式は行列の形で、

$$(RX)_{ik} = \lambda_k X_{ik} = \sum_{j=1}^3 X_{ij} \delta_{jk} \lambda_k = (X\Lambda)_{ik},$$

但し
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

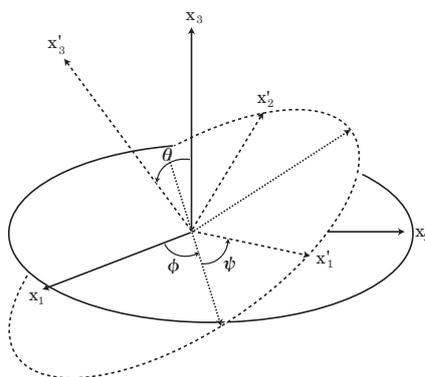


図 33:

と書ける。ここで、 δ_{jk} はクロネッカーのデルタである。こうして、

$$X^{-1}RX = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

のように対角化されることが言える。両辺、行列式をとると、

$$\det R = \det(X^{-1}RX) = \det \Lambda = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$$

となるが、直交行列 R の行列式は 1 であるので、

$$\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$$

が得られる。これと、先ほど導いた $|\lambda_i| = 1$ をあわせると、 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ の少なくとも一つは実数で 1 であることがわかる。これでオイラーの定理は証明された。

(ii) オイラー角

3次元空間に静止座標系を設定する。3次元空間での回転は、静止座標系から2つの角を用いて回転軸の方向を決め、1つの角でその回転軸の周りの回転角を与えることで完全に決定される。そのために、オイラー角を導入しておこう。まず空間に x_1, x_2, x_3 の3軸を設定しておく。ここから回転軸 x'_3 軸を決めるのに2つの角度を用いる。図33を参照しながら考えていこう。まず、 x_3 軸の周りに φ 回転する。この回転により x_1 - x_2 平面は角 φ 回転している。続いて回転した x_1 軸の周りに θ 回転する。これにより x_3 軸は望む方向に移動し、回転軸 x'_3 を与える。最後に、 x'_3 軸の周りに ψ 回転する。これで、任意の回転を与えることができる。

この操作から、回転行列 R は

$$\begin{aligned} R &= \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi & \cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi & \sin \psi \sin \theta \\ -\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi & -\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi & \cos \psi \sin \theta \\ \sin \theta \sin \varphi & -\sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と表現される。

§ 12.2 剛体の角速度・慣性テンソル・角運動量

§§12.2.1 剛体

質点相互間の距離が不変であるような質点の集まりを剛体という。全く変形しない理想化された物体である。質点の集まりと考えると、位置 \mathbf{r}_i にある質点の質量を m_i とすると、剛体の質量 M はすべての質点の寄与の和を取ることで $M = \sum_i m_i$ と書ける。連続的に質量が分布していると考えられるときには、各質点の質量を、質量密度 ρ とその近傍の微小体積 $dV = dx dy dz$ の積で表し、各質点についての和は剛体全体にわたる積分に置き換えれば良い。

$$\sum_i m_i \rightarrow \int dV \rho$$

今後、いつでもこの手続きをとって、連続体に移行する。

剛体の慣性中心（重心）を原点にとり、剛体に結びつけた座標系を $(x = x_1, y = x_2, z = x_3)$ と表すことにする。これを剛体固定系と呼ぶことにしよう。また、原点は剛体固定系の原点と一致し、静止した慣性系の座標を (X, Y, Z) で表わすことにしよう。剛体の座標を指定するには、剛体の慣性中心の位置と、剛体の向きが必要である。3次元空間ではそれぞれ3つの変数を必要とするので、剛体の自由度は特別な対称性が無い限り、一般に6となる。

§§12.2.2 角速度

剛体が回転する場合を考えていこう。剛体が、ある回転軸のまわりに、小さな角度 $d\varphi$ だけ回転したとする。この回転に伴って剛体内の各点は、 $d\mathbf{r}$ だけ動いたとする。このとき、動いた距離 $dr = |d\mathbf{r}|$ は、図 34 からわかるように

$$dr = r \sin \theta d\varphi$$

となっている。ここに角度 θ は、回転軸と、剛体内の考えている点の位置ベクトルがなす角である。今、回転軸の方向を示すために、回転軸方向を向いていて、大きさが回転角 $d\varphi$ に等しいベクトル $d\boldsymbol{\varphi}$ を導入すると、前式は向きまで含めて

$$d\mathbf{r} = d\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r} \quad (12.2)$$

のように、ベクトル積（外積）を用いて書けることがわかる。

さて、回転が微小時間 dt の間に起こったとすると、剛体内の点の速度は、上式の両辺を dt で割り算して、 $dt \rightarrow 0$ の極限を取ることで

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r},$$

$$\text{但し } \boldsymbol{\Omega} = \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{dt}$$

と表される。ここで $\boldsymbol{\Omega}$ を角速度と呼ぶ。式から明らかのように、角速度の大きさは、回転の角度が時間的に変化する割合である。また、角速度の方向は回転軸方向にある。

前節で導入したオイラー角を用いて角速度を表しておこう。角度の時間変化を $\frac{d\theta}{dt} \equiv \dot{\theta}$ と表す。剛体固定軸 x_1, x_2, x_3 に、オイラー角の時間変化を射影すると、オイラー角 θ の時間変化 $\dot{\theta}$ の x_1 軸成分を $\dot{\theta}_1$ 等と記すと、

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_1 &= \dot{\theta} \cos \psi, & \dot{\theta}_2 &= -\dot{\theta} \sin \psi, & \dot{\theta}_3 &= 0, \\ \dot{\varphi}_1 &= \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi, & \dot{\varphi}_2 &= \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi, & \dot{\varphi}_3 &= \dot{\varphi} \cos \theta, \\ \dot{\psi}_1 &= \dot{\psi}_2 = 0, & \dot{\psi}_3 &= \dot{\psi} \end{aligned}$$

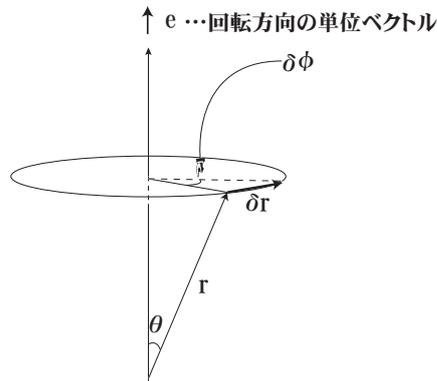


図 34:

となる (図 35)。各成分を集めることで、角速度 Ω をオイラー角とその時間微分で表わすことができる。

$$\Omega_1 = \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi, \quad \Omega_2 = \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi, \quad \Omega_3 = \dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi}$$

§§12.2.3 剛体の角運動量と慣性モーメント

今、剛体の慣性中心を原点に取っているので、慣性中心の周りの剛体の角運動量は、剛体内のすべての質点の角運動量をベクトル的に足したものである。各質点を添え字 a で区別していると見なすと、全角運動量は

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \sum_{a=\text{質点}} (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) = \sum_{a=\text{質点}} m_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a) \\ &= \sum_a m_a (\mathbf{r}_a \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}_a)) \\ &= \sum_a m_a [r_a^2 \boldsymbol{\Omega} - \mathbf{r}_a (\mathbf{r}_a \cdot \boldsymbol{\Omega})] \end{aligned}$$

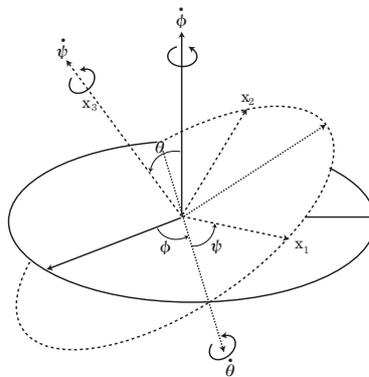


図 35:

となる。ここで、 m_a は剛体内にある各質点の質量を表している。角速度 Ω は剛体内のすべての質点に対して共通であることに注意せよ^{||}。またここで、ベクトルの3重積 $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ の関係を利用した。今導いた全角運動量の式を、ベクトルの成分で表しておこう。ベクトルの成分を区別するために添え字 i をつける。ここで、 $i = 1, 2, 3$ がそれぞれ、 x, y, z 成分に相当する。こうして、角運動量の i 成分 L_i は

$$\begin{aligned} L_i &= \sum_{a=\text{質点}} m_a \left(\sum_{l=1}^3 (r_a)_l (r_a)_l \Omega_i - (r_a)_i \sum_{j=1}^3 (r_a)_j \Omega_j \right) \\ &= \sum_{j=1}^3 \Omega_j \sum_{a=\text{質点}} m_a \left[\sum_{l=1}^3 (r_a)_l (r_a)_l \delta_{ij} - (r_a)_i (r_a)_j \right]. \end{aligned}$$

ここで、 δ_{ij} は、クロネッカーのデルタであり、

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (\text{for } i = j) \\ 0 & (\text{for } i \neq j) \end{cases}$$

であった。全角運動量の表式は、角速度とそれ以外にわけて

$$L_i = \sum_{j=1}^3 I_{ij} \Omega_j, \quad (12.3)$$

$$I_{ij} \equiv \sum_{a=\text{質点}} m_a \left[\sum_{l=1}^3 (r_a)_l (r_a)_l \delta_{ij} - (r_a)_i (r_a)_j \right] \quad (12.4)$$

と表すことができる。ここで定義した I_{ij} を慣性モーメントテンソルと呼んでいる。初めに述べたように、剛体が連続的な物体だと考えると、質点についての和 \sum_a は積分 \int に、質点の質量 m_a は剛体の質量密度 ρ と微小体積 $dV \equiv dx dy dz$ の積 ρdV に置き換えられるので、慣性モーメントテンソル I_{ij} は

$$\begin{aligned} I_{ij} &= \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) [r^2 \delta_{ij} - r_i r_j] \\ &= \begin{pmatrix} \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) (y^2 + z^2) & - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) xy & - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) xz \\ - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) yx & \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) (x^2 + z^2) & - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) yz \\ - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) zx & - \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) zy & \int dx dy dz \rho(\mathbf{r}) (x^2 + y^2) \end{pmatrix}_{ij} \end{aligned}$$

となる。

慣性モーメントテンソル I_{ij} は対称行列なので、うまく座標系をとれば、対角成分のみ値を持って、非対角成分はすべて0にすることができる^{**}。このような座標系を慣性主軸系と呼び、この座標系のもとでは

$$I = \begin{pmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3 \end{pmatrix}$$

となる。慣性主軸系では剛体の角運動量は

$$L_1 = I_1 \Omega_1, \quad L_2 = I_2 \Omega_2, \quad L_3 = I_3 \Omega_3 \quad (12.5)$$

と、それぞれの角速度に比例した形で書ける。ここで現れた I_1, I_2, I_3 を主慣性モーメントと呼ぶ。ここで、 I_1, I_2, I_3 は、式から読み取られるように、それぞれ x -, y -, z -軸から離れたところに置かれた物体の質量が大き

^{||} $\Omega = \frac{d\varphi}{dt}$ だった。

^{**} 数学的には、対称行列 I は直交行列 O を用いて、 OIO^{-1} として対角化可能である。

いほど、大きな量であることがわかる。後に見るように、 I_1, I_2, I_3 は、 x -、 y -、 z -軸のまわりの“回転しにくさの度合い”を表していることがわかる。また、 $I_1 = I_2 = I_3$ のときには角運動量ベクトルと角速度ベクトルは同じ向きを向き、平行であるが、一般にはそうはなっていないことに注意しよう。

上に述べたことを、ある点の周りを回転する質点で確かめておこう。質量 m の質点が x - y 平面内で回転運動しているとしよう。このとき、「中心力場の問題」で述べたように、角運動量は z 軸方向を向いていて、その大きさ L_z は、

$$L_z = xp_y - yp_x = mr^2 \frac{d\theta}{dt}$$

であった (§7.1)。ただし、ここでの角度 θ は、今は z 軸周りの角度 φ_z と表されていることに注意せよ。また、 r は x - y 面内にあるので、 $r^2 = x^2 + y^2$ である。結局、角運動量は

$$L_z = m(x^2 + y^2) \frac{d\varphi_z}{dt} = I_z \Omega_z$$

と表せる。ここに、 $I_z \equiv m(x^2 + y^2)$ である。 L_z が、 z 軸周りを回っている質量 m の質点のもつ角運動量である。同様に、 x 軸周り、 y 軸周りを回転する質量 m の質点の角運動量は

$$L_x = m(y^2 + z^2) \frac{d\varphi_x}{dt} = I_x \Omega_x, \quad L_y = m(z^2 + x^2) \frac{d\varphi_y}{dt} = I_y \Omega_y$$

と書ける。つまり、角運動量の α 成分は、“質量 \times 回転軸からの距離の 2 乗 \times 角速度の α 成分”という形をしていることがわかる。こうして、慣性モーメントが回転軸からの距離の 2 乗と質量の積で表わされる。すなわち、回転軸から離れたところに大きな質量のものがあれば、その軸の周りの慣性モーメントは大きくなる。物体が連続的に広がりを持っているとすると、上式の角運動量の表式で、質点の質量を広がりを持った物体の質量密度 ρ と微小体積 dV の積に置き換えて、すべての質点（質量分布）について和をとれば良いことになる。角速度はどの点でも同じなので、結局

$$L_x = \iiint \rho(y^2 + z^2) dV \cdot \frac{d\varphi_x}{dt}, \quad L_y = \iiint \rho(z^2 + x^2) dV \cdot \frac{d\varphi_y}{dt}, \\ L_z = \iiint \rho(x^2 + y^2) dV \cdot \frac{d\varphi_z}{dt}$$

となる。ここで、主慣性モーメント I_x, I_y, I_z は

$$I_x = \iiint \rho(y^2 + z^2) dV, \quad I_y = \iiint \rho(z^2 + x^2) dV, \quad I_z = \iiint \rho(x^2 + y^2) dV$$

となっている。このとき、角運動量の各成分は

$$L_x = I_x \Omega_x, \quad L_y = I_y \Omega_y, \quad L_z = I_z \Omega_z, \quad \text{ここで} \quad \boldsymbol{\Omega} = \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{dt}$$

と、再び得られる。

§§12.2.4 剛体のラグランジアン

剛体の慣性中心は静止しているものとしよう。ここでは、剛体の回転のみに注目する。剛体の運動エネルギー T は、剛体内の各質点の運動エネルギーを足したものであるので、

$$\begin{aligned} T &\equiv \frac{1}{2} \sum_{a=\text{質点}} m_a \mathbf{v}_a^2 = \frac{1}{2} \sum_{a=\text{質点}} m_a (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}_a)^2 = \frac{1}{2} \sum_{a=\text{質点}} m_a [\Omega^2 r_a^2 - (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{r}_a)^2] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \Omega_i \Omega_j \sum_a m_a \left(\sum_{l=1}^3 (r_a)_l^2 \delta_{ij} - (r_a)_i (r_a)_j \right) \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} I_{ij} \Omega_i \Omega_j \end{aligned}$$

と変形できる^{††}。最後の行へは、(12.4) 式で導入された慣性モーメントテンソルを用いた。剛体に働くポテンシャルエネルギー V があれば、剛体のラグランジアンは

$$L = T - V = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} I_{ij} \Omega_i \Omega_j - V$$

となる。

§ 12.3 剛体回転の運動方程式

§§12.3.1 剛体回転の運動方程式

剛体の角運動量 \mathbf{L} は、前節で見たように、 $\mathbf{L} = \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a$ であったので、両辺を時間で微分することで、

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \sum_a \frac{d\mathbf{r}_a}{dt} \times \mathbf{p}_a + \sum_a \mathbf{r}_a \times \frac{d\mathbf{p}_a}{dt}$$

となる。ここで、右辺第1項は、速度と運動量が同じ方向を向いていることに注意すると $\mathbf{0}$ になることがわかる。一方、第2項の運動量の時間微分は、ニュートンの運動法則から、剛体内のこの部分に働く力 \mathbf{f}_a を用いて書き直せる。結局、剛体回転の運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{K}, \quad (12.6)$$

$$\text{ここで } \mathbf{K} = \sum_{a=\text{質点}} \mathbf{r}_a \times \mathbf{f}_a$$

と得られる。ここで、 \mathbf{K} は力のモーメントと呼ばれる。剛体内の質点同士に作用しあう力は、作用・反作用の法則によって、すべて打ち消しあってしまう、 \mathbf{K} には効いてこない。よって、 \mathbf{f}_a としては、その質点に働く外力だけを考えればよいことに注意しておこう。

ラグランジアンから出発しても、当然同じ運動方程式が得られる。剛体の慣性中心が静止している座標系では、一般化座標は剛体の向きを指定する角 φ をとればよい。その時間微分は $\dot{\varphi} = \boldsymbol{\Omega}$ である。オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_i} = \frac{\partial L}{\partial \varphi_i}$$

^{††} $(\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}_a)^2 = |\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}_a|^2 = (\Omega r_a \sin \theta)^2 = \Omega^2 r_a^2 (1 - \cos^2 \theta) = \Omega^2 r_a^2 - (\Omega r_a \cos \theta)^2 = \Omega^2 r_a^2 - (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{r}_a)^2$

である。前小節で与えたラグランジアンを用いると、

$$\frac{d}{dt} \sum_{j=1}^3 I_{ij} \Omega_j = -\frac{\partial V}{\partial \varphi_i}$$

が得られる。左辺は $L_i = \sum_{j=1}^3 I_{ij} \Omega_j$ より、角運動量の i 成分の時間微分 $\frac{dL_i}{dt}$ となっている。右辺は

$$\delta V = \sum_{a(\text{質点})} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \delta \mathbf{r}_a = -\sum_a \mathbf{f}_a \cdot (\delta \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_a) = -\delta \boldsymbol{\varphi} \cdot \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{f}_a) = -\delta \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{K}$$

となる。ここで、第2から第3へは力 \mathbf{f}_a が $\mathbf{f}_a = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_a}$ であることと、回転のときの変位 $\delta \mathbf{r}_a$ を使い、第3から第4へはベクトル解析の公式 $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A})$ を用いた。こうして、

$$\frac{\partial V}{\partial \varphi_i} = -K_i$$

となるので、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{dL_i}{dt} = K_i$$

となり、再び剛体回転の運動方程式が得られる。

以下に註を述べておこう。座標の原点を \mathbf{a} だけずらすと $\mathbf{r}_a = \mathbf{r}'_a + \mathbf{a}$ として、

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \sum_{a=\text{質点}} \mathbf{r}_a \times \mathbf{f}_a = \sum_{a=\text{質点}} \mathbf{r}'_a \times \mathbf{f}_a + \sum_{a=\text{質点}} \mathbf{a} \times \mathbf{f}_a \\ &= \mathbf{K}' + \mathbf{a} \times \mathbf{F}, \quad (\mathbf{F} = \sum_{a=\text{質点}} \mathbf{f}_a). \end{aligned}$$

となる。もし、 \mathbf{K} と \mathbf{F} が直交 ($\mathbf{K} \cdot \mathbf{F} = 0$) していれば、 \mathbf{a} をうまく選ぶと、 $\mathbf{K}' = \mathbf{0}$ にすることが可能である。すなわち、 \mathbf{a} をうまくとって、 \mathbf{K} と \mathbf{F} がそもそも直交しているので $\mathbf{K} = \mathbf{a} \times \mathbf{F}$ とすることが可能である。こうして、剛体に働く力のモーメント \mathbf{K} を、一定の直線上に作用点を持つ剛体に働く合力 \mathbf{F} で表すことが出来る。

例として、一様な重力場を考えよう。合力 \mathbf{F} と力のモーメント \mathbf{K} は

$$\mathbf{F} = \mathbf{g} \sum_a m_a, \quad \mathbf{K} = \sum_a m_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{g}, \quad (\mathbf{F} \cdot \mathbf{K} = 0).$$

となり、この場合には \mathbf{F} と \mathbf{K} は直交している。従って、上の議論から、うまい座標系をとれば、力のモーメント \mathbf{K} は剛体に働く合力 \mathbf{F} で表わされるはずである。今、慣性中心 $\mathbf{R}_0 = \frac{\sum_a m_a \mathbf{r}_a}{\sum_a m_a}$ を導入すると、

$$\mathbf{K} = \sum_a m_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{g} = \mathbf{R}_0 \times \mathbf{g} \sum_a m_a = \mathbf{R}_0 \times \mathbf{F}$$

となる。こうして、慣性中心に働く1つの力 \mathbf{F} の作用により、剛体の回転運動 $\frac{d\mathbf{L}}{dt}$ が決定されることになる。

§§12.3.2 剛体回転の例:対称コマの自由回転

剛体が対称軸を持っているとしよう。その軸を x_3 軸とする (図36)。すなわち、剛体は x_3 軸の周りに回転しても何も変わらない。 x_3 軸とそれに直交する2軸を慣性主軸系にとれば、剛体は x_3 軸の周りに対称なので、

$$I_1 = I_2$$

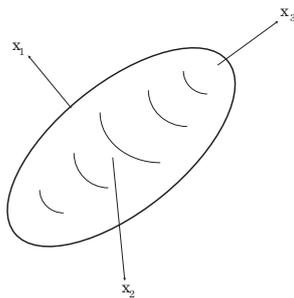


図 36:

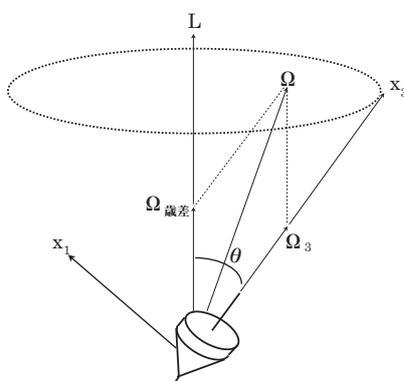


図 37:

である。この剛体を、“対称コマ”と呼ぶことにしよう。剛体に外力が働いていないときには、力のモーメント \mathbf{K} は $\mathbf{0}$ となるので、剛体回転の運動方程式から

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{0},$$

すなわち、剛体の角運動量は保存することがわかる。角運動量ベクトルと剛体の対称軸 (x_3 軸) を含む平面に垂直に x_2 軸をとると、 $L_2 = 0$ から、 $\Omega_2 = \frac{L_2}{I_2} = 0$ であることがわかる。すなわち、 \mathbf{L} 、 $\mathbf{\Omega}$ 、 x_3 軸は常に同じ平面 (x_1 - x_3 平面) 内にあることがわかる (図 37)。剛体の対称軸は $\mathbf{v} = \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$ の速度を持って動くが、剛体の対称軸上のベクトル \mathbf{r} は x_3 軸に平行なので、この \mathbf{v} は $\mathbf{\Omega}$ とも、対称軸 x_3 軸とも垂直であるので、剛体の対称軸は常に \mathbf{L} 、 $\mathbf{\Omega}$ 、 x_3 軸が含まれる平面に垂直に動いていこうとする。すなわち、“対称コマは対称軸のまわりを回転しながら、対称軸は保存する角運動量ベクトル \mathbf{L} のまわりを一様に回転する”という状況が実現される。これをコマの歳差運動と呼ぶ。

角速度ベクトル $\mathbf{\Omega}$ の対称軸 (x_3 軸) 成分 Ω_3 は、コマ自身の回転の角速度である。角速度ベクトル $\mathbf{\Omega}$ の角運動量 \mathbf{L} の方向の成分が、歳差運動の角速度 $\Omega_{\text{歳差}}$ になる。角運動量ベクトルと x_3 軸のなす角度を θ とすると、

$$\begin{aligned} \Omega_3 = \frac{L_3}{I_3} = \frac{L}{I_3} \cos \theta, \quad \Omega_{\text{歳差}} \sin \theta = \Omega_1 = \frac{L_1}{I_1} = \frac{L}{I_1} \sin \theta, \\ \Omega_{\text{歳差}} = \frac{L}{I_1} \end{aligned}$$

と得られる。

§§12.3.3 剛体の釣り合い

剛体に力が働いているにもかかわらず、剛体が動かないための条件は、まず剛体に働く力が釣り合っていて、合力 \mathbf{F} が $\mathbf{0}$ となっていなければならないことである。さらに、力のモーメント \mathbf{K} も釣り合っていて、全体として $\mathbf{0}$ になっていなければ剛体は回転してしまう。これらの両条件を表すと、

$$\mathbf{F} = \sum_a \mathbf{F}_a = \mathbf{0}, \quad \left(\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{0} \right)$$

$$\mathbf{K} = \sum_a \mathbf{K}_a = \mathbf{0}, \quad \left(\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{0} \right).$$

と書ける。

剛体が他の物体に接触していて釣り合っているときには、接触する他の物体から及ぼされる力も考慮に入れなければならない。すなわち、抗力や摩擦力まで考えないといけなくなる。接触面が完全に粗いときには、接触点において相対運動が無い。このとき、剛体はころがる。接触面と摩擦が全く無いような、完全に滑らかな状況ではなくても、接触面に沿う方向に摩擦力が働くときには剛体はすべる。接触面が完全に粗いか完全に滑らかな場合には摩擦力はあからさまには現れてこない。

§ 12.4 オイラーの運動方程式

慣性主軸系をとり、運動方程式を再構成しよう。静止系では

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{K}$$

と得られているので、これを慣性主軸系で書き直そう。慣性主軸を x_1, x_2, x_3 とし、その基底ベクトルを $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ と書くと、角運動量はこの座標で

$$\mathbf{L} = L_1\mathbf{e}_1 + L_2\mathbf{e}_2 + L_3\mathbf{e}_3$$

と書ける。基底ベクトルは剛体に結びつけられているので、剛体が回転するとともに動いていく。回転でのベクトルの変換はすでに得られており、基底ベクトルの微小回転 $d\varphi$ のもとでの変位 $d\mathbf{e}_i$ は

$$d\mathbf{e}_i = d\varphi \times \mathbf{e}_i$$

となる。よって、角運動量の時間変化 $\frac{d\mathbf{L}}{dt}$ は、角度の時間変化 $\boldsymbol{\Omega} = \frac{d\varphi}{dt}$ のもとで、

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \frac{dL_1}{dt}\mathbf{e}_1 + \frac{dL_2}{dt}\mathbf{e}_2 + \frac{dL_3}{dt}\mathbf{e}_3 + L_1\frac{d\mathbf{e}_1}{dt} + L_2\frac{d\mathbf{e}_2}{dt} + L_3\frac{d\mathbf{e}_3}{dt} \\ &= \frac{dL_1}{dt}\mathbf{e}_1 + \frac{dL_2}{dt}\mathbf{e}_2 + \frac{dL_3}{dt}\mathbf{e}_3 + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{L} \end{aligned}$$

となる。ここで、慣性主軸系では $L_i = I_i\Omega_i$ であるので、主慣性モーメントが時間に依存しないとして、上の式に代入することで

$$\begin{aligned} I_1\frac{d\Omega_1}{dt} + (I_3 - I_2)\Omega_2\Omega_3 &= K_1, \\ I_2\frac{d\Omega_2}{dt} + (I_1 - I_3)\Omega_3\Omega_1 &= K_2, \\ I_3\frac{d\Omega_3}{dt} + (I_2 - I_1)\Omega_1\Omega_2 &= K_3 \end{aligned} \tag{12.7}$$

となる。この運動方程式をオイラーの運動方程式と呼ぶ。

§ 12.5 剛体の運動の例

§§12.5.1 地球の自転

オイラーの運動方程式を用いて、再び対称コマの自由回転を記述しておこう。対称軸を x_3 軸にとると、主慣性モーメントは $I_1 = I_2$ となる。自由回転であるので、力のモーメントは働いていないとしてよい。すなわち $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ である。よって、オイラーの運動方程式は

$$\frac{d\Omega_1}{dt} = -\omega\Omega_3, \quad \frac{d\Omega_2}{dt} = \omega\Omega_1, \quad \frac{d\Omega_3}{dt} = 0,$$

$$\omega \equiv \Omega_3 \frac{I_3 - I_1}{I_1}$$

となる。ここで、 ω を定義した。この解は容易に得られ、

$$\Omega_1 = A \cos \omega t, \quad \Omega_2 = A \sin \omega t, \quad \Omega_3 = \text{定数}$$

となる。角速度 Ω_1, Ω_2 は対称軸の周りを角速度 ω で回転することがわかる。この ω は歳差運動の角速度である。

さて、宇宙空間に浮かぶ地球は、他から力のモーメントを受けずに自由回転しているものと考えてみよう。地球は赤道が膨らんだ扁平な回転楕円体と近似的にみなせる。したがって、第0近似では、簡単に対称コマの自由回転とみなせる。対称軸を x_3 軸にとると、主慣性モーメントは $I_1 = I_2$ であり、また、

$$\frac{I_3 - I_1}{I_1} \approx 0.0033$$

であるという。地球は1日1回転しているので、角速度の対称軸成分 Ω_3 は

$$\Omega_3 \approx 1 \text{ 回転/day}$$

である。また、角速度ベクトルは対称軸と少しずれていて、角速度ベクトルと対称軸のなす角を α とすると、おおよそ

$$\tan \alpha \approx \alpha \approx 0.3''$$

である。歳差運動の角速度は

$$\omega = \Omega_3 \frac{I_3 - I_1}{I_1} \approx 0.0033 \text{ 回転/day}$$

と得られる。よって、理論的にはおおよそ300日で角速度ベクトル $\boldsymbol{\Omega}$ は対称軸の周りを1回転するといえる。観測ではおおよそ440日と見積もられている。この相違は地球が完全な剛体ではないことなどに帰せられるであろう。

§§12.5.2 一様な重力場内での対称コマの運動

次に、対称コマが一様な重力場内で回転している状況を考察しよう。静止系の座標を (X, Y, Z) とする。コマの支点に静止座標系の原点をとり、鉛直上向きに Z 軸を取る。コマの対称軸を x_3 軸とすると、主慣性モーメントは $I_1 = I_2$ である。コマの慣性中心の運動エネルギー $T_{\text{慣性中心}}$ は、コマの質量を m として

$$\begin{aligned} T_{\text{慣性中心}} &= \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2} m \left(\left(l \frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(l \sin \theta \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} m l^2 \left(\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \sin^2 \theta \right) \end{aligned}$$

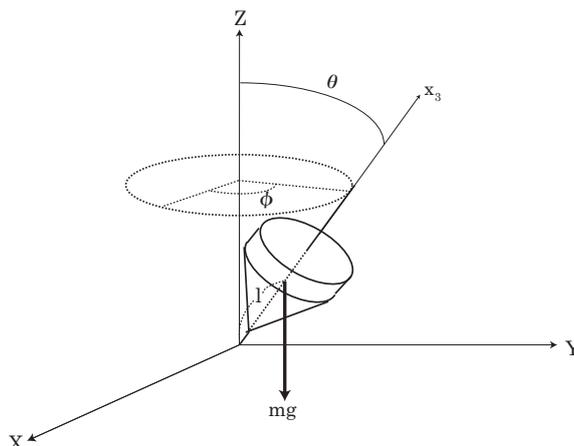


図 38:

となる。ここで、オイラー角を用いている。対称コマの回転の運動エネルギー $T_{\text{回転}}$ は

$$\begin{aligned} T_{\text{回転}} &= \frac{1}{2} (I_1 (\Omega_1^2 + \Omega_2^2) + I_3 \Omega_3^2) \\ &= \frac{1}{2} I_1 \left(\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \sin^2 \theta \right) + \frac{1}{2} I_3 \left(\frac{d\psi}{dt} + \frac{d\varphi}{dt} \cos \theta \right)^2 \end{aligned}$$

と表わされる。ここで、角速度のオイラー角による表示を用いた (§§10.2.2)。重力場中での対称コマのポテンシャルエネルギー $V(\varphi, \theta, \psi)$ は

$$V(\varphi, \theta, \psi) = mgl \cos \theta$$

であるので、ラグランジアンは

$$\begin{aligned} L &= T_{\text{慣性中心}} + T_{\text{回転}} - V(\varphi, \theta, \psi) \\ &= \frac{1}{2} (I_1 + ml^2) \left(\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \sin^2 \theta \right) + \frac{1}{2} I_3 \left(\frac{d\psi}{dt} + \frac{d\varphi}{dt} \cos \theta \right)^2 - mgl \cos \theta \end{aligned}$$

となる。オイラーの運動方程式は、 $I_1 = I_2$ より

$$\begin{aligned} I_1 \frac{d\Omega_1}{dt} + (I_3 - I_1) \Omega_2 \Omega_3 &= K_1, \\ I_2 \frac{d\Omega_2}{dt} - (I_3 - I_1) \Omega_1 \Omega_2 &= K_2, \\ I_3 \frac{d\Omega_3}{dt} &= K_3 \end{aligned}$$

と書ける。ここで、力のモーメントは、静止系の原点（コマの支点）から対称軸上にあるコマの慣性中心までの距離を l として、

$$K_1 = mgl \sin \theta \cos \psi, \quad K_2 = -mgl \sin \theta \sin \psi, \quad K_3 = 0$$

となる。ここでも、オイラー角を用いた。まず、 $K_3 = 0$ より、角速度の第3成分は時間に依存しない。角速度のオイラー角表示から、

$$\Omega_3 = \frac{d\varphi}{dt} \cos \theta + \frac{d\psi}{dt} = \frac{L_3}{I_3} = \text{一定}$$

となる。ここで、角運動量の第3成分 L_3 は x_3 軸まわりの回転角 ψ の共役運動量であり、 $L_3 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}$ である。オイラー・ラグランジュ方程式より $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\partial L}{\partial \psi} = 0$ から、 L_3 が保存量であることは明らかである。また、対称コマに働く力 mg は静止座標系の Z 軸に平行であるので、角運動量の Z 成分は保存する。すなわち、

$$\begin{aligned} & ((I_1 + ml^2) \sin^2 \theta + I_3 \cos^2 \theta) \frac{d\varphi}{dt} + I_3 \frac{d\psi}{dt} \cos \theta = L_Z = \text{一定} \\ \text{すなわち} \quad & (I_1 + ml^2) \sin^2 \theta \frac{d\varphi}{dt} + L_3 \cos \theta = L_Z = \text{一定} \end{aligned}$$

となる。角運動量の Z 成分は、 Z 軸周りの回転 φ に対する一般化運動量であるので、 $L_Z = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}$ であり、オイラー・ラグランジュ方程式 $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0$ により保存量であることは容易に確かめられる。ここで、 $\dot{\varphi} \equiv \frac{d\varphi}{dt}$ であったことを思い出そう。

さて、エネルギー E は保存量であるので、保存するエネルギーを、保存する角運動量 L_3 と L_Z を用いて表してみよう。

$$\begin{aligned} E &= T_{\text{慣性中心}} + T_{\text{回転}} + V(\theta) \\ &= \frac{1}{2}(I_1 + ml^2) \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{(L_Z - L_3 \cos \theta)^2}{2(I_1 + ml^2) \sin^2 \theta} + \frac{L_3^2}{2I_3} + mgl \cos \theta \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{L_Z}{I_1 + ml^2}, & b &\equiv \frac{L_3}{I_1 + ml^2}, & k &\equiv \frac{2}{I_1 + ml^2} \left(E - \frac{L_3^2}{2I_3} \right), & h &\equiv \frac{2mgl}{I_1 + ml^2}, \\ w &\equiv \cos \theta \end{aligned}$$

と定義すると、エネルギーの式は

$$\left(\frac{dw}{dt} \right)^2 = (1 - w^2)(k - hw) - (a - bw)^2 \equiv f(w)$$

と書き表わすことができる。ここで定義した関数 $f(w)$ は w の3次式である。左辺は2乗の形なので、物理的に意味があるのは $f(w) \geq 0$ かつ、 w の定義から $-1 \leq w \leq 1$ の領域である。形式的には $f(w \rightarrow -\infty) < 0$ かつ $f(w \rightarrow \infty) > 0$ であり、また、 $f(-1) < 0$ かつ $f(1) < 0$ であることは容易に確かめられる。よって、 $f(w) = 0$ という方程式が重根 $w = w_0$ を持つ時には、 $f(w) \geq 0$ かつ $-1 \leq w \leq 1$ であるのは、 w_0 のみであることがわかる。このときには、 $w = w_0$ 、すなわち $\theta = \theta_0$ のみが意味のある物理的な解となり、 $\theta = \theta_0 = \text{定数}$ であることから、コマの対称軸は静止系の Z 軸、すなわち鉛直方向から傾き θ_0 を保ったまま、歳差運動を行うことになる。

次に $f(w) = 0$ の解が2根 $w_1, w_2 (> w_1)$ を持つ場合を考えよう。すなわち、 $\theta_1 > \theta_2$ の場合である。このときには θ_2 と θ_1 の間では $f(w) \geq 0$ であるので、コマの対称軸は Z 軸、つまり鉛直方向から傾き θ_1 と θ_2 の間を振動しながら歳差運動することになる。傾き θ_1 と θ_2 の間を行き来する現象を章動と呼ぶ。章動では、 θ_1, θ_2 で $\frac{d\theta}{dt} = 0$ となる。この点では

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{L_Z - L_3 \cos \theta}{(I_1 + ml^2) \sin^2 \theta} = \frac{a - bw}{1 - w^2} = \frac{a - b \cos \theta}{1 - \cos^2 \theta}$$

であるが、 $b > 0$ ($L_3 > 0$) のときには以下の3つの場合が可能である。

- (1) $a > bw_2 (= b \cos \theta_2)$, このとき $\frac{d\varphi}{dt} > 0$,
- (2) $a = bw_2$, このとき $\frac{d\varphi_2}{dt} = 0$, $\frac{d\varphi_1}{dt} \geq 0$
- (3) $bw_1 < a < bw_2$, このとき $\frac{d\varphi_2}{dt} < 0$, $\frac{d\varphi_1}{dt} > 0$

(1) の場合には正常な歳差運動しながら章動がおきるが、(2) の場合には、 θ_1 で歳差運動は一旦止まる。さらに(3) の場合には歳差運動の向きが一時逆転しながら進んでいくことになる。

さて、章動が起きず、歳差運動のみする場合についてもう少し考察しておこう。このときには、 $\theta = \theta_0$ かつ $\frac{d\theta}{dt} = 0$ である。 $\theta_0 = 0$ のときにはコマは直立して回転し、歳差運動しない。このような対称コマを眠りコマと呼んでいる。ここでは $\theta_0 \neq 0$ の場合を考える。関数 $f(w)$ は $f(w) = 0$ の方程式で重根 $w = w_0$ ($\theta = \theta_0$) を持つ。このとき、 $\left. \frac{df(w)}{dw} \right|_{w=w_0} = 0$ でもある。従って、

$$f(w) = 0, \quad \frac{df(w)}{dw} = 0$$

の2式を連立させて解けば重根が得られる。2式を具体的に記せば、

$$(1 - w^2)(k - hw) - (a - bw)^2 = 0, \\ -2w(k - hw) - h(1 - w^2) + 2b(a - bw) = 0$$

となる。下式から $k - hw$ を得て上式に代入して k を消去する。また、 a, b, w の定義と L_Z を用いて表わした L_Z の表式から $a - bw = \sin^2 \theta \frac{d\varphi}{dt}$ を得るので、 h の定義と併せて用いると、先の2式から

$$(I_1 + ml^2)w_0 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 - I_3 \Omega_3 \frac{d\varphi}{dt} + mgl = 0$$

が得られる。ここで、重根を w_0 とした。こうして、歳差運動の角速度 $\frac{d\varphi}{dt}$ は

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{I_3 \Omega_3}{2(I_1 + ml^2)w_0} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(I_1 + ml^2)w_0 mgl}{I_3^2 \Omega_3^2}} \right)$$

と得られる。

今、ルートの中の $\frac{(I_1 + ml^2)w_0 mgl}{I_3^2 \Omega_3^2}$ が十分小さいとしよう。このときには歳差運動の角速度は

$$\frac{d\varphi}{dt} \approx \begin{cases} \frac{I_3 \Omega_3}{(I_1 + ml^2)w_0} & \text{複号 + : 速い歳差運動} \\ \frac{mgl}{I_3 \Omega_3} & \text{複号 - : 遅い歳差運動} \end{cases}$$

と得られる。一般に速い歳差運動は摩擦などで減衰してしまい、遅い歳差運動のみが見られる。コマ自身が対称軸の周りを回転する角速度 Ω_3 が小さいときには、歳差運動の角速度 $\frac{d\varphi}{dt}$ は大きくなる。コマを回して最後に倒れそうになる直前にはこのような運動が見られる。また、前に第0近似として地球を自由回転する対称コマとして取り扱ったが、実際には太陽や他の惑星から力のモーメントを受ける。このとき、遅い歳差運動が残り、これは地軸を26000年で一周させる歳差運動を引き起こすと考えられる。

§§12.5.3 逆立ちコマ

逆立ちコマを考えてみよう。問題を簡単化するため、厚みの無視できる硬貨の中心からずれたところにおもりを付けて、重心の位置が少しずれていると考えよう。硬貨の中心と慣性中心は図 39 の様な関係にあるとする。この硬貨を対称軸周りに回転させると、初めは慣性中心が硬貨の中心より下にあったものが、硬貨が中心の周りに回転し、最後には慣性中心が中心の上に来て安定して回転するようになる。重心が中心より下から上に上がって来るといふことで、“逆立ちコマ”と呼ばれる。慣性中心と形の中心がさほど離れていないとして、図 41(b) にある慣性中心から硬貨の接地点への位置ベクトル \mathbf{r} の大きさ r は、円盤の半径 l と近似的に等しいとしておこう： $r \approx l$ 。実際に回転させてみるとわかるが、硬貨を反時計回りに回転させると、上から見て硬貨の接地点は反時計回りに回転していく (図 40)。そこで、床と硬貨の接地点には図 40 のように摩擦力が働く。これを \mathbf{f} としよう。硬貨の質量を M とし、床との動摩擦係数を μ とすれば摩擦力 \mathbf{f} の大きさ f は

$$f = \mu Mg$$

となる。この摩擦力により慣性中心の周りに力のモーメント \mathbf{K} が生じる。図 41(b) のように、 \mathbf{r} と \mathbf{f} は直交しているので、力のモーメントの大きさ K は

$$K = |\mathbf{r} \times \mathbf{f}| = rf \sin(\pi/2) \approx lf$$

となる。ここで、 $r \approx l$ を用いた。慣性中心を持ち上げるように硬貨を回転させる角運動量 \mathbf{L}' は、 x 及び y 成分を持ち、図 41(a) から

$$L'_x = L' \sin \varphi, \quad L'_y = -L' \cos \varphi$$

となる。ここで L' は \mathbf{L}' の大きさである。力のモーメント \mathbf{K} は図 41(b) のように、水平面より下を向き、 z 成分は負である。これにより、硬貨自身が回転している角運動量 \mathbf{L} は

$$\frac{dL}{dt} = K_z (< 0)$$

より減衰していく。これが硬貨の回転を遅くする原因になる。ここでは、近似的に、力のモーメントはほぼ水平面を向いているとして、図 41(a) より

$$K_x \approx K \cos \varphi, \quad K_y \approx K \sin \varphi$$

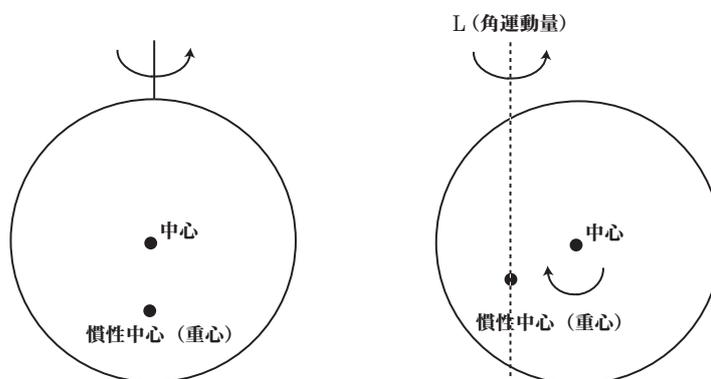


図 39:

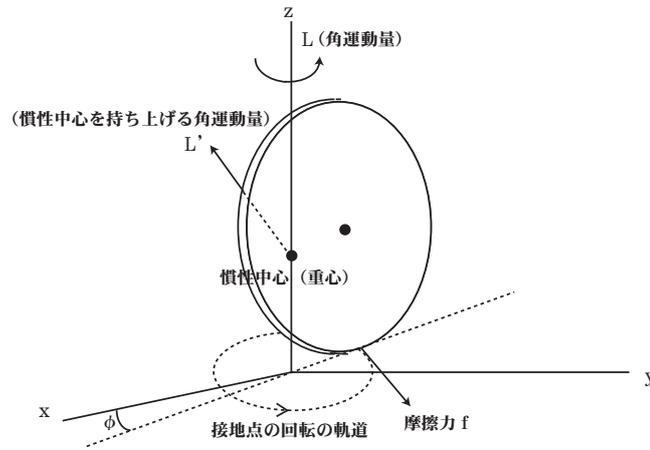
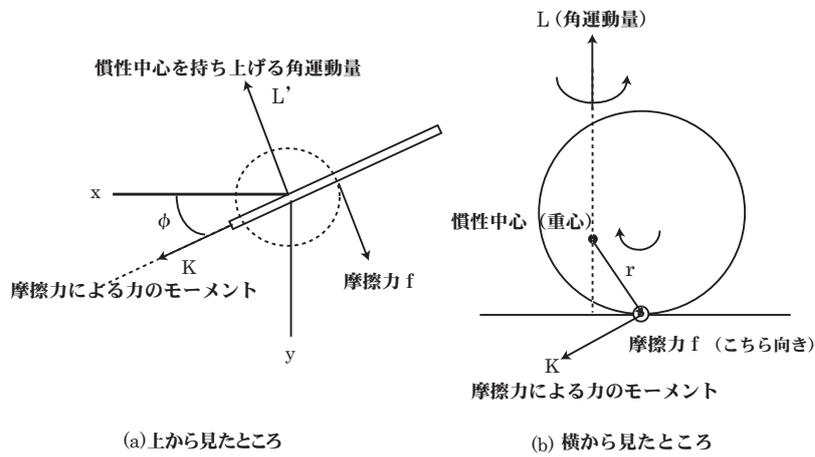


図 40:



(a) 上から見たところ

(b) 横から見たところ

図 41:

としよう。こうして、運動方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dL'_x}{dt} = K_x, & \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt}(L' \sin \varphi) = K \cos \varphi \approx lf \cos \varphi \\ \frac{dL'_y}{dt} = K_y, & \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt}(-L' \sin \varphi) = K \sin \varphi \approx lf \sin \varphi \end{aligned}$$

となる。ここで、 K の大きさは変化しないので、角運動量 L' の大きさも変化しない。よって、時間変化は φ のみであり、上記運動方程式はともに

$$L' \frac{d\varphi}{dt} \approx lf = l\mu Mg \tag{12.8}$$

となる。ここで、摩擦力の表式を用いた。また、

$$\frac{d\varphi}{dt} \equiv \omega$$

は、硬貨が z 軸の周りを回転する角速度であり、 ω と記そう。慣性中心を回転して持ち上げる角速度を Ω とすると

$$L' = I\Omega$$

であり、慣性中心のずれを無視すれば、半径 l で質量 M の一様な円盤の慣性モーメント I は

$$I = \frac{1}{2}Ml^2$$

であるので、(12.8) から

$$\Omega = \frac{2\mu g}{l\omega}$$

が得られる。このように、近似的な扱いではあったが、角速度 Ω で慣性中心は持ち上がり、コマは倒立することがわかる。

倒立するには角度 π 回転すればよいので、倒立するまでの時間を T とすれば

$$\Omega T = \pi$$

から、倒立するまでの時間 T が求められる。

§ 12.6 非慣性基準系における運動

§§12.6.1 非慣性系における運動方程式

慣性系である K_0 系から、非慣性系である K' 系への変換を考える。ここで、 K' 系は K_0 系に対して、時間に依存した速度 $\mathbf{V}(t)$ で運動しているものとする。 K_0 系での質点の速度 \mathbf{v}_0 と K' 系での速度 \mathbf{v}' の間には

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}_0 - \mathbf{V}(t)$$

の関係がある。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}'}{dt} &= \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} - \frac{d\mathbf{V}(t)}{dt} \equiv \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} - \mathbf{W}(t), \\ \mathbf{W}(t) &\equiv \frac{d\mathbf{V}(t)}{dt} \end{aligned}$$

となる。 K_0 系での運動方程式は $m \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} = \mathbf{f}$ であるので、これを用いて K' 系での運動方程式は、

$$m \frac{d\mathbf{v}'}{dt} = \mathbf{f} - m\mathbf{W}(t)$$

と得られる。ここに $-m\mathbf{W}(t)$ は、非慣性系で運動を記述することによる見かけの力であり、 K' 系の加速度の向きと逆向きに働くように見える。

さて、次に、 K' 系からさらに K' 系に対して角速度 $\boldsymbol{\Omega}(t)$ で回転している非慣性系 K 系を考察しよう。任意のベクトル \mathbf{G} は変位 $d\mathbf{G}$ をうけるが、時間変化を考えると

$$\left(\frac{d\mathbf{G}'}{dt} \right)_{K'} = \left(\frac{d\mathbf{G}}{dt} \right)_K + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{G}$$

の変化をする。よって、形式的に並進系 K' と回転系 K との間には

$$\left(\frac{d}{dt} \right)_{K'} = \left(\frac{d}{dt} \right)_K + \boldsymbol{\Omega} \times$$

という演算の関係があると考えればよい。よって、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\mathbf{r}'}{dt}\right)_{K'} &= \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)_K + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \\ \left(\frac{d^2\mathbf{r}'}{dt^2}\right)_{K'} &= \left(\frac{d}{dt}\left(\frac{d\mathbf{r}'}{dt}\right)_{K'}\right)_{K'} \\ &= \frac{d}{dt}\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} + \boldsymbol{\Omega}(t) \times \mathbf{r}\right) + \boldsymbol{\Omega}(t) \times \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} + \boldsymbol{\Omega}(t) \times \mathbf{r}\right) \\ &= \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + 2\left(\boldsymbol{\Omega}(t) \times \frac{d\mathbf{r}}{dt}\right) + \boldsymbol{\Omega}(t) \times (\boldsymbol{\Omega}(t) \times \mathbf{r}) + \frac{d\boldsymbol{\Omega}}{dt} \times \mathbf{r} \end{aligned}$$

となる。こうして、 $m\left(\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}\right)_{K'} = \mathbf{f} - m\mathbf{W}(t)$ を用いて、

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{f} - m\mathbf{W}(t) + 2m\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \boldsymbol{\Omega}(t)\right) + m\boldsymbol{\Omega}(t) \times (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\Omega}(t)) + m\left(\mathbf{r} \times \frac{d\boldsymbol{\Omega}(t)}{dt}\right) \quad (12.9)$$

を得る。右辺第1項は本当の力、第2項は慣性力としての見かけの力、第3項はコリオリ力として知られている。第4項は遠心力と呼ばれる見かけの力であり、最後の第5項は非一様回転から生じる見かけの力である。

各項を見ていく前に、ラグランジアンを用いて、上式を再導出しておこう。まず、 K_0 系と K' 系で速度の関係は $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}' + \mathbf{V}(t)$ であったので、慣性系でのラグランジアン $L_0 = \frac{1}{2}m\mathbf{v}_0^2 - V(\mathbf{r}_0)$ より、

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2}m(\mathbf{v}' + \mathbf{V})^2 - V(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}'^2 + m\mathbf{v}' \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2 - V(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}'^2 - m\mathbf{r}' \cdot \frac{d\mathbf{V}}{dt} - V(\mathbf{r}') + \frac{d}{dt}(m\mathbf{r}' \cdot \mathbf{V}) + \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}m \int^t \mathbf{V}(t')^2 dt'\right) \end{aligned}$$

となる。ここで、ラグランジアンには時間の完全微分だけの不定性が許されていたので、運動に影響しない時間の完全微分項は無視して、

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}'^2 - m\mathbf{r}' \cdot \mathbf{W}(t) - V \\ \mathbf{W}(t) &\equiv \frac{d\mathbf{V}(t)}{dt} \end{aligned}$$

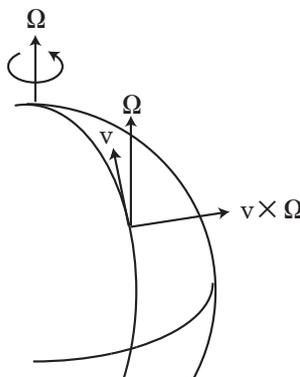


図 42:

となる。さらに角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ で回転している回転系では、 $\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v} + \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}$ となることから、ラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r})^2 - m\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{W} - V(\boldsymbol{r}) \\ &= \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 + m\boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r})^2 - m\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{W} - V(\boldsymbol{r}) \end{aligned}$$

と得られる。こうして、オイラー・ラグランジュ方程式 $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}}$ から再び、(12.9) 式を得る。

さて、コリオリ力 $2m(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\Omega})$ に関して見ておこう。地球は自転しているので、地表面に静止している観測者にとっては回転座標系である。北半球で子午線（経線）に沿って北上する物体はコリオリ力により、東の方向にそれていくことがわかる (図 42)。

次に遠心力であるが、力の方向は回転軸から外を向く方向であり、大きさは $|m\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\Omega})| = m\Omega^2 r \sin \theta$ となる。ここで、 θ は \boldsymbol{r} と $\boldsymbol{\Omega}$ のなす角である。

§§12.6.2 コリオリ力の例

コリオリ力が働いた場合の例として、地球上での地表面付近での質点の運動を考えよう。図 43(a) は地球の断面図である。赤道面から北へ θ の位置での質量 m の質点の落下運動を考えよう。ただし、遠心力は無視する。地表面のある固定点を原点とし、鉛直上向きに z 軸を、北へ y 軸を、東へ x 軸を取る。図 43(b) では鉛直上方から座標を見たところであり、紙面に垂直手前に z 軸が向いている。地球は北極と南極を結ぶ軸の周りに自転しているものとし、自転の角速度の大きさを Ω とする。

地球の自転の角速度ベクトル $\boldsymbol{\Omega}$ の x , y , z 成分, Ω_x , Ω_y , Ω_z は、角速度の大きさと角 θ を用いて

$$\Omega_x = 0, \quad \Omega_y = \Omega \cos \theta, \quad \Omega_z = \Omega \sin \theta$$

と書けるので、コリオリ力の x , y , z 成分は

$$(2m\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\Omega})_x = 2m(v_y\Omega_z - v_z\Omega_y) = 2m\Omega \left(\frac{dy}{dt} \sin \theta - \frac{dz}{dt} \cos \theta \right)$$

$$(2m\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\Omega})_y = 2m(v_z\Omega_x - v_x\Omega_z) = -2m\Omega \frac{dx}{dt} \sin \theta$$

$$(2m\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\Omega})_z = 2m(v_x\Omega_y - v_y\Omega_x) = 2m\Omega \frac{dx}{dt} \cos \theta$$

と書ける。ただし、 $\boldsymbol{v} = \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}$ である。この状況で、質点を $(x, y, z) = (0, 0, h)$ の位置から自由落下させる。質点の運動方程式は、成分表示で

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = 2m\Omega \left(\frac{dy}{dt} \sin \theta - \frac{dz}{dt} \cos \theta \right) \quad (12.10)$$

$$m \frac{d^2y}{dt^2} = -2m\Omega \frac{dx}{dt} \sin \theta \quad (12.11)$$

$$m \frac{d^2z}{dt^2} = -mg + 2m\Omega \frac{dx}{dt} \cos \theta \quad (12.12)$$

となる。遠心力は無視している。

運動方程式 (12.11)、(12.12) を時間 t で積分し、初期条件として、 $t = 0$ で $x(0) = 0$, $v_y(0) = 0$, $v_z(0) = 0$ を考慮すると、

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= -2\Omega x \sin \theta \\ \frac{dz}{dt} &= -gt + 2\Omega x \cos \theta \end{aligned} \quad (12.13)$$

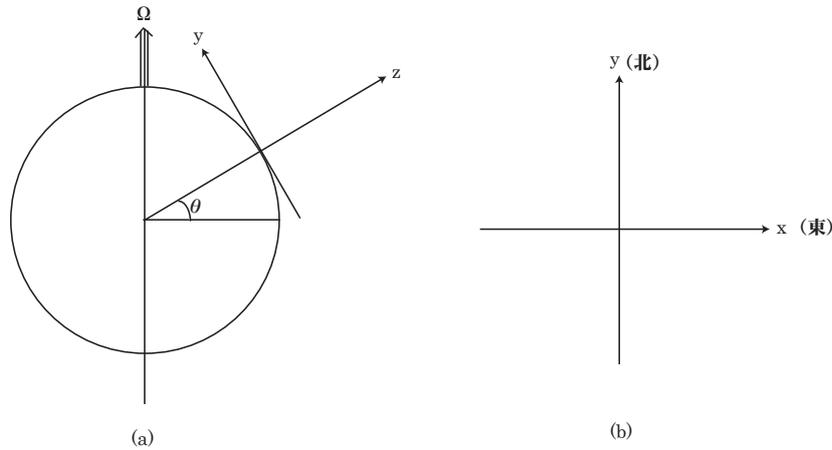


図 43:

が得られる。これらを (12.10) に代入し整理すると、

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -4\Omega^2x + 2\Omega gt \cos \theta$$

が得られる。右辺第 2 項を左辺に移行すると

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 4\Omega^2x = 2\Omega gt \cos \theta$$

であるが、これは強制振動の時に見た、“非斉次線形常微分方程式”であるので、右辺の非斉次項を 0 においた線形微分方程式の一般解と、もとの微分方程式の特解の和として、一般解が得られる。特解として

$$x_{\text{特解}} = \frac{gt}{2\Omega} \cos \theta$$

がすぐに確かめられる。こうして、斉次方程式の一般解 $x_{\text{一般}} = C \sin(2\Omega t + \alpha)$ との和として一般解が得られる。ここで、 C と α は積分定数である。

$$x(t) = x_{\text{特解}} + x_{\text{一般}}$$

ここで、 $t = 0$ で $x(0) = C \sin \alpha = 0$ 、 $v_x(0) = \frac{dx(0)}{dt} = \frac{g}{2\Omega} \cos \theta + 2\Omega C \cos \alpha = 0$ から $\alpha = 0$ 、 $C = -\frac{g}{4\Omega^2} \cos \theta$ と積分定数が決まるので、解は

$$x(t) = \frac{gt}{2\Omega} \cos \theta - \frac{g}{4\Omega^2} \cos \theta \sin 2\Omega t \quad (12.14)$$

と決まる。こうして得られた $x(t)$ を (12.13) に代入して

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= -gt \sin \theta \cos \theta + \frac{g}{2\Omega} \sin \theta \cos \theta \sin 2\Omega t \\ \frac{dz}{dt} &= -gt + gt \cos^2 \theta - \frac{g}{2\Omega} \cos^2 \theta \sin 2\Omega t \end{aligned} \quad (12.15)$$

が得られる。これは t で容易に積分できて、 $t = 0$ で $y = 0$ 、 $z = h$ の初期条件に注意して、

$$\begin{aligned} y(t) &= -\frac{g}{2}t^2 \sin \theta \cos \theta - \frac{g}{4\Omega^2} \sin \theta \cos \theta \cos 2\Omega t + \frac{g}{4\Omega^2} \sin \theta \cos \theta \\ z(t) &= -\frac{1}{2}gt^2 \sin^2 \theta - \frac{g}{4\Omega^2} \cos^2 \theta (1 - \cos 2\Omega t) + h \end{aligned} \quad (12.16)$$

と、完全に解けてしまう。

得られた (12.14)、(12.16) を、 Ωt で展開し、4 次まで取ってみると、

$$\begin{aligned}x(t) &\approx \frac{1}{3}g\Omega t^3 \cos \theta \\y(t) &\approx -\frac{g\Omega^2}{6}t^4 \sin \theta \cos \theta \\z(t) &\approx -\frac{1}{2}gt^2 + h + \frac{g\Omega^2}{6}t^4 \cos^2 \theta\end{aligned}$$

となる。時間 t^3 まででは、落下した質点は x 方向、すなわち東に逸れていくことがわかる。

第III部 相对性理論

13章 特殊相対論と電磁気学

§13.1 アインシュタインの特殊相対性原理とローレンツ変換

2章ではラグランジアンを構成するためにガリレオの相対性原理を採用した。ガリレオの相対性原理は、すべての慣性系で力学法則が同じ形を取るべきであることを要請した。もっと条件を厳しくして、すべての慣性系で物理法則が同じ形を取るべきであると要請してみよう。この要請を、ガリレオの相対性原理と区別して、アインシュタインの特殊相対性原理と呼ぶことにしよう。慣性系に限っている点でまだ“特殊”なのである。

アインシュタインの特殊相対性原理を認めると力学法則が若干変更を受けることになる。これを以下で見よう。

§§13.1.1 光速度不変の原理と同時刻の相対性

光の伝搬を考えよう。光が伝搬することも物理法則であるとするなら、すべての慣性系において、光の伝搬の仕方は同じであるはずであろう。光の速度が有限であることは種々の実験・観測で示されているので、光の伝搬の法則がすべての慣性系で等しいならば、すべての慣性系において光速度は有限な一定値をとると結論される。これは光速度不変の原理と呼ばれる。この光速を c と書くことにする。光速は定義値であり、

$$c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$$

である。すべての慣性系にとって、光速が同じ値をとるならば、たちどころに日常の経験的世界観を変更せざるを得なくなる。

今、2つの慣性系があり、相対速度 V で、ある方向に一様に運動しているとしよう。運動方向に x 座標をとり、一つの慣性系を静止系 K ととする。もう一つの慣性系は静止系 K に対して x 方向に速さ V で運動しており、この運動座標系を K' とする。図44のように、 K 系と K' 系の座標軸は互いに同じ方向を向いているとする。今、 K' 系で図44のA点で光を灯したとしよう。A点から等距離にあるB点、C点に光が到達する時刻を考えてみよう。光速度不変の原理から、 K' 系では光源Aから運動方向前方にあるC点へも、後方にあるB点へも、等しい速さで光は伝わっていくはずである。このとき、ABとACの距離が等しいので、B点、C点へ光が到達する時刻は同じである。すなわち、慣性系 K' 系にいる観測者は、光がB点、C点に到達するのは同時刻の出来事であると観測する。

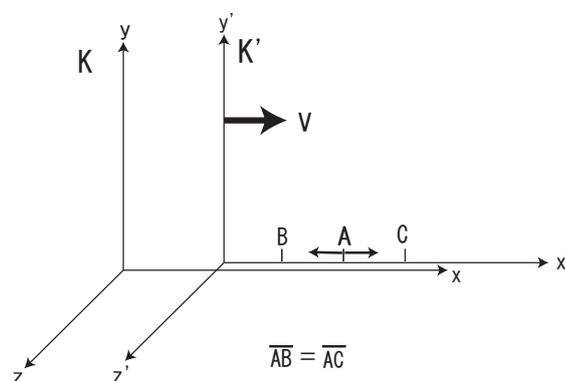


図 44:

一方、この同じ現象を慣性系 K にいる観測者はどのように観測するであろうか。光が A 点を発した後、 x の正方向（前方）へも負方向（後方）へも、 K 系に静止した観測者には光は同じ速さで伝わる。これが光速不変の原理であり、光源の運動状態に依らず、光は同じ速さで伝搬する。ところが、 K' 系は x の正方向へ速さ V で運動しているため、 B 点は光が発せられた点に近づいて来て、 C 点は遠ざかって行く。すなわち、光が進まねばならない距離は明らかに後方にある B 点の方が短い。すなわち、 K 系に静止している観測者は、 A 点で発せられた光は B 点に到達したのち C 点に到達したと観測する。

こうして、 K' 系の観測者には同時刻に起きた事象が、 K 系の観測者には同時刻に起きてはいない。これは、光速が運動状態に依らず、すべての慣性系において等しいという光速不変の原理から導かれたことであり、真理である。すなわち、時刻概念は慣性系ごとに決まる相対的なものである。これまで述べた現象は象徴的に同時刻の相対性と呼ばれることが多い。こうして、時間はすべての慣性系において共通のパラメータではなく、慣性系に固有の量であることを認めなければならない。

§§13.1.2 ローレンツ変換

慣性系ごとに時間を考えねばならないことが前節で議論された。そこで、2つの慣性系の間にはどのような関係が存在するかを考察しよう。2章ではガリレイ変換 (2.6) が議論された。しかしながら、そこでは光速は現れてこず、いわば光速は無限大と陰に考えられていた。そこでは同時刻の相対性は議論の俎上にのぼらず、すべての慣性系で時間は共通、すなわち $t' = t$ であることが暗に仮定されていた。しかしながら、同時刻の相対性から、時間は慣性系に固有のものであり、慣性系間の変換で空間座標とともに時間も変換されるべきである。ここでは、2つの慣性系間の変換を考察しよう。

今、 x 軸方向に互いに一様に運動している2つの慣性系を考える。便宜上、静止系を K 、 K に対して K 系の x 軸正の方向に速度 V で一様に運動している慣性系を K' としよう。それぞれの慣性系 K 及び K' の座標は時間も含めて (x, y, z, t) 、 (x', y', z', t') と記す。運動方向は x または同じことであるが x' 方向であるので、運動方向に直交する座標は両系で常に等しい。すなわち、

$$y' = y, \quad z' = z$$

今、時刻 $t = t' = 0$ で座標の原点は重なっていたとする。このとき、 K 系で、時刻 $t = 0$ に原点から x 軸正の向きに出た光の先端の位置 x 、及び同じく光の先端を K' 系で観測した場合の位置 x' は、

$$x = ct, \quad x' = ct'$$

となる。ここで、 t 、 t' は K 系、 K' 系で測定した時刻である。光の伝搬は物理法則であるので、 K 系で成り立つ事実は K' 系でも成り立つはずである。そこで、

$$x' - ct' = \lambda(x - ct)$$

という式が成り立っていれば良いことがわかる。ただし、 λ は未定の定数であり、1である必然性はない。同様な考察から、 x 軸負の方向へ伝搬する光に関しては

$$x' + ct' = \mu(x + ct)$$

となっていれば良い。ここに、 μ も未定の定数である。上の2式を辺々足したり引いたりすると

$$\begin{aligned} x' &= \gamma x + \rho ct, & ct' &= \gamma ct + \rho x \\ \gamma &\equiv \frac{\lambda + \mu}{2}, & \rho &\equiv \frac{\mu - \lambda}{2} \end{aligned}$$

と整理される。ここで、 $x' = 0$ の点は、上式から

$$0 = \gamma x + \rho ct, \quad \text{すなわち} \quad x = -\frac{\rho}{\gamma} ct$$

となる。 K' 系の原点 $x' = 0$ は、 K 系に対して速さ V で運動していることから、 $x = Vt$ と見比べると

$$\rho = -\frac{V}{c}\gamma$$

と、未定の定数が一つ減る。上で導いた $x' = \dots$ と $ct' = \dots$ の式から ρ を消去すると

$$\begin{aligned} x' &= \gamma x - \gamma \frac{V}{c} ct, \\ ct' &= \gamma ct - \gamma \frac{V}{c} x \end{aligned}$$

となるが、これらの式を逆に解くと

$$\begin{aligned} x &= \frac{x'}{\gamma \left[1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2\right]} + \frac{\left(\frac{V}{c}\right)}{\gamma \left[1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2\right]} ct' \\ ct &= \frac{ct'}{\gamma \left[1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2\right]} + \frac{\left(\frac{V}{c}\right)}{\gamma \left[1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2\right]} x' \end{aligned}$$

と表わされる。これは、 K' 系から K をみていることに対応しており、 K' 系を静止系、 K 系を K' 系に対して x' 軸負の方向に速度 $-V$ で一様に運動している系の変換とみなせるので、 ρ を消去した $x' = \dots$ 、 $ct' = \dots$ の式で、 $x' \leftrightarrow x$ 、 $ct' \leftrightarrow ct$ 、 $V \leftrightarrow -V$ としたものに他ならないので、

$$\begin{aligned} x &= \gamma x' + \gamma \frac{V}{c} ct' \\ ct &= \gamma ct' + \gamma \frac{V}{c} x' \end{aligned}$$

と同じ式であるべきである。よって、比較することにより、未定の γ が決定される。

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}}$$

これをもとの式に戻すことで2つの慣性系間を結ぶ関係を得る。

$$\begin{aligned} x' &= \frac{x - \frac{V}{c} ct}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}}, \\ ct' &= \frac{ct - \frac{V}{c} x}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}} \\ y' &= y, \quad z' = z \end{aligned} \tag{13.1}$$

2つの慣性系間を結ぶ変換 (13.1) をローレンツ変換と呼ぶ。今は、 x 方向のみ運動しているので、 x 方向へのローレンツブーストと呼ぶ。もちろん、 $V/c \rightarrow 0$ の極限で、ローレンツ変換はガリレイ変換に帰着する。すなわち、光速に比べて系の運動の速さが遅いときには、ガリレイ変換、ニュートン力学で十分であり、また、時間はすべての慣性系において共通 ($t' \approx t$) となる。

さて、2つの慣性系間を結ぶ関係が導出できたが、2つの慣性系で不変な量はどのような形を持っているだろうか。3次元空間回転の場合には $x^2 + y^2 + z^2$ が回転不変量であったが、ローレンツ変換では時間の変換も含

み不変ではない。しかしながら 3次元空間回転をも含んでいるので、長さの組み合わせも含まれるであろう。ローレンツ不変な組み合わせは簡単に見つけることができ、

$$s^2 \equiv c^2 t^2 - (x^2 + y^2 + z^2)$$

である。ローレンツ変換を実際に使うと、容易に

$$\begin{aligned} s'^2 &\equiv ct'^2 - (x'^2 + y'^2 + z'^2) \\ &= c^2 t^2 - (x^2 + y^2 + z^2) \\ &\equiv s^2 \end{aligned}$$

であることが確かめられる。 s のことを世界間隔と呼ぶ。

§§13.1.3 ローレンツ変換からの帰結

2つの慣性系間をつなぐローレンツ変換が導いたので、そこから得られる簡単な帰結を紹介しておこう。

2つの慣性系 K 系と K' 系の原点 ($x = 0$, $x' = 0$) に置かれた時計を考えよう。 K 系を静止系と見て、それに対して K' 系は x 方向に速さ V で動いているとする。 K' 系の原点におかれた時計は K 系からみて、速さ V で動くので、 K' 系の原点に置かれた時計の座標は K 系から見ると $x = Vt$ である。ローレンツ変換より

$$\begin{aligned} ct' &= \frac{ct - \frac{V}{c}Vt}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}} \\ &= ct\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2} \end{aligned}$$

である。ここで K' 系の時計の位置 $x = Vt$ を代入している。こうして、 K' 系での時間 t' と、 K 系での時間 t の間には

$$t' = t\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}$$

の関係があることがわかる。すなわち、 $\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2} < 1$ から $t' < t$ であり、静止系に対して運動している慣性系の時間 t' は、静止慣性系の時間 t からみて遅れることがわかる。

次に、 K' 系に固定された長さ l_0 の物体 AB を考える (図 45)。この長さ l_0 は K' 系において測定されており、物体に対して静止した観測者が測定する物体の固有の長さである。物体 AB の両端の位置は、 K' 系で見て x'_2 と x'_1 であり、 $l_0 = x'_2 - x'_1$ となる。この物体の両端の座標を K 系で測定する。 K' 系での座標値に対応し、 K 系ではそれぞれ x_2 , x_1 であり、 K' 系に固定された物体 AB を K 系の観測者が測定した長さ l は、 $l = x_2 - x_1$ となる。ローレンツ変換から、 x'_i と x_i ($i = 1, 2$) には関係があり、代入すると

$$\begin{aligned} l_0 &= x'_2 - x'_1 \\ &= \frac{x_2 - \frac{V}{c}ct}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}} - \frac{x_1 - \frac{V}{c}ct}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}} \\ &= \frac{l}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}} \end{aligned}$$

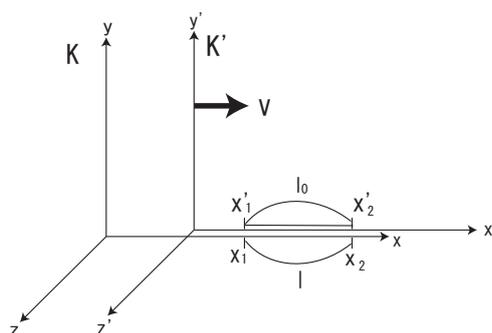


図 45:

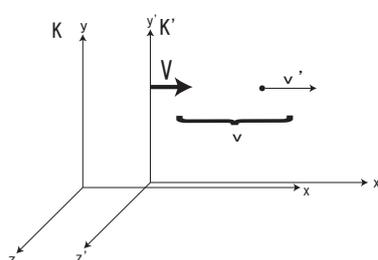


図 46:

が得られる。すなわち、

$$l = l_0 \sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}$$

であり、 $\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2} < 1$ より $l < l_0$ である。すなわち、動いている物体の長さを静止系から測る (l) と、物体固有の長さ (l_0) に比べて縮んで観測されることがわかる。これをローレンツ収縮と呼ぶ。

さて、速度はどのように変換されるだろうか (図 46)。ガリレイ変換では (2.6) であったが、明らかに光速不変の原理に反している。今、 K' 系から K 系を見ると、 K 系は x の負の方向に速さ V で進んでいるので、 K 系が K' 系に対して動く速度は、 $-V$ である。ローレンツ変換の式で $x \leftrightarrow x'$ 、 $t \leftrightarrow t'$ 、 $V \rightarrow -V$ とすればよいので、

$$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}},$$

$$t = \frac{t' + \frac{V}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}}.$$

となる。辺々割り算すると、

$$\frac{x}{t} = \frac{x' + Vt'}{t' + \frac{V}{c^2}x'}$$

$$= \frac{\frac{x'}{t'} + V}{1 + \frac{V}{c^2} \frac{x'}{t'}}$$

となる。ここで、 K 系から見た物体の速さ v は $v = \frac{x}{t}$ であり、 K' 系から見た物体の速さ v' は $v' = \frac{x'}{t'}$ であるので、

$$v = \frac{v' + V}{1 + \frac{Vv'}{c^2}}$$

となる。これが相対論での速度の合成則である。たとえば、 K' 系での光の速さが c であれば、上式に $v' = c$ を代入すれば、 K 系で見た光の速さ v は確かに $v = c$ となることがわかる。すなわち、光速不変の原理を満たしている。もちろん、 $V/c \rightarrow 0$ 、 $v'/c \rightarrow 0$ となるような、光速に比べて物体や慣性系の速さが小さいときには、速度の合成則は (2.6) に戻る。

§ 13.2 相対論的力学

§§13.2.1 最小作用の原理

2章では、ガリレイの相対性原理にもとづき、質点の運動を記述するラグランジアンを構成した。ここでは、アインシュタインの特殊相対性原理にもとづき、力学を構成しなおそう。もちろん、光速を $c \rightarrow \infty$ とすれば通常のニュートン力学に戻るべきである。

1つの自由粒子の運動について考察しよう。我々の行うべきことは、作用を構成することである。物理法則はすべての慣性系で同じ形を取るべきであるので、作用の形は慣性系に依らない。慣性系を結ぶ変換はローレンツ変換であったので、作用はローレンツ変換の下で不変であるべきである。ローレンツ変換で不変な粒子に関する量は、粒子が時間経過とともに運動した世界間隔しかない。すなわち、微小な時間間隔 dt に粒子は微小な変位 (dx, dy, dz) をとったとき、ローレンツ変換で不変な量は、微小な世界間隔 ds であり、

$$ds \equiv \sqrt{(cdt)^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2}$$

である。これが積分の測度となり、ローレンツ変換で不変な作用 S として、

$$\begin{aligned} S &= -\alpha \int ds \\ &= \int \left(-\alpha c \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) dt \\ &\equiv \int dt L, \\ L &\equiv -\alpha c \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 α は後に決める定数であり、便宜上負号を付した。また、 $v = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}/dt$ は粒子の速さである。作用 S を時間積分で表わしたときの被積分関数がラグランジアンであったので、ラグランジアン L を定義した。

光速 c が考えている速さ v に比べて大きいとき、すなわち $v/c \rightarrow 0$ のとき、ローレンツ変換がガリレイ変換に戻ったことから、定数 α はガリレイの相対性原理に基づき構成されたラグランジアンに戻るよう決定される。すなわち、 v/c が小さいとして上のラグランジアンを展開すると、

$$L = -\alpha c \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \approx -\alpha c + \frac{\alpha v^2}{2c}$$

となる。これが、運動に影響しない付加定数を除いて (2.8) に一致するためには、 $\alpha = mc$ ととらなければならない。このとき、 $L \approx -mc^2 + \frac{1}{2}mv^2$ となり、第 1 項の付加定数を除き運動エネルギーの形を持つ。こうして、定数 α が決定されたので、相対論的な作用、及びラグランジアンが決定された。

$$\begin{aligned} S &= -mc \int ds = \int L dt \\ L &= -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \end{aligned} \quad (13.2)$$

§§13.2.2 運動量・エネルギー

運動量は空間並進不変性に基づくものであったので、定義は変わらず、

$$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

となる。実際、 $v/c \ll 1$ のとき、分母は 1 となって、 $\mathbf{p} \sim m\mathbf{v}$ と、非相対論的に得られた運動量の表式に帰着する。

次に、エネルギーを考えよう。エネルギーは時間並進の不変性に基づく物理量であったので、非相対論でも相対論でも定義は変わらず、

$$E \equiv \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (13.3)$$

と得られる。ここで、 $v/c \ll 1$ のときには、

$$E \approx mc^2 + \frac{1}{2}mv^2$$

となり、確かに第 2 項に運動エネルギーが現れる。しかしながら、 $v = 0$ の静止した粒子に対しても (13.3) 式は、

$$E = mc^2$$

となり、静止粒子のエネルギーは零と異なる。すなわち、粒子の質量に光速の 2 乗をかけたエネルギーが常に存在する。これは静止エネルギーと呼ばれる。こうして、相対性理論から質量とエネルギーは等価であり、互いに転換し得るという重要な結論が得られた。これを質量とエネルギーの等価性と呼ぶ。

運動量とエネルギーの表式を組み合わせ得られる関係式を 2 つあげておこう。

$$\begin{aligned} E^2 &= (\mathbf{p}c)^2 + (mc^2)^2 \\ \mathbf{p} &= E \frac{\mathbf{v}}{c^2} \end{aligned}$$

§§13.2.3 一般のローレンツ変換

さて、我々は、2 つの慣性系を結ぶ変換としてローレンツ変換を導いたが、 x 方向に相対して運動する慣性系に限った。そこで、一般に、2 つの慣性系が相対速度 \mathbf{V} で運動している場合のローレンツ変換を形式的に書き下しておこう。

ローレンツ変換で不変な量は、世界間隔 $ds^2 \equiv c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$ であった。そこで、世界間隔を不変にする一般的な変換の形式を書くことを目標にする。

まず、世界間隔は、 $dx^{\mu=0} \equiv cdt$ 、 $dx^1 \equiv dx$ 、 $dx^2 \equiv dy$ 、 $dx^3 \equiv dz$ として、

$$ds^2 = \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\nu=0}^3 g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \equiv g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

と書ける。ここで、 $g_{\mu\nu}$ は計量テンソルと呼ばれ、今の場合

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と定義される。また、最右辺は繰り返す添え字については0から3まで和をとるという規約を用いる（アインシュタインの規約）。また、

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

も定義しておく。

ここで、一般に

$$\begin{aligned} X^\mu &\equiv (X^0, \mathbf{X}), \\ X_\mu &\equiv g_{\mu\nu} X^\nu = (X^0, -\mathbf{X}) \end{aligned}$$

という4元ベクトルを導入する。ここで、 \mathbf{X} は3次元空間の回転に対する3次元ベクトルである。上付き添え字を持つ X^μ を反変ベクトル、下付添え字を持つ X_μ を共変ベクトルと呼ぶ。これらを用いると、世界間隔は

$$ds^2 = dx_\mu dx^\mu$$

とも書き表される。これを見ると、添え字の上、下は計量テンソル $g_{\mu\nu}$ 、 $g^{\mu\nu}$ で移動させることができることがわかる。また、

$$g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = \delta_\mu^\nu \equiv \begin{cases} 1 & (\mu = \nu) \\ 0 & (\mu \neq \nu) \end{cases}$$

となる。ここで、 δ_μ^ν はクロネッカーのデルタである。

一般のローレンツ変換は、新しい慣性系の座標をプライムを付けて表すと、

$$dx^{\mu'} = \sum_{\nu=0}^3 \Lambda^{\mu'}_\nu dx^\nu \equiv \Lambda^{\mu'}_\nu dx^\nu$$

と書き表わすことができる。ここで、 $\Lambda^{\mu'}_\nu$ は変換を表す量であり、 μ, ν は0から3まで走る。本章では、ギリシャ文字の添え字は0から3までの値をとるとしよう。この Λ の満たす性質を見よう。ローレンツ変換は世界間隔を不変にする変換であった。一般に、4元ベクトルのノルム（長さ） $X_\mu X^\mu$ を不変に保つ。今、 $X^\mu = dx^\mu$ と考えておけばよい。ローレンツ変換後の4元ベクトルのノルム $X'_\mu X'^\mu$ は変換前のノルム $X_\mu X^\mu$ と等しくなるのがローレンツ変換であったので、

$$\begin{aligned} X'_\mu X'^\mu &= g_{\mu\nu} X'^\mu X'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma X^\rho X^\sigma \\ &\equiv g_{\rho\sigma} X^\rho X^\sigma \end{aligned}$$

が成り立つはずである。こうして、ローレンツ変換を表す行列 Λ に対して、条件

$$g_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma = g_{\rho\sigma} \quad (13.4)$$

が課せられる。両辺に $g^{\tau\rho}$ をかけて、 ρ について和をとり、 $g^{\mu\nu}g_{\nu\rho} = \delta^\mu_\rho$ の関係を用いると、

$$\Lambda_\nu^\tau\Lambda^\nu_\sigma = \delta^\tau_\sigma, \\ \text{すなわち} \quad \Lambda_\nu^\tau = (\Lambda^{-1})^\tau_\nu$$

となる。これが、ローレンツ変換 Λ の従うべき条件である。ローレンツ変換 Λ^μ_ν は 4×4 行列で 16 個の成分があるが、条件式 (13.4) は $g_{\mu\nu}$ が μ, ν に対して対称であることから 10 個の条件式を与える。従って、 Λ^μ_ν のうち独立な成分は 6 個となる。このうち 3 個は時間変数を変換しない 3 次元空間の回転であり、残りの 3 つが x 方向、 y 方向、 z 方向へのローレンツブーストである。

§§13.2.4 ローレンツスカラー・ベクトル・テンソル

ローレンツ変換のもとで不変な量を (ローレンツ) スカラーと呼ぶ。

$$C' = C$$

たとえば、世界間隔はスカラー量である。また、時空座標の関数 $C(x)$ に対してローレンツ変換のもとで

$$C'(x') = C(x)$$

となる量を、スカラー場と呼ぶ。

ローレンツ変換に対して

$$X'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} X^\nu = \Lambda^\mu_\nu X^\nu, \\ X'_\mu = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} X_\nu = \Lambda_\mu^\nu X_\nu$$

と変換される量 X^μ 、 X_μ をそれぞれ反変ベクトル、共変ベクトルと呼ぶ。また、

$$X'^\mu(x') = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} X^\nu(x), \\ X'_\mu(x') = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} X_\nu(x)$$

となる量をそれぞれ、反変ベクトル場、共変ベクトル場と呼ぶ。

添え字が複数ついている量は、一般にテンソルと呼ばれる。たとえば、

$$G'^{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\rho} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma} G^{\rho\sigma}(x)$$

と変換される量は、2 階反変テンソル場と呼ばれる。

§§13.2.5 ローレンツ群

ローレンツ変換は群を為している。ローレンツ変換 Λ^μ_ρ と計量テンソル $g_{\mu\nu}$ には (13.4) の関係があるので、両辺の行列式をとることと、 $\rho = \sigma = 0$ ととることから、

$$\det\Lambda = \pm 1, \\ (\Lambda^0_0)^2 = 1 + \sum_{i=1}^3 (\Lambda^i_0)^2 \geq 1$$

が得られる。よって、ローレンツ変換は4つの連結成分に分けられる。

- (1) $\det\Lambda = 1$, $\Lambda^0_0 \geq 1$, 単位元 1 に連結
- (2) $\det\Lambda = -1$, $\Lambda^0_0 \geq 1$, 空間反転 P に連結
- (3) $\det\Lambda = -1$, $\Lambda^0_0 \leq -1$, 時間反転 T に連結
- (4) $\det\Lambda = 1$, $\Lambda^0_0 \leq -1$, 空間時間反転 PT に連結

ここで、空間反転 P と時間反転 T は、

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

である。以後、(1) の場合のみ考える。このローレンツ変換は本義ローレンツ変換と呼ばれる。

「リー群とリー代数」の節で述べられたことを参照しよう。まずは無限小変換を考える。変換しないときには $\Lambda^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu$ のように対角成分のみ 1 であり、 $x'^\mu = x^\mu$ となる。よって、無限小変換を

$$\Lambda^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu + \epsilon^\mu_\nu$$

と書こう。このとき、(13.4) に代入し、 ϵ^μ_ν の 1 次までとると

$$\epsilon_{\mu\nu} + \epsilon_{\nu\mu} = 0$$

すなわち、 $\epsilon_{\mu\nu}$ は反対称であることが示される。こうして、独立な成分は 6 つであることがわかる。このとき、ローレンツ変換はアインシュタインの規約を用いて

$$\begin{aligned} x'^\mu &= \Lambda^\mu_\nu x^\nu = x^\mu + \epsilon^\mu_\nu x^\nu \equiv \left(1 - \frac{i}{2} \epsilon^{\rho\sigma} M_{\rho\sigma}\right)^\mu_\nu x^\nu \\ (M_{\rho\sigma})^\mu_\nu &\equiv i(\delta_\rho^\mu g_{\sigma\nu} - \delta_\sigma^\mu g_{\rho\nu}) \\ 1^\mu_\nu &\equiv \delta^\mu_\nu \end{aligned}$$

と表わすことができる。直接の計算から

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = -i(g_{\mu\rho} M_{\nu\sigma} - g_{\nu\rho} M_{\mu\sigma} - g_{\mu\sigma} M_{\nu\rho} + g_{\nu\sigma} M_{\mu\rho})$$

を示すことができる。こうして、 $M_{\mu\nu}$ に関する交換子は閉じており、この交換関係は $so(3,1)$ 代数の生成子が満たすものとなっている。リー群、リー代数の言葉では

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda} &= \exp\left(-\frac{i}{2} \epsilon^{\rho\sigma} \hat{M}_{\rho\sigma}\right) \approx 1 - \frac{i}{2} \epsilon^{\rho\sigma} \hat{M}_{\rho\sigma}, \\ [\hat{M}_{\mu\nu}, \hat{M}_{\rho\sigma}] &= -i(g_{\mu\rho} \hat{M}_{\nu\sigma} - g_{\nu\rho} \hat{M}_{\mu\sigma} - g_{\mu\sigma} \hat{M}_{\nu\rho} + g_{\nu\sigma} \hat{M}_{\mu\rho}) \end{aligned}$$

$\{\hat{\Lambda}\}$ は $SO(3,1)$ 群の元であり、 $\hat{M}_{\rho\sigma}$ はリー代数 $so(3,1)$ の生成子、 $(M_{\rho\sigma})^\mu_\nu$ はその表現行列である。

さて、リー代数 $so(3,1)$ の生成子から

$$\begin{aligned} J_i &\equiv \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{M}^{jk} = (\hat{M}_{23}, \hat{M}_{31}, \hat{M}_{12}), \\ K_i &\equiv \hat{M}_{i0} (= -\hat{M}_{0i}) \quad (i, j, k = 1, 2, 3) \end{aligned}$$

を定義しよう。ここで、 ϵ_{ijk} は $(i, j, k) = (1, 2, 3)$ の偶置換のときは 1、奇置換のときは -1、それ以外は 0 である完全反対称テンソルである。このとき、交換子は

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k, \quad [J_i, K_j] = i\epsilon_{ijk}K_k, \quad [K_i, K_j] = -i\epsilon_{ijk}J_k$$

と計算される。ここで、繰り返すラテン添え字は 1 から 3 まで和をとることを意味する。生成子 $\{J_i\}$ は $su(2)$ 代数を満たし、3次元回転の生成子を与える。また、 $\{K_i\}$ はローレンツ・ブーストの生成子である。こうして、ローレンツ変換群要素は

$$\hat{\Lambda} = \exp(i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{J} + i\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{K})$$

と書ける。ここで、 $\boldsymbol{\theta} = -(\epsilon_{23}, \epsilon_{31}, \epsilon_{12})$ 、 $\boldsymbol{\beta} = (\epsilon_{10}, \epsilon_{20}, \epsilon_{30})$ とおいた。具体的に行列表示を書き下しておこう。空間回転に関して、1 軸周りの回転は

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ 0 & 0 & -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \theta_1 \\ 0 & 0 & -\theta_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = (1 + i\theta_1 J_1)X$$

および、これと同様にして J_i を定義すると、

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。ローレンツブーストに関しては、1 軸方向へのローレンツ変換は

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} & -\frac{\beta_1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} & 0 & 0 \\ \frac{\beta_1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} & \frac{1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & -\beta_1 & 0 & 0 \\ -\beta_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \\ = (1 + i\beta_1 K_1)X$$

及び、同様な計算で K_2 、 K_3 を定義すると

$$K_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

が得られる。このとき、この行列表現から、 J_i 、 K_i は $so(3,1)$ 代数の交換関係を満足することは容易に確かめられる。

さらに、

$$\mathbf{A} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{J} + i\mathbf{K}), \quad \mathbf{B} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{J} - i\mathbf{K})$$

を定義すると、 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} の間の交換関係は

$$[A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk}A_k, \quad [B_i, B_j] = i\epsilon_{ijk}B_k, \quad [A_i, B_j] = 0$$

が得られる。こうして、ローレンツ群 $so(3,1)$ は 2 つの $su(2)$ 代数の積として表現される[‡]。

§§13.2.6 4元形式でのエネルギー、運動量

まず、固有時 τ を、ローレンツ不変な量として導入する。

$$ds = cd\tau, \quad d\tau = dt\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

固有時は明らかにローレンツスカラーである。この固有時を用いて、4元ベクトルとしての4元速度 u^μ を導入しよう。

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \left(\frac{c}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right)$$

定義から、 $u_\mu u^\mu = c^2$ となる。ここで、 dx^μ は4元ベクトル、 $d\tau$ はスカラーであるので、4元速度 u^μ はローレンツ変換に対して4元ベクトルとして振舞う。今、 $p^\mu \equiv mu^\mu$ も4元ベクトルであり、

$$\begin{aligned} p^\mu &\equiv mu^\mu = \left(\frac{mc}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) \\ &= \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \end{aligned}$$

となる。ここで、 E はエネルギー、 \mathbf{p} は3次元の運動量ベクトルである。こうして、エネルギー、運動量はあわせて4元ベクトルを構成する。ここで、

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2$$

という関係式が得られる。ここで m は粒子の質量であり、ローレンツスカラー量である。

さて、4元力 F^μ を導入し、粒子の“運動方程式”を

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = F^\mu$$

と書き下してみよう。固有時 $d\tau$ は $d\tau = dt\sqrt{1 - v^2/c^2}$ であったので、上の“運動方程式”の空間成分 ($\mu = 1, 2, 3$) は

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \mathbf{F}$$

となるが、ニュートン力学での力 \mathbf{f} は $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}$ を満たすものであったので、上の式は

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f} &= \mathbf{F} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \\ \mathbf{F} &\equiv \frac{\mathbf{f}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

[‡]数学的にはコンパクトな4次元回転群 $o(4)$ が $su(2) \times su(2)$ と同型であり、非コンパクトな $so(3,1)$ は $su(2) \times su(2)$ には数学的な意味では同型ではないが、表現を作るときには便利である。

と書き直される。時間成分 ($\mu = 0$) については

$$\frac{dE}{dt} \frac{1}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = F^0$$

と書き直されるが、エネルギー E の時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{d}{dt} \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = \frac{1}{\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}} c^2 \mathbf{p} \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} \\ &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} \end{aligned}$$

となる。ここで、§§11.2.2 で示した関係式 $c^2 \mathbf{p}/E = \mathbf{v}$ 、及びニュートン方程式を用いてニュートンの力 \mathbf{f} を用いた。この式は、エネルギーの時間微分が仕事率に等しいという式そのものである。

こうして、4元力 F^μ は3次元的な力 \mathbf{f} と粒子の速度 \mathbf{v} を用いて、

$$F^\mu = \left(\frac{\mathbf{f} \cdot \mathbf{v}}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \frac{\mathbf{f}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right)$$

と表されることがわかる。

§§13.2.7 粒子の崩壊・融合・衝突

質量 M の物体が、質量 m_1 と m_2 の2つの物体に崩壊したとしよう。もちろん、エネルギー保存法則から $M > m_1 + m_2$ でなければこの過程は生じない。崩壊前の粒子が静止している座標系で考えよう。崩壊後の粒子のエネルギーをそれぞれ E_{10} 、 E_{20} 、運動量を \mathbf{p}_{10} 、 \mathbf{p}_{20} とし、エネルギーと運動量の保存法則から、

$$\begin{aligned} Mc^2 &= E_{10} + E_{20}, \\ 0 &= \mathbf{p}_{10} + \mathbf{p}_{20}, \quad \text{すなわち} \quad E_{10}^2 - m_1^2 c^4 = E_{20}^2 - m_2^2 c^4 \end{aligned}$$

となる。ここで、運動量保存法則の第2の表式は、 $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ の関係を用いている。以上の式から、崩壊後の粒子のエネルギーは

$$E_{10} = \frac{M^2 + m_1^2 - m_2^2}{2M} c^2, \quad E_{20} = \frac{M^2 - m_1^2 + m_2^2}{2M} c^2$$

と得られる。

今度は崩壊の逆過程、2つの粒子の融合を考えよう。すなわち、質量 m_1 の粒子1と質量 m_2 の粒子2の2つの粒子が融合して質量 M の粒子になったとする。実験室系では粒子2が静止していて、そこに粒子1が E_1 のエネルギー、 \mathbf{p}_1 の運動量を持って入射してきたものとする。系の全エネルギー E と全運動量 \mathbf{p} は、

$$\begin{aligned} E &= E_1 + m_2 c^2, \\ \mathbf{p} &= \mathbf{p}_1 \end{aligned}$$

である。ここで、 $E^2 - \mathbf{p}^2 c^2$ はローレンツ変換でスカラー量として振る舞うので、ローレンツ変換の下で不変である。実験室系から慣性中心系にローレンツ変換すると、 $E^2 - \mathbf{p}^2 c^2 \equiv M^2 c^4$ としたときの M は慣性中心系で静止している融合後の粒子の質量である。よって、

$$\begin{aligned} M^2 c^4 &= E^2 - \mathbf{p}^2 c^2 = (E_1 + m_2 c^2)^2 - \mathbf{p}_1^2 c^2 \\ &= (E_1^2 - \mathbf{p}_1^2 c^2) + (m_2 c^2)^2 + 2m_2 c^2 E_1 \end{aligned}$$

であるが、 $(E_1^2 - \mathbf{p}^2 c^2) = m_1^2 c^4$ であることに気づくと、結局、融合後の粒子の質量は融合前の2粒子の質量と実験室系での入射エネルギー E_1 で決まり、

$$M^2 = m_1^2 + m_2^2 + 2m_2 \frac{E_1}{c^2}$$

となる。また、慣性中心の速度、すなわち実験室系で見た融合後の粒子の速度 \mathbf{V} は

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{p}c^2}{E} = \frac{\mathbf{p}_1 c^2}{E_1 + m_2 c^2}$$

となっている。

最後に、質量 m_1 の粒子1と質量 m_2 の粒子2の2つの粒子の弾性衝突を考えよう。弾性衝突であるので、エネルギーは散逸しない。そこで、衝突前の4元運動量を p_1^μ 、 p_2^μ と書き、衝突後のそれを $p_1'^\mu$ 、 $p_2'^\mu$ とすると、エネルギー・運動量の保存則から

$$p_1^\mu + p_2^\mu = p_1'^\mu + p_2'^\mu$$

である。実験室系では静止した粒子2に粒子1が入射してきて衝突が起きたものとしよう。すなわち、

$$p_2^0 = \frac{E_2}{c} = m_2 c, \quad p_2^i = 0 \quad (i = 1, 2, 3)$$

4元運動量の保存の式から、2乗をとると

$$(p_1^\mu + p_2^\mu - p_1'^\mu)^2 = (p_2'^\mu)^2$$

が得られるが、 $\sum_\mu p_1^\mu p_{1\mu} = \sum_\mu p_1'^\mu p_{1\mu} = m_1^2 c^2$ 、 $\sum_\mu p_2^\mu p_{2\mu} = \sum_\mu p_2'^\mu p_{2\mu} = m_2^2 c^2$ の関係を用いると、

$$m_1^2 c^2 + \sum_{\mu=0}^3 p_{1\mu} p_2^\mu - \sum_{\mu=0}^3 p_{1\mu} p_1'^\mu - \sum_{\mu=0}^3 p_{2\mu} p_1'^\mu = 0$$

と変形できる。ここで、実験室系では、粒子1の衝突前の運動量 \mathbf{p}_1 と衝突後の運動量 \mathbf{p}_1' のなす散乱角を θ_1 とし、

$$\begin{aligned} \sum_\mu p_{1\mu} p_2^\mu &= p_{10} p_2^0 = E_1 m_2, & \sum_\mu p_{2\mu} p_1'^\mu &= p_{20} p_1'^0 = E_1' m_2, \\ \sum_\mu p_{1\mu} p_1'^\mu &= \frac{E_1 E_1'}{c^2} - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_1' = \frac{E_1 E_1'}{c^2} - |\mathbf{p}_1| |\mathbf{p}_1'| \cos \theta_1 \end{aligned}$$

となっているので、代入して、

$$\cos \theta_1 = \frac{E_1' (E_1 + m_2 c^2) - E_1 m_2 c^2 - m_2^2 c^4}{|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'| c^2}$$

が得られる。同様に、入射粒子1の衝突前の進行方向から、1の衝突により粒子2が散乱される角 θ_2 は

$$\cos \theta_2 = \frac{(E_1 + m_2 c^2)(E_2' - m_2 c^2)}{|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2'| c^2}$$

と得られる。

§ 13.3 電磁場中の粒子の力学

§§13.3.1 電磁場との相互作用

電磁場中の粒子の運動を考えよう。自由粒子のラグランジアンは相対論的に構成することができた。電磁場に関しては、古典的には電磁場の振動で現れる電磁波の速度は光速 c であるので、電磁場を考える際には相対論的に扱うことを免れることはできない。そこで、電磁場を特徴付ける場を 4 元ベクトル場 $A^\mu(x)$ として記述しよう。粒子に関する 4 元ベクトルは dx^μ しかないので、粒子と電磁場から作られる相対論的に不変な量のうち最も簡単なものは、2 つの 4 元ベクトルの“内積”、 $A_\mu(x)dx^\mu$ である。そこで、粒子と電磁場との相互作用を q で特徴付けることにしよう。この q のことを、粒子の持つ電荷と呼ぶ。例えば、陽子の持つ電荷は e 、電子のそれは $-e$ である。ここで、 e は素電荷と呼ばれ、

$$e = 1.6021764 \times 10^{-19} \text{ C}$$

という値を持つ。こうして、自由粒子の作用に付け加える電磁相互作用の作用 S_{int} は

$$S_{\text{int}} = -q \int A_\mu(x) dx^\mu$$

となる。便宜上、負号をつけた。ここで、電磁場を表す 4 元ベクトルを、時間成分と空間成分にわけて、

$$A^\mu(x) = \left(\frac{\phi(x)}{c}, \mathbf{A}(x) \right), \quad A_\mu(x) = \left(\frac{\phi(x)}{c}, -\mathbf{A}(x) \right)$$

とする。ここで導入した $\phi(x)$ 、 $\mathbf{A}(x)$ はそれぞれスカラーポテンシャル、ベクトルポテンシャルと呼ばれる。こうして、作用、及びラグランジアンは

$$\begin{aligned} S &= \int (-mcds - qA_\mu(x)dx^\mu) \\ &= \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + q\mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{v} - q\phi(x) \right) dt \\ &\equiv \int L dt \end{aligned} \tag{13.5}$$

$$L \equiv -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + q\mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{v} - q\phi(x) \tag{13.6}$$

と得られる。ここで、 $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}$ は粒子の速度である。

電磁場中の粒子の運動方程式は、最小作用の原理から得られるオイラー・ラグランジュ方程式により与えられる。

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}}$$

具体的に計算を実行しよう。右辺は

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = q \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{v}) - q \frac{\partial \phi(x)}{\partial \mathbf{r}}$$

であるが、ベクトル解析の公式

$$\text{grad}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{a} + \mathbf{b} \times \text{rot } \mathbf{a} + \mathbf{a} \times \text{rot } \mathbf{b}$$

と、 $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}} = 0$ とから、

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = q(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} + q\mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A} - q\nabla\phi$$

と変形できる。運動方程式の左辺については、 $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{p} + q\mathbf{A}$ となるので、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{p} + q\mathbf{A}) = q(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} + q\mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A} - q \text{grad } \phi$$

とまとまる。さらに、時間についての全微分は

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{A}(x)}{dt} &= \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{A} \\ &= \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} \end{aligned}$$

となるので、結局、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + q\mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A} - q\nabla\phi$$

となる。右辺の“力”の部分で、粒子の速度に依存しない力と速度に依存する力の部分に分割し、最終的に次の運動方程式を得る。

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E}(x) + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}(x) \quad (13.7)$$

$$\mathbf{E}(x) \equiv -\nabla\phi(x) - \frac{\partial \mathbf{A}(x)}{\partial t}$$

$$\mathbf{B}(x) \equiv \text{rot } \mathbf{A}(x) \quad (13.8)$$

式(13.7)の右辺の力をローレンツ力と呼ぶ。また、 $\mathbf{E}(x)$ を電場、 $\mathbf{B}(x)$ を磁束密度と呼ぶ。粒子の速度が光速に近く、相対論的に扱う際には $\mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1-v^2/c^2}$ であるが、粒子の速度 v が光速 c に比べて小さい場合には非相対論的な $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ を用いて運動を扱えば十分である。非相対論的な範囲で、系のハミルトニアンを求めよう。ラグランジアン(13.6)式は、非相対論的な近似では、 $\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \approx 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{v^2}{c^2}$ より

$$L \equiv -mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + q\mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{v} - q\phi(x)$$

となる。定数 $-mc^2$ は運動方程式に寄与しないので落とす。正準運動量 \mathbf{p} は

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}(x)$$

となるので、はハミルトニアン H は定義により

$$\begin{aligned} H &= \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L \\ &= \mathbf{p} \cdot \left(\frac{\mathbf{p} - q\mathbf{A}}{m} \right) - \frac{1}{2}m \left(\frac{\mathbf{p} - q\mathbf{A}}{m} \right)^2 - q\mathbf{A} \cdot \left(\frac{\mathbf{p} - q\mathbf{A}}{m} \right) + q\phi(x) \\ &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(x))^2 + q\phi(x) \end{aligned} \quad (13.9)$$

と書ける。この表式は電磁場中での荷電粒子の非相対論的な運動の記述に用いられる。

§§13.3.2 4元形式での運動方程式

前小節で導いた電磁場中の粒子の運動方程式を、4元形式のまま導出してみよう。4元形式で書かれた作用から出発する。

$$S = \int (-mc ds - qA_\mu dx^\mu)$$

作用が最小、すなわち $\delta S = 0$ から運動方程式が導かれる。今、 $ds = \sqrt{dx_\mu dx^\mu}$ 、 $\delta ds = \frac{dx_\mu \delta(dx^\mu)}{ds}$ 、 $\delta A_\mu = \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} \delta x^\nu$ より、

$$\delta S = - \int \left(mc \frac{dx_\mu \delta dx^\mu}{ds} + qA_\mu \delta dx^\mu + q \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} dx^\mu \delta x^\nu \right) = 0$$

である。右辺の被積分関数の第2項と第3項を部分積分し、表面項は零であることを用いる。また、第3項で和の記号を μ を ν 、 ν を μ と書き直す。さらに、4元速度 u_μ を利用して $\frac{dx_\mu}{ds} = \frac{1}{c} \frac{dx_\mu}{d\tau} = \frac{1}{c} u_\mu$ であることから、

$$\delta S = - \int \left(m du_\mu - q dA_\mu + q \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} dx^\nu \right) \delta x^\mu = 0$$

と書き換えられる。さらに第2項は $dA_\mu = \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu$ より、全体を $d\tau$ で割った後に再び掛けて

$$\delta S = - \int \left(m \frac{du_\mu}{d\tau} - q \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} \right) u^\nu \right) \delta x^\mu d\tau = 0$$

が得られる。任意の δx^μ に対して成り立つので、オイラー・ラグランジュ方程式として、

$$m \frac{du_\mu}{d\tau} = -q F_{\mu\nu} u^\nu \quad (13.10)$$

$$F_{\mu\nu} \equiv \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} \quad (13.11)$$

が得られる。もちろん、これは (13.7) と同じ運動方程式である。ここで定義した $F_{\mu\nu}$ は電磁場テンソルであり、具体的に書くと

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E_x}{c} & \frac{E_y}{c} & \frac{E_z}{c} \\ -\frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ -\frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ -\frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

と、先に定義した電場、磁束密度の成分で表される。明らかに $F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$ の関係がある反対称テンソルである。

§§13.3.3 ゲージ不変性

4元形式で書かれた運動方程式 (13.10) は、時空座標のローレンツスカラーの任意関数 $f(x)$ を用いた次の変換

$$A_\mu \longrightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \frac{\partial f(x)}{\partial x^\mu} \quad (13.12)$$

に対して不変である。この変換をゲージ変換と呼ぶ。実際、ゲージ変換に対して電磁場テンソル $F_{\mu\nu}$ が不変であるので、運動方程式も形を変えない。電磁場テンソル $F_{\mu\nu}$ がゲージ変換の下で不変であることは、微分 $\partial/\partial x^\mu$ がすべての μ に対し可換であることから簡単に示される。時間成分であるスカラーポテンシャル、空間成分であるベクトルポテンシャルの言葉でゲージ変換を見ると、

$$\begin{aligned}\phi'(x) &= \phi(x) - \frac{\partial f(x)}{\partial t}, \\ \mathbf{A}'(x) &= \mathbf{A}(x) + \nabla f(x)\end{aligned}$$

となっている。もちろん、

$$\begin{aligned}\mathbf{E}'(x) &= -\nabla\phi'(x) - \frac{\partial\mathbf{A}'(x)}{\partial t} \\ &= -\nabla\left(\phi(x) - \frac{\partial f}{\partial t}\right) - \left(\frac{\partial\mathbf{A}(x)}{\partial t} + \frac{\partial\nabla f}{\partial t}\right) \\ &= -\nabla\phi(x) - \frac{\partial\mathbf{A}(x)}{\partial t} \\ &= \mathbf{E}(x) \\ \mathbf{B}'(x) &= \text{rot } \mathbf{A}'(x) \\ &= \text{rot } (\mathbf{A}(x) + \nabla f(x)) = \text{rot } \mathbf{A}(x) \\ &= \mathbf{B}(x)\end{aligned}$$

となり、電場、磁束密度はゲージ変換で不変である。

この事実を用いて、自然界はゲージ変換に対して不変である、と考える。これを基礎原理にとり、ゲージ原理と呼ぶ。

§§13.3.4 電磁場の方程式

電磁場を表す電磁ポテンシャルとして A_μ を導入したが、運動方程式に現れる電場、磁束密度はゲージ変換に対して不変であった。また、作用自身も

$$\begin{aligned}S_{\text{int}} &= -q \int A_\mu dx^\mu \longrightarrow \\ S'_{\text{int}} &= -q \int A'_\mu dx^\mu = -q \int \left(A_\mu - \frac{\partial f}{\partial x^\mu} \right) dx^\mu \\ &= -q \int A_\mu dx^\mu + qf|_{\text{表面項}} = -q \int A_\mu dx^\mu = S_{\text{int}}\end{aligned}$$

となって不変である。

今度は、電磁場のみからなる項を作用の一部として考えよう。粒子との電磁相互作用と同じく、ローレンツ不変であり、かつゲージ変換に対して不変であるように作用を考える。最も簡単な組み合わせとして、 $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ が考えられる。電磁テンソル $F_{\mu\nu}$ 自身はゲージ不変である。そこで、作用として、

$$S = - \int mc ds - q \int A_\mu dx^\mu - \frac{\epsilon_0 c}{4} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^4x$$

と、第3項を加えよう。ここで、 ϵ_0 は未定の定数であり、便宜上、光速 c とともに入れた。後の便宜のため、電荷が連続的に分布している場合を考えよう。電荷 q を電荷密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ に置き換えるのであるが、電荷密度は

単位体積あたりの電荷量であるので、3次元体積がローレンツ不変な量でないことから、電荷密度はローレンツスカラーではなく、4元ベクトルの時間成分と同じ変換を受ける[§]。こうして、上の作用を書き直すと

$$\begin{aligned} S &= -\sum \int mc ds - \int \rho(x) dV A_\mu dx^\mu - \frac{\epsilon_0 c}{4} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^4x \\ &= -\sum \int mc ds - \frac{1}{c} \int \rho(x) A_\mu \frac{dx^\mu}{dt} d^4x - \frac{\epsilon_0 c}{4} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^4x \end{aligned}$$

となる。ここで、第1項は電荷分布を形作る粒子についての和をとることを意味している。第2項は cdt で割っておいて、ローレンツ不変な4次元体積 $cdt \cdot dV = d^4x$ で書いた。ここで、4元電流 j^μ を導入しておく。

$$j^\mu(x) \equiv \rho(x) \frac{dx^\mu}{dt} = (c\rho(x), \mathbf{j}(x)), \quad \mathbf{j}(x) \equiv \rho(x)\mathbf{v} = \rho(x) \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

4元電流を用いると、作用は、

$$S = -\sum \int mc ds - \frac{1}{c} \int A_\mu j^\mu d^4x - \frac{\epsilon_0 c}{4} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^4x \quad (13.13)$$

と得られる。ここで、2階反変テンソルで書かれた電磁場テンソルは、定義により

$$F^{\mu\nu} = g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} F_{\rho\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

と得られる。

さて、電磁場自身が満たす方程式を、(13.13)の作用から導こう。力学の運動方程式を導く際には、粒子の位置に関する変分 $\delta S = 0$ からオイラー・ラグランジュ方程式が導かれたが、今度は、場 A_μ の変分に関して作用が最小であるという最小作用の原理を要請しよう。場の変分から場の方程式が導出される。すなわち、

$$\frac{\delta S}{\delta A^\mu} = 0$$

を考えることになる。これからは、 $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ を ∂_μ と書こう。確かに反変ベクトル x^μ での偏微分は、共変ベクトルの変換性を示すことは容易に確かめられる。この表記では電磁場テンソルは $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ と書ける。作用の第3項の A に関する変分は

$$\begin{aligned} \delta \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^4x &= 2 \int F^{\mu\nu} \delta F_{\mu\nu} d^4x = 2 \int F^{\mu\nu} (\partial_\mu \delta A_\nu - \partial_\nu \delta A_\mu) d^4x \\ &= -2 \int [(\partial_\mu F^{\mu\nu}) \delta A_\nu - (\partial_\nu F^{\mu\nu}) \delta A_\mu] d^4x \\ &= 4 \int (\partial_\nu F^{\mu\nu}) \delta A_\mu d^4x \end{aligned}$$

となる。ここで、1行目から2行目へは部分積分と表面項は零になることを用い、2行目から3行目へは被積分関数の第1項で和の添え字を $\mu \leftrightarrow \nu$ の入れ替えを行なった後に電磁場テンソルの反対称性 ($F^{\nu\mu} = -F^{\mu\nu}$) を用いた。こうして、作用 (13.13) の A_μ に関する変分から、

$$\delta S = - \int \left(\frac{1}{c} j^\mu + c\epsilon_0 \partial_\nu F^{\mu\nu} \right) \delta A_\mu d^4x = 0$$

[§]4次元体積 d^4x はローレンツ不変である。また電荷 ρdV もローレンツ不変である。ここで、 $dV = d^3x$ は体積素片である。従って、 ρ 自身は時間成分 dx^0 と同じ変換を受けるべきである。

が得られ、任意の δA_μ に対して作用が最小であることから、

$$\partial_\nu F^{\mu\nu} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} j^\mu \quad (13.14)$$

が得られる。これは Maxwell 方程式の第 2 の組と呼ばれる電磁場の方程式を与える。ここで、 $\mu = 0$ の時間成分と、 $\mu = i = 1, 2, 3$ の空間成分をとると、電磁場テンソル、4 元電流をあからさまに書いて

$$\begin{aligned} \mu = 0 ; & \quad -\frac{1}{c} \operatorname{div} \mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} c\rho \\ \mu = i : & \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \operatorname{rot} \mathbf{B} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j} \end{aligned}$$

となる。ここで、新たに

$$\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \equiv \mu_0, \quad \text{すなわち} \quad c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$$

を満たす μ_0 を導入する。ここで、 ϵ_0 を真空の誘電率、 μ_0 を真空の透磁率と呼ぶ。値は実験的に決定すべきものである。また、

$$\mathbf{D}(x) \equiv \epsilon_0 \mathbf{E}(x), \quad \mathbf{H}(x) \equiv \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(x) \quad (13.15)$$

により、電束密度 \mathbf{D} 、磁場 \mathbf{H} を定義すると、上のマクスウェル方程式の第 2 の組は

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D}(x) &= \rho(x), \\ \operatorname{rot} \mathbf{H}(x) &= \mathbf{j}(x) + \frac{\partial \mathbf{D}(x)}{\partial t} \end{aligned} \quad (13.16)$$

と表される。一方、電場、磁束密度の定義 $\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ 、 $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$ と、数学の恒等式 $\operatorname{rot} \operatorname{grad} \phi = \nabla \times \nabla \phi = 0$ 、 $\operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{A} = \nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = 0$ から、

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E}(x) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(x)}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{B}(x) &= 0 \end{aligned} \quad (13.17)$$

が得られる。これをマクスウェル方程式の第 1 の組と呼ぶ。

真空中での電磁場の方程式は (13.15)~(13.17) で決定される。物質中では真空の誘電率、真空の透磁率の代わりに物質の誘電率 ϵ 、物質の透磁率 μ に変えた一連の式が得られる。

14章 一般相対論と重力場の方程式

§14.1 等価原理

特殊相対論では、互いに一定の速度で運動する慣性系の間の変換が求められた。そこではすべての慣性系で物理法則は同じであるべきであるというアインシュタインの特殊相対性原理に基づき、物理法則が構築されたが、本来、座標系は我々が持ち込むものである。慣性系のみならず、すべての座標系で物理法則は同じであるはずであろう。非相対論の場合に非慣性系での運動を扱ったが、ここでは相対論的な一般座標を考察しよう。

まず、重力の特殊性を考えておく。簡単のため、地表面付近での運動を考えよう。もちろん、以下の議論は一般の重力場でも成り立つ。地表面付近では、物体は下向きの重力 $m_G g$ を受ける。ここで、 g は重力加速度であり、 m_G は重力に反応する物質固有の量としての重力質量を表わす。この重力のもとで、物体は加速度 $\frac{d^2 z}{dt^2}$ を受ける。物体固有の持つ慣性（動きにくさ）を m_I と表わし、慣性質量* と呼ぶ。鉛直上向きを z 軸の正方向とすると、運動方程式は

$$m_I \frac{d^2 z}{dt^2} = -m_G g$$

となる。今、加速度を持って動く座標系での鉛直方向の座標軸を z' として、

$$z' = z + \frac{1}{2} g t^2$$

をとる。両辺、時間 t で2階微分すると

$$\frac{d^2 z'}{dt^2} = \frac{d^2 z}{dt^2} + g = \left(-\frac{m_G}{m_I} + 1 \right) g$$

となる。ここで、最右辺へは運動方程式を用いた。実験事実として、全ての物質で、重力質量と慣性質量は同じ比例関係にあることが示されている。ここで、この比例定数を1にとる。すなわち、全ての物質で重力質量と慣性質量は等しい。この事実を等価原理として採用する。このとき、上式は

$$\frac{d^2 z'}{dt^2} = \left(-\frac{m_G}{m_I} + 1 \right) g = 0$$

となり、適当な加速度座標系に移れば、自分の近傍の全ての物質に働く重力を見かけ上、消すことができる。すなわち、ある近傍では、重力のある系と加速度系は区別できない。力を感じる量と物体の動きにくさを表わす量が重力の場合にだけ一致するので、重力のある系と加速度系は区別できない。重力のもつ特殊性である。

§14.2 時空の幾何学

§§14.2.1 計量テンソル

特殊相対性理論を思い出そう。そこでの光の軌跡は、世界距離の2乗が零、 $s^2 = (ct)^2 - (x^2 + y^2 + z^2) = 0$ により表わされる。すなわち、3次元空間を直進し、かつ4次元時空での世界距離は最小値0をとる。もちろん、光より遅い粒子の世界距離は $s^2 > 0$ である。今、図47の左のように、等速度で上方に引揚げられる箱の中に観測者が居るとし、箱の左側から光が入射し、右側に抜けていったとしよう。このとき、光の軌跡は、箱の中でも確かに直線軌道を描くことがわかる。一方、等加速度で箱が上方に引揚げられたときには、箱の外から見たときにはたとえ光は直進しようとも、箱の中では光は放物軌道を描く。しかしながら、前小節で理解したことは、加速度系と重力のある系は区別できないということであった。そこで、等加速度で引揚げられている箱の中の観測者は、自分が等加速度運動している箱の中にいるのか、下向きに働く重力場の中にいるのか原

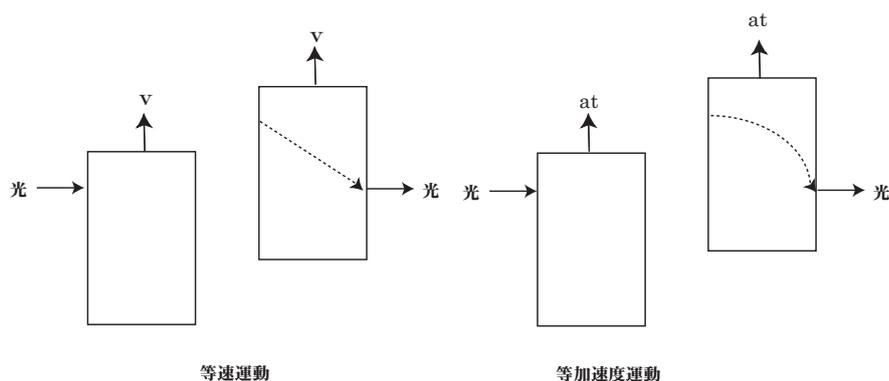


図 47:

理的に区別できない。これが等価原理の内容であった。したがって、重力場の下では光は空間的には直進せず、曲げられることが等価原理から直ちに結論される。光が進むときの世界間隔 s^2 は $s^2 = 0$ の“最短世界距離”を進むが、空間的にはもはや直線にならない“曲がった空間”を考えなければならなくなる。すなわち、光線が曲がったのではなく、曲がった時空間の中の最短世界距離を光は進行したと考えるのである。

特殊相対論では、微少世界間隔 ds は

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

と表わされていた。一般には

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x) dx^\mu dx^\nu \quad (14.1)$$

と表わされる。ここで、繰り返すギリシャ添え字については 0 から 3 まで和を取るアインシュタインの規約を用いている。特殊相対論では世界間隔は

$$g_{00} = 1, \quad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1, \quad \text{その他の } g_{\mu\nu} = 0$$

ということである。この $g_{\mu\nu}$ が決まれば世界間隔の形状、すなわち 4 次元時空間の幾何学が決定される。この $g_{\mu\nu}(x)$ を計量テンソルと呼ぶ。重力場が存在すれば、 $g_{\mu\nu}$ は特殊相対論のそれとは異なる。計量 $g_{\mu\nu}$ が決定されれば重力場の効果が決まるというわけである。

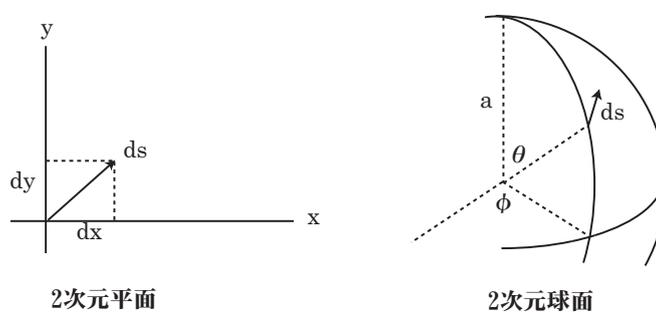


図 48:

*これまで重力質量と慣性質量を区別せず、単に質量と呼んだ。その理由は以下を参照のこと。

感覚をつかむために、通常の2次元空間での距離を考えてみよう。図48左では平坦な2次元平面を考えている。このとき、“距離” ds は

$$ds^2 = \sum_{i=1}^2 g_{ij} dx^i dx^j = (dx)^2 + (dy)^2$$

$$dx^1 = dx, \quad dx^2 = dy, \quad g_{11} = g_{22} = 1, \quad g_{12} = g_{21} = 0$$

となる。一方、曲がった2次元球面では、距離は

$$ds^2 = \sum_{i=1}^2 g_{ij} dx^i dx^j = a^2 (d\theta)^2 + a^2 \sin^2 \theta (d\phi)^2$$

$$dx^1 = d\theta, \quad dx^2 = d\phi, \quad g_{11} = a^2, \quad g_{22} = a^2 \sin^2 \theta, \quad g_{12} = g_{21} = 0$$

となり、計量 g_{ij} は座標 θ に依存している。また、計量が決まれば逆に幾何学が決まることがわかる。

§§14.2.2 一般座標変換

任意の座標系において物理法則は同等であるということを要請する。このとき、物理法則は座標の取り方によらず、同じ形式で書かれるであろう。そこで、まずは一般の座標変換を考察しておこう。ある座標系 $x = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ から別の座標系 $x' = (x'^0, x'^1, x'^2, x'^3)$ に変換する。

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = x'^\mu(x)$$

微分 dx^μ は

$$dx'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu$$

と変換することがわかる。ここで、座標の微分と同じ変換をする4元ベクトル A^μ を考えよう。

$$A'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} A^\nu$$

この量 A^μ を反変4元ベクトルと呼ぶ。次に、 $\phi(x)$ をスカラー関数としよう。 ϕ 自身は座標変換により変換されない。

$$\phi(x') = \phi(x)$$

このとき、このスカラー関数の微分 $\frac{\partial \phi}{\partial x^\mu}$ は

$$\frac{\partial \phi}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial \phi}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}$$

と変換する。この変換と同じ変換をする4元ベクトルを A_μ とする。

$$A'_\mu = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} A_\nu$$

この A_μ を共変4元ベクトルと呼ぶ。すなわち、上付き添え字を(複数)持つ量は反変ベクトル(の積)のように変換し、下付き添え字を(複数)持つ量は共変ベクトル(の積)のように変換する。例えば、

$$F'^{\mu\nu} = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\rho} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma} F^{\rho\sigma}$$

と変換する $F^{\mu\nu}$ は、2階反変テンソルである。

反変ベクトルと共変ベクトルの変換則に現れる係数間には、

$$\frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\rho}} \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\nu}} = \delta_{\nu}^{\mu}, \quad \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x'^{\rho}} \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x^{\nu}} = \delta_{\nu}^{\mu}$$

の関係があるので、4元ベクトルの内積は、一般座標変換の下でも不変である。

$$A'^{\mu} B'_{\mu} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\rho}} \frac{\partial x^{\sigma}}{\partial x'^{\mu}} A^{\rho} B_{\sigma} = \delta_{\rho}^{\sigma} A^{\rho} B_{\sigma} = A^{\rho} B_{\rho}$$

さて、2点間の世界距離は、計量テンソル $g_{\mu\nu}$ を用いて、(15.2) と表わされていた。一般座標変換の下でも世界距離は不変であるので、

$$ds'^2 = g'_{\mu\nu}(x') dx'^{\mu} dx'^{\nu} = g_{\mu\nu}(x) dx^{\mu} dx^{\nu} = ds^2$$

したがって、 $g'_{\mu\nu}(x') dx'^{\mu} dx'^{\nu} = g'_{\mu\nu} \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\rho}} \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\sigma}} dx^{\rho} dx^{\sigma} = g_{\rho\sigma}(x) dx^{\rho} dx^{\sigma}$ であることから、計量テンソルの変換則が導かれる。

$$g'_{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x^{\sigma}}{\partial x'^{\nu}} g_{\rho\sigma}(x)$$

こうして、 $g_{\mu\nu}$ は2階の共変テンソルとして変換されることがわかる。

計量テンソルにより、共変ベクトルと反変ベクトルを移り変わらせることができる。例えば、反変ベクトル A^{μ} から $g_{\mu\nu} A^{\nu}$ により、共変ベクトル A_{μ} が構成される。実際、一般座標変換に対する変換性を見ておこう。

$$\begin{aligned} g'_{\mu\nu}(x') A'^{\nu}(x') &= \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x^{\sigma}}{\partial x'^{\nu}} g_{\rho\sigma}(x) \cdot \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\tau}} A^{\tau}(x) \\ &= \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} \delta_{\tau}^{\sigma} g_{\rho\sigma}(x) A^{\tau}(x) = \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} g_{\rho\tau}(x) A^{\tau}(x) \end{aligned}$$

となるので、

$$A_{\mu}(x) = g_{\mu\nu}(x) A^{\nu}(x)$$

として共変ベクトル A_{μ} を定義すると、確かに

$$A'_{\mu} = \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} A_{\rho}$$

と共変ベクトルの変換性を示す。計量テンソルから2階の反変テンソル $g^{\mu\nu}(x)$ を次のように定義しよう。

$$g^{\mu\nu} g_{\nu\rho} = \delta_{\rho}^{\mu}$$

これを満たす $g^{\mu\nu}$ を用いると、 $A^{\mu} = g^{\mu\nu} A_{\nu}$ として、共変ベクトル A_{ν} から反変ベクトル A^{μ} が得られることは、先の場合と同様にして示される。こうして、反変、共変の添え字の上げ下げは、計量テンソル $g_{\mu\nu}$ とその逆テンソル $g^{\mu\nu}$ を用いて行なわれる。

§§14.2.3 共変微分

重力場の下で曲がった時空間では、4元ベクトル A_{μ} の微分 dA_{μ} は一般に4元ベクトルとならない。このことは、一般座標変換が一般には線形変換でないことから明らかである。実際、4元ベクトルの変換式 $A'_{\mu} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} A_{\nu}$ から

$$dA'_{\mu} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} dA_{\nu} + d\left(\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}}\right) A_{\nu} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} dA_{\nu} + A_{\nu} \frac{\partial^2 x^{\nu}}{\partial x'^{\mu} \partial x'^{\rho}} dx'^{\rho}$$

となる。 x と x' の変換が 1 次変換であれば右辺第 2 項は消えて dA_μ は共変ベクトルの変換性に従うが、一般にはそうではない。この原因は、上で考えたベクトルの“微分”が同一時空点での 2 つのベクトルの差ではないことに因る。すなわち、ベクトル $A_\mu(x)$ の微分を得るには、時空点 $x + dx$ でのベクトルの値 $A_\mu(x + dx)$ と、 x から“平行移動”したベクトル $A_\mu^{\parallel}(x + dx)$ との差を dx で除する必要がある。時空間が曲がっていなければ、 x からの平行移動は $A_\mu^{\parallel}(x + dx) = A_\mu(x)$ であるが、時空間が曲がっている場合にはそうはならない。平行移動したベクトル $A_\mu^{\parallel}(x + dx)$ の $A_\mu(x)$ からのずれは、ベクトル自身の値 A_μ に比例し、また移動距離 dx が大きければそれだけずれは大きくなるであろう。そこで、

$$A_\mu^{\parallel}(x + dx) = A_\mu(x) + \Gamma_{\mu\sigma}^\rho(x)A_\rho(x)dx^\sigma$$

と表すことができる。ここで、 $\Gamma_{\mu\sigma}^\rho$ は座標の関数である比例係数であり、クリストッフェル記号と呼ばれる。

平行移動に伴うベクトルのずれを $\delta A_\mu(x) (= \Gamma_{\mu\sigma}^\rho(x)A_\rho(x)dx^\sigma)$ と書くことにしよう。内積はスカラー量であり不変なので、 $\delta(B_\mu A^\mu) = 0$ である。すなわち、

$$B_\mu \delta A^\mu = -A^\mu \delta B_\mu = -A^\mu \Gamma_{\mu\sigma}^\rho B_\rho dx^\sigma$$

となるが、最右辺の和を取る添え字を付け替えて

$$B_\mu \delta A^\mu = -A^\rho \Gamma_{\rho\sigma}^\mu B_\mu dx^\sigma$$

とも書ける。 B_μ は任意であるので、反変ベクトルに対する平行移動 $A_\mu^{\parallel}(x + dx) = A^\mu(x) + \delta A^\mu(x)$ が次の様に得られる。

$$A_\mu^{\parallel}(x + dx) = A^\mu(x) - \Gamma_{\rho\sigma}^\mu A^\rho(x)dx^\sigma$$

こうして、2 つの 4 元ベクトルの差から、また 4 元ベクトルとなる“微分” DA_μ が得られる。これを共変微分とよぶ。すなわち、

$$DA_\mu = A_\mu(x + dx) - A_\mu^{\parallel}(x + dx) = A_\mu(x + dx) - A_\mu(x) - \Gamma_{\mu\sigma}^\rho(x)A_\rho(x)dx^\sigma$$

共変導関数 $A_{\mu;\sigma}$ は、共変微分を dx^σ で除して、 $dx^\sigma \rightarrow 0$ の極限をとることにより得られる： $A_{\mu;\sigma} = \lim_{dx^\sigma \rightarrow 0} \frac{DA_\mu}{dx^\sigma}$:

$$A_{\mu;\sigma} = \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\sigma} - \Gamma_{\mu\sigma}^\rho(x)A_\rho(x) \quad (14.2)$$

反変ベクトルについても同様に得られる。

$$A_{\nu}^{\mu;\sigma} = \frac{\partial A^\mu}{\partial x^\sigma} + \Gamma_{\rho\sigma}^\mu(x)A^\rho(x) \quad (14.3)$$

共変微分は導出から明らかなように、4 元ベクトルとして振舞う。

続いて、テンソルの共変微分を考えておこう。たとえば T_ν^μ のようなテンソルの共変微分は、 $T_\nu^\mu = A^\mu B_\nu$ のように 2 つの 4 元ベクトルの積と同じ変換則を満たすはずである。それぞれのベクトルの平行移動はすでに得られているので共変微分は

$$DT_\nu^\mu = T_\nu^\mu(x + dx) - T_\nu^{\parallel\mu}(x + dx)$$

は、 A^μ 、 B_ν の平行移動から得られ、結局、共変導関数として、

$$T_{\nu;\rho}^\mu = \frac{\partial T_\nu^\mu}{\partial x^\rho} + \Gamma_{\sigma\rho}^\mu T_\nu^\sigma - \Gamma_{\nu\rho}^\sigma T_\sigma^\mu$$

と得られる。以上のことから、テンソルの共変成分についてはそれぞれ共変ベクトルの共変導関数の場合と同様に、反変成分については反変ベクトルの共変導関数と同様な方法で、クリストッフェル記号が含まれる項を加えていけばよい。

次に、 $\Gamma_{\rho\sigma}^{\mu}$ についてみておこう。今、あるスカラー関数 ϕ から共変ベクトル $A_{\mu} = \frac{\partial\phi}{\partial x^{\mu}}$ を作る。このときには、 $\frac{\partial A_{\mu}}{\partial x^{\nu}} = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^{\mu}\partial x^{\nu}} = \frac{\partial A_{\nu}}{\partial x^{\mu}}$ であるので、共変導関数 (14.2) から

$$A_{\mu;\nu} - A_{\nu;\mu} = (\Gamma_{\nu\mu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}) \frac{\partial\phi}{\partial x^{\rho}}$$

となる。ここで、等価原理により、重力場は局所的には消えて曲がりのない時空間で考えられるので、このときには共変微分は通常の微分になり、右辺は 0 である。もちろん、平行移動の際のずれが無いので $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = 0$ ということである。こうして、この座標系では $A_{\mu;\nu} - A_{\nu;\mu} = 0$ となる。しかし、この量は 2 階の共変テンソルであるので、座標変換しても、ある系で 0 であれば常に 0 である。こうして、任意の座標系、すなわち一般に

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \Gamma_{\nu\mu}^{\rho}$$

と、 $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ の下付き添え字は入れ替えに対して対称であると言える*。

さて、4 元ベクトルの長さは平行移動で変わらないので、

$$g_{\mu\nu}(x+dx)A_{\parallel}^{\mu}(x+dx)A_{\parallel}^{\nu}(x+dx) = g_{\mu\nu}(x)A^{\mu}(x)A^{\nu}(x)$$

が成り立つ。左辺の計量テンソルを $g_{\mu\nu}(x+dx) = g_{\mu\nu}(x) + \frac{\partial g_{\mu\nu}(x)}{\partial x^{\rho}} dx^{\rho}$ とテイラー展開し、平行移動した共変ベクトルの表式を代入して dx の 2 次以上を無視すると、

$$\frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^{\rho}} - g_{\sigma\nu}\Gamma_{\mu\rho}^{\sigma} - g_{\mu\sigma}\Gamma_{\nu\rho}^{\sigma} = 0$$

という関係が得られる。これは、2 階共変テンソルとしての計量テンソルの共変導関数は零であることを示している。添え字 μ, ν, ρ を順に入れ替えると

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{\rho\mu}}{\partial x^{\nu}} - g_{\sigma\mu}\Gamma_{\rho\nu}^{\sigma} - g_{\rho\sigma}\Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} &= 0 \\ -\frac{\partial g_{\nu\rho}}{\partial x^{\mu}} + g_{\sigma\rho}\Gamma_{\nu\mu}^{\sigma} + g_{\nu\sigma}\Gamma_{\rho\mu}^{\sigma} &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。ここで、3 つの式を辺々足して 2 で割り、軽量テンソルの対称性 $g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$ 及び $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ の下付き添え字の入れ替えに対する対称性を用いると、

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \frac{1}{2}g^{\rho\sigma} \left(\frac{\partial g_{\sigma\mu}}{\partial x^{\nu}} + \frac{\partial g_{\sigma\nu}}{\partial x^{\mu}} - \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^{\sigma}} \right) \quad (14.4)$$

と、 $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ が時空の計量テンソル $g_{\mu\nu}$ で表すことができる。時空が曲がっていることによりベクトルの平行移動が $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ を係数にしてずれていたが、その大きさはもちろん時空の幾何学を決定する計量テンソルにより決定されている。

最後に、クリストッフェル記号の変換性を見ておこう。共変ベクトルを平行移動した後に一般座標変換すると

$$A'_{\mu} \parallel(x' + dx') = \left(\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \right)_{x'+dx'} A_{\nu} \parallel(x + dx)$$

$T'_{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x^{\rho}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x^{\sigma}}{\partial x'^{\nu}} T_{\rho\sigma}(x)$ より、一般座標変換で移った系 x' でも $T'_{\mu\nu} = 0$ となる。
* $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \Gamma_{\nu\mu}^{\rho}$ と下付き添え字について対称であるのは、振率が零であるということに対応している。振率 $S_{\mu\nu}^{\sigma}$ は $\Gamma_{\mu\nu}^{\sigma}$ の反対称成分として、 $S_{\mu\nu}^{\sigma} = \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} - \Gamma_{\nu\mu}^{\sigma}$ と書ける。

となる。変換行列を1次までテーラー展開すると $\left(\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\right)_{x'+dx'} = \left(\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\right)_{x'} + \frac{\partial^2 x^\nu}{\partial x'^\mu \partial x'^\rho} dx'^\rho$ となるので、この式と右辺の $A_\nu^\parallel(x+dx) = A_\nu(x) + \Gamma_{\nu\tau}^\sigma(x)A_\sigma(x)dx^\tau$ の具体的表式を代入すると、

$$A'_\mu{}^\parallel(x'+dx') = \left[\left(\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\right)_{x'} + \frac{\partial^2 x^\nu}{\partial x'^\mu \partial x'^\rho} dx'^\rho \right] [A_\nu(x) + \Gamma_{\nu\tau}^\sigma(x)A_\sigma(x)dx^\tau]$$

となるが、ここで、もう一度 x' 系に逆変換し、 $A_\nu(x) = \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\nu} A'_\alpha(x')$ 等により、

$$A'_\mu{}^\parallel(x'+dx') = A'_\mu(x') + \left[\frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial x'^\mu \partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\rho}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x'^\rho}{\partial x^\beta} \frac{\partial x^\gamma}{\partial x'^\nu} \Gamma_{\alpha\gamma}^\beta(x) \right] A'_\rho(x') dx'^\nu$$

が得られる。これは、 x' 系に変換してから平行移動したものと見なせるので、

$$A'_\mu{}^\parallel(x'+dx') = A'_\mu(x') + \Gamma'_{\mu\nu}{}^\rho(x') A'_\rho(x') dx'^\nu$$

と一致しなければならない。両者を比較することにより、クリストッフエル記号の一般座標変換性が得られる。

$$\Gamma'_{\mu\nu}{}^\rho(x') = \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial x'^\mu \partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\rho}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x'^\rho}{\partial x^\beta} \frac{\partial x^\gamma}{\partial x'^\nu} \Gamma_{\alpha\gamma}^\beta(x) \quad (14.5)$$

§§14.2.4 曲率

2つの座標方向 x^α , x^β をとり、微小面積要素 $dx^\alpha dx^\beta$ の周りに沿ってあるベクトルを平行移動しながら1周させることを考えてみよう。時空が平坦であれば、元に戻ったときにベクトルは初めのベクトルと完全に重なるであろう。しかしながら、時空が曲がっていれば、ずれが生じる。このことは地表面で考えれば容易に想像が付く。赤道上で赤道方向を向いたベクトルを、ちょうど出発点の反対側まで平行移動しておき、今度は経線にそって北極を経由して元に戻ったところまで移動させると、ベクトルは出発点の状況とは正反対の方向を向いているであろう。これは地球表面が球面として“曲がって”いるからである。さて、まず座標 (x^α, x^β) にベクトル $A^\mu(x)$ があるとしよう。このベクトルを x^α 方向に dx 平行移動した後、 x^β 方向に dy 平行移動し、 $A_\parallel^\mu(x+dx+dy)$ となったとする。まず、

$$A_\parallel^\mu(x+dx) = A^\mu(x) - \Gamma_{\rho\alpha}^\mu(x) A^\rho(x) dx^\alpha$$

と平行移動された後、

$$A_\parallel^\mu(x+dx+dy) = A_\parallel^\mu(x+dx) - \Gamma_{\rho\beta}^\mu(x+dx) A_\parallel^\rho(x+dx) dy^\beta$$

と移動される。上式を代入し、クリストッフエル記号のテーラー展開 $\Gamma_{\rho\sigma}^\mu(x+dx) = \Gamma_{\rho\sigma}^\mu(x) + \frac{\partial \Gamma_{\rho\sigma}^\mu}{\partial x^\alpha} dx^\alpha$ を用いると、

$$A_\parallel^\mu(x+dx+dy) = A^\mu(x) - \Gamma_{\alpha\rho}^\mu(x) A^\rho(x) dx^\alpha - \Gamma_{\beta\rho}^\mu(x) A^\rho(x) dy^\beta - \left(\frac{\partial \Gamma_{\beta\rho}^\mu}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\beta\nu}^\mu(x) \Gamma_{\alpha\rho}^\nu(x) \right) A^\rho(x) dx^\alpha dy^\beta$$

が得られる。今度は、同じベクトルを x^β 方向に dy 平行移動した後、 x^α 方向に dx 平行移動し、 $A_\parallel^\mu(x+dy+dx)$ となったとする。まず、

$$A_\parallel^\mu(x+dy) = A^\mu(x) - \Gamma_{\rho\beta}^\mu(x) A^\rho(x) dy^\beta$$

と平行移動された後、

$$A_{\parallel}^{\mu}(x+dy+dx) = A_{\parallel}^{\mu}(x+dy) - \Gamma_{\rho\alpha}^{\mu}(x+dy)A_{\parallel}^{\rho}(x+dy)dx^{\alpha}$$

と移動される。上式を代入し、クリストッフェル記号をテーラー展開して用いると、

$$A_{\parallel}^{\mu}(x+dy+dx) = A^{\mu}(x) - \Gamma_{\beta\rho}^{\mu}(x)A^{\rho}(x)dy^{\beta} - \Gamma_{\alpha\rho}^{\mu}(x)A^{\rho}(x)dx^{\alpha} - \left(\frac{\partial\Gamma_{\alpha\rho}^{\mu}}{\partial y^{\beta}} - \Gamma_{\alpha\nu}^{\mu}(x)\Gamma_{\beta\rho}^{\nu}(x) \right) A^{\rho}(x)dx^{\alpha}dy^{\beta}$$

が得られる。こうして $A_{\parallel}^{\mu}(x+dx+dy)$ から $A_{\parallel}^{\mu}(x+dy+dx)$ を引くと、面積素片を1周したときのベクトルのずれが得られる[†]。

$$\begin{aligned} \delta A^{\mu} &= A_{\parallel}^{\mu}(x+dx+dy) - A_{\parallel}^{\mu}(x+dy+dx) \\ &= R_{\rho\alpha\beta}^{\mu}A^{\rho}dx^{\alpha}dy^{\beta} \\ R_{\rho\alpha\beta}^{\mu} &= \frac{\partial\Gamma_{\alpha\rho}^{\mu}}{\partial x^{\beta}} - \frac{\partial\Gamma_{\beta\rho}^{\mu}}{\partial x^{\alpha}} + \Gamma_{\beta\nu}^{\mu}\Gamma_{\alpha\rho}^{\nu} - \Gamma_{\alpha\nu}^{\mu}\Gamma_{\beta\rho}^{\nu} \end{aligned} \quad (14.6)$$

ここで、(14.6) で定義された量をリーマンの曲率テンソルと呼ぶ。曲率テンソルによって、時空間の曲がりの程度がわかることは明らかであろう。リーマンの曲率テンソルのすべての成分がゼロであれば、時空間は平坦である。

4階共変テンソルとして、 $R_{\alpha\beta\mu\nu} \equiv g_{\alpha\rho}R_{\beta\mu\nu}^{\rho}$ を導入しよう。少し変形することで、

$$R_{\alpha\beta\mu\nu} \equiv g_{\alpha\rho}R_{\beta\mu\nu}^{\rho} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g_{\alpha\nu}}{\partial x^{\beta}\partial x^{\mu}} + \frac{\partial^2 g_{\beta\mu}}{\partial x^{\alpha}\partial x^{\nu}} - \frac{\partial^2 g_{\alpha\mu}}{\partial x^{\beta}\partial x^{\nu}} - \frac{\partial^2 g_{\beta\nu}}{\partial x^{\alpha}\partial x^{\mu}} \right) + g_{\rho\sigma} \left(\Gamma_{\beta\mu}^{\rho}\Gamma_{\alpha\nu}^{\sigma} - \Gamma_{\beta\nu}^{\rho}\Gamma_{\alpha\mu}^{\sigma} \right)$$

が得られる。この式から

$$\begin{aligned} R_{\alpha\beta\mu\nu} &= -R_{\beta\alpha\mu\nu} = -R_{\alpha\beta\nu\mu} \\ R_{\alpha\beta\mu\nu} &= R_{\mu\nu\alpha\beta} \end{aligned}$$

という対称性を持つことを示すことができる。さらに、 $R_{\alpha\beta\mu\nu}$ の下付き添え字の任意の3つを巡回置換させて得られる3つの方程式を加え合わせることで、たとえば、

$$R_{\alpha\beta\mu\nu} + R_{\alpha\mu\nu\beta} + R_{\alpha\nu\beta\mu} = 0$$

といった関係式が得られる。

リーマンの曲率テンソルから、2階のテンソルを作ることができる。これをリッチテンソルと呼び、次のように導入される。

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu} &\equiv g^{\alpha\beta}R_{\alpha\mu\beta\nu} = R_{\mu\alpha\nu}^{\alpha} \\ &= \frac{\partial\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}} - \frac{\partial\Gamma_{\mu\alpha}^{\alpha}}{\partial x^{\nu}} + \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}\Gamma_{\alpha\beta}^{\beta} - \Gamma_{\mu\beta}^{\alpha}\Gamma_{\nu\alpha}^{\beta} \end{aligned}$$

リッチテンソルは、曲率テンソルの対称性 $R_{\alpha\beta\mu\nu} = R_{\mu\nu\alpha\beta}$ を用いることで

$$R_{\mu\nu} = R_{\nu\mu}$$

のように、添え字の入れ替えについて対称であることがわかる。

最後に、リッチテンソルから

$$R \equiv g^{\mu\nu}R_{\mu\nu} = R_{\mu}^{\mu}$$

として、スカラー量を構成することができる。これをスカラー曲率と呼ぶ。

[†]座標 (x^{α}, x^{β}) を A、 $(x^{\alpha} + dx^{\alpha}, x^{\beta})$ を B、 $(x^{\alpha} + dx^{\alpha}, x^{\beta} + dy^{\beta})$ を C、 $(x^{\alpha}, x^{\beta} + dy^{\beta})$ を D とすると、 $A_{\parallel}^{\mu}(x+dx+dy)$ は $A \rightarrow B \rightarrow C$ 、と平行移動したものであり、 $A_{\parallel}^{\mu}(x+dy+dx)$ は $A \rightarrow D \rightarrow C$ と平行移動したものである。両者の差は、 $-A \rightarrow D \rightarrow C = C \rightarrow D \rightarrow A$ であることから、1周したときのベクトルの変化を表す。

§ 14.3 重力場の下での自由粒子の運動

§§14.3.1 測地線

重力以外の力が働いていないときの質点の運動を考察しよう。重力のみ働いているので、重力が時空間を曲げているが、質点は他に力を受けないので、曲がった時空間を“まっすぐ”進む。曲がった空間での最短距離は測地線[‡]により実現される。

すでに知っているように、相対論での自由粒子の作用は

$$S = -mc \int ds$$

である。今、 $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$ である。最小作用の原理から、実現される軌道は

$$\delta S = -mc \int \delta(ds) = 0$$

で与えられる。計算すべきは $\delta(ds)$ であるので、これを見ていこう。今、

$$\begin{aligned} \delta(g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu) &= \delta(ds^2) = 2ds\delta(ds) \\ &= dx^\mu dx^\nu \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} \delta x^\rho + 2g_{\mu\nu} dx^\mu d(\delta x^\nu) \end{aligned}$$

であるので、最小作用の原理から

$$\begin{aligned} \delta S &= -mc \int \left(\frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} \delta x^\rho + g_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{d\delta x^\nu}{ds} \right) ds \\ &= -mc \int \left(\frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} - \frac{d}{ds} \left(g_{\mu\rho} \frac{dx^\mu}{ds} \right) \right) \delta x^\rho ds \\ &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。ここで、1行目から2行目へは部分積分を行ない、境界では変分を $\delta x^\rho = 0$ と固定していることを用いた。また、2行目第2項で和を取る添え字を ν から ρ に変更した。任意の δx^ρ について成り立つので、

$$\frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} - \frac{d}{ds} \left(g_{\mu\rho} \frac{dx^\mu}{ds} \right) = 0$$

が成り立つ。さらに、左辺は

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} - \frac{d}{ds} \left(g_{\mu\rho} \frac{dx^\mu}{ds} \right) &= \frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} - g_{\mu\rho} \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} - \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\rho}}{\partial x^\nu} \\ &= \frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} - g_{\mu\rho} \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} - \frac{1}{2} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} \left(\frac{\partial g_{\mu\rho}}{\partial x^\nu} + \frac{\partial g_{\nu\rho}}{\partial x^\mu} \right) \end{aligned}$$

と変形できる。ここで、右辺第3項は2行目に移るときに和を対称化しておいた。こうして、運動方程式は

$$g_{\mu\rho} \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g_{\mu\rho}}{\partial x^\nu} + \frac{\partial g_{\nu\rho}}{\partial x^\mu} - \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} \right) \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} = 0$$

となるが、両辺 $g^{\sigma\rho}$ を掛けると

$$\frac{d^2 x^\sigma}{ds^2} + \frac{1}{2} g^{\sigma\rho} \left(\frac{\partial g_{\mu\rho}}{\partial x^\nu} + \frac{\partial g_{\nu\rho}}{\partial x^\mu} - \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho} \right) \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds} = 0$$

となる。クリストッフエル記号(14.4)を用いれば(添え字を適当に書き直して)、重力場の下での自由粒子の運動は、測地線の方程式

$$\frac{d^2 x^\mu}{ds^2} + \Gamma_{\rho\sigma}^\mu \frac{dx^\rho}{ds} \frac{dx^\sigma}{ds} = 0 \quad (14.7)$$

となることがわかる。

[‡]例えば、3次元球面上の2次元地表面では、最短な測地線は大円である。

§§14.3.2 重力場中の非相対論的近似

重力のみを感じて運動する自由粒子の速度が小さいとしよう。このときには、非相対論的近似が良くなる。重力場が余りに強いと、当然粒子の速度は増していくので、粒子の速度が小さい非相対論的近似では、重力場も弱い。非相対論的には作用はラグランジアン[§]の時間積分であり、ラグランジアンは運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差で表わされる。ここでは、運動エネルギー項を $-mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \approx -mc^2 + \frac{1}{2}mv^2$ と近似し、ポテンシャルエネルギー項は重力ポテンシャル ϕ のもとで $m\phi$ と書こう[§]。そうすると、作用は

$$\begin{aligned} S &= -mc \int ds = \int L dt \\ &= -mc \int \left(c - \frac{v^2}{2c} + \frac{\phi}{c} \right) dt \end{aligned}$$

となる。したがって、

$$ds = \left(c - \frac{v^2}{2c} + \frac{\phi}{c} \right) dt$$

と対応するので、両辺2乗して

$$ds^2 = \left(c^2 - v^2 + 2\phi + \frac{v^4}{4c^2} + \frac{\phi^2}{c^2} \right) dt^2 \approx (c^2 + 2\phi)dt^2 - dr^2$$

となる。ここで、光速 c は大きいので、 c が分母にある項は無視した。また $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ であることを用いた。こうして、計量 $g_{\mu\nu}$ は読み取れて、

$$g_{00} = 1 + \frac{2\phi}{c^2}, \quad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1, \quad \text{それ以外は } 0$$

こうして、クリストッフェル記号で0でないのは、時間に依存しない ϕ の1次までで

$$\Gamma_{00}^i = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^i}, \quad (i = 1, 2, 3)$$

のみである。非相対論的なので、 $ds^2 = c^2 d\tau^2$ であるが、固有時 τ は座標時 t と近似的に等しい。以上から、(14.7) は

$$\frac{d^2 x^i}{(cdt)^2} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^i} = 0, \quad \text{すなわち} \quad \frac{d^2 x^i}{dt^2} = -\frac{\partial \phi}{\partial x^i}$$

となる。これはニュートン力学での重力場の下での運動方程式に他ならない。

§§14.3.3 重力場中での時間の遅れ

今、原点での時間について考えよう。固有時 τ は前小節で得られた g_{00} を用いて

$$\tau = \frac{1}{c} \sqrt{g_{00}} x^0 \approx \frac{x^0}{c} \left(1 + \frac{\phi}{c^2} \right)$$

と近似できる。重力場のポテンシャル ϕ は負の量であったので、重力場が強い (ϕ が負で大きい) ほど、固有時 τ は小さく、すなわち固有時間はゆっくり流れることがわかる。重力場が ϕ_1 である位置での固有時を τ_1 、 ϕ_2 である位置では τ_2 として時間が経過するとしよう。両者の差は

$$\frac{\tau_2 - \tau_1}{\tau_1} \approx \frac{\phi_2 - \phi_1}{c^2}$$

[§]質量 M の質点を作る重力場のポテンシャルは $\phi = -G\frac{M}{r}$ である。

となる。ここで、 $\phi_2 < \phi_1$ 、すなわち2の場所の方が1の場所より重力が強い場合には $\tau_2 - \tau_1 < 0$ となり、 τ_2 のほうが τ_1 より小さい、すなわちゆっくり時間が経過することがわかる。このように、重力場は時間を遅らせる。

§ 14.4 重力場の方程式

§§14.4.1 数学的準備

重力場に対する作用を考えよう。作用はラグランジアン密度の4元積分として与えられる。平坦な時空 $(x_{(0)})$ では4元体積 $d^4x_{(0)}$ はスカラーであるが、一般座標変換に対して4元体積は不変ではない。実際、

$$d^4x' = \frac{\partial(x'^0, x'^1, x'^2, x'^3)}{\partial(x^0, x^1, x^2, x^3)} d^4x$$

である。ここでヤコビアン $J \equiv \frac{\partial(x'^0, x'^1, x'^2, x'^3)}{\partial(x^0, x^1, x^2, x^3)}$ は計量テンソルの行列式で書けることを見ておく。計量テンソルの変換則は

$$g'^{\mu\nu} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\rho}} \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\sigma}} g^{\rho\sigma}$$

であるので、この両辺の行列式を取る。今、 $\det g_{\mu\nu} = g$ としたので、逆行列 $g^{\mu\nu}$ の行列式は $1/g$ である。このとき

$$\frac{1}{-g'} = J^2 \frac{1}{-g}, \quad \text{すなわち} \quad J = \frac{\sqrt{-g}}{\sqrt{-g'}}$$

となる。ここで、計量テンソルの行列式は負の値を取ることに注意しておこう。実際、平坦な時空では計量は $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ と対角行列になり、行列式は -1 となる。こうして、一般座標変換で不変な体積要素は $\sqrt{-g}d^4x$ となる。

$$\sqrt{-g'}d^4x' = \sqrt{-g}d^4x$$

ここで、計量テンソルの行列式で表わされる幾つかの有用な関係式を導いておこう。計量テンソルの μ 行 ν 列を除いてできる行列の行列式に $(-1)^{\mu+\nu}$ を掛けたもの（小行列式）を $\mu\nu$ 成分にもつ行列（余因子行列）を、 $\tilde{g}^{\mu\nu}$ と表わすと

$$g_{\mu\nu} \tilde{g}^{\nu\rho} = g \delta_{\mu}^{\rho}$$

を満たすことは定義である。したがって、余因子行列は

$$\tilde{g}^{\mu\nu} = g g^{\mu\nu}$$

と表わすことができる。一方、前々式の両辺の微分 $dg_{\mu\nu}$ をとると

$$dg = \tilde{g}^{\mu\nu} dg_{\mu\nu} = g g^{\mu\nu} dg_{\mu\nu}$$

が得られる。また、 $g^{\mu\nu} g_{\nu\rho} = \delta_{\rho}^{\mu}$ から $\delta g^{\mu\nu} g_{\nu\rho} + g^{\mu\nu} \delta g_{\nu\rho} = 0$ より、上式は

$$dg = \tilde{g}^{\mu\nu} dg_{\mu\nu} = g g^{\mu\nu} dg_{\mu\nu} = -g g_{\mu\nu} dg^{\mu\nu}$$

とも表わされる。導関数としては、上の微分式から、

$$\frac{\partial g}{\partial x^\rho} = g g^{\mu\nu} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho}, \quad \frac{\partial}{\partial x^\rho} (\ln(-g)) = g^{\mu\nu} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial x^\rho}$$

が得られる。

この表式を用いると、共変微分の縮約、すなわち一般化された発散を簡単に表わすことができる。まず、クリストッフェル記号で上付き添え字と2番目の下付き添え字に関して和を取ると

$$\Gamma_{\mu\rho}^\rho = \frac{1}{2} g^{\rho\sigma} \left(\frac{\partial g_{\sigma\mu}}{\partial x^\rho} + \frac{\partial g_{\sigma\rho}}{\partial x^\mu} - \frac{\partial g_{\mu\rho}}{\partial x^\sigma} \right) = \frac{1}{2} g^{\rho\sigma} \frac{\partial g_{\rho\sigma}}{\partial x^\mu}$$

得られる。ここで、最後の等式では、中辺の第1項と第3項の和の添え字を付け替え得れば容易にわかるように打ち消し合うことを用いた。こうして、計量テンソルの行列式の微分を用いることで、

$$\Gamma_{\mu\rho}^\rho = \frac{\partial \ln \sqrt{-g}}{\partial x^\mu}$$

と簡単化される。こうして、4元ベクトル A^μ の一般化された発散 $A_{;\mu}^\mu$ は

$$A_{;\mu}^\mu = \frac{\partial A^\mu}{\partial x^\mu} + \Gamma_{\mu\rho}^\rho A^\mu = \frac{\partial A^\mu}{\partial x^\mu} + \frac{\partial \ln \sqrt{-g}}{\partial x^\mu} A^\mu = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial (\sqrt{-g} A^\mu)}{\partial x^\mu}$$

と纏められる。

次にスカラー場 ϕ の2階微分を共変形式に表わそう。スカラー場の共変微分はベクトル場と異なり通常の微分項しか現れないので、4元反変ベクトルの形にして

$$\phi^{;\mu} = g^{\mu\nu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\nu}$$

となる。これは4元ベクトルなので、その共変微分は先ほどの A^μ に $\phi^{;\mu}$ を代入し

$$\phi_{;\mu}^{;\mu} = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\sqrt{-g} g^{\mu\nu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\nu} \right)$$

と得られる。

§§14.4.2 重力場の方程式

重力場の方程式を構成するには、重力場に対するラグランジアンを見つける必要がある。作用はスカラー量であるので、一般座標変換に対して不変な体積要素 $\sqrt{-g} d^4x$ で積分される量もまたスカラーでなければならない。重力場により規定されるべき計量テンソルを含むスカラー量として我々はスカラー曲率 R を得た。したがって、最も簡単なラグランジアン密度として R に比例するものを取りることができる。もちろん、 R^2 や $R^{\mu\nu} R_{\mu\nu}$ 、 $g^{\nu\sigma} R_{\nu\alpha\beta}^\mu R_{\mu\sigma} R^{\alpha\beta}$ など、計量テンソルを含むスカラー量はいくらでも考えられるが、ここでは、計量テンソルの高次の微分を含まない(2階微分までで収まる) R まで考えることにする。物質場のラグランジアン密度を \mathcal{L}_m と書くことにして、ある定数を a 、 b として作用 S を

$$\begin{aligned} S &= S_g + S_m \\ S_g &= \int (a + bR) \sqrt{-g} d^4x \\ S_m &= \frac{1}{c} \int \mathcal{L}_m \sqrt{-g} d^4x \end{aligned}$$

のように採用しよう。物質場の \mathcal{L}_m はその物質場に応じて取ればよい。

重力場の作用に関して $g_{\mu\nu}$ に関する変分を行なおう。

$$\delta S_g = a \int \delta(\sqrt{-g}) d^4x + b \int \delta(R\sqrt{-g}) d^4x$$

を計算していく。まず a に比例した第 1 項を考えよう。計量テンソルの行列式 g の変分は、§12.4.1 で求めた微分 dg を変分と読み替えれば

$$\delta g = gg^{\mu\nu} \delta g_{\mu\nu} = -gg_{\mu\nu} \delta g^{\mu\nu}$$

となる。よって、作用の変分の第 1 項は

$$\delta(\sqrt{-g}) = -\frac{1}{2\sqrt{-g}} \delta g = -\frac{1}{2} \sqrt{-g} g_{\mu\nu} \delta g^{\mu\nu}$$

となる。これを利用して、第 2 項の変分を実行しよう。このとき、まず

$$\begin{aligned} \delta(R\sqrt{-g}) &= \delta R \cdot \sqrt{-g} + R\delta(\sqrt{-g}) = \delta(g^{\mu\nu} R_{\mu\nu})\sqrt{-g} - \frac{R}{2} \sqrt{-g} g_{\mu\nu} \delta g^{\mu\nu} \\ &= \left(R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} \right) \sqrt{-g} \delta g^{\mu\nu} + \sqrt{-g} g^{\mu\nu} \delta R_{\mu\nu} \end{aligned}$$

と変形できる。上式で $\delta R_{\mu\nu}$ が現れる最終項は、4 元積分により消えることを以下で示そう。 $\delta R_{\mu\nu}$ を定義に戻って計算すると

$$\begin{aligned} \delta R_{\mu\nu} &= \delta \left(\frac{\partial \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}}{\partial x^{\rho}} - \frac{\partial \Gamma_{\mu\rho}^{\rho}}{\partial x^{\nu}} + \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} \Gamma_{\sigma\rho}^{\rho} - \Gamma_{\mu\rho}^{\sigma} \Gamma_{\sigma\nu}^{\rho} \right) \\ &= \frac{\partial \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}}{\partial x^{\rho}} - \frac{\partial \delta \Gamma_{\mu\rho}^{\rho}}{\partial x^{\nu}} + \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} \Gamma_{\sigma\rho}^{\rho} + \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} \delta \Gamma_{\sigma\rho}^{\rho} - \delta \Gamma_{\mu\rho}^{\sigma} \Gamma_{\sigma\nu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\rho}^{\sigma} \delta \Gamma_{\sigma\nu}^{\rho} \end{aligned}$$

となる。クリストッフエル記号自体はテンソルではないが[‡]、 $g_{\mu\nu} \rightarrow \tilde{g}_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} + \delta g_{\mu\nu}$ と変化させたときのクリストッフエル記号の変分 $\delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ は 3 階の混合テンソルとなる[¶]。したがって、クリストッフエル記号の変分 $\delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ の共変微分を計算してみると

$$\begin{aligned} \delta \Gamma_{\mu\nu;\rho}^{\rho} &= \frac{\partial \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}}{\partial x^{\rho}} + \Gamma_{\sigma\rho}^{\rho} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\rho}^{\sigma} \delta \Gamma_{\sigma\nu}^{\rho} - \Gamma_{\nu\rho}^{\sigma} \delta \Gamma_{\mu\sigma}^{\rho} \\ \delta \Gamma_{\mu\rho;\nu}^{\rho} &= \frac{\partial \delta \Gamma_{\mu\rho}^{\rho}}{\partial x^{\nu}} + \Gamma_{\sigma\nu}^{\rho} \delta \Gamma_{\mu\rho}^{\rho} - \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} \delta \Gamma_{\sigma\rho}^{\rho} - \Gamma_{\rho\nu}^{\sigma} \delta \Gamma_{\mu\sigma}^{\rho} \end{aligned}$$

となる。こうして、 $\delta R_{\mu\nu}$ の式に $\Gamma_{\rho\nu}^{\sigma} \Gamma_{\mu\sigma}^{\rho}$ を足して引いておくと、上の $\delta \Gamma$ を辺々引くことで、

$$\delta R_{\mu\nu} = \delta \Gamma_{\mu\nu;\rho}^{\rho} - \delta \Gamma_{\mu\rho;\nu}^{\rho}$$

と表わされる。計量テンソル $g_{\mu\nu}$ の共変微分は零であったので、結局

$$g^{\mu\nu} \delta R_{\mu\nu} = (g^{\mu\nu} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho})_{;\rho} - (g^{\mu\nu} \delta \Gamma_{\mu\rho}^{\rho})_{;\nu} = (g^{\mu\nu} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} - g^{\mu\rho} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\nu})_{;\rho} \equiv A^{\rho}_{;\rho}$$

となる。ここで最終行へは第 2 項の和の添え字を書き直した上で、 $A^{\rho} = g^{\mu\nu} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} - g^{\mu\rho} \delta \Gamma_{\mu\nu}^{\nu}$ という 4 元ベクトルの発散という形になることを示している。4 元ベクトルの発散は前小節で $A^{\mu}_{;\mu} = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial(\sqrt{-g} A^{\mu})}{\partial x^{\mu}}$ と得られているので、結局、 b に比例する作用の変分の第 2 項は

$$\int g^{\mu\nu} \delta R_{\mu\nu} \sqrt{-g} d^4x = \int A^{\rho}_{;\rho} \sqrt{-g} d^4x = \int d^4x \frac{\partial}{\partial x^{\rho}} (\sqrt{-g} A^{\rho})$$

[‡]クリストッフエル記号の変換則は $\Gamma'^{\rho}_{\mu\nu} = \frac{\partial x'^{\rho}}{\partial x^{\sigma}} \frac{\partial x^{\tau}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x'^{\nu}} \Gamma_{\tau\alpha}^{\sigma} + \frac{\partial x'^{\rho}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial^2 x^{\alpha}}{\partial x'^{\mu} \partial x'^{\nu}}$ であるので、 $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}^{\rho}$ と $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ の差である $\delta \Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ では第 2 項が相殺して、3 階のテンソルとして変換されることがわかる。

となり、積分を実行すると3次元時空間の表面積分となる。表面では $\delta g_{\mu\nu} = 0$ ととるので、結局表面積分は消えて、第2項は寄与しない。こうして、

$$\delta S_g = \int \left(-\frac{a}{2} g_{\mu\nu} + b \left(R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} \right) \right) \sqrt{-g} \delta g^{\mu\nu} d^4x$$

となる。

あらかじめ、定数 a 、 b の代わりに、 $b = -\frac{c^3}{16\pi G}$ 、 $a = -2\Lambda b$ として、 G と Λ を未知定数と取ろう。こうして、

$$\delta S_g = -\frac{c^3}{16\pi G} \int \left(R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} \right) \sqrt{-g} \delta g^{\mu\nu} d^4x$$

が得られる。

次に物質場を考える。これは容易で

$$\begin{aligned} \delta S_m &= \frac{1}{c} \delta \int \mathcal{L} \sqrt{-g} d^4x = \frac{1}{c} \int \left(\frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial g^{\mu\nu}} \delta g^{\mu\nu} + \frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial \frac{\partial g^{\mu\nu}}{\partial x^\rho}} \delta \left(\frac{\partial g^{\mu\nu}}{\partial x^\rho} \right) \right) d^4x \\ &= \frac{1}{c} \int \left(\frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial g^{\mu\nu}} \delta g^{\mu\nu} - \frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial \frac{\partial g^{\mu\nu}}{\partial x^\rho}} \delta g^{\mu\nu} \right) d^4x \end{aligned}$$

となる。第2行目へは変分と微分を交換して部分積分を行ない、表面項は消えることを用いた。こうして、

$$\begin{aligned} \delta S_m &= \frac{1}{2c} \int T_{\mu\nu} \sqrt{-g} \delta g^{\mu\nu} d^4x \\ T_{\mu\nu} &= \frac{2}{\sqrt{-g}} \left(\frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial g^{\mu\nu}} - \frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial(\mathcal{L}\sqrt{-g})}{\partial \frac{\partial g^{\mu\nu}}{\partial x^\rho}} \right) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $T_{\mu\nu}$ はエネルギー・運動量テンソルである。

以上を纏めると、最小作用の原理から

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta S_g + \delta S_m \\ &= -\frac{c^3}{16\pi G} \int \left(R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} - \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu} \right) \sqrt{-g} \delta g^{\mu\nu} d^4x \\ &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。任意の $\delta g^{\mu\nu}$ について成り立つので、最終的に

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu} \quad (14.8)$$

が得られる。これをアインシュタインの重力場の方程式と呼ぶ。観測によると定数 Λ は小さな値をとる。この定数を宇宙定数と呼ぶ。重力場の方程式によると、物質のエネルギー・運動量分布（右辺）により重力場（計量 $g_{\mu\nu}$ ）が決まる。決まった時空間を物質は運動し、エネルギー・運動量分布を変えるが、それに応じて時空の幾何学が相応じて再決定される。すなわち、物質場と重力場はお互いがお互いを規定していくように、自己無撞着に決定される。

宇宙定数が零であれば、物質が存在しない ($T_{\mu\nu} = 0$) 時には重力場の方程式の解として平坦時空 $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ が許される。すなわち、“真空”では平坦時空である。しかしながら、宇宙定数が小さくても零でなければ、物質が存在しなくても時空が平坦でなくなる。そこで、宇宙定数の項を右辺に移項し、重力場の方程式を

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} \left(T_{\mu\nu} - \frac{c^4}{8\pi G} \Lambda g_{\mu\nu} \right)$$

としておく。そこで、宇宙定数の項を“真空のエネルギー・運動量密度”と解釈しよう。すなわち、

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}Rg_{\mu\nu} &= \frac{8\pi G}{c^4}\tilde{T}_{\mu\nu} \\ \tilde{T}_{\mu\nu} &= T_{\mu\nu} + T_{\mu\nu}^{(\text{vac})} \\ T_{\mu\nu}^{(\text{vac})} &= -\frac{c^4}{8\pi G}\Lambda g_{\mu\nu} \end{aligned}$$

と書く。こうして、“真空のエネルギー・運動量密度”も含めた上で、真にエネルギー・運動量密度が零、 $\tilde{T}_{\mu\nu} = 0$ のときには時空は平坦であると考えられることは可能である。4元速度を u_μ とすると、完全流体の時には、エネルギー密度を ρ 、圧力を p とし、エネルギー・運動量テンソルは

$$T_{\mu\nu} = (\rho + p)u_\mu u_\nu + pg_{\mu\nu}$$

と書けることが知られている。真空のエネルギー・運動量テンソル $T_{\mu\nu}^{(\text{vac})}$ にあてはめると、真空のエネルギー密度 $\rho^{(\text{vac})}$ と圧力 $p^{(\text{vac})}$ は

$$\rho^{(\text{vac})} = \frac{c^4}{8\pi G}\Lambda, \quad p^{(\text{vac})} = -\frac{c^4}{8\pi G}\Lambda$$

と対応づけられることがわかる^{||}。こうして、圧力が負になるので、宇宙定数の存在は宇宙膨張の原因になり得る。

§ 14.5 弱い重力場・強い重力場

§§14.5.1 ニュートンの万有引力の法則

前節では2つのパラメータ G と Λ が表れた。宇宙論的な観測事実から、宇宙定数と呼ばれる Λ は小さな値であることが知られてきた。では、残る G がどういった量であるか考察しよう。

非相対論的な近似では物質は光速に比べて十分遅い速さで運動しているが、必然的に重力場は弱くなくてはならなかった (§§12.3.2)。この時には、§12.3.2 でみたように計量テンソルで平坦時空からずれるのは

$$g_{00} = 1 + \frac{2\phi}{c^2}$$

であった。物質場のエネルギー・運動量テンソルとしては、 $T_{\mu\nu} = \rho c^2 u_\mu u_\nu$ を用いればよい。ここで、 ρ は質量密度、また、 u_μ は $u_\mu = \frac{dx_\mu}{ds}$ で定義した4元速度である。物質の速さは遅いので、4元速度 u_μ は $u_0 = 1$ 、 $u_1 = u_2 = u_3 = 0$ とし、物質場のエネルギー・運動量テンソルは

$$T_{00} = \rho c^2, \quad \text{その他の } T_{\mu\nu} = 0$$

となる。アインシュタインの重力場の方程式で、宇宙定数 Λ は小さいので0としておこう。このとき、重力場の方程式は

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}Rg_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4}T_{\mu\nu}$$

である。ここで、 μ と ν について縮約すると

$$R^\mu_\mu - \frac{1}{2}Rg^\mu_\mu = \frac{8\pi G}{c^4}T^\mu_\mu$$

^{||}完全流体の静止系では4元速度は $u_0 = 1, u_1 = u_2 = u_3 = 0$ 。ここでは、 $u_\mu = \frac{dx_\mu}{ds} = \frac{1}{c} \frac{dx_\mu}{d\tau}$ の定義を用いている。§11.2.6 と c だけ異なる。

であるが、 $g_{\mu}^{\mu} = 4$ であるので $R_{\mu}^{\mu} = R$ であることから

$$R = -\frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu}^{\mu}$$

となる。このスカラー曲率 R を重力場の方程式に代入すると

$$R_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} \left(T_{\mu\nu} - \frac{1}{2} T_{\rho}^{\rho} g_{\mu\nu} \right)$$

となる。今の非相対論的な近似の場合には $(0, 0)$ 成分のみエネルギー・運動量テンソルは成分を持つので、上の式の $(0, 0)$ 成分を考えよう。

$$R_{00} = \frac{8\pi G}{c^4} \left(T_{00} - \frac{1}{2} T_0^0 g_{00} \right) = \frac{8\pi G}{c^4} \left(\rho c^2 - \frac{1}{2} \rho c^2 \right) = \frac{4\pi G}{c^2} \rho$$

となる。非相対論的な近似では

$$\Gamma_{00}^i = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^i}, \quad (i = 1, 2, 3)$$

であった (§§12.3.2) ので、 ϕ の 1 次までではリッチテンソルは

$$R_{00} = \frac{\partial \Gamma_{00}^i}{\partial x^i}$$

のみが残る。一方、クリストッフェル記号は

$$\Gamma_{00}^i \approx -\frac{1}{2} g^{i\beta} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^{\beta}} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^i}$$

となるので、結局

$$R_{00} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^{i2}}$$

となる。アインシュタインの重力場の方程式 $R_{00} = \frac{4\pi G}{c^2} \rho$ に代入すると、非相対論的な近似のもとで、

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^i \partial x^i} = 4\pi G \rho$$

が得られる。この微分方程式の解は空間の 3 次元体積を dV' として

$$\phi(\mathbf{r}) = -G \int \frac{\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV'$$

と得られる。ここで、原点に質量 M の質点が置かれているときには** 原点からの距離 r のところでのポテンシャルとして、

$$\phi = -G \frac{M}{r}$$

** $\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = M \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ということである。ここで、 $\delta^3(\mathbf{r}) (= \delta(x)\delta(y)\delta(z))$ は (3 次元の) ディラックのデルタ関数と呼ばれる。ここで、 $\delta(x)$ を考えると、これは

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & (x = 0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

という性質を持つ。

となる。こうして、この重力場のもとで、質量 m の質点の感じる力 F は

$$F = -m \frac{\partial \phi}{\partial r} = -G \frac{mM}{r^2}$$

となる。これはニュートンが得た万有引力の法則に他ならない。したがって、我々が導入したパラメータ G はニュートンの万有引力定数に他ならないことがわかる。この G は

$$G = 6.674 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$$

という値を取る。

§§14.5.2 シュバルツシルト解

アインシュタインの重力場の方程式を、中心対称（球対称）な重力場について厳密に解いておこう。空間的に中心対称であるので、3次元空間で極座標 (r, θ, φ) をとれば、計量テンソルは θ, φ には依存しない。回転対称性から、最も一般的な ds^2 の表現は

$$ds^2 = A(r, t)dt^2 - B(r, t)dr^2 - C(r, t)(\sin^2 \theta d\varphi^2 + d\theta^2) + D(r, t)drdt$$

で与えられる。ここで、対称性を壊さないように (r, t) から (r', t') へ座標変換を行なう。

$$r = f_1(r', t'), \quad t = f_2(r', t') \quad (14.9)$$

この変換の自由度を用いて、新しい座標では

$$C(r', t') = r'^2, \quad D(r', t') = 0$$

となる座標系 (r', t') を取る。このとき、 A, B の代わりに

$$A(r', t') = c^2 e^{\nu(r', t')}, \quad B(r', t') = e^{\lambda(r', t')}$$

として、 ν と λ で表わしておこう。以上の準備のもとで、 (r', t') をあらためて (r, t) と書くと

$$ds^2 = e^{\nu} c^2 dt^2 - e^{\lambda} dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2)$$

となる。したがって、計量テンソルは

$$g_{00} = e^{\nu}, \quad g_{11} = -e^{\lambda}, \quad g_{22} = -r^2, \quad g_{33} = -r^2 \sin^2 \theta$$

$$g^{00} = e^{-\nu}, \quad g^{11} = -e^{-\lambda}, \quad g^{22} = -\frac{1}{r^2}, \quad g^{33} = -\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta}$$

となり、それ以外は0である。クリストッフェル記号で下付添え字の入れ替えたものを除いて0でないものは、ダッシュ(′)を r での微分、ドット ($\dot{\cdot}$) を ct での微分を表わすこととして、

$$\Gamma_{00}^0 = \frac{\dot{\nu}}{2}, \quad \Gamma_{10}^0 = \frac{\nu'}{2}, \quad \Gamma_{11}^0 = \frac{\dot{\lambda}}{2} e^{\lambda-\nu},$$

$$\Gamma_{00}^1 = \frac{\nu'}{2} e^{\nu-\lambda}, \quad \Gamma_{10}^1 = \frac{\dot{\lambda}}{2}, \quad \Gamma_{11}^1 = \frac{\lambda'}{2}, \quad \Gamma_{22}^1 = -r e^{-\lambda}, \quad \Gamma_{33}^1 = -r \sin^2 \theta e^{-\lambda}$$

$$\Gamma_{12}^2 = \frac{1}{r}, \quad \Gamma_{33}^2 = -\sin \theta \cos \theta, \quad \Gamma_{13}^3 = \frac{1}{r}, \quad \Gamma_{23}^3 = \cot \theta$$

と得られる。リーマンの曲率テンソルで、対称性を除いて零でないものは、 $R_{\alpha\beta}^{\mu\nu} = g^{\nu\rho} R_{\rho\alpha\beta}^{\mu}$ として

$$\begin{aligned} R_{01}^{02} &= -e^{-\lambda} \left(\frac{1}{2}\nu'' + \frac{1}{4}\nu'^2 - \frac{1}{4}\lambda'\nu' \right) + e^{-\nu} \left(\frac{1}{2}\ddot{\lambda} + \frac{1}{4}\dot{\lambda}^2 - \frac{1}{4}\dot{\lambda}\dot{\nu} \right) \\ R_{02}^{02} &= R_{03}^{03} = -\frac{1}{2r}\nu'e^{-\lambda}, \quad R_{21}^{21} = R_{31}^{31} = \frac{1}{2r}\lambda'e^{-\lambda}, \quad R_{32}^{32} = -\frac{1}{r^2}(e^{-\lambda} - 1), \\ R_{12}^{02} &= R_{13}^{03} = -\frac{1}{2r}\dot{\lambda}e^{-\nu} \end{aligned}$$

となる。こうして、リッチテンソルやスカラー曲率も計算できる。結果的にアインシュタインの重力場の方程式は

$$\begin{aligned} -e^{-\lambda} \left(\frac{1}{r^2} - \frac{\lambda'}{r} \right) + \frac{1}{r^2} &= \frac{8\pi G}{c^4} T_0^0, \\ -e^{-\lambda} \frac{\dot{\lambda}}{r} &= \frac{8\pi G}{c^4} T_0^1, \\ -e^{-\lambda} \left(\frac{\nu'}{r} + \frac{1}{r^2} \right) + \frac{1}{r^2} &= \frac{8\pi G}{c^4} T_1^1 \\ -\frac{1}{2}e^{-\lambda} \left(\nu'' + \frac{\nu'^2}{2} - \frac{\lambda'\nu'}{2} + \frac{\nu' - \lambda'}{r} \right) + \frac{1}{2}e^{-\nu} \left(\ddot{\lambda} + \frac{\dot{\lambda}^2}{2} - \frac{\dot{\lambda}\dot{\nu}}{2} \right) &= \frac{8\pi G}{c^4} T_2^2 \\ &= \frac{8\pi G}{c^4} T_3^3 \end{aligned}$$

となる。

質量が球対称に分布しているとしよう。重力場を生じる質量の外側ではエネルギー・運動量テンソルは零である。こうして、 $T_0^0 = T_1^1 = T_0^1 = 0$ として、重力場の方程式から

$$\begin{aligned} e^{-\lambda} \left(\frac{\nu'}{r} + \frac{1}{r^2} \right) - \frac{1}{r^2} &= 0 \\ e^{-\lambda} \left(\frac{\lambda'}{r} - \frac{1}{r^2} \right) + \frac{1}{r^2} &= 0 \\ \dot{\lambda} &= 0 \end{aligned} \tag{14.10}$$

が得られる。最後の式から λ は時間に依存しないことがわかる。最初の 2 式を辺々足すと

$$\nu' + \lambda' = 0, \quad \text{すなわち} \quad \nu + \lambda = f(t)$$

と、 ν と λ の和は座標に依らず時間だけの関数となる。しかしながら、 $\nu = -\lambda + f(t)$ となるので、 ds^2 で時間のところの計量は $e^\nu dt^2 = e^{-\lambda} e^{f(t)} dt^2$ となるので、新たに時間座標として $t \rightarrow \sqrt{f(t)}t$ ととれば dt^2 のところは $e^{-\lambda} dt^2$ となり、関数 $f(t)$ は消せる。こうして、一般性を失わず、 $f(t) = 0$ として良い。重力場の方程式 (14.10) の第 2 式に $-r^2$ を掛けると

$$\begin{aligned} 0 &= -r^2 \left[e^{-\lambda} \left(\frac{\lambda'}{r} - \frac{1}{r^2} \right) + \frac{1}{r^2} \right] = e^{-\lambda}(1 - \lambda'r) - 1 \\ &= \frac{d}{dr} (r(e^{-\lambda} - 1)) \end{aligned}$$

となるので、容易に積分でき、積分定数を $-r_g$ と書くと

$$r(e^{-\lambda} - 1) = -r_g, \quad \text{すなわち} \quad e^{-\lambda} = 1 - \frac{r_g}{r} = e^\nu$$

が得られる。ここで、 $\nu + \lambda = 0$ を用いた。定数 r_g を決定しよう。十分遠方では重力場は弱くなり、非相対論的になるであろう。このとき、計量は

$$e^\nu = g_{00} \approx 1 + \frac{2\phi}{c^2} = 1 - \frac{2GM}{c^2 r}$$

であることは、前小節で与えられた。ここで、 M は重力場を生む中心対称な全質量であり、 ϕ はニュートンの重力ポテンシャルに帰着していた。こうして、上式と比較して、定数 r_g は

$$r_g = \frac{2GM}{c^2}$$

と決定された。この定数 r_g を重力半径と呼ぶ。最終的に

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) c^2 dt^2 - \frac{1}{1 - \frac{r_g}{r}} dr^2 - r^2 (\sin^2 \theta d\varphi^2 + d\theta^2)$$

が得られた。これはシュバルツシルト解と呼ばれる厳密解である。これにより、任意の中心対称な質量分布を持つ物体によって生じる重力場が完全に決定される^{††}。

時間計量に注目しよう。 $r < r_g$ では計量の正負が変わってしまい、 $r = r_g$ で時空の性質は変化することがわかる。多くは r_g が小さく、物質分布の内側に r_g が存在するので、分布の外側 ($T_{\mu\nu} = 0$ のところ) で求めたシュバルツシルト解は適用できない。しかしながら、高密度天体では、 r_g が天体表面の外側にある場合も生じる。このような天体をブラックホールと呼ぶ。空間計量は $r = r_g$ で発散するように見えるが、この発散は見かけ上のもので、座標を取り替えると起こらない。実際、

$$r = r' + \left(\frac{r_g}{2}\right)^2 \frac{1}{4r'} + \frac{r_g}{2}$$

として新しい座標 r' に変換すると、シュバルツシルト解は、

$$ds^2 = \left(\frac{1 - \frac{r_g}{4r'}}{1 + \frac{r_g}{4r'}} dt\right)^2 - \left(1 + \frac{r_g}{4r'}\right)^4 (dr'^2 + r'^2 (\sin^2 \theta d\varphi^2 + d\theta^2))$$

となる。発散は起こらないが[‡]、時間計量で $4r' = r_g$ 、すなわち $r = r_g$ で計量が 0 になる。

§§14.5.3 重力場による時間の遅れ

シュバルツシルト解を用いて、重力場による時間の遅れを見ておこう。 $r > r_g$ に静止しておかれた時計の刻む固有時を τ とすると

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) c^2 dt^2 = c^2 d\tau^2$$

より、

$$d\tau = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) dt$$

が得られる。ここで、 dt は無限遠方で測定する時間であるとしよう。重力が強い、すなわち M が大きく r_g が大きいほど、 $d\tau$ は小さくなる。もちろん、 $r \rightarrow r_g$ と近づけると重力場は強くなり、やはり $d\tau$ は小さくなり、時間は遅れる。

^{††}ただし、角運動量や電荷を持たないものとする。

r から光が無窮遠方に向かって放射されたとしよう。光の振動数は単位時間あたりの波の山谷の個数であるので、振動数は時間の逆数に比例する。したがって、 r で放出された光の固有振動数 ν_0 は固有時 τ に反比例し、遠方で受け取るときのその光の振動数 ν は、遠方で時間 t に反比例する。こうして、

$$\nu_0 = \frac{1}{\left(1 - \frac{r_g}{r}\right)^{\frac{1}{2}}} \nu$$

が得られる。したがって、光が放出される場所が r_g に近いほど、遠方で観測される振動数は小さくなる。すなわち、重力による赤方偏移が起きる。ブラックホール近傍のように r_g が天体の外にあれば、 r_g 近傍で放射された光は遠方では振動数が 0 へ漸近する。 $r \rightarrow r_g$ で $\nu \rightarrow 0$ となり、無限赤方偏移が起きる。こうして、 $r < r_g$ からの光は観測できないことになる。したがって、ブラックホールでは、 $r < r_g$ の領域からは光すら観測できないことがわかる。

第IV部 古典電磁気学

15章 数学的準備—ベクトル解析の初歩—

11章では特殊相対論の要請から電磁場の基礎方程式である真空中でのマクスウェル方程式が導かれた。第III部では基本的な古典電磁気学について述べることにする。真空中でのマクスウェル方程式から種々の現象を導きたいのであるが、必要な数学のうち、頻出するガウスの定理とストークスの定理を述べる必要があると思われるので、ここで記載しておこう。

§15.1 勾配・発散・回転

§§15.1.1 スカラー場の勾配

まず、スカラー場、ベクトル場の微分を考えておこう。3次元空間で考えていこう。空間にある数が分布しているとしよう。これらは場所 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ の関数と見なされるので、 $\varphi(\mathbf{r})$ と表わそう。これをスカラー関数と呼ぶ。この関数は、 x, y, z の3変数に依存するので、偏導関数は、 $\frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial x}$ 、 $\frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial y}$ 、 $\frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial z}$ の3つ存在する。これらを纏めて、

$$\nabla\varphi(\mathbf{r}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial x} \\ \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial y} \\ \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial z} \end{pmatrix} \equiv \text{grad } \varphi(\mathbf{r}) \quad (15.1)$$

と記す。すなわち、偏微分により、スカラー場 $\varphi(\mathbf{r})$ からあらたにベクトル場が作られることになる。ここで、 ∇ は偏微分記号を並べて作った“ベクトル演算子”であり、ナブラと読む：

$$\nabla \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

また、grad はグラジエントと呼ばれ、勾配を意味する。

今、値の等しい等位面、すなわち $\varphi(\mathbf{r}) = \text{一定}$ が成り立つ面が存在するとしよう。このとき、 \mathbf{r} の近傍 $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ で φ の値は等しいので、 $\varphi(\mathbf{r} + d\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})$ が成り立っている。左辺をテーラー展開すると

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r} + d\mathbf{r}) &\approx \varphi(\mathbf{r}) + \left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial x} dx + \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial y} dy + \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial z} dz \right) \\ &= \varphi(\mathbf{r}) + \nabla\varphi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \end{aligned}$$

が得られるが、等位面ではこれが $\varphi(\mathbf{r})$ に等しいことから、

$$\nabla\varphi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = 0$$

が得られる。すなわち、勾配 $\nabla\varphi(\mathbf{r})$ から作られるベクトル場は、もとのスカラー場の等位面上のベクトル $d\mathbf{r}$ に直交していることがわかる。すなわち、勾配の方向は等位面に直交する方向であることがわかる。

§§15.1.2 発散と回転

次に、ベクトル場 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (A_x(\mathbf{r}), A_y(\mathbf{r}), A_z(\mathbf{r}))$ を考えよう。微分演算子 ∇ とベクトル場は、形式的に内積・外積の双方を考慮することができる。もちろん、微分記号は微分されるべき関数の左に置かれる。

まず、内積を考えよう。

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\partial A_x(\mathbf{r})}{\partial x} + \frac{\partial A_y(\mathbf{r})}{\partial y} + \frac{\partial A_z(\mathbf{r})}{\partial z} \equiv \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

ここで、div はダイバージェンスと読み、**発散**を意味する。

次に、外積を考える。

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \\ \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \\ \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \end{pmatrix} \equiv \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

ここで、rot はローテーションと読み、**回転**を意味する。

発散と回転の物理的意味を見ておこう。図 49 のような 2 つのベクトル場

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix}$$

を考えてみる。図 49 からわかるように、ベクトル場 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ は原点を中心に x - y 面で渦を巻いている場であり、ベクトル場 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ は x - y 面上に原点近傍から湧き出しているベクトル場である。このとき、発散、回転を計算すると

$$\text{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0, \quad \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$$

$$\text{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 2 \neq 0, \quad \text{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

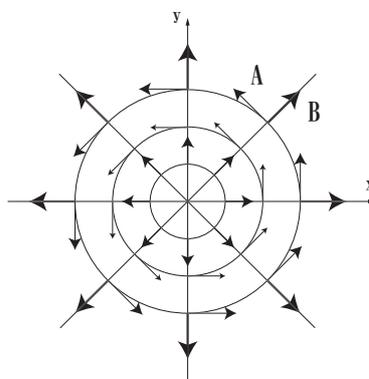


図 49:

となる。このように、渦を巻くのみで湧き出しのないベクトル場 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ に対しては、回転は零でないが、発散は零となる。湧き出しのみあり、渦の無いベクトル場 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ では、回転は零であるが発散は零でない。このように、発散はベクトル場の湧き出し（または吸い込み）を、回転はベクトル場の渦（回転）を特徴的に捉えるものと見て良からう。

§ 15.2 ベクトル場の積分定理

§§15.2.1 ガウスの定理

3次元ベクトル場 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ が存在しているとき、3次元の領域 V とその表面 S に関して、

$$\iiint_V \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) dV = \iint_S \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) dS \quad (15.2)$$

が成り立つ。ここで、 $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ は領域 V の表面 S の各点で定義される、面 S に垂直な大きさ1の単位ベクトルであり、法線ベクトルと呼ばれる。また、 dV は領域 V 内の微小体積、 dS は表面 S 上の微小面積である。上記の等式をガウスの定理と呼ぶ。証明は以下のとおりである。

図 50 のように、領域 V 中の微小な直方体を考える。 x 軸に垂直な面について、手前の面 $x + \Delta x$ に垂直な面上でのベクトル \mathbf{A} の x 成分は $A_x(x + \Delta x, y, z)$ で代表させよう。奥の面は、 $A_x(x, y, z)$ とする。このとき、面積 $\Delta y \Delta z$ を掛けて

$$\begin{aligned} A_x(x + \Delta x, y, z) \Delta y \Delta z - A_x(x, y, z) \Delta y \Delta z &= \left(\frac{A_x(x + \Delta x, y, z) - A_x(x, y, z)}{\Delta x} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \\ &= \frac{\partial A_x(x, y, z)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned}$$

と、左辺は微分で表わされる。左辺と右辺を入れ替えて積分にして表記すれば、

$$\iiint_{\Delta V} \frac{\partial A_x(x, y, z)}{\partial x} dx dy dz = \iint_{\Delta S(y-z \text{ 面})} A_x(x, y, z) n_x(x, y, z) dy dz$$

と表わされる。ここで、法線ベクトル \mathbf{n} は $n_x(x + \Delta x, y, z) = 1$ 、 $n_x(x, y, z) = -1$ となる。同様に、 y 軸、 z

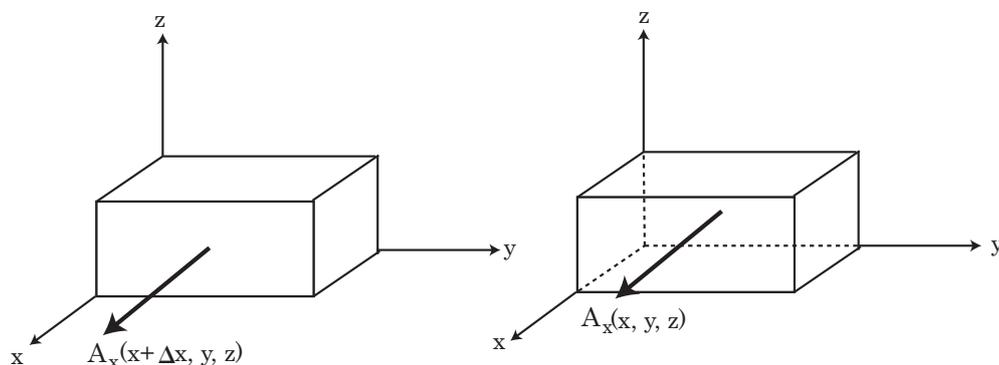


図 50:

軸に垂直な面についても考えると、

$$\begin{aligned}\iiint_{\Delta V} \frac{\partial A_y(x, y, z)}{\partial y} dx dy dz &= \iint_{\Delta S(z-x \text{ 面})} A_y(x, y, z) n_y dz dx \\ \iiint_{\Delta V} \frac{\partial A_z(x, y, z)}{\partial z} dx dy dz &= \iint_{\Delta S(x-y \text{ 面})} A_z(x, y, z) n_z dx dy\end{aligned}$$

が得られる。3つの式の辺々を足すと、

$$\begin{aligned}&\iiint_{\Delta V} \left(\frac{\partial A_x(x, y, z)}{\partial x} + \frac{\partial A_y(x, y, z)}{\partial y} + \frac{\partial A_z(x, y, z)}{\partial z} \right) dx dy dz \\ &= \iint_{\Delta S} (A_x(x, y, z) n_x dy dz + A_y(x, y, z) n_y dz dx + A_z(x, y, z) n_z dx dy)\end{aligned}$$

となるので、

$$\iiint_{\Delta V} \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) dV = \iint_{\Delta S} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} dS \quad (dV = dx dy dz)$$

という式が得られる。次に有限の体積を考える。領域 V を微少な領域 ΔV_i の和であると考えれば、体積素片 ΔV_i と隣の体積素片領域の接する面では法線ベクトルの向きが正反対であるので、考えている表面積分 (ΔS_i) は互いに打ち消しあうので、

$$\sum_i \iint_{\Delta S_i} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} dS = \iint_S \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} dS$$

が得られる。一方、体積積分は微少な体積素片 ΔV_i すべての寄与が足されるので、

$$\sum_i \iiint_{\Delta V_i} \operatorname{div} \mathbf{A} dV = \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{A} dV$$

となる。以上より、(15.2) 式のガウスの定理が証明された。

§§15.2.2 ストークスの定理

閉曲線 C に関するベクトル場 \mathbf{A} の線積分

$$\oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$$

を、循環と呼ぶ。循環が、閉曲線 C を境界にもつ面 S についての面積分で表わされるという定理がストークスの定理である。定理は以下のものである。

$$\oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \iint_S \operatorname{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} dS$$

証明は以下の通りである。

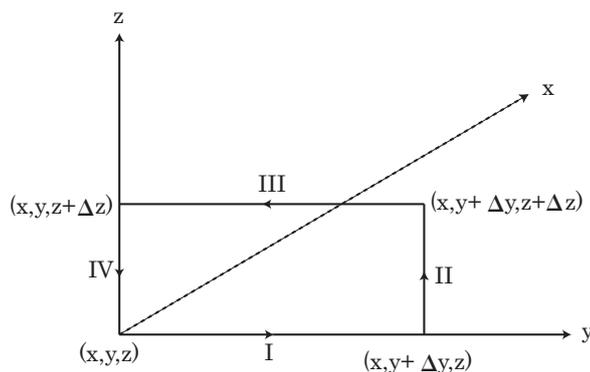


図 51:

図 51 の様に微小な矩形を考える。この矩形でベクトル場 \mathbf{A} に関する循環は、

$$\begin{aligned}
 \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} &= \int_I A_y dy + \int_{II} A_z dz + \int_{III} A_y dy + \int_{IV} A_z dz \\
 &= A_y(x, y, z)\Delta y + A_z(x, y + \Delta y, z)\Delta z - A_y(x, y, z + \Delta z)\Delta y - A_z(x, y, z)\Delta z \\
 &= -\left(\frac{A_y(x, y, z + \Delta z) - A_y(x, y, z)}{\Delta z}\right)\Delta y\Delta z + \left(\frac{A_z(x, y + \Delta y, z) - A_z(x, y, z)}{\Delta y}\right)\Delta y\Delta z \\
 &= -\frac{\partial A_y(x, y, z)}{\partial z}\Delta y\Delta z + \frac{\partial A_z(x, y, z)}{\partial y}\Delta y\Delta z = \left(\frac{\partial A_z(x, y, z)}{\partial y} - \frac{\partial A_y(x, y, z)}{\partial z}\right)\Delta y\Delta z \\
 &= (\text{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}))_x \Delta y\Delta z = \text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}\Delta y\Delta z \\
 &= \iint_{\Delta S} \text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}dS
 \end{aligned}$$

のように変形される。ここで、1 行目は \mathbf{A} と \mathbf{r} の内積をとり、1 行目から 2 行目へは積分の方向に注意して正負の符号が決まっている。また、積分路 I では、積分路中の点 (x, y, z) でベクトルの値を代表させ、同様に積分路 II, III, IV ではそれぞれの積分路中の点 $(x, y + \Delta y, z)$ 、 $(x, y, z + \Delta z)$ 、 (x, y, z) でベクトルの値を代表させた。3 行目から 4 行目へは矩形が微小であるので、差を微分で表わし、4 行目から 5 行目へはベクトル場の回転の定義を用いて、これが $(\Delta y \cdot \Delta z)$ 面に垂直な法線ベクトル $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$ との内積で表わされることに注意した。最後の行は矩形の面積積分の形にしておいた。

有限な領域 S を考え、これを微小な矩形 ΔS_i に分割しておき、すべての矩形について和をとると、

$$\sum_i \oint_{C_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \sum_i \iint_{\Delta S_i} \text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}dS$$

となる。ここで、左辺の和は、隣り合う矩形領域ではそれぞれの循環の線積分方向が正反対で積分が打ち消しあうので、

$$\sum_i \oint_{C_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$$

となる。一方、右辺の矩形の面積積分は、すべて和として寄与するので、

$$\sum_i \iint_{\Delta S_i} \text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}dS = \iint_S \text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}dS$$

となる。こうして、ストークスの定理が成り立つことが示された。

16章 電磁気学の基本法則

§16.1 真空中のマクスウェル方程式

11章で電磁場が真空中で満たす基本方程式系であるマクスウェルの方程式が導出された。ここではこれらの方程式が意味する内容について簡単に述べておこう。

まず、電磁相互作用は粒子と電磁ポテンシャル A_μ の結合で表わされ、相互作用の強さを q とした。実際には相互作用の強さ q は粒子が固有に持つ電荷によって決まる。観測される粒子の電荷は、素電荷 e [§] の整数倍に量子化されている[¶]。電荷には、正、負の両方が存在する。また、荷電粒子の流れが電流となる。これは、11章で4元電流として見たとおりである。また、速度 \mathbf{v} で運動する電荷 q の荷電粒子には11章で見たようにローレンツ力 $\mathbf{f} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ が働く。ここで、 \mathbf{E} 、 \mathbf{B} はそれぞれ、電場、磁束密度である。11章で導出された真空中の電場、磁束密度、荷電粒子が満たす基本方程式を再掲しておく。電場 \mathbf{E} から電束密度 \mathbf{D} を、また磁束密度 \mathbf{B} から磁場 \mathbf{H} を

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) \equiv \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(\mathbf{x}) \quad (16.3)$$

により定義する。ここで、 ϵ_0 、 μ_0 は真空中の誘電率、及び透磁率であり、光速を c として、 $c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}$ の関係がある。電磁場の基方程式であるマクスウェル方程式は

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{x}) &= \rho(\mathbf{x}), \\ \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{x}) &= \mathbf{j}(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{x})}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{x}) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{x})}{\partial t} \end{aligned} \quad (16.4)$$

であった。ここで、 $\rho(\mathbf{x})$ は電荷密度、 $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ は電流密度である。また、荷電粒子に働くローレンツ力は

$$\mathbf{f} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

である。これらが11章で導かれた基本となる方程式系であり、これをもとにして考察していこう。

§§16.1.1 電荷に関するクーロンの法則

電荷 Q を持った点粒子が、真空中で原点に存在しているとしよう。マクスウェル方程式で

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t)$$

であるが、今は時間 t に依存しない。点電荷が原点にあるとして、点電荷（原点）を含む半径 r の球で積分すると

$$\iiint \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{\epsilon_0} \iiint \rho(\mathbf{r}) dV$$

[§]後に単位が決定されるが、ここで用いられる単位系で $e = 1.6 \times 10^{-19}$ [C] である。

[¶]基本粒子であるクォークの電荷は、 $\frac{2}{3}e$ や $-\frac{1}{3}e$ などという分数電荷を持つ。

となる。点状の電荷が原点に置かれているので、生じる電場に特別な方向性は無く、球対称として良い。左辺はガウスの定理から、半径 r の球面での積分に置き換えられ、

$$\begin{aligned} \iiint \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}) dV &= \iint \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= 4\pi r^2 E(r) \end{aligned} \quad (16.5)$$

となる。ここで、原点からの距離 r での電場の大きさは一定であり、向きは外向き \mathbf{e}_r とした。表面積は $4\pi r^2$ である。一方、右辺は電荷密度の体積積分であり、電荷は原点に Q のみ存在するので積分は Q を与える。こうして

$$\frac{1}{\epsilon_0} \iiint \rho(\mathbf{r}) dV = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

を得る。こうして、

$$\mathbf{E}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r^2} \mathbf{e}_r$$

となる。こうして、静止した点電荷が作る電場は、距離の 2 乗に反比例し、大きさは点電荷の大きさに比例することがわかる。また電場の向きは電荷が正であれば電荷から発散する外向き、負であれば吸収される内向きになることがわかる。これをガウスの法則と呼ぶ。

点電荷 Q が作る電場のもとで、他の点電荷 q が Q から距離 r の点に置かれたとする。2 番目の電荷 q を持つ荷電粒子が受ける力は \mathbf{f} 、ローレンツ力の表式から

$$\mathbf{f} = q\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{qQ}{r^2} \mathbf{e}_r$$

と得られる。これはクーロンの法則と呼ばれる。ここで、単位ベクトル \mathbf{e}_r は 2 つの点電荷を結ぶ外向きの単位ベクトルであるので、同種の符号を持つ荷電粒子間 ($qQ > 0$) には斥力、異符の荷電粒子間 ($qQ < 0$) には引力が働くことがわかる。

§§16.1.2 単磁化の非存在

磁束密度 \mathbf{B} に関するマクスウェル方程式

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0$$

を電場に関するマクスウェル方程式 $\operatorname{div} \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$ に比較すると、右辺に電荷密度に対応する“磁化密度”が現れていないことがわかる。すなわち、N 極だけ、あるいは S 極だけといった単磁化は存在しない。任意の領域 V とその表面 S に対し、ガウスの定理を用いると

$$0 = \iiint \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) dV = \iint \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS$$

となり、磁束密度は必ずわき出しがあれば吸い込みもあり相殺する。すなわち、任意の領域の中に単磁化が存在し、 $\operatorname{div} \mathbf{B}$ が 0 にならないといった状況は起こりえないことがわかる。

§§16.1.3 マクスウェル・アンペールの法則

今、時間に依存しない場合を考察する。このとき、電流密度の入ったマクスウェル方程式は

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

となる。電束密度 \mathbf{D} の時間変化は無いとしている。流れる電流密度ベクトルを横切る閉曲面 S で面積分すると、 S に垂直な法線ベクトルを \mathbf{n} として、

$$\iint_S \text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \iint_S \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} \, dS$$

となる。左辺はストークスの定理を用いて、閉曲面 S の境界となる閉曲線を C として、

$$\iint_S \text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_C \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$$

となる。右辺から“電流” I を定義する。

$$I \equiv \iint_S \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} \, dS$$

こうして、

$$\oint_C \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = I$$

を得る。すなわち、電流 I は磁場 \mathbf{H} を生む。

今、無限に長い直線電流を考えると、対称性から、磁場は直線電流 I からの距離 r のみの関数であり、直線電流を取り囲むような磁場を発生させる。よって、

$$I = \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi r H(r)$$

となる。こうして、無限に長い直線電流の周りには、それを取り囲む様に、大きさ $H(r)$ の磁場が生じることがわかる。

$$H(r) = \frac{I}{2\pi r}$$

時間に依存する場合には、電流密度 \mathbf{j} に、電束密度の時間変化 $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ が加わり、磁場が生じることになる。これをマクスウェル・アンペールの法則と呼ぶ。

さて、マクスウェル方程式 (16.4) の第 3 式の $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ の項は、電荷の保存法則にとって不可欠である。(16.4) の第 3 式の両辺の発散 (div) をとると、

$$\text{div rot } \mathbf{H} = \text{div } \mathbf{j} + \text{div} \left(\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right)$$

となるが、任意のベクトル \mathbf{A} に対して $\text{div rot } \mathbf{A} = 0$ が成り立つので、結局

$$\text{div } \mathbf{j} + \frac{\partial \text{div } \mathbf{D}}{\partial t} = 0$$

となる。ここで、時間微分 ($\partial/\partial t$) と空間微分 (div) を入れ替えた。こうして、マクスウェル方程式 (16.4) の第 1 式を用いると、

$$\text{div } \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

が得られる。これは、電荷・電流密度の保存を表わす連続の方程式に他ならない。

§§16.1.4 ファラディの電磁誘導の法則

マクスウェル方程式

$$\text{rot}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

の両辺を、ある閉曲面 S で面積分しよう。面 S の法線ベクトルを \mathbf{n} として、

$$\iint_S \text{rot}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} \, dS = - \iint_S \frac{\partial\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \cdot \mathbf{n} \, dS$$

となるが、左辺はストークスの定理から、閉曲面 S の境界となる閉曲線を C として

$$\iint_S \text{rot}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_C \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r} \equiv V$$

となる。電場 \mathbf{E} を閉曲線 C に沿って積分したものは、この閉曲線を回路と見立てたときの“起電力” V と考えられる。一方、右辺は、時間微分と面積分を交換し、その際空間積分が先にとられてしまうので、時間微分は全微分で書けることに注意すると

$$- \iint_S \frac{\partial\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \cdot \mathbf{n} \, dS = \frac{d}{dt} \iint_S \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \, dS$$

となる。ここで、

$$\Phi \equiv \iint_S \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \, dS$$

は、磁束密度の面積分であり、“磁束”と呼ばれる。したがって、マクスウェル方程式は

$$V = -\frac{d\Phi}{dt}$$

と書ける。すなわち、磁束の時間変化は起電力を生む。これをファラディの電磁誘導の法則と呼ぶ。また、右辺に負符号が現れるのは、起電力により生じる電流は、その電流により作られる磁場が、もとの磁場の変化を打ち消すように生じることを意味している。これは特にレンツの法則と呼ばれる。

§§16.1.5 幾つかの注意

(1) 電流密度

電流密度について述べておこう。電荷の流れを平均したものを考える。これを電流密度 ($\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$) と呼ぶ。ここで、 n_i を i 粒子の単位体積あたりの粒子数、 q_i を i 粒子の電荷、 \mathbf{v}_i を i 粒子の速度、 $\langle \dots \rangle$ を \dots の平均として、電流密度 \mathbf{j} は

$$\mathbf{j} = \sum_{i=\text{粒子}} n_i q_i \langle \mathbf{v}_i \rangle .$$

と得られる。電流密度を、その流れる方向 (単位ベクトルを \mathbf{n}) の断面積 (dS) で積分したものが電流 ($I(t)$) である。

$$I = \iint_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} \, dS$$

(2) 電流間に働く力

磁場が電流に及ぼす力を求めておこう。磁束密度 \mathbf{B} が存在するとき、電荷 q 、速度 \mathbf{v} の荷電粒子が受ける力 \mathbf{f} は

$$\mathbf{f} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

であった。よって、単位体積当たりの荷電粒子数を n 、電流の流れる導線の断面積を S 、考えている部分の導線の長さを l とすると、電流を流れる導線には単位体積あたり nSl 個の荷電粒子が存在する。導線中を流れる荷電粒子が受ける力の合力 \mathbf{F} は

$$\mathbf{F} = nSl\mathbf{f} = nSlq\mathbf{v}_D \times \mathbf{B} = nqS\mathbf{v}_D \times \mathbf{B}l$$

となる。ここで、荷電粒子の速度を平均の速度 \mathbf{v}_D に置き直した。また、 $nq\mathbf{v}_D$ は電流密度 \mathbf{j} 、 $nqS\mathbf{v}_D$ は電流 \mathbf{I} になるので、

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} \times \mathbf{B}l$$

が得られる。今、無限に長い直線電流 I_1 が作る磁束密度 \mathbf{B}_1 が、それに平行に置かれて同じ方向に流れる無限に長い直線電流 I_2 に及ぼす力 \mathbf{F}_2 を求めよう。上式から、

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{I}_2 \times \mathbf{B}_1 l = I_2 B_1 l \mathbf{e}$$

が得られる。ここで、 \mathbf{e} は2つの導線に直交しており、2つの導線を結ぶ内向きの方向である。電流 I_1 が作る磁束密度 B_1 はアンペールの法則より、

$$B_1 = \mu_0 \frac{I_1}{2\pi r}, \quad (B_1 = \mu_0 H_1)$$

である。ここで、 r は2つの導線間の距離である。よって、力 \mathbf{F}_2 の大きさ F_2 は

$$F_2 = \mu_0 \frac{I_1 I_2 l}{2\pi r}$$

となる。

(3) 電磁気学の単位

電流、電荷といった電磁気学に現れる物理量を定める単位は、上の電流間の力から決定される。真空中で1mの間隔で平行に張られた無限に長い2本の直線電流を考え、等しい電流 ($I_1 = I_2$) を流したとき、 $l = 1\text{m}$ あたり

$$F = 2 \times 10^{-7} \text{ [N]}$$

のときの電流を

$$1 \text{ [A]} (\text{アンペア})$$

と定義する。ただし、このとき、真空の透磁率と呼ばれる定数 μ_0 については

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ [N/A}^2\text{]}$$

という値を選ぶ。この選び方は電流の単位を変えるだけで任意であるが、このように選ぶことにする。このとき、真空の誘電率 ϵ_0 は光速 c から

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2}$$

と決まる。

また、1[A] の電流が 1[s] 間に運ぶ電荷を 1[C](クーロン) と定義する。

以上が国際標準である SI(system interanationale) 単位系における単位の決定の仕方である。しかしながら、物質が素粒子から構成されているという知識から、電子の電荷 q を

$$q(\equiv -e) = -1.60217653 \times 10^{-19} \text{ [C]}$$

とし、単位時間あたり 1 C の電荷が運ばれる電荷の流れを、1 A とした方が理解しやすい。ここで、 e は素電荷と呼ばれる量である。通常、観測される素粒子が持つ電荷は素電荷 e の整数倍に量子化されている。但し、基本粒子であるクォークは、素電荷 e を単位にして、 $2/3$ や $-1/3$ といった分数電荷を持つことが知られている。

§ 16.2 物質中での Maxwell 方程式

§§16.2.1 誘電分極

物質に外部電場を加えると、物質内の原子や分子は正負に分極する (図 52)。物質内では異なる分子の分極の正負が打ち消し合い、実質的には何も変化がないが、物質表面には正負の電荷が現れる。これは電気分極と呼ばれる現象である。

物質全体としての分極の強さを電気分極ベクトル \mathbf{P} として表そう。その大きさは物質表面に現れる電荷密度により決まり、向きは外部電場と同じ向き、すなわち負から正への向きとしよう。物質表面に現れた電荷密度 ρ_P 、を分極電荷密度と呼ぶ。このとき、マクスウェル方程式のガウスの法則から、分極電荷密度 ρ_P と電気分極ベクトル \mathbf{P} には、電気分極ベクトルが負から正の方向に (通常の電場とは逆に) 定義されているので、

$$\operatorname{div} \mathbf{P} = -\rho_P$$

が成り立つ。ここで、符号に注意せよ。また、電気分極は、物質内に入ってきた電場 \mathbf{E} に比例するはずだから、

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E} \equiv \chi_e \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (\chi = \chi_e \epsilon_0)$$

と書けるであろう。ここで、比例係数として導入した χ_e を、電気感受率と呼ぶ。ところで、真空中では、真に存在する電荷密度を ρ として、 $\operatorname{div}(\epsilon_0 \mathbf{E}) = \rho$ だった。しかし、今は分極電荷密度が存在することも考慮して

$$\operatorname{div}(\epsilon_0 \mathbf{E}) = \rho + \rho_P = \rho - \operatorname{div} \mathbf{P}$$

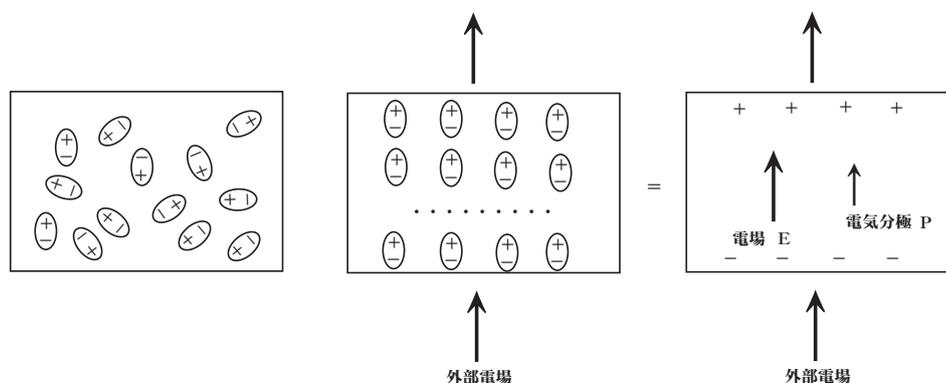


図 52:

となっている。よって、

$$\operatorname{div}(\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = \rho$$

と書き直して、真に存在する電荷密度 ρ のみで書き表すことができる。今、物質中での電束密度 \mathbf{D} を次のように導入しよう。

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &\equiv \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E} = \epsilon_0 (1 + \chi_e) \mathbf{E} \\ &\equiv \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \\ &\equiv \epsilon \mathbf{E} \end{aligned}$$

ここで、比誘電率 ϵ_r と物質中での誘電率 ϵ を

$$\begin{aligned} \epsilon_r &\equiv 1 + \chi_e, \\ \epsilon &\equiv \epsilon_0 \epsilon_r \end{aligned}$$

と定義する。以上、まとめて

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \tag{16.6}$$

となる。基本方程式の一つであるマクスウェル方程式のガウスの法則を表わす方程式は、真空中に比べて、物質中では真空の誘電率 ϵ_0 を物質中での誘電率 ϵ に置きかえれば良いことがわかる。

§§16.2.2 磁化

真空中では、時間変動が無い ($\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = 0$) ときには $\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j}$ または $\operatorname{rot} \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$ だった。磁場を加えると、磁気双極子 \mathbf{m} が現れる。これは磁場を作るので、

$$\operatorname{rot} \mathbf{m} = \mathbf{j}_m$$

と、誘起された磁気双極子による \mathbf{j}_m が現れる。よって、

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{j} + \mathbf{j}_m) = \mu_0 (\mathbf{j} + \operatorname{rot} \mathbf{m})$$

すなわち、

$$\operatorname{rot}(\mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{m}) = \mu_0 \mathbf{j}$$

となる。ここで、誘導磁化 \mathbf{M}_i を導入する：

$$\mathbf{M}_i \equiv \mu_0 \mathbf{m}$$

すると、2つ前の式は

$$\operatorname{rot}(\mathbf{B} - \mathbf{M}_i) = \mu_0 \mathbf{j}$$

となる。ここで、物質中での磁場 \mathbf{H} を

$$\mathbf{H} \equiv \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{B} - \mathbf{M}_i) \quad \left(= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{m} \right)$$

として導入すると、2つ前の式は

$$\text{rot } \mathbf{H} = \mathbf{j}$$

となる。時間変動があるときには、電荷の保存則を満足するように、電束密度の時間微分が電流密度に加わるのは、真空中の場合と同様である。したがって、

$$\text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (16.7)$$

となる。

さて、誘導磁化 \mathbf{M}_i は、外から磁場を与えたので発生したので、物質中の磁場 \mathbf{H} に比例しているはずである。よって、

$$\mathbf{M}_i = \chi_m \mathbf{H}$$

と書けるはずである。ここで、比例定数 χ_m を磁化率と呼ぶ。すると、導入した \mathbf{H} の式から、 $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}_i$ と書けるので、よって、

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}_i = \mu_0 \mathbf{H} + \chi_m \mathbf{H} = \mu_0 \left(1 + \frac{\chi_m}{\mu_0} \right) \mathbf{H} \\ &\equiv \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \\ &\equiv \mu \mathbf{H} \end{aligned}$$

となる。ここで、比透磁率 $\mu_r \equiv 1 + \frac{\chi_m}{\mu_0}$ と、透磁率 $\mu \equiv \mu_0 \mu_r$ を定義した。

物質中においても単磁荷が存在しないことには変わらないので、

$$\text{div } \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (16.8)$$

が成立する。また、電磁誘導の法則も、物質中で定義された磁束密度の変化に対し、

$$\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (16.9)$$

は変わらない。

以上から、物質の性質は誘電率、透磁率に反映され、結局、物質中での Maxwell 方程式は

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) \\ \text{div } \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= 0 \\ \text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \text{ただし } \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (16.10)$$

のように、真空中でのそれと同じ形を持つことがわかる。

17章 マクスウェル方程式からの帰結

§17.1 静電場

§§17.1.1 電位

時間に依存しない場合には、電場 \mathbf{E} は、4元ベクトル場のスカラーポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ を用いて

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\text{grad } \phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial \phi}{\partial x} \\ -\frac{\partial \phi}{\partial y} \\ -\frac{\partial \phi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

と書ける。時間依存性の無い場合を静電場と呼ぶ。このとき、 $\phi(\mathbf{r})$ は電位とも呼ばれる。電場ベクトルと、微小な変位 $d\mathbf{r}'$ との内積をとり、座標で積分すると

$$\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}_0) = - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$$

と書ける。ここで、 \mathbf{r}_0 は電位の基準を決める位置である。積分定数としての $\phi(\mathbf{r}_0)$ は電位の基準であり、任意に選ぶことが可能である。

さて、原点に置かれた点電荷 q による電位（スカラーポテンシャル） $\phi(\mathbf{r})$ を求めてみよう。今、電場は

$$\mathbf{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^2} \mathbf{e}_r$$

であった。ただし、 \mathbf{e}_r は原点から外向きの単位ベクトルとする。こうして、電位は

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}_0) &= - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \\ &= - \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \int_{r_0}^r \frac{1}{r'^2} dr' \quad (\mathbf{e}'_r \cdot d\mathbf{r}' = dr') \\ &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) \end{aligned}$$

と得られる。ここで、無限遠方 ($r_0 \rightarrow \infty$) で、電位を $\phi(\infty) = 0$ ととると、原点に置かれた点電荷による電位 ϕ は

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}$$

となる。

§§17.1.2 導体

電荷が自由に移動できる物体を導体と呼び、電流を通すことが出来る。導体に外から電場を加えると、導体内の電荷は電場に反応して移動し、導体内の電場を打ち消すまで続く。こうして、導体内では外からの電場を打ち消すように電荷が移動し、結果的に導体内の電場は零となる (図 53)。

導体表面に誘起される面電荷密度 σ を求めてみよう。導体表面を含んで、図 54 のように領域 V を考える。単位体積当たりの電荷密度を ρ とすると、Maxwell 方程式から、

$$\text{div } \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})$$

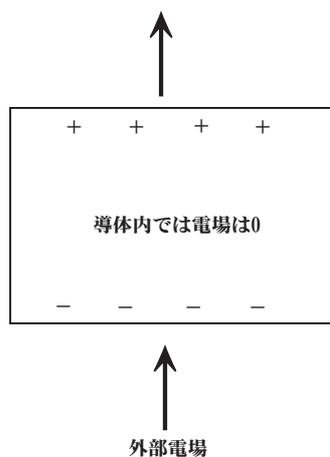


図 53:

である。両辺、領域 V で体積積分する。左辺の体積積分は

$$\begin{aligned}
 (\text{左辺}) &= \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{D} dV \\
 &= \iint_S \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dS \\
 &= DS
 \end{aligned}$$

となる。ここで、1行目から2行目へはガウスの定理を用い、2行目から3行目へは、 \mathbf{n} は領域 V から外向きに出る単位ベクトルであることと、電場 (電束密度 \mathbf{D}) は导体外部にしか存在しないことを用いた。一方、右辺の体積積分は、

$$\begin{aligned}
 (\text{右辺}) &= \iiint_V \rho dV \\
 &= \sigma S
 \end{aligned}$$

となる。ここで、電荷は导体表面にしかないので全電荷は、(面電荷密度 σ) \times (面積 S) となることを用いた。

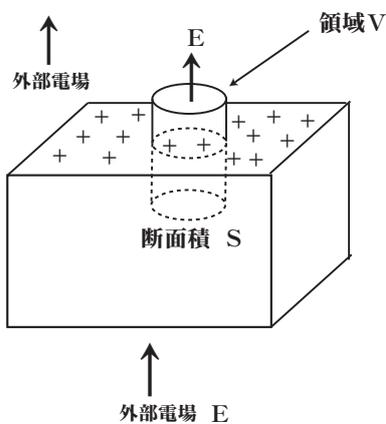


図 54:

以上、2式あわせて

$$D = \sigma$$

となり、導体表面に誘起される面電荷密度 σ は電束密度の大きさと書ける。ここで、導体外部、すなわち真空中での電束密度と電場の関係、 $D = \epsilon_0 E$ より、面電荷密度 σ は、外からかけた電場の大きさ E を用いて、

$$\sigma = \epsilon_0 E$$

と求められる。

§§17.1.3 コンデンサ

導体を2つ用意して、電荷を蓄えるコンデンサと呼ばれる回路部品を構成することが可能である。面積 S の平板な導体を、図 55 のように距離 d 離して2枚平行に置く。上を $+Q$ に、下を $-Q$ に帯電したとしよう。これを平行平板コンデンサと呼ぶ。

上側の導体平面を考える。導体を貫いて、図 56 の様な円柱の領域 V を考える。前節と同様に、 $\text{div } \mathbf{D} = \rho$ の両辺を領域 V で体積積分する。左辺は、

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= \iiint_V \text{div } \mathbf{D} dV \\ &= \iint_S \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= (D_u + D_u) \Delta S = 2D_u \Delta S \end{aligned}$$

とできる。ここで、1行目から2行目へはガウスの定理を用い、2行目から3行目へは、電場(電束密度 \mathbf{D})は平板に垂直に導体外部に存在すること、 \mathbf{n} は領域 V から外向きに出る単位ベクトルであること、また導体の上側と下側に同じ大きさの電束密度 D_u が生じていることを用いた。ただし、平板の端の効果は無視し、常に電場は平板に垂直に生じていると近似した。ここで、 ΔS は考えている円柱領域の底面積である。一方、右辺は、

$$\begin{aligned} \text{(右辺)} &= \iiint_V \rho dV \\ &= \sigma \Delta S \\ &= \frac{Q}{S} \Delta S \end{aligned}$$

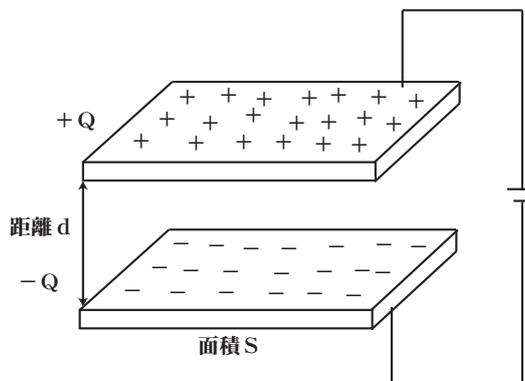


図 55:

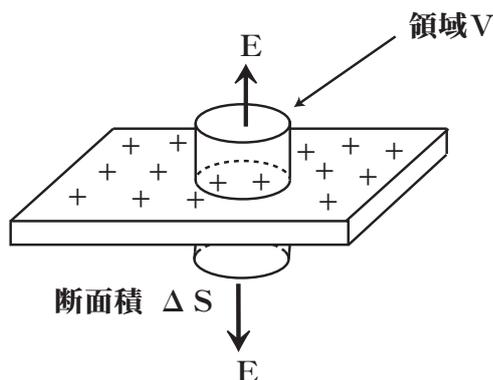


図 56:

となる。ここで、面電荷密度 σ は、(全電荷)/(面積) あるので、 $\sigma = Q/S$ となる。よって、

$$D_u = \frac{\sigma}{2} = \frac{Q}{2S}$$

と得られる。

同様に、下側の導体平板について考えよう。今度は、電場は導体に向かっていることに注意して

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{D} dV \\ &= \iint_S \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= (-D_1 - D_1)\Delta S \\ &= -2D_1\Delta S \end{aligned}$$

と得られる。電場(電束密度)の向きと、考えている領域 V の円柱の底面からの外向き法線ベクトルの向きが反対であることに注意せよ。一方、

$$\begin{aligned} \text{(右辺)} &= \iiint_V \rho dV \\ &= \sigma\Delta S \\ &= -\frac{Q}{S}\Delta S \end{aligned}$$

となるここで、面電荷密度 σ は、(全電荷)/(面積) だが、電荷が $-Q$ であった。結局、

$$D_1 = \frac{\sigma}{2} = \frac{Q}{2S}$$

となる。

上側の導体と下側の導体の作る電場(電束密度)の大きさは、符号を除いて同じであることがわかった。向きを考慮して両者を足し併せると、平板間の電束密度 D は

$$D = D_u + D_1 = \frac{Q}{2S} + \frac{Q}{2S} = \frac{Q}{S}$$

と得られる。また、平板間の外側では電場は打ち消し合い、零となる。以上から、平行平板コンデンサ内の電場の大きさ E は、蓄えられた電荷 Q 、導体平板の面積を S として、

$$E = \frac{Q}{\epsilon_0 S}$$

となる。コンデンサ内に誘電率 ϵ の物体を詰めるときには、上記の真空の誘電率 ϵ_0 を誘電体の誘電率 ϵ に置き換えれば良い。

$$E = \frac{Q}{\epsilon S}$$

さて、平行平板コンデンサに電荷を蓄えるため、両平板間に電位差 $V (= \phi_u - \phi_l)$ を与えているとする。ここで、 $\phi_{u(l)}$ は上側（下側）の電位である。よって、

$$\begin{aligned} V &= \phi_u - \phi_l = \left| - \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} \right| = Ed \\ &= \frac{Qd}{\epsilon S} \end{aligned}$$

となる。ここで、コンデンサの電場 E を用いた。こうして、平行平板コンデンサの電気容量 C を導入して、上式はコンデンサの電極間の電位差 V 、蓄えられる電荷 Q の関係として

$$\begin{aligned} Q &= CV \\ C &\equiv \frac{\epsilon S}{d} \end{aligned}$$

と表わされる。すなわち、同じ電位差 V ならば、電気容量 C が大きいほど、コンデンサに蓄えられる電荷 Q は多くなることがわかる。また、平行平板コンデンサの電気容量を大きくするには、 C の表式から、極板面積 S を大きくする、極板間隔 d を小さくする、極板間に誘電率 ϵ の大きな誘電体を詰めればよいことがわかる。

次に、コンデンサに蓄えられるエネルギーを考えよう。電荷 q に働く力 F は、 $F = qE$ であった。今、コンデンサに電位差を与え、電荷 q を距離 d だけ運ぶときに必要な仕事を行い、コンデンサに電荷を貯めていくことにする。このとき必要な仕事 W は、 $W = Fd = qEd = qV$ ($F = qE$ かつ電位差 $V = Ed$) と得られる。電位差 V に逆らって Δq だけ電荷を増したときに要する仕事を ΔW と書くと、今得られた仕事の式から、 $\Delta W = \Delta q \times V = \Delta q \cdot \frac{q}{C}$ となる。電荷を 0 から Q までコンデンサにためるのに必要な仕事 W は、 ΔW を 0 から Q まで加え（積分し）て

$$W = \int_0^Q dW = \int_0^Q \frac{q}{C} dq = \frac{Q^2}{2C}$$

と得られる。これだけの仕事が必要だったので、コンデンサにはこの仕事分がエネルギーとして蓄えられている。 $Q = CV$ の関係を用いて、コンデンサに蓄えられた静電エネルギー W は

$$W = \frac{Q^2}{2C} = \frac{1}{2} CV^2$$

となる。

§ 17.2 定常電流と磁場

§§17.2.1 オームの法則

導体では §§15.1.2 で述べたように、外部から電場を加えると、導体内の電場を打ち消すように電荷が移動する。これは、導体中に自由電子が存在することにより実現される。電子が持つ電荷は $-e$ であるので、電子の流れが電流になるのではあるが、電子の電荷が負なので電子の流れと電流の向きは反対であるように定義されている。導体を構成する原子が周期的に並んでいると電子は散乱されずに進んでいくのであるが、実際には物質には不純物が存在したり、格子欠陥があったり、原子（イオン）の熱振動による散乱などがあり、電子は散乱

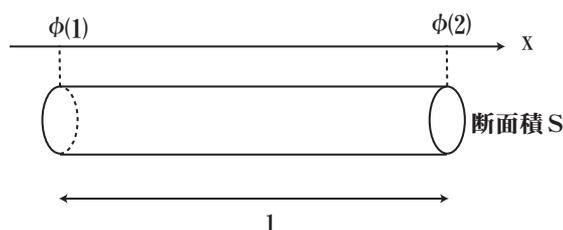


図 57:

されながら進むことになる。これが、電気抵抗となる。導体中には多数の自由電子が存在するので、電子の平均速度を v_D とし、全ての電子が平均速度で運動していると単純化して考えよう。平均速度は $v_D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n v_i$ と書かれる。ここで、 n は単位体積当たりの電子数とした。和は単位体積中の n 個の自由電子についてとるものとする。自由電子が単位時間に不純物等に衝突して散乱される回数は速度に比例するので、速度に比例した抵抗力 $-\frac{m}{\tau} v_D$ が働くと考えればよい。ここで、速度に比例した抵抗力の比例係数を m/τ とした。 m は電子の質量であり、時間の次元を持つ定数 τ (緩和時間) を用いた。こうして、自由電子に対する運動方程式は

$$m \frac{dv_D}{dt} = -e\mathbf{E} - \frac{m}{\tau} v_D$$

と書ける。電子の電荷は $-e$ である。定常の流れになると、電子の平均速度 v_D は変化しなくなるので、運動方程式の左辺を 0 とし、

$$-e\mathbf{E} - \frac{m}{\tau} v_D = 0$$

から、自由電子の最終的な平均速度が得られる。

$$v_D = -\frac{e\tau}{m} \mathbf{E}$$

電子は電荷を持つので、電子の流れが電流密度 \mathbf{j} となるが、電子の電荷が負であることを考慮して

$$\mathbf{j} = n(-e)v_D = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E}$$

と得られる。以上より、まとめて、

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \sigma \mathbf{E} \\ \sigma &\equiv \frac{ne^2\tau}{m} \end{aligned} \quad (17.1)$$

と得られる。すなわち、電流密度は電場に比例する。これをオームの法則と呼ぶ。また、比例係数として導入した σ を電気伝導度と呼ぶ。

次に、電流の方向のみを考え、その方向を x 方向としよう。電流密度の大きさ j は、電位 (スカラーポテンシャル) ϕ を用いて

$$j = \sigma E = -\sigma \frac{d\phi}{dx}, \quad (\mathbf{E} = -\nabla\phi)$$

と書けるので、 x 方向の導線の長さ l 、それに垂直な断面積 S で体積分して

$$\iiint j dx dS = -\sigma \iiint \frac{d\phi}{dx} dx dS$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= \int \left(\iint j dS \right) dx = \int I dx = Il, & \left(I = \iint j dS : \text{電流} \right) \\ \text{(右辺)} &= -\sigma \iint \left(\int \frac{d\phi}{dx} dx \right) dS = -\sigma \iint (\phi(2) - \phi(1)) dS = -\sigma S(\phi(2) - \phi(1)) = \sigma SV \\ & & (V = |\phi(1) - \phi(2)| : \text{電位差}) \end{aligned}$$

と変形されるので、両辺等しいことから

$$Il = \sigma SV$$

と表わすことができる。整理して、

$$\begin{aligned} V &= RI & (17.2) \\ R &= \frac{l}{\sigma S} \end{aligned}$$

と得られる。これもまた、オームの法則と呼ばれる。ここで導入した比例係数 R を電気抵抗、電気伝導度の逆数 $\frac{1}{\sigma}$ を抵抗率と呼ぶ。

§§17.2.2 ジュール熱

電気抵抗が存在すると、速度に比例した力が働くことで、エネルギーが散逸していくことがわかる。このエネルギーは熱として散逸される。電流が流れることにより発生する熱を考えよう。

速さ v_D の電子が Δt の時間に動く距離は $v_D \Delta t$ である。また、電場により電子が受ける力は $-eE$ である。したがって、仕事は、(力)×(移動距離)となるので、電場が自由電子1個にする仕事は $-eEv_D \Delta t$ となる。ここで、導線の単位体積当たりの電子数を n 、導線の断面積を S 、考えている導線の長さを l とすると、電子が動く導線に存在する電子数は nSl 個となる。よって、電場が導線内の電子にする仕事 ΔW は

$$\Delta W = -eEv_D \Delta t \cdot nSl = n(-e)v_D S \cdot El \cdot \Delta t = IV \Delta t$$

となる。ここで、 $-nev_D \equiv j$ は電流密度、 $jS \equiv I$ は電流、 $El \equiv V$ は電位差である。以上から、電場がする単位時間当たりの仕事、すなわち仕事率 W は

$$W = \frac{\Delta W}{\Delta t} = IV$$

と書ける。オームの法則を用いると、

$$W = IV = I^2 R = \frac{V^2}{R}$$

とも書ける。電場がした仕事は熱として発生することになる。これをジュール熱と呼ぶ。

電流密度 \mathbf{j} と電場 \mathbf{E} を用いて、ジュール熱は

$$W = IV = \iint \mathbf{j} dS \cdot \int dx \mathbf{E} = \iiint \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} dV \quad (17.3)$$

と書けることに注意しよう。このとき、 $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ が単位体積当たりのエネルギーになっていることがわかる。

図 58:

§§17.2.3 コイルが作る磁場

ここでは、無限に長いソレノイド (コイル) の中にできる磁場を考えてみよう。電流密度の時間変化の無い定常電流のときには、マクスウェル方程式は

$$\text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

であり、図 58 の様な積分経路 C をとって両辺を積分する。左右両辺は

$$(\text{左辺}) = \iint \text{rot } \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dS = \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = 2H_u l$$

$$(\text{右辺}) = \iint \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS = nIl, \quad (n: \text{単位長さ当たりの導線の巻き数})$$

と得られる。ここで、 H_u は図 58 の S を囲む磁場の強さである。よって、両辺等しいと置くと

$$H_u = \frac{1}{2}nI$$

となる。同様に、下側を流れるところで積分径路をとると、下側の導線が作る磁場の大きさを H_l として、上側と同様に

$$H_l = \frac{1}{2}nI$$

が得られる。ソレノイドの外側では H_u 、 H_l の大きさは等しく向きが反対になるので、磁場は打ち消しあい、零となる。ソレノイドの内側では同じ向きになり、うしてソレノイドの内側に生じる磁場の大きさ H は、

$$H = H_u + H_l = nI, \quad \text{または} \quad B = \mu nI$$

が得られる。したがって、ソレノイド内部の磁束密度を大きくするには、コイルの単位長さ当たりの巻き数 n を増やす、電流 I を強くする、透磁率 μ の大きな物質を入れる、といった方法が考えられる。

§§17.2.4 ビオ・サバルの法則

電流密度 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ が作る磁場を考えよう。ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ を用いると、磁束密度 \mathbf{B} は $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ と表わされることを思い出そう。導体内では電場は存在しないので、 $\text{div } \mathbf{E} (= \rho/\epsilon) = 0$ である。オームの法則から、 $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ であったので、

$$\text{div } \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma \text{div } \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$$

が得られる。一方、Maxwell 方程式の、時間に依存しないマクスウェル・アンペールの法則から、

$$\text{rot } \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

なので、 $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ より、

$$\mu \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \text{grad div } \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

が得られる。ここで、最後の等式は、任意のベクトル場 \mathbf{V} に対して成り立つベクトル解析の公式 $\text{rot rot } \mathbf{V}(\mathbf{r}) = \text{grad div } \mathbf{V}(\mathbf{r}) - \nabla^2 \mathbf{V}(\mathbf{r})$ を用いた。今、

$$\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (17.4)$$

という条件を課しておくことにしよう^{||}。そうすると、上式は

$$\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mu \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

と簡単化される。式 (17.4) の妥当性は、後に確かめることにしよう。上の微分方程式はポアソン方程式と呼ばれており、解くことが可能である。その解は

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu}{4\pi} \iiint \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}'$$

となることが知られている。よって、電流密度 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ が作る磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ は、ベクトルポテンシャルのローテーションをとることで、

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu}{4\pi} \iiint \text{rot} \left(\frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d^3 \mathbf{r}' \\ &= \frac{\mu}{4\pi} \iiint \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (17.5)$$

として得られる。これをビオ・サバールの法則と呼ぶ。

電流の小部分 $I dx$ が作る磁場を考えよう。先ほど得られた (17.5) 式で、 $\mathbf{j} = j \mathbf{n}$ とする。 j は電流密度の大きさ、 \mathbf{n} は電流の流れる方向の単位ベクトルである。このとき、電流の流れる方向を dx 、それに垂直な断面を dS として、

$$dx \iint \mathbf{j} dS = dx \iint j \mathbf{n} dS = dx \mathbf{n} I = I dx$$

と変形できる。ここで、 $\iint j dS = I$ は電流であり、電流の流れる方向のベクトルは $dx \mathbf{n} = d\mathbf{x}$ となる。以上より、

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu}{4\pi} \iiint \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 \mathbf{r}' \\ &= \frac{\mu}{4\pi} \int dx' \iint \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dS' \\ &= \frac{\mu I}{4\pi} \int d\mathbf{x}' \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \end{aligned}$$

が得られる。これが、電流 I が作る磁束密度を与える。

§ 17.3 電磁誘導

§§17.3.1 相互誘導・自己誘導

今、ソレノイドを2つ、図 59 の様に配置したとしよう。1次コイルに電流 I_1 を流すと、1次コイルには I_1 に比例した磁場が生じる。磁場が電流 I_1 に比例するので、2次コイルを貫く磁束 Φ_2 もまた電流 I_1 に比例する。比例定数を M として、 $\Phi_2 = MI_1$ と表わされる。1次コイルに流れる電流が変化したとすると、2次コイルを貫く磁束が変化するので、電磁誘導の法則から起電力 V_2 が生じる。

$$V_2 = -\frac{d\Phi_2}{dt} = -M\frac{dI_1}{dt}$$

この現象を相互誘導と呼び、 M を相互インダクタンスと呼ぶ。

今度は、単一のソレノイドに電流 I が流れているとする。自分自身のソレノイドを貫く磁束を Φ とすると、 Φ は流れる電流に比例するので、比例定数を L として、 $\Phi = LI$ と表わされる。ここで、ソレノイドに流れる電流が時間変化したとしよう。すると、自分自身のソレノイド中の磁束が変化するので、自分自身のソレノイドに誘導起電力 V が生じることになる。すなわち、

$$V = -\frac{d\Phi}{dt} = -L\frac{dI}{dt}$$

この現象を自己誘導と呼び、 L を自己インダクタンスと呼ぶ。

§§17.3.2 ソレノイドに蓄えられるエネルギー

ソレノイドを流れる電流 I_L が、時刻 $t = 0$ で $I_L = 0$ 、 $t = t_1$ で I になったとしよう。自己誘導からコイルに生じる起電力は $V = -L\frac{dI_L}{dt}$ であった。したがって、 Δt の時間に、この起電力に逆らって $\Delta Q \equiv I_L \Delta t$ の電荷を運ばないといけないので、このために必要な仕事 ΔW は、

$$\begin{aligned} \Delta W &= (\text{力}) \times (\text{移動距離}) = (\Delta QE) \times (\Delta x) = (\Delta Q) \times (E\Delta x) = (I_L \Delta t) \times (V) \\ &= I_L \Delta t \cdot L \frac{dI_L}{dt} \end{aligned}$$

となる。ここで、電場の大きさを E として必要な力は ΔE 、移動距離を dx として電位差 V は $V = E dx$ である。よって、仕事 W は時間 $t = 0$ から $t = t_1$ まで積分し、

$$W = \int \Delta W = \int_0^{t_1} L \frac{dI_L}{dt} \cdot I_L dt = \int_0^I LI_L dI_L = \frac{1}{2} LI^2$$

図 59:

∥ゲージ変換の自由度 (13.12) を固定する条件の一つで、クーロンゲージと呼ばれる。

となる。こうして、これだけの仕事がソレノイドに蓄えられることになる。蓄えられたエネルギーは

$$W = \frac{1}{2}LI^2$$

と得られる。

§§17.3.3 LCR 回路

電気容量 C のコンデンサ、抵抗値 R の電気抵抗、自己インダクタンス L のソレノイドを直列に接続した電気回路を考えておこう。この回路に電流 I が流れているとする。コンデンサ、抵抗、ソレノイドの両端の電位差 V_C 、 V_R 、 V_L はそれぞれ

$$Q = CV_C, \quad V_R = RI, \quad V_L = L \frac{dI}{dt}$$

となる。よって、全電位差 V は

$$V = V_C + V_R + V_L = \frac{Q}{C} + RI + L \frac{dI}{dt}$$

である。ここで、電流と電荷の変化は

$$I = \frac{dQ}{dt}$$

の関係があることに注意すると、上の電位差の式は

$$L \frac{d^2Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{1}{C}Q = V$$

と書き表すことができる。

この回路が交流電源 $V = V_0 \sin(\Omega t)$ に繋がれているとすると

$$L \frac{d^2Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{1}{C}Q = V_0 \sin(\Omega t)$$

となり、 $L \leftrightarrow m$ 、 $R \leftrightarrow \mu$ 、 $\frac{1}{C} \leftrightarrow k$ 、 $Q \leftrightarrow x$ とかくと、

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + \mu \frac{dx}{dt} + kx = V_0 \sin(\Omega t)$$

となって、摩擦のある場合の強制振動の運動 (§9.4 を見よ) と同じ方程式が得られる。こうして、この電気回路でも強制振動で見られた共鳴 (共振) 現象などが見られることがわかる。

18章 電磁波

§ 18.1 電磁波

真空中 ($\rho = 0$, $\mathbf{j} = \mathbf{0}$) での Maxwell 方程式は、

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (18.1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (18.2)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (18.3)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (18.4)$$

と書ける。式 (18.3) に rot を施して、 $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E}$ となるベクトル解析の公式を用いると、(18.1) を使って

$$(\text{左辺}) = \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E}$$

となる。一方、右辺は (18.4) を用いて

$$(\text{右辺}) = -\operatorname{rot} \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) = -\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \mathbf{B} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$$

となる。両辺等しいと置いてまとめると

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \nabla^2 \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0} \quad (18.5)$$

が得られる。これは波動方程式であり、電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ は、速さ $c \equiv \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ で伝わる波動であることを意味している。

同様にして、(18.4) の両辺に rot を施し、(18.2) と (18.3) を用いると、

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \nabla^2 \right) \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0}$$

が得られる。この式はまた、磁束密度 \mathbf{B} 、または磁場 $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0$ は、速さ $c \equiv \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ で伝わる波動であることを意味している。

こうして、重要な結論が導かれる。すなわち電磁場は波動として伝わる。電磁場の波動を電磁波と呼ぶ。

電磁波の伝わる速さ c は

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s} \quad (18.6)$$

となった。これは光速と一致しており、光（可視光）は電磁波の一種であると結論される。

§ 18.2 電磁波の進行方向

電磁場が z 座標と時間 t に依存しているとしよう。すなわち、 $\mathbf{E}(z, t)$ 、 $\mathbf{B}(z, t)$ とする。このとき、Maxwell 方程式は

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} = 0 &\quad \longrightarrow \quad \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 &\quad \longrightarrow \quad \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &\quad \longrightarrow \quad \begin{pmatrix} -\frac{\partial E_y}{\partial z} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial B_x}{\partial t} \\ -\frac{\partial B_y}{\partial t} \\ -\frac{\partial B_z}{\partial t} \end{pmatrix} \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &\quad \longrightarrow \quad \begin{pmatrix} -\frac{\partial B_y}{\partial z} \\ \frac{\partial B_x}{\partial z} \\ 0 \end{pmatrix} = \epsilon_0 \mu_0 \begin{pmatrix} \frac{\partial E_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と書かれる。上式の第 3、4 式の第 3 成分から

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial t} = 0$$

が得られる。よって、この式と $\operatorname{div} \mathbf{E} = 0$ 、 $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ の式から、 E_z 、 B_z ともに z にも t にも依存しない定数であることがわかる。定常的な場は電磁波の伝播に影響しないので、 $E_z = B_z = 0$ と置いてよい。

電場の z 成分は $E_z = 0$ となったので、 \mathbf{E} は z 軸に垂直な平面に存在する。そこで、電場 \mathbf{E} が向く方向を x 方向にとろう。このとき、 $E_y = E_z = 0$ である。こうして、 $\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ と $\operatorname{rot} \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ の式の第 1、2 成分からそれぞれ、

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\partial B_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} &= -\frac{\partial B_y}{\partial t} \\ -\frac{\partial B_y}{\partial z} &= \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} \\ \frac{\partial B_x}{\partial z} &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。上式の第 1 式と第 4 式から B_x は z にも t にも依存しない定数であることがわかるので、先ほどと同様に $B_x = 0$ として良い。こうして、

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E(z, t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ B(z, t) \\ 0 \end{pmatrix}$$

となり、 \mathbf{E} と \mathbf{B} は直交していることがわかった。

次に電磁波の進行方向を考察しよう。電場 \mathbf{E} は x 成分しか持たず、かつ z と t のみの関数であるので、波動方程式 (18.5) は、

$$\frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial t^2} - \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial z^2} = 0$$

となる。これは今考えている電場は z 方向に進行する波動であることを示している。 \mathbf{B} についても同様である。従って、電磁波は電場 \mathbf{E} 、磁束密度 \mathbf{B} の両方に直交した方向に進むことがわかる ($\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ の方向)。

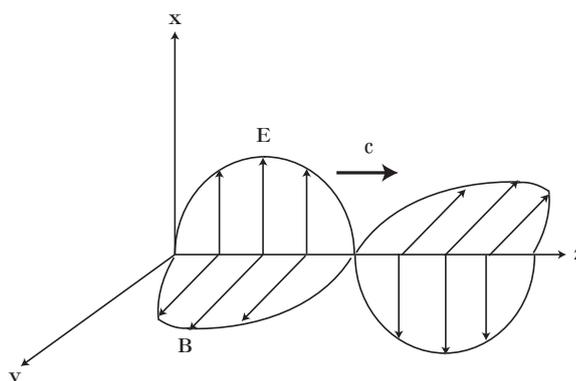


図 60:

§ 18.3 電磁場のエネルギー

電磁波は $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ の方向に進むことがわかった (図 60)。そこで、 $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ ($\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu$) の発散を計算してみよう。

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}) &= \mathbf{H} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H} \\ &= -\mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{E} \cdot \left(\mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

ここで、1行目はベクトル解析の公式を用い、1行目から2行目へは Maxwell 方程式を用いた。ただし、ここでは $\rho \neq 0$ 、 $\mathbf{j} \neq 0$ としている。両辺を、ある空間領域で体積積分して、項の順序を変えると、

$$-\iiint \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) dV = \iiint \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} dV + \iiint \operatorname{div}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ 、 $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$ に注意すると、左辺の被積分関数は

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \frac{d}{dt} \int_0^t \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') \cdot \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t')}{\partial t'} dt' = \frac{d}{dt} \int_0^{\mathbf{D}} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} = \frac{d}{dt} \int_0^{\mathbf{E}} \epsilon \mathbf{E} \cdot d\mathbf{E} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}^2 \right) \\ \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \frac{d}{dt} \int_0^t \mathbf{H}(\mathbf{r}, t') \cdot \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t')}{\partial t'} dt' = \frac{d}{dt} \int_0^{\mathbf{B}} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} = \frac{d}{dt} \int_0^{\mathbf{H}} \mu \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\mu}{2} \mathbf{H}^2 \right) \end{aligned}$$

と式変形できる。また、右辺の最後の項はガウスの定理を用いて面積分に変えると、結局、

$$-\frac{d}{dt} \iiint \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}^2 + \frac{\mu}{2} \mathbf{H}^2 \right) dV = \iiint \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} dV + \iint \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} dS \quad (18.7)$$

ただし $\mathbf{S} \equiv \mathbf{E} \times \mathbf{H}$

となる。この式の意味を考えよう。右辺第2項は §§15.2.2 の (17.3) 式で見たジュール熱である。従ってこの式はエネルギーに関する式である。また、右辺第2項は、 $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ が電磁波の進行方向であることから、考えている体積領域からその表面を通して電磁場のエネルギーが流れ \mathbf{S} で逃げていくと考えられる。従って、左辺は電磁場のエネルギーが時間とともに減少する時間変化の割合を与えていると考えられ、 $\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}^2 + \frac{\mu}{2} \mathbf{H}^2$ は電磁場のエネルギー密度と理解される。また、 $\mathbf{S} \equiv \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ はポインティングベクトルと呼ばれる。

第V部 量子力学

19章 量子力学の基礎方程式と数学的定式化

第5章において、物質の波動性を決定づける基礎方程式として、シュレーディンガー方程式 (5.5) を導出した。また、時間に依存しない場合には (5.7) となった。ここに再掲しておこう。

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (19.1)$$

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

$$\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = -i\hbar \nabla,$$

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (19.2)$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\mathbf{r}).$$

§5.4 で述べたように、物質の波動性を示す波動関数 ψ は、確率波としての意味での波動であった。また、§5.3 で述べたように、波動関数は重ね合わせをすることが可能であった。重ね合わせが可能であるので、波動関数が張る空間は線形空間（ベクトル空間）と考えてよい。こうして、波動関数が張る空間でのベクトルを $|\psi\rangle$ と表わすことにする。このベクトルにより系の状態が決定されるので、これを状態ベクトルと呼ぶ。ベクトルからスカラー量（数）を与えるために、考えている線形空間に双対な空間を考え、そこでのベクトルを $\langle\varphi|$ と書こう。こうすることで、内積が定義され、ベクトル $|\psi\rangle$ からスカラー量が得られる。内積を次のように定義する。

$$\langle\varphi|\psi\rangle \equiv \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}). \quad (19.3)$$

ここで、 $\psi(\mathbf{r})$ や $\varphi(\mathbf{r})$ は状態を決定する波動関数である。こうすると、有限次元のベクトルの内積 $\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{b} = \sum_n a_n^* b_n$ と対応して、波動関数の張る空間中のベクトル $|\psi\rangle$ の成分が $\psi(\mathbf{r})$ であり、ベクトルの成分を指定する数 n が、連続無限な \mathbf{r} で指定されているものと見なすことが可能である。また、ベクトル \mathbf{b} の n 成分をとることは、基底 \mathbf{e}_n と \mathbf{b} との内積をとることである。すなわち、 $b_n = \mathbf{e}_n^\dagger \cdot \mathbf{b}$ 。これに対応して、基底 $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ を用意し、ベクトル $|\psi\rangle$ の成分 $\psi(\mathbf{r})$ を得るためには、基底 $|\mathbf{r}\rangle$ と $|\psi\rangle$ と内積をとれば良いことがわかる。すなわち、

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle. \quad (19.4)$$

また、複素ベクトルの内積の定義を援用すると

$$\varphi(\mathbf{r})^* = \langle\mathbf{r}|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\mathbf{r}\rangle$$

である。こうして、(19.3) は

$$\langle\varphi|\psi\rangle \equiv \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r} \langle\varphi|\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$$

と書ける。こうして、

$$\int d^3\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}| = 1 \quad (19.5)$$

という、今考えている無限次元ベクトル（線形）空間においてもベクトルの基底に関する完全性の条件が得られる。この線形空間での $|\psi\rangle$ をケットベクトル、 $\langle\psi|$ をブラベクトルと呼び、あわせてブラケットと呼ぼう。

状態ベクトルの規格化条件は、それが連続変数で指定されるときには注意が必要である。状態ベクトルが離散変数 n により指定されているときには (19.5) を用いて

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \int d^3\mathbf{r} \langle\varphi_n|\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\varphi_m\rangle = \int d^3\mathbf{r} \varphi_n(\mathbf{r})^* \varphi_m(\mathbf{r}) = \delta_{nm}$$

となる。ここで、最後の等式では波動関数の規格直交性 (5.9) を用いた。右辺の δ_{nm} はクロネッカーのデルタである。今、状態ベクトルが連続変数 \mathbf{r} で指定されているときには、規格化はデルタ関数 (5.10) で行なわなければならない。すなわち、

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (19.6)$$

こうしておく、規格化は (19.5) を用いて、

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \int d^3 \mathbf{r}'' \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{r}' \rangle = \int d^3 \mathbf{r}'' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

となり無矛盾である。このとき、 $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle$ は、状態ベクトル $|\mathbf{r}'\rangle$ の成分表示、すなわち波動関数であると見なせる。このとき、規格化 (19.6) 式は、§5.4.1. で見た “位置の固有状態” $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})$ に他ならない^{||}。こうして、状態ベクトル $|\mathbf{r}\rangle$ は位置の固有状態であることがわかる。すなわち、

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle$$

となる。ここで、演算子 $\hat{\mathbf{r}}$ は抽象的な演算子である。これを運動量演算子について説明しよう。

運動量の固有状態を $|\mathbf{p}\rangle$ で表わす。運動量も連続変数であるので、規格直交化はデルタ関数で行われている。完全性と併せて記すと、

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad \int d^3 \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = 1 \quad (19.7)$$

である。状態ベクトル $|\mathbf{p}\rangle$ は運動量の固有状態であるので、抽象的な運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ に対して、

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle$$

を満たす。左から $\langle \mathbf{r} |$ をかけて内積をとると、

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p}' \rangle = \mathbf{p}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle \equiv \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})$$

となる。ここで、 $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle$ が運動量の固有関数 (5.6) であることから第 2 式が従う。ここで、 $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} / \hbar}$ である。完全性の条件 (19.6) を挟むと、左辺は

$$\mathbf{p}' \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}')$$

となり、波動関数 $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}')$ に作用して数ベクトル \mathbf{p}' を得て右辺に等しくなるには、演算子 $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle$ が

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \right)$$

であれば良いことがわかる。すなわち、 $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle$ を、 \mathbf{r} 、 \mathbf{r}' を行、列に持つ行列と見たときに、“対角成分”が §5 で得られた運動量演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ である。したがって、運動量演算子を “位置を対角的にする表示” をとったものが $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ である。

もう少し表示をみるために、“運動量を対角化する表示”を考えてみよう。“運動量を対角化する表示”での運動量演算子は

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$$

^{||} \mathbf{r}_0 を \mathbf{r}' としたものの。

となり、“対角成分”を抜き出すデルタ関数部分を除いて、数 \mathbf{p} を掛けるのみである。今度は、“運動量を対角化する表示”での位置演算子 \hat{r} を考えてみると、

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}' | \hat{r} | \mathbf{p} \rangle &= \int d^3 \mathbf{r}' \langle \mathbf{p}' | \hat{r} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \mathbf{r}' \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \mathbf{r}' |A|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}'\right) \\ &= \int d^3 \mathbf{r}' i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} |A|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}'\right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int d^3 \mathbf{r}' \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle \\ &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right)\end{aligned}$$

と変形される。ここで、第1の等式では(19.5)の完全性の条件を用い、第2の等式では $|\mathbf{r}'\rangle$ が位置演算子の固有状態であり、固有値が \mathbf{r}' であること、第3の等式では運動量の固有関数をあらわに書き、第4の等式では \mathbf{r}' を得るには \mathbf{p} 微分を行えば良いことを考慮し、第5の等式では波動関数をブラケット表示に戻し、再び完全性の条件(19.5)を用いたあと、運動量の固有状態の規格直交性を用いた。こうして、運動量を対角化する表示での位置演算子は、 $\hat{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$ となることがわかった**。

こうして、表示によって演算子の具体的な表式は変わり得ることが理解される。波動関数自身も表示を変えることになる。たとえば、内積に運動量の固有状態での完全性条件をはさむことで

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{p} \langle \varphi | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{p} \varphi(\mathbf{p})^* \psi(\mathbf{p})$$

となり、 $\psi(\mathbf{p})$ などは引数を運動量とする、運動量表示での波動関数である。

さて、運動量の固有状態 $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$ を考察しておこう。運動量の固有状態であるので、これは平面波であった。

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = A e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$$

ここで、 A は規格化因子である。運動量の固有状態は(19.7)により規格化されているので、

$$\begin{aligned}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{r} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \\ &= |A|^2 \int d^3 \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}$$

と書かれる。ここで、デルタ関数のフーリエ表示

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx}$$

を思い起こして、これが三重積分になっていることから^{††} $|A|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$ であることがわかる。こうして、

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$$

となる。この $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$ は、位置表示と運動量表示の変換で良く用いられる。

最後に、 $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ を考えよう。位置を対角化する表示では演算子は位置座標を引数に持つデルタ関数に比例した。したがって、

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \psi(\mathbf{r})^* \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \\ &= \int d^3 \mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \hat{A}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})\end{aligned}$$

**位置を対角化する表示では、 $\hat{r} = \mathbf{r}$ 、 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ であり、運動量を対角化する表示では $\hat{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$ 、 $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$ となっている。

^{††} $k = p/\hbar$ とみなす。

となる。これは、演算子 \hat{A} により示される物理量の期待値に他ならない。

こうして、ブラケット表示で、量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式 (19.1) または (19.3) は

$$\begin{aligned}i\hbar|\dot{\psi}(t)\rangle &= \hat{H}|\psi(t)\rangle, \\ \hat{H}|\psi\rangle &= E|\psi\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi\rangle\end{aligned}\tag{19.8}$$

と書かれる。

20章 不確定性関係

§ 20.1 交換関係と同時固有状態

位置を対角化する表示で考えよう。この表示では、位置演算子 \hat{r} と運動量演算子 \hat{p} はそれぞれ、

$$\hat{r} = \mathbf{r}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

と書ける。こうして、任意の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に対して、

$$\begin{aligned} [\hat{r}_i, \hat{p}_j] \psi(\mathbf{r}) &\equiv (\hat{r}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{r}_i) \psi(\mathbf{r}) = -i\hbar r_i \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial r_j} - (-i\hbar) \frac{\partial (r_i \psi(\mathbf{r}))}{\partial r_j} \\ &= i\hbar \delta_{ij} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $i, j = x, y, z$ であり、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。また $\frac{\partial r_i}{\partial r_j} = \delta_{ij}$ を用いた。この式が任意の ψ に対して成り立つので、交換子 $[\hat{r}_i, \hat{p}_j]$ についての重要な等式が得られる。

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] \equiv \hat{r}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{r}_i = i\hbar \delta_{ij}$$

これを、位置と運動量の交換関係と呼ぶ。

一般に、交換する2つの演算子には、同時固有状態が存在する。すなわち、2つの物理量 \hat{A} と \hat{B} に対し、 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ としよう。このとき、 \hat{A} の固有状態と固有値を ψ_n, a_n とすると、

$$\hat{A} \hat{B} \psi_n = \hat{B} \hat{A} \psi_n = a_n \hat{B} \psi_n$$

となる。第1の等式では \hat{A} と \hat{B} が可換であること、第2の等式では固有値 a_n は演算子ではなく数であることを用いた。こうして、上式は $\hat{B} \psi_n$ がまた \hat{A} の固有状態であり、固有値 a_n を持つことを示している。こうして、 $\hat{B} \psi_n$ は \hat{A} の固有状態 ψ_n に比例しなければならない。比例定数を b_n と書くと

$$\hat{B} \psi_n = b_n \psi_n$$

であることになり、 \hat{A} の固有状態 ψ_n はまた、固有値 b_n を持つ \hat{B} の固有状態であることを示している。すなわち、 \hat{A} と \hat{B} が可換であればこれら2つの物理量に関して同時に固有状態となる同時固有状態が存在することがわかる。§5で述べたように、固有値方程式 $\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$ は物理量 \hat{A} に関する測定過程を表わしていたので、可換な物理量に関しては測定の結果、同時に確定値 a_n, b_n を持ち得ることが結論される。

§ 20.2 不確定性関係

異なる成分の位置演算子と運動量演算子は可換であるので、同時固有状態を持つ。たとえば、粒子の x 方向の位置と y 方向の運動量は同時に正確に決まる。しかしながら、同じ成分の位置演算子と運動量演算子は交換しない。演算子が交換しないことから結論される帰結をみよう。

今、 λ を実数として、必ず正、または零になる次の量を考える。

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int d^3\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r}) + i\lambda\varphi(\mathbf{r})|^2 \\ &= \lambda^2 \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \varphi(\mathbf{r}) + i\lambda \int d^3\mathbf{r} (\phi(\mathbf{r})^* \varphi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})^*) + \int d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \\ &= \lambda^2 \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \varphi(\mathbf{r}) + 2\lambda \text{Im} \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

ここで、 $\text{Im}(\cdot)$ は、 \cdot の虚数部をとることを意味している。これを λ に関する 2 次方程式とみなすと、判別式から

$$\left| \text{Im} \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \right|^2 - \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \cdot \int d^3\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}')^* \phi(\mathbf{r}') \leq 0$$

となる。よって、 Im を元に戻して、

$$\int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \cdot \int d^3\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}')^* \phi(\mathbf{r}') \geq \left| \text{Im} \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) \right|^2 = \left| \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} (\varphi(\mathbf{r})^* \phi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})^*) \right|^2$$

が得られる。ここで、2つの演算子 \hat{A} と \hat{B} を考え、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ による期待値を $\langle A \rangle \equiv \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \hat{A} \psi(\mathbf{r})$ 等とし、

$$\varphi(\mathbf{r}) \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi(\mathbf{r}), \quad \phi(\mathbf{r}) \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \psi(\mathbf{r})$$

と定義し、物理量に対応した演算子 \hat{A} 、 \hat{B} はともにエルミート (§5) であることから、

$$\varphi(\mathbf{r})^* = \psi(\mathbf{r})^* (\hat{A} - \langle A \rangle), \quad \phi(\mathbf{r})^* = \psi(\mathbf{r})^* (\hat{B} - \langle B \rangle)$$

となることに注意すると、先の判別式は

$$\int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi(\mathbf{r}) \cdot \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \psi(\mathbf{r}) \geq \frac{1}{4} \left| \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi(\mathbf{r}) \right|^2$$

となる。ここで、左辺に現れる量は、

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \hat{A}^2 \psi(\mathbf{r}) - \left(\int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \hat{A} \psi(\mathbf{r}) \right)^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \equiv (\Delta A)^2 \end{aligned}$$

となり、これは期待値の周りの分散であり、測定値の不確定性を表わす。右辺の被積分関数は \hat{A} と \hat{B} の交換子の期待値となり、結局

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 \quad (20.1)$$

とまとまる。これを、物理量 \hat{A} と \hat{B} の間の不確定性関係と呼ぶ。測定値に不確定性関係が生じるのは交換子が零でない非可換なときであることがわかる。

今、 $\hat{A} = \hat{x}$ 、 $\hat{B} = \hat{p}_x$ と、同じ成分の位置と運動量を考えよう。これらは非可換であり、 $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ である。こうして、位置と運動量の不確定性関係

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (20.2)$$

が得られる。すなわち、同じ成分の位置と運動量は同時に正確な値を持たないことがわかる。この事実は不確定性原理とも呼ばれる。

21章 量子的世界の特徴

ここでは、空間1次元の量子系を調べ、古典力学的世界像と異なる量子力学的世界を垣間見ることにしよう。

§ 21.1 無限に深い井戸型引カポテンシャル

図 61 の様に、1次元の無限に深い井戸型ポテンシャルにある質量 m の粒子を考えよう。シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-a \leq x \leq a) \\ \infty & (x < -a, \quad x > a) \end{cases}$$

となる。ここで、 $x < -a$ 、 $x > a$ でポテンシャルエネルギーは無有限大になるので、系のエネルギーが有限であるためには、この領域で波動関数は零でなければならない。もしそうでなければ、エネルギー期待値は無有限大になってしまう[¶]。よって、 $x = \pm a$ で $\psi(x) = 0$ として良い。こうして、シュレーディンガー方程式は $-a \leq x \leq a$ の領域で考えて良く、このとき $V(x) = 0$ である。従って、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x),$$

$$\psi(x = \pm a) = 0$$

を解けばよい。第2式は波動関数の境界条件と呼ばれる。この条件は後で考慮することにして、第1式の微分方程式の解は

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx),$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

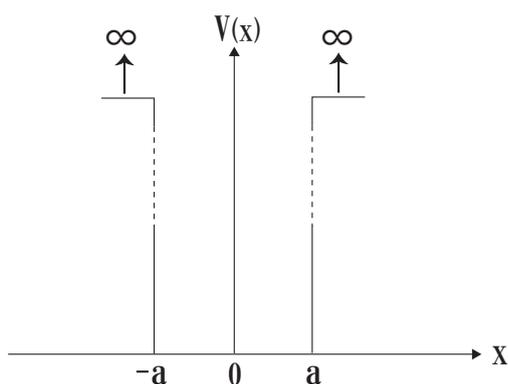


図 61:

[¶] $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* V(x) \psi(x) dx$ で $V(x)$ が無有限大であればその領域で $\psi(x) \neq 0$ ならば積分に寄与してしまい、無有限大を与えてしまう。

と得られる。ここで、 A 、 B は積分定数である。先ほどの境界条件 $\psi(\pm a) = 0$ から、

$$\begin{aligned} \psi(-a) &= A \cos(ka) - B \sin(ka) = 0, & \psi(a) &= A \cos(ka) + B \sin(ka) = 0, \\ \text{すなわち} & & & \\ A \cos(ka) &= 0, & B \sin(ka) &= 0 \end{aligned}$$

となる。2つに場合分けしよう。

(i) $A \neq 0$ のとき

このとき、上式から

$$B = 0, \quad k = \frac{n\pi}{2a}, \quad (n = 1, 3, 5, \dots),$$

が得られる。従って、

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), \quad (-a \leq x \leq a) \\ E_n &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2, \quad (n = 1, 3, 5, \dots) \end{aligned}$$

のように、波動関数とエネルギー固有値が同時に決定される。残った定数 A は波動関数の規格化 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ から決定される。すなわち、

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n(x)^* \psi(x) = |A|^2 \int_{-a}^a dx \cos^2\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = |A|^2 a, \quad \text{すなわち} \quad A = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

となり、波動関数は決定される^{||}。

(ii) $B \neq 0$ のとき

このとき、(i) の場合と同様にして

$$A = 0, \quad k = \frac{n\pi}{2a}, \quad (n = 2, 4, 6, \dots),$$

が得られる。従って、

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= B \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), \quad (-a \leq x \leq a) \\ E_n &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2, \quad (n = 2, 4, 6, \dots) \end{aligned}$$

のように、波動関数とエネルギー固有値が同時に決定される。残った定数 B はやはり波動関数の規格化 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ から決定される。すなわち、

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n(x)^* \psi(x) = |B|^2 \int_{-a}^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = |B|^2 a, \quad \text{すなわち} \quad B = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

となり、波動関数は決定される

(i)、(ii) の場合を纏めて、

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & (n = 1, 3, 5, \dots) \quad (-a \leq x \leq a) \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & (n = 2, 4, 6, \dots) \quad (-a \leq x \leq a) \\ 0 & (x < -a, \quad x > a) \end{cases} \\ E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \end{aligned}$$

^{||} $A = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i\theta}$ の様に位相因子がついても良いが、この位相因子は決定されないので 1 と置く。シュレーディンガー方程式は複素線形微分方程式であるので位相因子の不定性が残るが、期待値をとる際にはこの位相因子は寄与しないので常に 1 と置いて良い。

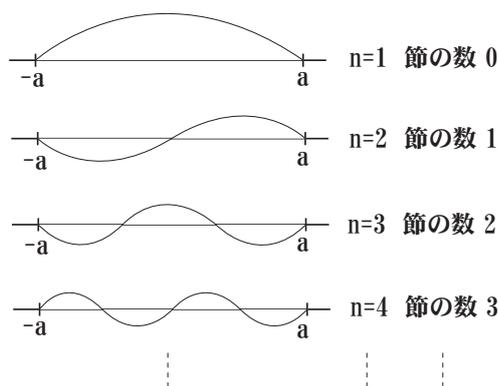


図 62:

となる。

この簡単な 1 次元量子系から幾つかの量力学的な特徴が見て取れる。まず、エネルギーはとびとびの値しか取り得ないことがわかる。取り得るエネルギーをエネルギー準位と呼ぶ。エネルギー固有値の低い方から波動関数を描くと、図 62 の様になっていることがわかる。 $x = \pm a$ の境界を除き、波動関数のゼロ点（節）がエネルギーが増加するごとに一つずつ増えていくことがわかる。これは 1 次元系の特徴であり、振動定理の名で知られている。

また、エネルギー固有値の表式を、 $E_n = \frac{1}{2m} \cdot \left(\frac{\hbar\pi}{2a} \right)^2$ と変形してみよう。波動関数の絶対値の 2 乗 $|\psi(x)|^2$ は粒子の存在確率を表わしていたので、波動関数のゼロ点（節）では粒子を見いだすことはない。したがって、量子数 n が大きくなるにつれ、粒子を見いだす不確かさは小さくなっていく。大ざっぱに $\Delta x \sim 2a/n$ として良いであろう。こうすると不確定性関係から運動量の不確かさは数係数を除いて $\Delta p \sim \hbar/\Delta x \sim \hbar/(2a/n)$ として良い。こうすると、エネルギーは、数係数 π を除いて、 $E_n \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m}$ のようになる。今、運動量の期待値はゼロであるので、 $(\Delta p)^2 \sim \langle p^2 \rangle$ であり、こうして、 $E_n \sim \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}$ となり、古典的な表式が再現される。すなわち、エネルギー固有値の値は不確定性関係で大まかには理解できる。

§ 21.2 有限の深さの井戸型引力ポテンシャル

次に、有限の深さの 1 次元井戸型引力ポテンシャルを考えよう。今度は、波動関数もエネルギー固有値も解析的な表式としては得られないが、量子力学的な特徴を引き出しておこう。

図 63 の様に、1 次元の有限の深さの井戸型ポテンシャルの中にある質量 m の粒子を考えよう。ポテンシャルの中にあることから、エネルギー E は負で、 $-V_0 \leq E < 0$ とする。ここで、 $-V_0 (< 0)$ はポテンシャルの深さである。シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < -a) & \text{領域 1} \\ -V_0 & (-a \leq x \leq a) & \text{領域 2} \\ 0 & (x > a) & \text{領域 3} \end{cases}$$

となる。粒子の存在確率の総和が 1 になるためには、 $x \rightarrow \pm\infty$ で波動関数は零に収束しなければならないことに注意しておこう。上記のシュレーディンガー方程式を、各領域に分けて考える。

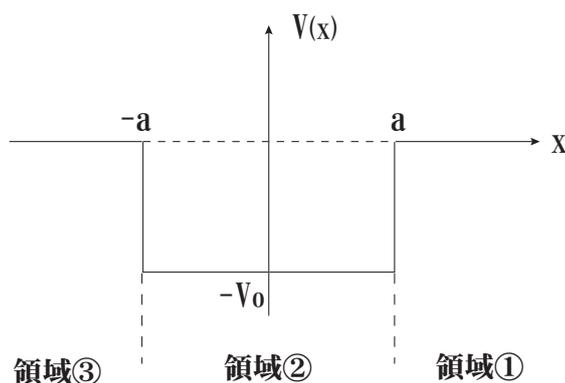


図 63:

- (i) $x > a$, $x < -a$, すなわち、領域 1 または 3 のとき、 $V(x) = 0$
ポテンシャルエネルギーは零であるので、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

を解けばよい。解は容易に得られて、

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C_3 e^{\kappa x} + C_1 e^{-\kappa x}, \\ \kappa &\equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \end{aligned}$$

である。ここで、 κ を定義し、 C_1 、 C_3 は積分定数である。領域 1 では $x \rightarrow \infty$ で波動関数が零でなければならないので** $C_3 = 0$ である。領域 3 では $x \rightarrow -\infty$ で波動関数が零であるので、 $C_1 = 0$ である。よって、

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{-\kappa x}, & (x > a) \quad \text{領域 1} \\ C_3 e^{\kappa x}, & (x < -a) \quad \text{領域 3} \end{cases}$$

と得られる。

- (ii) $-a \leq x \leq a$, すなわち、領域 2 のとき、 $V(x) = -V_0 < 0$
シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

となるので、この解は、

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \cos(kx) + B \sin(kx), \\ k &\equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

と得られる。ここで、 $E + V_0 > 0$ であることに注意しよう。

こうして、すべての領域で波動関数が得られたが、積分定数がまだ決定されていない。領域を分けたので、境界 $x = \pm a$ で波動関数は連続でまた 1 階微分に飛びがなく滑らかであるべきである。こうして、 $x = -a$ で

** そうでなければ、得られた解から粒子の存在確率密度が $x \rightarrow \infty$ で無限大になってしまうことがわかる。

の波動関数とその1階微分が連続である条件

$$\begin{aligned} C_3 e^{-\kappa a} &= A \cos(ka) - B \sin(ka), \\ C_3 \kappa e^{-\kappa a} &= k(A \sin(ka) + B \cos(ka)) \end{aligned}$$

および、 $x = a$ での同様な条件

$$\begin{aligned} C_1 e^{-\kappa a} &= A \cos(ka) + B \sin(ka), \\ -C_1 \kappa e^{-\kappa a} &= k(-A \sin(ka) + B \cos(ka)) \end{aligned}$$

が得られる。辺々足し引きして整理すると

$$\begin{aligned} (C_1 + C_3) e^{-\kappa a} &= 2A \cos(ka), & (C_1 - C_3) e^{-\kappa a} &= 2B \sin(ka), \\ \kappa(C_1 + C_3) e^{-\kappa a} &= 2kA \sin(ka), & \kappa(C_3 - C_1) e^{-\kappa a} &= 2B \cos(ka), \end{aligned}$$

となる。今、 $A \neq 0$ かつ $C_1 + C_3 \neq 0$ であれば第1式同士の比をとり、

$$k \tan(ka) = \kappa$$

となる。また $B \neq 0$ かつ $C_1 - C_3 \neq 0$ であれば第2式同士の比を取り

$$\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{\kappa}$$

が得られる。これらの2式は同時に成り立たないので、解を2組に分けて検討しよう。

(a) $A \neq 0$ かつ $C_1 + C_3 \neq 0$

このとき、 $B = 0$ かつ $C_1 - C_3 = 0$ 、すなわち $C_1 = C_3 \equiv C$ が解となり、かつ $k \tan(ka) = \kappa$ である。波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{\kappa x}, & (x < -a) \\ A \cos(kx), & (-a \leq x \leq a) \\ C e^{-\kappa x}, & (x > a) \end{cases}$$

となる。波動関数の規格化 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ より、 A と C に関係が付き、^{††}

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\kappa}}} e^{\kappa a} \cos(ka) e^{\kappa x}, & (x < -a) \\ \frac{1}{\sqrt{a + \frac{1}{\kappa}}} \cos(kx), & (-a \leq x \leq a) \\ \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\kappa}}} e^{\kappa a} \cos(ka) e^{-\kappa x}, & (x > a) \end{cases}$$

と得られる。エネルギー固有値は $k \tan(ka) = \kappa$ において、 $\xi \equiv ka$ 、 $\eta \equiv \kappa a$ とおくと、

$$\eta = \xi \tan(\xi), \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0$$

となる。ここで、第2式右辺では k 、 κ の定義を用いた。この2式の解 η_n を用いて、エネルギー固有値 E_n は $E_n = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \eta_n^2}{2ma^2}$ と得られる。

^{††}

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{-a} dx |C|^2 e^{2\kappa x} + \int_{-a}^a dx |A|^2 \cos^2(kx) + \int_a^{\infty} dx |C|^2 e^{-2\kappa x} = \frac{|A|^2}{\kappa} \cos^2(ka) + |A|^2 \left(\frac{\sin(2ka)}{2k} + a \right)$$

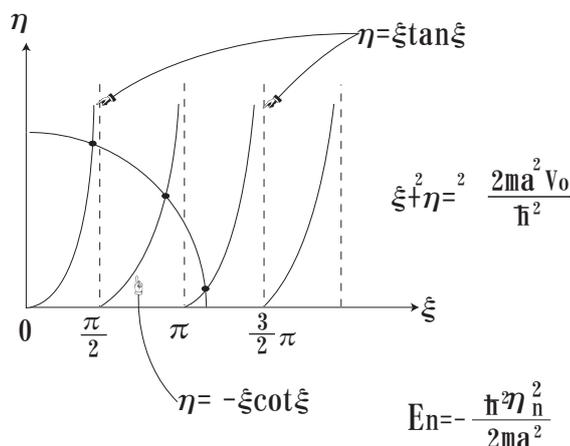


図 64:

(b) $B \neq 0$ かつ $C_1 - C_3 \neq 0$

このとき、 $A = 0$ かつ $C_1 + C_3 = 0$ 、すなわち $C_1 = -C_3 \equiv C$ が解となり、かつ $\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{\kappa}$ である。波動関数は場合 (i) と同様にして得ることができる。結果は

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\kappa}}} e^{\kappa a} \sin(ka) e^{\kappa x}, & (x < -a) \\ \frac{1}{\sqrt{a + \frac{1}{\kappa}}} \sin(kx), & (-a \leq x \leq a) \\ -\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\kappa}}} e^{\kappa a} \sin(ka) e^{-\kappa x}, & (x > a) \end{cases}$$

と得られる。エネルギー固有値は $\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{\kappa}$ において、 $\xi \equiv ka$ 、 $\eta \equiv \kappa a$ の定義から

$$\eta = -\xi \cot(\xi), \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0$$

となり、エネルギー固有値 E_n は $E_n = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \eta_n^2}{2ma^2}$ と得られる。

さて、エネルギー固有値をみておこう。新しく定義した η と ξ との交点が解となる。グラフで見ておくと、図 64 のようになっていることがわかる。図 64 から、交点、すなわちエネルギー固有値の数は $a^2 V_0$ が増大すると増えることがわかる。エネルギーは離散的な値をとり、束縛状態を与える。束縛状態の個数は、 $N = 0, 1, 2, \dots$ として

$$\frac{N}{2} < \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \leq \frac{N+1}{2} \pi$$

であれば $N+1$ 個存在することがわかる。

波動関数を (a)、(b) の両方の場合について求めた。古典的にはエネルギー E が $-V_0 \leq E < 0$ であるので、粒子は $-a \leq x \leq a$ の領域にしか存在できない。それ以外の領域では運動量 $p = \frac{2mE}{\hbar}$ が純虚数となってしまう、古典力学的には意味がないからである。しかしながら、今解かれた波動関数は、古典的に粒子が存在できない領域でも零ではなく、粒子の存在確率 $|\psi(x)|^2$ が零ではない。こうして量子力学的には古典的に粒子が存

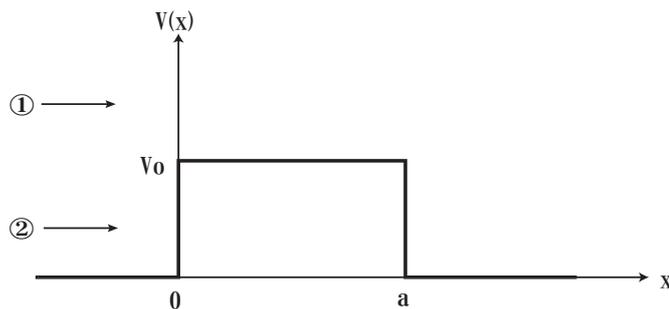


図 65:

在できない場所に粒子を見出す可能性があることがわかる。もし、有限のポテンシャルの井戸が2つ並んで存在すれば、一方のポテンシャルの井戸にいた粒子が、古典的には禁止されている領域を染み出して、もう一方のポテンシャルの井戸に現れる可能性が存在する。次節で詳しく見ておこう。

§ 21.3 ポテンシャル障壁の反射と透過

図 65 のような 1 次元箱型斥力ポテンシャルを考えよう。ポテンシャルエネルギーは

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0, x > a) \\ V_0, & (0 \leq x \leq a) \end{cases}$$

である。ここでは x の負の方向から入射してくる粒子のエネルギーによって、2つの場合に分けて考えよう。

(i) $E > V_0$ の場合

シュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= E\psi(x), & (x < 0, x > a) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) &= E\psi(x), & (0 \leq x \leq a) \end{aligned}$$

である。このシュレーディンガー方程式の解として、以下の形のものをとることが可能である。

$$\psi(x) = \begin{cases} \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{入射波}} + \underbrace{A' e^{-ikx}}_{\text{反射波}} & (x < 0) \\ B e^{ik'x} + B' e^{-ik'x} & (0 \leq x \leq a) \\ \underbrace{C e^{ikx}}_{\text{透過波}} & (x > a) \end{cases} \quad (21.1)$$

ここで、

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

を定義した。また、 $x < 0$ の領域で x の負の方向から正の方向へ進む平面波は入射波であり、正の方向から負の方向へ進む波はポテンシャルにより反射された反射波である。また $x > a$ の領域で x の正の方向に進む平面波は、ポテンシャルを透過してきた透過波である。

波動関数は領域を分けて解いたので、境界で波動関数とその1階微分が連続であるという条件を用いよう。 $x = 0$ 、 a での連続、滑らかの条件を書き下すと

$$\begin{aligned} A + A' &= B + B', & B e^{ik'a} + B' e^{-ik'a} &= C e^{ika}, \\ k'(A - A') &= k'(B - B'), & k'(B e^{ik'a} - B' e^{-ik'a}) &= k C e^{ika} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 B と B' を消去することで、

$$\frac{A'}{A} = \frac{(k^2 - k'^2)(1 - e^{2ik'a})}{(k + k')^2 - (k - k')^2 e^{2ik'a}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{4kk' e^{2i(k'-k)a}}{(k + k')^2 - (k - k')^2 e^{2ik'a}} \quad (21.2)$$

を得る。

ここで、一般的に、透過係数 D 、および反射係数 R を定義しておこう。

$$D \equiv \frac{|j_{\text{透過波}}|}{|j_{\text{入射波}}|}, \quad R \equiv \frac{|j_{\text{反射波}}|}{|j_{\text{入射波}}|}, \quad (21.3)$$

ここで、 $j_{\text{入射波}}$ 、 $j_{\text{透過波}}$ 、 $j_{\text{反射波}}$ はそれぞれ、入射波、透過波、反射波の確率の流れの密度である。確率の流れの密度は5章、§5.4.4の(5.11)式で定義されている。波動関数 ψ に対し、

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

であった。今、考察している場合に適用すると、

$$\begin{aligned} j_{\text{入射波}} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(A e^{ikx} \frac{d}{dx} (A e^{ikx})^* - (A e^{ikx})^* \frac{d}{dx} (A e^{ikx}) \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \\ j_{\text{透過波}} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(C e^{ikx} \frac{d}{dx} (C e^{ikx})^* - (C e^{ikx})^* \frac{d}{dx} (C e^{ikx}) \right) = \frac{\hbar k}{m} |C|^2, \\ j_{\text{反射波}} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(A' e^{-ikx} \frac{d}{dx} (A' e^{-ikx})^* - (A' e^{-ikx})^* \frac{d}{dx} (A' e^{-ikx}) \right) = -\frac{\hbar k}{m} |A'|^2, \end{aligned}$$

となる。よって、箱型斥力ポテンシャルのエネルギー V_0 より高いエネルギーで入射してきた粒子がポテンシャルを透過する割合、および反射する割合である透過係数 D 、反射係数 R は、(27.47)を用いて、

$$\begin{aligned} D &= \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a) + 4k^2 k'^2}, \\ R &= \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a) + 4k^2 k'^2} \end{aligned} \quad (21.4)$$

と得られる。こうして、ポテンシャル障壁 $V_0 > 0$ より高いエネルギー $E (> V_0)$ で粒子が入射してきても、一般的には零でない確率で反射されてくる ($R \neq 0$) ことがわかる。

(ii) $E < V_0$ の場合

(i) の場合とは、領域 $0 \leq x \leq a$ での波動関数が異なる。この領域では、今度は $E - V_0 < 0$ となるので、 $k' = i\kappa$ として、

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + A' e^{-ikx}, & (x < 0) \\ G e^{-\kappa x} + B' e^{\kappa x}, & (0 \leq x \leq a) \\ C e^{ikx}, & (x > a) \end{cases} \quad (21.5)$$

ただし、

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

である。よって、(i) で $k' \rightarrow i\kappa$ と置き換えれば良く、透過係数 D と反射係数 R は

$$\begin{aligned} D &= \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4k^2\kappa^2}, \\ R &= \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a)}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4k^2\kappa^2} \end{aligned} \quad (21.6)$$

となる。こうして、 $D \neq 0$ であるので、ポテンシャル障壁 V_0 より低いエネルギーで粒子が入射しても、古典的には進入不可能な $V_0 (> E)$ の領域を通り抜けて、粒子は $x \rightarrow \infty$ の領域に透過していく確率が存在することがわかる。この現象はトンネル効果と呼ばれる。

§ 21.4 調和振動子の量子論

§§21.4.1 級数を用いた解法

変位に比例した引力を受けて微小振動している質量 m の 1 次元調和振動子系を考えよう。ポテンシャルエネルギーは

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

となる。時間に依存しないシュレーディンガー方程式から、

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (21.7)$$

という微分方程式が得られる。

今、 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ として、新しい変数 ξ を導入する。このときシュレーディンガー方程式 (21.7) は

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi(\xi) = 0 \quad (21.8)$$

と書き換えられる。ここで、 $x \rightarrow \pm\infty$ 、すなわち大きな ξ^2 に対しては、上式の括弧の中の第 1 項 $\frac{2E}{\hbar\omega}$ は第 2 項の ξ^2 に比べて無視してよいので、

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$$

となり、 $x \rightarrow \pm\infty$ で有限な波動関数として、 $x \rightarrow \infty$ での漸近解 $\psi(\xi) \propto e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ が得られる。したがって、波動関数を

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot \chi(\xi)$$

とおいておこう。これを (21.8) に代入すると、 $\chi(\xi)$ に対する方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2\chi(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\chi(\xi)}{d\xi} + 2n\chi(\xi) &= 0, \\ 2n &\equiv \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \end{aligned} \quad (21.9)$$

今、 $\chi(\xi)$ を級数の形で求めてみよう。すなわち、

$$\chi(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s$$

としてみよう。 $\chi(\xi)$ に対する微分方程式に代入し、 ξ のべきで揃えて整理すると、

$$\sum_{s=0}^{\infty} (a_{s+2}(s+2)(s+1) + 2(n-s)a_s) \xi^s = 0$$

となる。任意の ξ に対して成り立つので、漸化式

$$a_{s+2} = -\frac{2(n-s)}{(s+1)(s+2)} a_s$$

が得られる。ところで、 $\chi(\xi)$ が ξ^s に関して有限の多項式でないとすると、大きな s に対して上の漸化式は $a_s \sim \frac{2}{s} a_{s-2}$ を与え、大きな s では係数 a_s は $a_s \sim 1/\left(\frac{s}{2}\right)!$ のように振舞う。こうして、 $\chi(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s \sim \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \xi^{2s} \sim e^{\xi^2}$ の様に振る舞い、波動関数が $\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \chi(\xi) \sim e^{\frac{\xi^2}{2}}$ となり、 $x \rightarrow \pm\infty$ 、すなわち $\xi \rightarrow \pm\infty$ で漸近解の振る舞いを壊し、波動関数が発散してしまう。この原因は、 $\chi(\xi)$ が ξ^s のべきに関して有限のべきで終わらないとしたことにある。したがって、べき級数は有限項で終わらなければならない。そのためには a_s が満たす漸化式が、ある $s+2$ 以降はすべて零になればよい。このためには、 $n=0, 1, 2, \dots$ と n が零を含む自然数であればよい[§]。こうして、 n の値に制限が付いた。ここで、 n は (21.9) で定義されており、エネルギー E に結び付けられている。こうして、エネルギー固有値 E_n が決定される。

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

このように、調和振動子のエネルギーは等間隔で離散的な値をとる。また、エネルギーの最低値は $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ と零でない。これを零点振動と呼ぶ。もし、 $E=0$ であれば、粒子は $x=0$ のポテンシャルエネルギーが最小になる位置に静止していることになり、位置は $x=0$ 、運動量は $p=0$ と共に確定値を取ることになって、不確定性原理に反する。したがって、零点振動は避けられない。

次に、波動関数を求めてみよう。級数解の漸化式は $s=(\text{偶数})$ と $s=(\text{奇数})$ に分かれる。これは、ハミルトニアン[§]の対称性から言える。これを見ておこう。調和振動子のハミルトニアンが $x \rightarrow -x$ の変換に対して不変であるので、

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x), \rightarrow \hat{H}(-x)\psi(-x) = E\psi(-x), \text{すなわち } \hat{H}(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

となり、 $\psi(-x)$ は同じ固有値 E に属する波動関数になる。したがって、

$$\psi(-x) = e^{i\theta} \psi(x)$$

のように、もとの波動関数に比例するはずである。波動関数の規格化条件から、その絶対値は変わらないので、位相因子 $e^{i\theta}$ が付くのみである。もう一度変換すると $\psi(x) = e^{i\theta} \psi(-x) = e^{2i\theta} \psi(x)$ となるので、 $e^{2i\theta} = 1$ 、すなわち、 $e^{i\theta} = \pm 1$ である。よって、波動関数は

$$\psi(-x) = \psi(x), \quad \text{または} \quad \psi(-x) = -\psi(x)$$

のように、2つの場合に分かれる。こうして、ハミルトニアンが $x \rightarrow -x$ のパリティ変換で不変であるなら、波動関数はこの変換に対して偶、または奇である。これを偶奇性またはパリティと呼ぶ。こうして、調和振動子では、 $x \rightarrow -x$ または $\xi \rightarrow -\xi$ の変換で偶奇が保たれるので、 $\chi(\xi)$ は ξ の偶数べきか奇数べきのみ含まれる。こうして、 $a_0 \neq 0$ の時には $a_1 = 0$ 、また $a_1 \neq 0$ の時には $a_0 = 0$ となる。

[§] s も零を含む自然数の値のみ取る。このとき、 $a_n \neq 0$ かつ $a_{n+s} = 0$ 。

まず、 $n=0$ のときには、 $a_0 \neq 0$ 、 $a_2 = a_4 = \dots = 0$ かつ、 $a_1 = a_3 = \dots = 0$ より、波動関数は

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

となる。ただし、波動関数の規格化を行い、変数を ξ から x に戻している。

次に $n=1$ のときには、 $a_3 = a_5 = \dots = 0$ かつ $a_0 = a_2 = \dots = 0$ より、

$$\psi_1(x) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

となる。

続いて $n=2$ では、 $a_0 \neq 0$ 、 $a_2 = -2a_0$ 、 $a_4 = a_6 = \dots = 0$ 、かつ $a_1 = a_3 = \dots = 0$ より、波動関数の規格化を実行して、

$$\psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{4m\omega}{\hbar}x^2 - 2\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

が得られる。1次元系の特徴として、量子数 n が增大すると、波動関数の零点がひとつずつ増える振動定理を実現している。

§§21.4.2 エルミート多項式

さて、(21.9) の微分方程式は、エルミートの微分方程式と呼ばれ、その解については数学的に詳しく調べられている。この小節ではエルミートの微分方程式と、その解であるエルミート多項式について触れておこう。

変数 ξ を z と記し、 χ を n に対応して、 H_n と書くことにしよう。そうすると、(21.9) の微分方程式は

$$\frac{d^2 H_n(z)}{dz^2} - 2z \frac{dH_n(z)}{dz} + 2nH_n(z) = 0 \quad (21.10)$$

と書ける。両辺に e^{-z^2} を掛けて変形すると、

$$\frac{d}{dz} \left(-e^{-z^2} \cdot \frac{dH_n(z)}{dz} \right) - 2ne^{-z^2} H_n(z) = 0 \quad (21.11)$$

となる。この方程式の解は

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (21.12)$$

となる。(21.12) が (21.10) の解であることを確かめておこう。(21.12) を z で微分すれば

$$\begin{aligned} \frac{dH_n(z)}{dz} &= 2z(-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} + (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (-2ze^{-z^2}) \\ &= 2z(-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} + (-1)^n e^{z^2} \left(-2z \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} - 2n \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} e^{-z^2} \right) \\ &= 2nH_{n-1}(z) \end{aligned} \quad (21.13)$$

となるが、一方、(21.12) で $n \rightarrow n+1$ として

$$\begin{aligned} H_{n+1}(z) &= (-1)^{n+1} e^{z^2} \frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}} e^{-z^2} = (-1)^{n+1} e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (-2ze^{-z^2}) \\ &= (-1)^{n+1} e^{z^2} \left(-2z \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} - 2n \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} e^{-z^2} \right) \\ &= 2zH_n(z) - 2nH_{n-1}(z) \end{aligned} \quad (21.14)$$

となる。(21.13) で左辺と右辺を入れ替えた上で 2 回使うと

$$H_{n-1}(z) = \frac{1}{2n} \frac{dH_n(z)}{dz} = \frac{1}{2n} \left(\frac{1}{2(n+1)} \frac{dH_{n+1}(z)}{dz} \right) = \frac{1}{4n(n+1)} \frac{d^2 H_{n+1}(z)}{dz^2}$$

が得られる。この式と、(21.13) で n を $n+1$ とした $H_n(z) = \frac{1}{2(n+1)} \frac{dH_{n+1}(z)}{dz}$ を (21.14) に代入すれば

$$H_{n+1}(z) = 2z \frac{1}{2(n+1)} \frac{dH_{n+1}(z)}{dz} - 2n \frac{1}{4n(n+1)} \frac{d^2 H_{n+1}(z)}{dz^2}$$

すなわち、整理して

$$\frac{d^2 H_{n+1}(z)}{dz^2} - 2z \frac{dH_{n+1}(z)}{dz} + 2(n+1)H_{n+1}(z) = 0$$

が得られる。これは、(21.10) のエルミートの微分方程式で n を $n+1$ としたものに他ならない。すなわち、(21.12) は解であることが言えた。

次に、エルミート多項式の規格直交性について記そう。エルミート多項式は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} \quad (21.15)$$

の規格直交関係を持つ。以下にこのことを示そう。まず、左辺に $2n$ を乗じておいて、変形していく。まず、エルミート多項式の形 (21.11) を用いて、

$$\begin{aligned} 2n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dz} \left(e^{-z^2} \frac{dH_n(z)}{dz} \right) \cdot H_m(z) dz \\ &= \left[e^{-z^2} \frac{dH_n(z)}{dz} H_m(z) \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \frac{dH_n(z)}{dz} \frac{dH_m(z)}{dz} dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \frac{dH_n(z)}{dz} \frac{dH_m(z)}{dz} dz \end{aligned}$$

となる。ここで、1 行目から 2 行目へは部分積分を用いた。 n と m を入れ替えると、

$$2m \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_m(z) H_n(z) dz = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \frac{dH_m(z)}{dz} \frac{dH_n(z)}{dz} dz$$

となるので、辺々引き算して 2 で割ると

$$(n-m) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz = 0$$

が得られる。ここで、 $n \neq m$ のときには

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz = 0, \quad (n \neq m)$$

となり、直交性が示される。 $n = m$ の時には初めの式に戻ろう。乗じた $2n$ で割っておくと

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z)^2 dz = \frac{1}{2n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \left(\frac{dH_n(z)}{dz} \right)^2 dz = 2n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} (H_{n-1}(z))^2 dz$$

が得られる。ここで、2 番目の等式では (21.13) を用いた。これを繰り返し用いることで

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z)^2 dz &= 2n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} (H_{n-1}(z))^2 dz = 2n \cdot 2(n-1) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} (H_{n-2}(z))^2 dz \\ &= \dots \\ &= 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

が得られる。これで、(21.15) の規格直交性が示された。

最後に、エルミート多項式の母関数展開について述べておこう。エルミート多項式は関数 $S(z, t) \equiv e^{z^2 - (t-z)^2}$ の t に関する展開係数として得られる。すなわち、

$$\begin{aligned} S(z, t) &\equiv e^{z^2 - (t-z)^2} = e^{2zt - t^2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} t^n \end{aligned} \quad (21.16)$$

これを示そう。一般に関数 $f(x)$ のテーラー展開

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n f(x)}{dx^n} \right)_{x=x_0} (x - x_0)^n$$

において、 $x = z - t$ 、 $x_0 = z$ とすると、

$$f(z - t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(z)}{dz^n} (-t)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^n}{n!} \frac{d^n f(z)}{dz^n}$$

と書ける。ここで、 $f(z - t) = e^{-(z-t)^2}$ とすると、上式は

$$e^{-(z-t)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^n}{n!} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} e^{-z^2} H_n(z)$$

となる。ここで、(21.12) を用いた。こうして、(21.16) が示された。

この母関数展開を用いると、エルミート多項式の漸化式 (21.13)、(21.14) は容易に示される。母関数 $S(z, t)$ を z で微分すると、

$$\frac{\partial}{\partial z} S(z, t) = 2tS(z, t), \quad \text{すなわち} \quad \frac{dH_n(z)}{dz} = 2nH_{n-1}(z)$$

が得られ、 $S(z, t)$ を t で微分すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} S(z, t) = 2(z - t)S(z, t), \quad \text{すなわち} \quad H_{n+1}(z) - 2zH_n(z) + 2nH_{n-1}(z) = 0$$

が得られる。

さて、調和振動子の問題で、漸近解 $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ を除いた $\chi(\xi)$ が満たす微分方程式がエルミートの微分方程式であった。したがって、調和振動子の波動関数は、エルミート多項式を用いて、

$$\psi_n(x) = \chi_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

と表される。

§§21.4.3 生成消滅演算子による記述

調和振動子ポテンシャル中での質量 m の粒子に対するハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

であった。もちろん、 $[x, \hat{p}] = i\hbar$ の交換関係を満たしている。

今、次の演算子 \hat{a} 、 \hat{a}^\dagger を導入する。

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right),$$

逆に

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

となる。 x と \hat{p} の交換関係から

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

が導かれる。この交換関係に注意して、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

と表現される。したがって、調和振動子のエネルギーと波動関数を求めるには、演算子 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値と固有関数を求めれば良いことになった。

交換関係

$$[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

が従うので、この結果を利用すると、ハミルトニアンの第 n 固有状態 ψ_n に対し、

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{a} \psi_n &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} + \frac{1}{2} \hat{a} \right) \psi_n = \hbar\omega \left([\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \frac{1}{2} \right) \psi_n = \hat{a} \hbar\omega \left[\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) - 1 \right] \psi_n \\ &= (E_n - \hbar\omega) \hat{a} \psi_n \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $\hat{H} \hat{a} \psi_n = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \hat{a} \psi_n = E_n \hat{a} \psi_n$ を用いた。こうして、波動関数 ψ_n に \hat{a} を作用させると、エネルギー固有値が $\hbar\omega$ だけ低い状態 ($\hat{a} \psi_n$) が得られることがわかった。しかしながら、調和振動子のポテンシャル $V(x)$ は $V(x) \geq 0$ であるので、系のエネルギーは下に有界である。こうして、エネルギー最低状態 ψ_0 が存在するはずであるので、このときには

$$\hat{a} \psi_0 = 0$$

でなければならない。もしそうでなければ、エネルギーはさらに $\hbar\omega$ 下がり、 ψ_0 がエネルギー最低状態であるという前提に反してしまう。このとき、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger が満たす交換関係を繰り返し用いることで

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_0 &= 0, \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger \psi_0) &= \hat{a}^\dagger \psi_0, \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^{\dagger 2} \psi_0) &= 2(\hat{a}^{\dagger 2} \psi_0), \\ &\vdots \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^{\dagger n} \psi_0) &= n(\hat{a}^{\dagger n} \psi_0), \end{aligned}$$

となっていることがわかる。したがって、波動関数 $\hat{a}^{\dagger n} \psi_0$ は、演算子 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態で、固有値は n である。構成法から $n = 0, 1, 2, \dots$ であることは明らかである。こうして、 $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$ に対する波動関数は $\hat{a}^{\dagger n} \psi_0$ であり、固有値は

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

であることが導かれる。

このとき、規格化された波動関数は

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x)$$

となる。基底状態の波動関数 $\psi_0(x)$ は $\hat{a}\psi_0 = 0$ の条件から導かれる。すなわち、

$$\hat{a}\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \psi_0(x) = 0$$

より

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

となり、これを解くと、波動関数を規格化しておいて、

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

が得られる。これは以前に求めた結果と同じである。励起状態は、 $\hat{a}^\dagger \propto \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)$ を次々作用させて得られる。

古典力学の振動のところでも述べたように、安定な位置であるポテンシャルの極小値の周りに展開すると特別な場合を除き 2 次のポテンシャルが得られ、[¶] 結果的に微小振動は調和振動になる。このとき、本小節で見たように、生成消滅演算子 \hat{a}^\dagger 、 \hat{a} を用いて調和振動子の量子論を構成すると、 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ でハミルトニアンが表され、かつ $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値は零を含む自然数であった。こうして、 $\hat{a}^\dagger \hat{a} \rightarrow n$ は、何かある量子の“数”という考えに導かれる^{||}。結晶格子を考えてみると、各原子は格子点の周りに微小振動しているが、この振動は波として結晶全体に伝わり得る。格子振動を量子力学的に扱うと、多自由度の調和振動子を扱うことになるが、波と粒子の 2 重性から、格子振動を粒子的にみると、 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ が振動子を量子化した“粒子描像”を与えていることになる。また、 $\hat{a}^\dagger \psi_n \sim \psi_{n+1}$ より、 \hat{a}^\dagger は量子を一つ加える“生成演算子”として働く。また、 $\hat{a} \psi_n \sim \psi_{n-1}$ は量子を一つ消す“消滅演算子”として働く。生成、消滅させられる、調和振動を量子化した量子はフォノンと呼ばれる。

[¶] 極小点では $\frac{dV(x)}{dx} = 0$ より、テイラー展開の 2 次から始まる。

^{||} 量子一つのエネルギーが $\hbar\omega$ であるということ。

22章 角運動量

§ 22.1 保存量

§§22.1.1 保存量

量子力学では物理量は演算子で表わされるが、物理量 F の時間微分 \dot{F} を、期待値 $\langle F \rangle$ の時間微分を与える演算子として導入しよう。すなわち、

$$\begin{aligned} \langle \dot{F} \rangle &\equiv \frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{d}{dt} \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t)^* \hat{F} \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3\mathbf{r} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi + \int d^3\mathbf{r} \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \int d^3\mathbf{r} \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \\ &= \frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} [(\hat{H}^* \psi^*) \hat{F} \psi - \psi^* \hat{F} \hat{H} \psi] + \int d^3\mathbf{r} \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \\ &= \frac{i}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} (\psi^* \hat{H} \hat{F} \psi - \psi^* \hat{F} \hat{H} \psi) + \int d^3\mathbf{r} \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \end{aligned}$$

となる。ここで2行目から3行目へはシュレーディンガー方程式とその複素共役を用い、3行目から4行目へはハミルトニアンのエルミート性 (${}^t \hat{H}^* = \hat{H}$) を用いた。こうして、演算子 \dot{F} として、

$$\hat{\dot{F}} \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{F} - \hat{F} \hat{H}) + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}$$

が導入される。もちろん、この演算子 $\hat{\dot{F}}$ の期待値は、 \hat{F} の期待値の時間微分を与える。今、演算子 \hat{F} が、時間をあからさまに含まない、すなわち $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ のときには、 $\hat{\dot{F}} \equiv \frac{d\hat{F}}{dt}$ と書くと

$$i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} = [\hat{F}, \hat{H}] \quad (\equiv \hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}) \quad (22.1)$$

が得られる。よって、

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0, \quad \text{このとき} \quad \frac{d}{dt} \langle F \rangle = 0 \quad (22.2)$$

となる。すなわち、ある演算子がハミルトニアンと可換であれば、その物理量は時間に依存しない保存量である。

§§22.1.2 運動量と空間並進

運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ の物理的意味を見ておこう。古典的には空間の一様性から運動量保存則が得られた (§3.1)。ここでも、空間並進の不変性を見てみる。空間座標を無限小 $\delta\mathbf{r}$ だけ変位させよう。波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ の変化は

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{r} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} + \dots \\ &\approx (1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla) \psi(\mathbf{r}) \\ &\equiv \hat{T}(\delta\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad \hat{T}(\delta\mathbf{r}) \equiv 1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla \end{aligned}$$

と展開できる。ここで、 $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ は $\delta\mathbf{r}$ だけ並進させる演算子である。空間の一様性から、系は空間並進に関して不変、すなわちハミルトニアンが空間並進対称性を持つとしよう。このとき、

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) \hat{H} \psi(\mathbf{r}) = \hat{H} \hat{T}(\delta\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

となるので、(22.2) のように

$$[\hat{T}(\delta\mathbf{r}), \hat{H}] = 0$$

である。ここで、 $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ の表式を代入し、任意の $\delta\mathbf{r}$ に対して成り立つことから、

$$[\nabla, \hat{H}] = 0$$

である。こうして、運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ はハミルトニアン \hat{H} と可換、すなわち、

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = 0$$

であり、空間の一様性から運動量保存則が成り立つことが量子論のレベルで再び示された。空間並進を表わす演算子 \hat{T} は運動量演算子を用いて、

$$\hat{T}(\mathbf{r}) \approx 1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \approx e^{\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}}$$

と書ける。最後の等式は、再び $\delta\mathbf{r}$ を有限の大きさのものとして、展開前の形に戻した。

§§22.1.3 角運動量と空間回転

古典力学では空間回転の不変性から導かれた保存量である角運動量 \mathbf{L} は、 $\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ と定義された (§3.2)。量子論では物理量の非可換性から順序が重要になるが、量子力学での軌道角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}}$ は古典論をそのまま演算子

$$\hat{\mathbf{L}} \equiv \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla \quad (22.3)$$

とすれば良い。これを、空間回転を考察することで確かめよう。

無限小回転 $\delta\varphi$ を考えると、図 66 の様に、変位 $\delta\mathbf{r}$ は

$$\delta\mathbf{r} = \delta\varphi \times \mathbf{r}$$

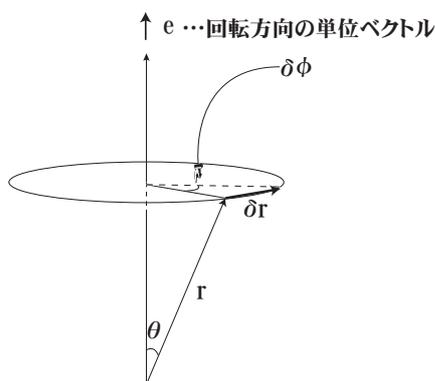


図 66:

となる (12.2)。この空間回転で波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ は

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{r} \cdot \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}} + \dots \\ &\approx \psi(\mathbf{r}) + (\delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)\psi(\mathbf{r}) \\ &= (1 + \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla))\psi(\mathbf{r}) \\ &\equiv \hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi})\psi(\mathbf{r}), \quad \hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi}) \equiv 1 + \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)\end{aligned}$$

と展開できる。ここで、1行目から2行目へは微少回転での変位 $\delta\mathbf{r}$ を代入した後、ベクトル解析の公式 $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \cdot \mathbf{A}$ を用いた。また、 $\hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi})$ は $\delta\boldsymbol{\varphi}$ だけ回転させる演算子である。空間の等方性から、系は空間回転に関して不変、すなわちハミルトニアンが空間回転対称性を持つとしよう。このとき、

$$\hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi})\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi})\psi(\mathbf{r})$$

となるので、(22.2) のように

$$[\hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi}), \hat{H}] = 0$$

である。ここで、 $\hat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi})$ の表式を代入し、任意の $\delta\boldsymbol{\varphi}$ に対して成り立つことから、

$$[\mathbf{r} \times \nabla, \hat{H}] = 0$$

が得られる。こうして、角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ はハミルトニアン \hat{H} と可換、すなわち、

$$[\hat{\mathbf{L}}, \hat{H}] = 0$$

であり、空間の等方性から角運動量保存則が成り立つことが量子論のレベルで再び示された。

空間回転を表わす演算子 \hat{R} は角運動量演算子を用いて、

$$\hat{R}(\boldsymbol{\varphi}) \approx 1 + \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\varphi} \cdot \hat{\mathbf{L}} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\varphi} \cdot \hat{\mathbf{L}}}$$

と書ける。最後の等式は、再び $\delta\boldsymbol{\varphi}$ を有限の大きさのものとして、展開前の形に戻した。

§ 22.2 角運動量

§§22.2.1 角運動量演算子

角運動量演算子は古典的な表式を、(22.3) の様にそのまま演算子に対応させればよいことがわかった。直交座標で成分表示すると

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \equiv \hbar \hat{l}_x, \\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \equiv \hbar \hat{l}_y, \\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \equiv \hbar \hat{l}_z,\end{aligned}$$

となる。ここで、いつも \hbar が現れるので、 \hbar 単位の “角運動量” $\hat{\mathbf{l}}$ を定義しておこう。直接の計算から、次の交換関係が成り立つことが導かれる。

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y \quad (22.4)$$

さて、角運動量演算子から、次の演算子を定義しておく。

$$\hat{l}_+ \equiv \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- \equiv \hat{l}_x - i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_0 \equiv \hat{l}_z \quad (22.5)$$

このとき、これらの演算子間には

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_0, \quad [\hat{l}_0, \hat{l}_+] = \hat{l}_+, \quad [\hat{l}_0, \hat{l}_-] = -\hat{l}_- \quad (22.6)$$

という交換関係が従う。

次に、角運動量の2乗の大きさの演算子 \hat{l}^2 を導入する。定義は古典的なものと同じであり、また交換関係に注意して、今、定義した \hat{l}_\pm, \hat{l}_0 を用いて

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 &\equiv \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \\ &= \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_0^2 + \hat{l}_0 = \hat{l}_0^2 + \frac{1}{2}(\hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_- \hat{l}_+) \end{aligned}$$

と表わされる。このとき、角運動量の2乗の大きさの演算子と、角運動量の各成分とは可換である。すなわち、

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$$

が成り立っている。角運動量の異なる成分同士の演算子は非可換であるので、角運動量の大きさの2乗と、たとえば角運動量の z 成分のみ同時固有状態を持つことが可能である。

さて、角運動量演算子を極座標で表現しておこう。直交座標系と極座標系の変換は、図 67 より

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

であり、逆に

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \tan \theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \tan \varphi = \frac{y}{x}$$

となる。このとき、微分演算は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

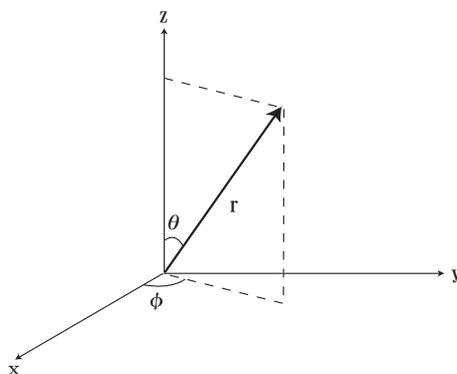


図 67:

となる。これを用いると、角運動量演算子は

$$\begin{aligned}\hat{l}_0 &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, & \hat{l}_{\pm} &= e^{\pm i\varphi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \\ \hat{l}^2 &= -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]\end{aligned}\quad (22.7)$$

と書かれる。

最後に、極座標表示でのラプラシアン $\Delta \equiv \nabla^2$ をみておこう。これは、ハミルトニアンの運動エネルギー項 $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ に表れる。これは、先に与えた $\frac{\partial}{\partial x}$ 等の極座標表示を用いて

$$\begin{aligned}\Delta \equiv \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2\frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2\frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2}\end{aligned}$$

と表わされる。したがって、ハミルトニアンの運動エネルギー項は

$$\begin{aligned}\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2\frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2\hat{l}^2}{2mr^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2\frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\end{aligned}$$

と書ける。最右辺の第2項は、古典力学の所で述べた“遠心力ポテンシャル”の形そのものであることがわかる (§7.2)。

§§22.2.2 固有値と固有関数

前節で述べたように、角運動量演算子に関しては角運動量の大きさの2乗と、ある角運動量成分— z 成分としよう—は同時固有状態を持つ。そこで、 \hat{l}^2 と \hat{l}_z の固有値と同時固有関数を求めよう。

まず、角運動量の z 成分 \hat{l}_z の固有値 m と固有関数 $\psi(\mathbf{r})$ を考えよう。このとき、固有値方程式は

$$\hat{l}_z\psi(\mathbf{r}) = m\psi(\mathbf{r})$$

となる。ここで、角運動量の z 成分演算子の極座標表示を用いると、

$$-i\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi} = m\psi(\mathbf{r})$$

となるので、解は容易に

$$\psi_m(\mathbf{r}) = f(r, \theta)e^{im\varphi}$$

となることがわかる。ここで φ は z 軸周りの角であり、 2π で元に戻る。波動関数の一価性から、 $\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + 2\pi)$ であるので、固有値 m は

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

角運動量の z 成分の固有値を m と書く習わしである。これは、歴史的に、この値が“磁気量子数” (magnetic quantum number) と呼ばれていたためである。もちろん、質量ではない。

と得られる。今、 \hat{l}_z は \hbar 単位の角運動量であり、もともとの角運動量は $\hat{L}_z \equiv \hbar \hat{l}_z$ であるので、角運動量の z 成分は \hbar の整数倍しかとり得ないという重要な結論が得られた。この事実を方向量子化と呼ぶ。

次に、角運動量の大きさの 2 乗の固有値を求める。ベクトル量の射影である角運動量の z 成分の固有値 m には、当然最大値と最小値が存在するはずであるので、 z 成分の固有値の最大値を l としよう。対称性から最小値は $-l$ のはずである。今、波動関数 $\psi_m(\mathbf{r})$ に演算子 \hat{l}_\pm を作用させたものを考えよう。このとき、

$$\begin{aligned}\hat{l}_z \hat{l}_\pm \psi_m(\mathbf{r}) &= ([\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] + \hat{l}_\pm \hat{l}_z) \psi_m(\mathbf{r}) \\ &= (\pm \hat{l}_\pm + \hat{l}_\pm \hat{l}_z) \psi_m(\mathbf{r}) \\ &= (m \pm 1) \hat{l}_\pm \psi_m(\mathbf{r})\end{aligned}$$

のように得られる。ここで 1 行目から 2 行目へは交換関 (22.6) を用い、2 行目から 3 行目へは ψ_m が \hat{l}_z の固有値 m の固有関数であることを用いた。こうして、波動関数 $\hat{l}_\pm \psi_m(\mathbf{r})$ は角運動量の z 成分 \hat{l}_z の固有値が $m \pm 1$ である固有関数であることがわかる： $\hat{l}_\pm \psi_m(\mathbf{r}) \propto \psi_{m \pm 1}(\mathbf{r})$ 。固有値 m として最大値 l をとってみよう。固有値 $l+1$ の状態はもはや存在しないので、 $\hat{l}_+ \psi_l(\mathbf{r}) = 0$ でなければならない。両辺に \hat{l}_- を作用させ、(22.6) 式に引き続く式を用いると

$$\begin{aligned}0 = \hat{l}_- \hat{l}_+ \psi_l(\mathbf{r}) &= (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z) \psi_l(\mathbf{r}) \\ &= \hat{l}^2 \psi_l(\mathbf{r}) - (l^2 + l) \psi_l(\mathbf{r})\end{aligned}$$

となる。ここで、 $\hat{l}_0 \equiv \hat{l}_z$ であり、 ψ_l は \hat{l}_z の固有値 l であることを用いた。こうして

$$\hat{l}^2 \psi_l(\mathbf{r}) = l(l+1) \psi_l(\mathbf{r})$$

が得られる。さらに、波動関数 ψ_l に演算子 \hat{l}_- を作用させると角運動量の z 成分が 1 単位下がった波動関数 ψ_{l-1} が得られるので、これを繰り返し用いることでここで考えている決まった大きさをもつ角運動量の固有関数はすべて得られる。すなわち、 $(\hat{l}_-)^k \psi_l(\mathbf{r}) \propto \psi_{l-k}(\mathbf{r})$ 。また、交換関係 $[\hat{l}^2, \hat{l}_\pm] = 0$ より、 $\hat{l}^2 (\hat{l}_-)^k \psi_l(\mathbf{r}) = (\hat{l}_-)^k \hat{l}^2 \psi_l(\mathbf{r}) = l(l+1) (\hat{l}_-)^k \psi_l(\mathbf{r})$ となる。すなわち

$$\hat{l}^2 \psi_{l-k}(\mathbf{r}) = l(l+1) \psi_{l-k}(\mathbf{r}), \quad (k = 0, 1, 2, \dots, 2l)$$

こうして、角運動量の大きさの 2 乗の固有値は $l(l+1)$ であることがわかった。ここで、 l は角運動量の z 成分の固有値の最大値である (図 68)。

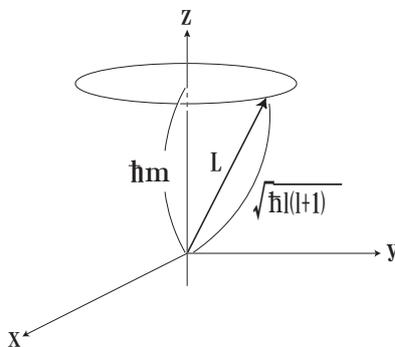


図 68:

こうして、角運動量の大きさの2乗と z 成分の同時固有状態の固有値が得られたので、これらの量子数を用いて波動関数を ψ_{lm} と書くことにしよう。以上をまとめて、

$$\begin{aligned}\hat{l}^2\psi_{lm}(\mathbf{r}) &= l(l+1)\psi_{lm}(\mathbf{r}), & (l: 0 \text{ 以上の整数}) \\ \hat{l}_z\psi_{lm}(\mathbf{r}) &= m\psi_{lm}(\mathbf{r}), & (m = -l, -l+1, \dots, l-1, l) \\ \psi_{lm}(\mathbf{r}) &= f_l(r, \theta)e^{im\varphi}\end{aligned}\tag{22.8}$$

また、波動関数の規格化を用いて規格化因子を決定すると、

$$\begin{aligned}\hat{l}_+\psi_{lm}(\mathbf{r}) &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\psi_{l, m+1}(\mathbf{r}), \\ \hat{l}_-\psi_{lm}(\mathbf{r}) &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\psi_{l, m-1}(\mathbf{r})\end{aligned}\tag{22.9}$$

が得られる。はじめに戻って、ここでの角運動量演算子 \hat{l}_i は、もともとの角運動量 \hat{L} から \hbar をはずして定義されていたことを思い出そう： $\hat{L}_z = \hbar\hat{l}_z$ 、 $\hat{L}^2 = \hbar^2\hat{l}^2$ 。よって、角運動量の大きさの2乗と z 成分の固有値は、 $\hbar^2l(l+1)$ 、 $\hbar m$ であることを注意しておこう。

次に固有関数を考えよう。角運動量演算子 \hat{l}^2 、 \hat{l}_z は極座標表示の角度 θ 、 φ のみに依存したので、固有関数は

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

のように動径部分 $R(r)$ と角度部分 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ に分離できる。角運動量の固有関数としては、角度部分 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ を考えることになる。これを求めよう。すでに、角 φ に対する依存性は得られている。そこで、

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

としておこう。実際、 $\hat{l}_z Y_{lm} = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{lm} = mY_{lm}$ となっており、角運動量の z 成分の演算子 \hat{l}_z の固有関数であることがわかる。今、角運動量の大きさの2乗の演算子の固有状態でもあるので、

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

を満たさなければならない。(22.7)を用いて左辺の演算子を微分で書き、実行できる φ 微分は行ってから両辺に現れる共通の因子を割って整理すると、 $\Theta_{lm}(\theta)$ に対する方程式として

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \Theta_{lm}(\theta) + l(l+1)\Theta_{lm}(\theta) = 0\tag{22.10}$$

が得られる。この微分方程式はルジャンドル陪微分方程式として知られており*、解は詳しく調べられている。こうして、我々はルジャンドル陪微分方程式の解を用いて角運動量の固有関数を書き下すことができる。

$$\Theta_{lm}(\theta) = \epsilon \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta),\tag{22.11}$$

$$\text{ここで } \epsilon = \begin{cases} (-1)^m & (m \geq 0) \\ 1 & (m \leq 0) \end{cases}$$

ここで、 P_l^m はルジャンドル陪多項式と呼ばれ、

$$P_l^{|m|}(x) \equiv (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x),$$

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

*次小節 (§§20.2.3) を見よ。

と与えられる。ここで、 $P_l(x)$ はルジャンドル多項式と呼ばれる。

こうして、角運動量の大きさ l 、 z 成分 m である角運動量の固有関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ が得られた。

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi}$$

この $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ は球面調和関数と呼ばれる。最初の幾つかを具体的に記しておこう。

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\begin{cases} Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi} \\ Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta \cdot e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \end{cases}$$

§§22.2.3 ルジャンドル多項式とルジャンドル陪多項式

この節では前節で現れたルジャンドル陪多項式について簡単にまとめておく。

(i) ルジャンドル微分方程式は

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} \right] + l(l+1)P_l(x) = 0 \quad (22.12)$$

と与えられる。この方程式の解は次のルジャンドル多項式である：

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (22.13)$$

また、ルジャンドル多項式は次の直交性を持つ：

$$\int_{-1}^1 P_l(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ln} \quad (22.14)$$

ここで δ_{ln} はクロネッカーのデルタである。以下に、簡単な証明を与えよう。

(簡単な証明)

まず、 $u(x) \equiv (x^2 - 1)^l$ を考える。この両辺を x で微分してから $(x^2 - 1)$ をかけると

$$(x^2 - 1) \frac{du(x)}{dx} = 2lxu(x)$$

が得られる。さらに $(l+1)$ 回微分すると

$$(x^2 - 1) \frac{d^{l+2}u(x)}{dx^{l+2}} + 2(l+1)x \frac{d^{l+1}u(x)}{dx^{l+1}} + l(l+1) \frac{d^l u(x)}{dx^l} = 2lx \frac{d^{l+1}u(x)}{dx^{l+1}} + 2l(l+1) \frac{d^l u(x)}{dx^l}$$

となる。これを整理すると

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d^{l+1}u(x)}{dx^{l+1}} \right] + l(l+1) \frac{d^l u(x)}{dx^l} = 0$$

とまとまる。これを (22.12) と比較すると、 $\frac{d^l u(x)}{dx^l}$ がルジャンドル微分方程式を満たしていることがわかる。係数をつけて、

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l u(x)}{dx^l} = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

がルジャンドル微分方程式の解であることが言えた。

次に、ルジャンドル微分方程式 (22.12) の両辺に $P_n(x)$ をかけてから x について -1 から 1 まで積分する。部分積分を用いて

$$\int_{-1}^1 \left[-\frac{dP_n(x)}{dx} \cdot (1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} + l(l+1)P_n(x)P_l(x) \right] dx = 0$$

さらに上の式で l と n を入れ替えると

$$\int_{-1}^1 \left[-\frac{dP_l(x)}{dx} \cdot (1-x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} + n(n+1)P_l(x)P_n(x) \right] dx = 0$$

が得られるが、上の 2 式を辺々引き算して

$$[l(l+1) - n(n+1)] \cdot \int_{-1}^1 P_l(x)P_n(x) dx = 0$$

が得られる。今、 $l \neq n$ では積分が 0 でなければ上式は満たされないので、

$$\int_{-1}^1 P_l(x)P_n(x) dx = 0$$

となる。一方、 $l = n$ ではルジャンドル方程式の解 (22.13) を用いて

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [P_l(x)]^2 dx &= \frac{1}{2^{2l} (l!)^2} \int_{-1}^1 \left[\frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \right] \cdot \left[\frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \right] dx \\ &= \frac{1}{2^{2l} (l!)^2} \cdot (2l)! \int_{-1}^1 dx (-1)^l (x^2 - 1)^l \\ &= \frac{(2l)!}{2^{2l} (l!)^2} \cdot 2 \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!} \\ &= \frac{2}{2l+1} \end{aligned}$$

となる。ここで、1 行目から 2 行目へは部分積分を用い、2 行目から 3 行目へは積分を実行した。こうして $l \neq n$ と $l = n$ をまとめて、(22.14) を得る。

最後にルジャンドル多項式の母関数 $K(x, t)$ を記しておく。

$$K(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n$$

(ii) ルジャンドル陪微分方程式は

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_l^m(x)}{dx} \right] - \frac{m^2}{1-x^2} P_l^m(x) + l(l+1)P_l^m(x) = 0 \quad (22.15)$$

と与えられる。ここで、 $l = 0, 1, 2, \dots$ 、 $m = 0, 1, 2, \dots \leq l$ である。 $m = 0$ ではルジャンドル微分方程式に帰着する。この方程式の解は次のルジャンドル陪多項式である：

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad (22.16)$$

ここで、 $P_l(x)$ はルジャンドル多項式である。また、ルジャンドル陪多項式は次の直交性を持つ：

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_n^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ln} \quad (22.17)$$

ここで δ_{ln} はクロネッカーのデルタである。以下に、簡単な証明を与えよう。

(簡単な証明)

ルジャンドル微分方程式 (22.12) から出発する。丹念に x で m 回微分すると

$$\begin{aligned} & \left[(1-x^2) \frac{d^{m+2} P_l(x)}{dx^{m+2}} - 2mx \frac{d^{m+1} P_l(x)}{dx^{m+1}} - m(m-1) \frac{d^m P_l(x)}{dx^m} \right] \\ & - \left[2x \frac{d^{m+1} P_l(x)}{dx^{m+1}} + 2m \frac{d^m P_l(x)}{dx^m} \right] + l(l+1) \frac{d^m P_l(x)}{dx^m} = 0 \end{aligned}$$

という式が得られる。これを $P_l^{(m)}(x) \equiv \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}$ とおいて整理すると

$$(1-x^2) \frac{d^2 P_l^{(m)}(x)}{dx^2} - 2(m+1)x \frac{d P_l^{(m)}(x)}{dx} + [l(l+1) - m(m+1)] P_l^{(m)}(x) = 0$$

となるが、さらに $P_l^{(m)}(x) \equiv (1-x^2)^{-m/2} y(x)$ とおいて $y(x)$ に対する微分方程式に直す。上で得られた $P_l^{(m)}(x)$ に対する微分方程式に代入し、関数 $y(x)$ の微分方程式を得た後で最後に $(1-x^2)^{m/2}$ をかけて整理すると

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dy(x)}{dx} \right] - \frac{m^2}{1-x^2} y(x) + l(l+1)y(x) = 0$$

が得られる。これはルジャンドル陪微分方程式にほかならない。よって、 $y(x)$ はルジャンドル陪微分方程式の解であることがわかる。この $y(x)$ を $P_l^m(x)$ と書いて

$$y(x) \equiv P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

が得られる。

直交性を示すために、ルジャンドル陪微分方程式 (22.15) の両辺に $P_n^m(x)$ をかけて x について -1 から 1 ままで積分する：

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-1}^1 P_n^m(x) \left[\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d P_l^m(x)}{dx} \right) - \frac{m^2}{1-x^2} P_l^m(x) + l(l+1) P_l^m(x) \right] dx \\ &= \int_{-1}^1 \left[\frac{d P_n^m(x)}{dx} (x^2-1) \frac{d P_l^m(x)}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2} P_n^m(x) P_l^m(x) + l(l+1) P_n^m(x) P_l^m(x) \right] dx \end{aligned}$$

ここで、第1項では部分積分を行った。上式で n と l を入れ替えると、

$$\int_{-1}^1 \left[\frac{d P_l^m(x)}{dx} (x^2-1) \frac{d P_n^m(x)}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2} P_l^m(x) P_n^m(x) + n(n+1) P_l^m(x) P_n^m(x) \right] dx = 0$$

となる。2式を辺々引き算すると

$$[l(l+1) - n(n+1)] \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_n^m(x) dx = 0$$

となる。よって、 $n \neq l$ のとき

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_n^m(x) dx = 0$$

が得られる。 $n=l$ のときにはルジャンドル陪多項式をルジャンドル多項式で表した (22.16) を用いて

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx &= \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} dx \\
 &= (-1)^m \int_{-1}^1 \frac{d^m}{dx^m} \left[(1-x^2)^m \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \right] P_n(x) dx \\
 &= \frac{(-1)^m}{2^n n!} \int_{-1}^1 \frac{d^m}{dx^m} \left[(1-x^2)^m \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \right] \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n dx \\
 &= \frac{(-1)^{m+n}}{2^n n!} \int_{-1}^1 \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} \left[(1-x^2)^m \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \right] (x^2-1)^n dx
 \end{aligned}$$

と変形できる。ここで、1行目から2行目へは m 回部分積分を行い、3行目ではルジャンドル多項式 $P_n(x)$ を具体的に表示し、3行目から4行目へはさらに n 回部分積分を行った。さて、右辺最終行の被積分関数中、 $m+n$ 階 x 微分する項について考えよう。 $P_n(x)$ は x の n 次の多項式であるので、 $\frac{d^m P_n(x)}{dx^m}$ は $(n-m)$ 次の多項式である。これに $(1-x^2)^m$ をかけたものは $(n+m)$ 次の多項式となるので、さらに $(m+n)$ 回微分すると定数となる。その定数は $P_n(x)$ の最高次の係数に注意して

$$\begin{aligned}
 P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^{2n} - \dots) = \frac{1}{2^n n!} \frac{(2n)!}{n!} x^n - \dots, \\
 \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} \left[(1-x^2)^m \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \right] &= \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} \left[(-1)^m x^{2m} \frac{d^m}{dx^m} x^n + \dots \right] \\
 &= \frac{(-1)^m (2n)!}{2^n (n!)^2} \cdot \frac{n!}{(n-m)!} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} (x^{n+m} + \dots) \\
 &= \frac{(-1)^m (2n)!}{2^n n!} \cdot \frac{(n+m)!}{(n-m)!}
 \end{aligned}$$

となる。残りの因子 $(x^2-1)^n$ は積分されて

$$\int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = (-1)^n \int_{-1}^1 (1-x^2)^n dx = (-1)^n \cdot \frac{2^{2n} (n!)^2}{(2n)!} \frac{2}{2n+1}$$

となるので、よってルジャンドル陪多項式の規格化は

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx &= \frac{(-1)^{m+n}}{2^n n!} \cdot \left[\frac{(-1)^m (2n)!}{2^n n!} \cdot \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \right] \cdot \left[(-1)^n \cdot \frac{2^{2n} (n!)^2}{(2n)!} \frac{2}{2n+1} \right] \\
 &= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}
 \end{aligned}$$

となる。以上から、規格直交性が示された。

こうして、(22.15) 式で $x = \cos \theta$ とおくと、このルジャンドル陪微分方程式は角運動量の固有関数 $\Theta(\theta)$ が満たす (22.10) 式になることがわかる。したがって、 $\Theta(\theta)$ はルジャンドル陪多項式 $P_l^m(\cos \theta)$ で表される。

§ 22.3 角運動量代数とスピン

§§22.3.1 角運動量代数

§20.2.1 では古典力学の軌道角運動量から出発し、角運動量演算子を微分演算子で表した。そして微分演算子の固有関数として角運動量固有関数を構成し、あわせて固有値を得た。しかしながら、角運動量は回転の生成

子であり、§10.1.3 で示されたように、回転の生成子 \mathbf{J} はリー代数を構成する。したがって、ここではリー代数の交換関係 (22.4) からのみ出発しよう。微分演算子で表された軌道角運動量にとらわれないために、空間回転の生成子としての角運動量演算子を $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ と記そう。すなわち

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y,$$

$$\text{または } [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad \text{ただし } \epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) = (123) \text{ およびその偶置換} \\ -1 & (ijk) = (321) \text{ およびその偶置換} \\ 0 & \text{上記以外} \end{cases} \quad (22.18)$$

ここで、 $(ijk) = (123) = (xyz)$ としている。

繰り返しになるが、この節だけで閉じた記述にしよう。角運動量の大きさの 2 乗 $\hat{\mathbf{J}}^2$ は

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

であるが、この演算子は $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ のいずれとも交換する。そこで、 \hat{J}_z を取り上げると、 $\hat{\mathbf{J}}^2$ と \hat{J}_z は可換であるので同時固有状態が存在する。これを 17 章で導入したブラケット表示を用いて、 $|j, m\rangle$ と書くことにする。ここで、 m は角運動量の z 成分の固有値である (図 69)。すなわち

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

が成り立っている。また、角運動量の z 射影には最大値が存在するので、この最大となる m の値を j と記した。

次に昇降演算子 \hat{J}_\pm を定義する。

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_0 \equiv \hat{J}_z$$

とすると、次の交換関係を満足する：

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm$$

昇降演算子を状態 $|j, m\rangle$ に作用させたものはまた、 $\hat{J}_z (= \hat{J}_0)$ の固有状態となる。実際、

$$\hat{J}_0 \hat{J}_\pm |j, m\rangle = ([\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] + \hat{J}_\pm \hat{J}_0) |j, m\rangle = (m \pm 1) \hat{J}_\pm |j, m\rangle$$

となる。したがって、状態 $\hat{J}_\pm |j, m\rangle$ は、角運動量の z 成分の固有値が $m \pm 1$ の固有状態であることがわかる。こうして、

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle \propto |j, m \pm 1\rangle$$

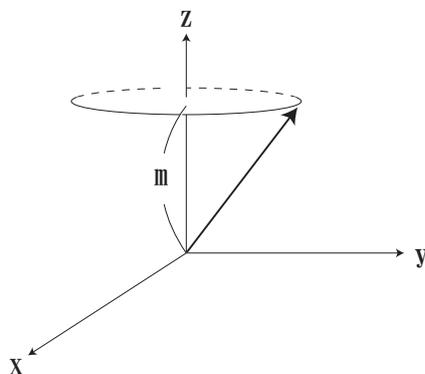


図 69:

となっているので、 $\hat{J}_-|j, m\rangle = N_m|j, m-1\rangle$ としよう。ただし、 j は角運動量の z 射影の最大値であったので

$$\hat{J}_+|j, j\rangle = 0$$

であることに注意しよう。さて、規格化 N_m を求める。今、 $\hat{J}_-|j, m\rangle = N_m|j, m-1\rangle$ であるので、 $\langle j, m|\hat{J}_+ = \langle j, m-1|N_m$ ということでもある。内積をとると、

$$\begin{aligned} N_m^2 &= \langle j, m-1|N_m N_m|j, m-1\rangle = \langle j, m|\hat{J}_+\hat{J}_-|j, m\rangle = \langle j, m|([\hat{J}_+, \hat{J}_-] + \hat{J}_-\hat{J}_+)|j, m\rangle \\ &= \langle j, m|(2\hat{J}_0 + \hat{J}_-\hat{J}_+)|j, m\rangle = 2m + \langle j, m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j, m\rangle \end{aligned}$$

と変形できる。ここで、 $m = j$ で $\hat{J}_+|j, j\rangle = 0$ を用いると

$$N_j^2 = 2j, \quad \text{すなわち} \quad N_j = \sqrt{2j}$$

と得られる。一方、 $\hat{J}_+|j, j-1\rangle = c|j, j\rangle$ として

$$\hat{J}_+|j, j-1\rangle = \hat{J}_+ \left(\frac{1}{N_j} \hat{J}_-|j, j\rangle \right) = \frac{1}{N_j} ([\hat{J}_+, \hat{J}_-] + \hat{J}_-\hat{J}_+)|j, j\rangle = \frac{2j}{N_j}|j, j\rangle$$

となるので、これにより、 $c = N_j$ 、すなわち、

$$\begin{aligned} \hat{J}_-|j, j\rangle &= N_j|j, j-1\rangle \\ \hat{J}_+|j, j-1\rangle &= N_j|j, j\rangle \end{aligned}$$

であることがわかる。同様にして、

$$\begin{aligned} \hat{J}_-|j, j-k\rangle &= N_{j-k}|j, j-k-1\rangle \\ \hat{J}_+|j, j-k-1\rangle &= N_{j-k}|j, j-k\rangle \end{aligned}$$

となる。すなわち、

$$\begin{aligned} N_{j-k}^2 &= \langle j, j-k|\hat{J}_+\hat{J}_-|j, j-k\rangle = \langle j, j-k|([\hat{J}_+, \hat{J}_-] + \hat{J}_-\hat{J}_+)|j, j-k\rangle \\ &= \langle j, j-k|2\hat{J}_0|j, j-k\rangle + \langle j, j-k|\hat{J}_-\hat{J}_+|j, j-k\rangle \\ &= 2(j-k) + N_{j-k+1}^2 \end{aligned}$$

という漸化式が導かれる。これを解くと

$$N_{j-k}^2 = \sum_{l=0}^k 2(j-l) = 2j(k+1) - k(k+1) = (k+1)(2j-k) \quad (22.19)$$

$$\text{すなわち} \quad N_m = \sqrt{(j-m+1)(j+m)} \quad (j-k = m \text{ とした}) \quad (22.20)$$

と、規格化因子 N_m が決定できる。さて、(22.19) 式を見ると左辺は零以上の数であるので、右辺から $2j-k \geq 0$ でなければならないことがわかる。ここで、 j は角運動量の z 射影の最大値、 k は状態 $|j, j\rangle$ から \hat{J}_- で角運動量の z 射影の固有値を 1 ずつ下げていく回数であった。すなわち、 k は零を含む自然数である。角運動量の z 射影が最大値を持つ状態 $|j, j\rangle$ から \hat{J}_- で z 射影を下げていくと、最小値 $-j$ を超えると状態は存在しないはずであるので、どこかで $N_{j-k}^2 = 0$ とならないといけない。そうでなければ、漸化式から $N_{j-k}^2 < 0$ が得られてしまい、角運動量の z 射影に最小値があるということと矛盾である。こうして、ある 0 を含む自然数 k が存在し、

$$2j - k = 0$$

となるべきであることが (22.19)。すなわち、

$$2j = k = (0 \text{ を含む自然数}),$$

$$j = \text{整数 } (0, 1, 2, \dots) \text{ または半整数 } \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\right)$$

という重要な結論が得られた。角運動量の z 成分の最大値は \hbar を単位にして整数倍または半整数倍に限られる。軌道角運動量の場合には整数倍のみであり半整数は現れなかったことを思いだそう。

続いて、角運動量の大きさの 2 乗を考える。今、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_0^2 + \frac{1}{2}(\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+)$$

と書けるので、容易に

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= \left(m^2 + \frac{1}{2}(N_m^2 + N_{m+1}^2) \right) |j, m\rangle \\ &= \left(m^2 + \frac{1}{2}[(j-m+1)(j+m) + (j-m)(j+m+1)] \right) |j, m\rangle \\ &= j(j+1) |j, m\rangle \end{aligned}$$

が得られる。すなわち、角運動量の大きさの 2 乗の固有値は \hbar を戻すと $\hbar^2 j(j+1)$ であることが言える。

以上、角運動量代数から得られた事実をまとめておこう。

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle \\ \hat{J}_z |j, m\rangle &= m |j, m\rangle \\ j; m \text{ の最大値、整数または半整数} \\ \hat{J}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \\ \hat{J}_- |j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \end{aligned} \tag{22.21}$$

また、角運動量 j の状態、すなわち角運動量の大きさが $\sqrt{j(j+1)}$ である状態は $|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \dots, |j, -j+1\rangle, |j, -j\rangle$ の $2j+1$ 個存在することがわかる (図 70)。

ところで、軌道角運動量 l は整数であった。しかしながら、空間回転を引き起こす回転の生成子 $\hat{\mathbf{J}}$ の満たす交換関係、すなわちリー代数から空間回転に関して結論されたことは、角運動量は \hbar を単位にして整数または

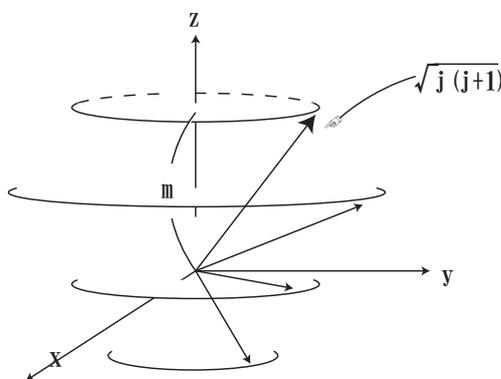


図 70:

半整数に量子化されるべきであるという事実である。軌道角運動量に関しては、その座標表示、すなわち角度微分演算子としての表現から確かに整数値しか取り得ないことが結論された。しかし、空間回転としてのみその表現を考えるならば、半整数値が許される。自然は、半整数値の角運動量を許すのであろうか。一様な外部磁場中に原子を置くと、磁場が無いときに見られるエネルギー準位が軌道角運動量の磁場方向の射影値に応じて分裂することが実験的に確かめられている。これを1次のゼーマン効果と呼ぶ (§§23.3.2)。ところが、微細にみると、各々のエネルギー準位がさらに2つに分裂することが明らかにされた。これは異常ゼーマン効果として知られる。角運動量の射影を2つのみ持つ角運動量の大きさ j は $j = 1/2$ の場合である。こうして、磁場に反応する原子中の電子自身が半整数 $j = 1/2$ の角運動量を持つことが理解された。素粒子自身が持つ固有の角運動量をスピン角運動量、または簡単にスピンと呼ぶ。

§§22.3.2 パウリスピン

スピン角運動量 $j = 1/2$ の場合を考えよう。(22.21) 式と規格直交性 $\langle j, m | j, m' \rangle = \delta_{mm'}$ を用いて、次の行列を考える。

$$s_+ \equiv \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_+ | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_+ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_+ | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_+ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_- \equiv \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_- | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_- | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_0 \equiv \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_0 | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_0 | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_0 | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_0 | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

さらに (x, y, z) 表示に戻すと、 $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$ 、 $\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/(2i)$ 、 $\hat{J}_z = \hat{J}_0$ より、

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-), \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-), \quad s_z = z_0$$

となる。共通に $1/2$ の因子が表れるので、 $\mathbf{s} \equiv \boldsymbol{\sigma}/2$ として、行列 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を導入すると

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad \text{すなわち} \quad (s_x, s_y, s_z) = \frac{1}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (22.22)$$

が得られる。行列 $\boldsymbol{\sigma}$ をパウリ行列と呼ぶ。空間回転を引き起こす生成子の行列表示として、パウリ行列はすでに §10.1.4 で導入されている。このときにはパウリ行列の成分の添え字を、 $(1, 2, 3) = (x, y, z)$ と読み直せばよい。パウリ行列から得られる \mathbf{s} は空間回転の生成子なので、交換関係 (22.18) を満たす。これは直接の行列表示からも確かめられる。パウリ行列は次の性質を持つことは、行列計算から直接確かめることができる。

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0$$

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y$$

さて、次に波動関数

$$\chi_{s, m_s}(s'_z) \equiv \langle s'_z | \chi; s, m_s \rangle$$

を考える。ただし、ここではスピン $s = 1/2$ に限ろう。スピン $1/2$ では角運動量演算子は 2 行 2 列のパウリ行列で表示されたので、波動関数は 2 成分持つことになる。スピンの z 成分の固有値は $\pm 1/2$ であるので、スピン波動関数 $\chi_{\frac{1}{2}, m}$ に関しては

$$\chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(s'_z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_{\uparrow}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}(s'_z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_{\downarrow}$$

となる。実際、角運動量の z 射影の最大値 $s_z = 1/2$ の波動関数から角運動量を 1 単位持ち上げることは不可能であり、 $s_+\chi_{\uparrow} = 0$ 等が得られる：

$$s_+\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad s_+\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_{\uparrow}$$

$$s_-\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_{\downarrow}, \quad s_-\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$s_z\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\chi_{\uparrow}, \quad s_z\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\chi_{\downarrow}$$

一般のスピン波動関数は、スピン上向き (χ_{\uparrow}) とスピン下向き (χ_{\downarrow}) の重ね合わせで書けるので、

$$\chi(s'_z) = a_{\uparrow}\chi_{\uparrow} + a_{\downarrow}\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

となる。これは 2 成分スピン波動関数である。

一般に、スピン角運動量 \mathbf{s} の $\mathbf{e}(\theta, \varphi)$ 方向の成分 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{e}(\theta, \varphi)$ が $\pm \frac{1}{2}$ となるスピン波動関数 χ を求めておこう (図 71)。スピン演算子は $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$ であるので、 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2$ であり、

$$\mathbf{e}(\theta, \varphi) \cdot \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

が、求める χ が満たす固有値方程式である。 (θ, φ) 方向の単位ベクトル $\mathbf{e}(\theta, \varphi)$ の各成分は

$$e_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad e_y = \sin \theta \sin \varphi, \quad e_z = \cos \theta$$

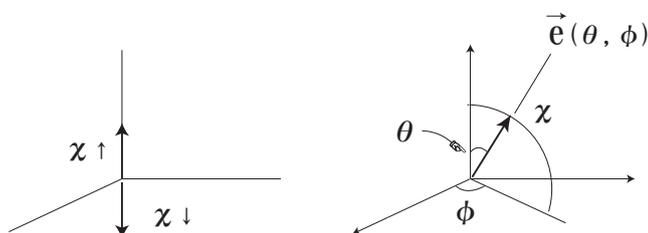


図 71:

であるので、パウリ行列との内積から、上の固有値方程式は

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \pm \begin{pmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。これをスピン波動関数の規格化 $|a_{\uparrow}|^2 + |a_{\downarrow}|^2 = 1$ に注意して解くと

$$\begin{aligned} \text{複号 + に対して} \quad a_{\uparrow} &= \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad a_{\downarrow} = \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}}, \\ \text{複号 - に対して} \quad a_{\uparrow} &= -\sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad a_{\downarrow} = \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}}, \end{aligned}$$

が得られる。すなわち、

$$\begin{aligned} \chi^{(+\frac{1}{2})}(s'_z) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} = \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}} \chi_{\uparrow} + \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}} \chi_{\downarrow}, \\ \chi^{(-\frac{1}{2})}(s'_z) &= \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} = -\sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}} \chi_{\uparrow} + \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}} \chi_{\downarrow} \end{aligned}$$

が得られる。§10.1.4 で述べたことと対応して、 z 軸周りの角 φ を 0 から 2π まで変化させると、 $e^{\pm i\frac{\varphi+2\pi}{2}} = -e^{\pm i\frac{\varphi}{2}}$ であるので、スピン波動関数は

$$\chi^{(\pm\frac{1}{2})}(s'_z) \longrightarrow -\chi^{(\pm\frac{1}{2})}(s'_z)$$

と負号が付き、元には戻らない。角 φ を 0 から 4π まで変化させて初めて元に戻る。これはスピノールの顕著な性質である。

こうして、スピン 1/2 を持つ粒子の波動関数は、空間部分の波動関数 $\phi(\mathbf{r})$ とスピン波動関数 $\chi(s_z)$ の積となる：

$$\langle \mathbf{r}, s_z | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}, s_z) = \phi(\mathbf{r}) \cdot \chi(s_z)$$

§22.4 角運動量の合成

2つの角運動量演算子 $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ を考える。ここで、下付き添え字 1, 2 は別の自由度、すなわち異なる粒子の角運動量、あるいは軌道角運動量とスピン角運動量などを表わしているものとする。したがって、2つは独立なので、 $[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0$ と交換する。交換可能な最大の組として、

$$\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1,z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2,z}$$

をとろう。ここで、 $\hat{J}_{1,z}$ は粒子 1 の角運動量の z 成分を表わす。これらの演算子に対する固有値を $j_1(j_1+1), m_1, j_2(j_2+1), m_2$ とする。状態は、それぞれの角運動量の固有状態 $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ から、

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

として構成される。各々 $2j_1+1$ 個、 $2j_2+1$ 個の状態があるので、これらを掛け合わせた状態は $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個存在する。

さて、2つの角運動量を合成して、別の大きさの角運動量 \hat{J} を得ることにしよう。角運動量はベクトルであるのでベクトルの合成に対応する：

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$$

こうして、同時対角化できる交換可能な演算子の最大の組として、今度は

$$\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$$

を取ることにする。対応する固有値は $j_1(j_1 + 1)$ 、 $j_2(j_2 + 1)$ 、 $J(J + 1)$ 、 M とする。どのような J 、 M が可能かを考察しよう。角運動量の z 成分はそのままの和となるので、

$$M = m_1 + m_2$$

が得られる。また、 j_1 、 j_2 はそれぞれ m_1 、 m_2 の最大値であるので、合成後の角運動量の z 成分が最大値 $M_{max} = j_1 + j_2$ を取るときには、必ず合成角運動量の大きさ J は M_{max} を含むように最大値 $J = j_1 + j_2$ でなければならない。こうして、合成後の角運動量の大きさ J は

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, J_{min}$$

となる。ここで、 J_{min} は合成された角運動量の最小値である。状態の個数から

$$\sum_{J=J_{min}}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

とならなければならないので、 J_{min} として、 $J_{min} = |j_1 - j_2|$ と求められる。すなわち、

$$\begin{aligned} J &= j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|, \quad \text{すなわち } |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \\ M &= -J, -J+1, \dots, J \end{aligned} \quad (22.23)$$

合成された角運動量の固有状態を $|j_1, j_2; J, M\rangle$ と書くことにしよう。この状態を合成前の角運動量の固有状態の積で展開すると、展開係数を $\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | JM \rangle$ と書いて

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | JM \rangle |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

と表わされる。あるいは、波動関数の形で

$$\psi_{j_1 j_2 J M} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} c_{j_1 j_2 m_1 m_2}^{JM} \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}$$

と書いても良い。ここで、 $c_{j_1 j_2 m_1 m_2}^{JM} \equiv \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | JM \rangle$ をクレブシュ・ゴールドン係数と呼ぶ。

スピン角運動量がともに $1/2$ の2つのスピン角運動量を合成する簡単な場合を具体的に考えてみよう。このとき、 $j_1 = j_2 = 1/2$ である。こうして合成スピンは

$$J = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad \text{または} \quad J = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| (= |j_1 - j_2|) = 0$$

である。こうして、粒子1のスピン波動関数を $\chi_{\uparrow\text{or}\downarrow}(1)$ 、粒子2のスピン波動関数を $\chi_{\uparrow\text{or}\downarrow}(2)$ 、昇降演算子 $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_{1,\pm} + \hat{J}_{2,\pm}$ から、合成後のスピン波動関数 $\chi_{J,M}(1, 2)$ は

$$\begin{aligned} J = 1, & \begin{cases} \chi_{1,1}(1, 2) = \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \chi_{1,0}(1, 2) = \hat{J}_- \chi_{11}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)) \\ \chi_{1,-1}(1, 2) = \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{cases} \\ J = 0, & \begin{cases} \chi_{0,0}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)) \end{cases} \end{aligned}$$

と得られる。このとき、クレブシュ・ゴルダン係数は

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 11 \rangle &= 1, & \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | 10 \rangle &= \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 10 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | 1-1 \rangle &= 1, \\ \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | 00 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 10 \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

と得られている。

§ 22.5 一様な外部磁場中の粒子の運動

前小節までで角運動量の一般論を終わるが、最後に一様な外部磁場中の粒子の運動を考えてみよう。古典力学でのハミルトン形式から、電磁場中でのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t) \quad (22.24)$$

と書ける (§§11.3.1)。ここで、粒子の質量は m であり、電荷を q とした。また、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 、 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ はそれぞれベクトルポテンシャル、スカラーポテンシャル（電位）であり、磁束密度 \mathbf{B} 、電場 \mathbf{E} とは $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ 、 $\mathbf{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ の関係がある。さらに粒子が固有磁気モーメント $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ を持つとしよう。粒子に固有の特定の方向は、自身のスピン角運動量の方向しかないので、固有磁気モーメントはまた、スピンの方向を持つ。スピン方向の単位ベクトルを $\frac{\hat{\mathbf{s}}}{s}$ と書く。ここで $\hat{\mathbf{s}}$ はスピン演算子、 s はスピンの大きさである。こうして

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu \frac{\hat{\mathbf{s}}}{s}$$

と書ける。ここで、係数 μ は固有磁気モーメントの大きさであり、電子の場合

$$\mu = -\mu_B, \quad \mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

である。ここで、 m_e は電子の質量である。この μ_B をボーア磁子と呼ぶ（式(??)を見よ）。

よって、電場のない ($\Phi = 0$) 一様な外部磁場 \mathbf{B} のもとでは、ハミルトニアン (22.24) に磁気モーメントと磁場の相互作用が加わり、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$$

となる。

今、一様な外部磁場の元での電子の運動を考えよう。電荷は $q = -e$ である。また、 z 方向に一様な磁場がある場合には、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} として

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0$$

と取ればよい。実際、 $(\text{rot } \mathbf{A})_z = B$ となることを確かめることができる。スピン 1/2 の粒子では $s = 1/2$ と取ればよいので、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x - eBy)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{e\hbar B}{m} \hat{s}_z$$

とあからさまに書くことができる。ここで、 $[\hat{H}, \hat{s}_z] = 0$ より、電子のスピン角運動量の z 成分は確定値を持つことができる。そこで、 s_z を $1/2$ または $-1/2$ で置き換えて良い。また、 $[\hat{H}, \hat{p}_x] = [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$ から、 \hat{p}_x 、 \hat{p}_z の固有値は保存される。そこで、保存される運動量の x 成分、 z 成分を p_x 、 p_z として、波動関数 ψ を

$$\psi(x, y, z) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \cdot \varphi(y)$$

と変数分離する。これをシュレーディンガー方程式 $\hat{H}\psi = E\psi$ に代入すると、 $\varphi(y)$ に対する方程式として

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \left[\frac{e\hbar B}{m} s_z + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{e^2 B^2}{2m} \left(y - \frac{p_x}{eB} \right)^2 \right] \varphi(y) = E\varphi(y)$$

が得られる。ただし、 $s_z = \pm 1/2$ である。ここで、

$$\omega_H \equiv \frac{eB}{m}, \quad y_0 \equiv \frac{p_x}{eB}$$

とおくことで、 $\varphi(y)$ に対する方程式は、さらに

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega_H^2 (y - y_0)^2 \varphi(y) = \left(E - \hbar \omega_H s_z - \frac{p_z^2}{2m} \right) \varphi(y)$$

と纏められる。これは、 y_0 を中心に、振動数 ω_H 、エネルギー $\mathcal{E} \equiv \left(E - \hbar \omega_H s_z - \frac{p_z^2}{2m} \right)$ で振動する調和振動子のシュレーディンガー方程式となっていることがわかる。従って、波動関数、エネルギー固有値とも、§19.4 の議論をたどれば得られる。特に、エネルギー固有値は

$$(\mathcal{E} =) E - \hbar \omega_H s_z - \frac{p_z^2}{2m} = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

より、

$$E_n = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} + s_z \right) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots; \quad s_z = \pm \frac{1}{2})$$

と得られる。すなわち、外部磁場と平行な z 方向にはエネルギーが $\frac{p_z^2}{2m}$ の連続的な一様運動を行い、磁場に垂直な x - y 面内では、回転運動がエネルギー的に量子化された結果を与える。磁場に垂直な面内の運動により得られる離散的なエネルギーをランダウ準位と呼ぶ。

23章 水素原子

§23.1 水素型原子の固有値と固有関数

水素原子、または水素型イオンを考える。すなわち、中心にある $+Ze$ の電荷を持った原子核を 1 個の電子が取り囲んでいて束縛されている電子の運動を考える。原子核を構成する陽子や中性子は重く、陽子 1 つの質量は電子の質量のおよそ 1860 倍あるので、原子核は実質上動かないとして良い。しかしながら、正確には原子核と電子の 2 体問題と考えると、原子核の周りにある“電子”の質量を、換算質量で置き換えたものの 1 体問題として扱うと良い (§§24.1.1)。すなわち、原子核を構成する陽子、及び中性子の質量を m_N 、原子核を構成する陽子と中性子のあわせた個数を A とし、電子の質量を m_e とすると、換算質量 m は (§§24.1.1) $m = \frac{Am_N m_e}{Am_N + m_e}$ である。ここで、 $A = Z = 1$ の場合が水素原子である。陽子 1 つの質量は電子の質量のおよそ 1860 倍あるので、原子核は実質上動かないとして良い。電子は原子核から電気的な引力、すなわちクーロン引力を受けて束縛されている。ここで、クーロンポテンシャルに $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ という因子がいつもあらわれるので、簡単のため $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv \frac{q^2}{r}$ と書くことにしよう。こうすると、時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Zq^2}{r}\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (23.1)$$

と表わされる。水素原子の問題を解くことは、 $Z = 1$ として上のシュレーディンガー方程式を解くことに帰着される。さて、ラプラシアン $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ を極座標で表わす。これはすでに §20.2.1 で行なっている ((22.7) 式に続く式を参照)。結果を再掲しておこう:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &\equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2} \\ \hat{l}^2 &= - \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \end{aligned} \quad (23.2)$$

求める波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ は、 r に依存した動径成分と、角度変数 (θ, φ) に依存した角度成分に変数分離される:

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi_{lm}(\theta, \varphi)$$

これをシュレーディンガー方程式 (23.1) に代入し、(23.2) を用いる。代入した後、 $\psi(\mathbf{r})$ で割ってから整理しておく、

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Zq^2}{r} \right) = \frac{\hat{l}^2 \Phi_{lm}(\theta, \varphi)}{\Phi_{lm}(\theta, \varphi)} \quad (23.3)$$

が得られる。右辺の分子は関数 $\Phi_{lm}(\theta, \varphi)$ に演算子 \hat{l}^2 が作用していて Φ_{lm} とは別の関数型になっていることに注意しよう。こうして、左辺は r のみの関数、右辺は (θ, φ) のみの関数となっているので、左右両辺ともにある定数でなければ任意の r, θ, φ に対して成り立たない。よって、この定数を A とすると、右辺から

$$\frac{\hat{l}^2 \Phi_{lm}(\theta, \varphi)}{\Phi_{lm}(\theta, \varphi)} = A, \quad \text{すなわち} \quad \hat{l}^2 \Phi_{lm}(\theta, \varphi) = A\Phi_{lm}(\theta, \varphi)$$

となる。ここで、 \hat{l}^2 は軌道角運動量の大きさの 2 乗の演算子であるので、§20.2.2 で調べたように、固有値と固有関数はすでに知っている。固有値は l を 0 以上の整数として $A = l(l+1)$ 、固有関数 $\Phi_{lm}(\theta, \varphi)$ は球面調和

関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ である。こうして、(23.3) 式は、

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Zq^2}{r} \right) R(r) = 0,$$

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

と得られる。こうして、これから求めるべき関数 $R(r)$ の満たす上の式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left(-\frac{Zq^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r) = ER(r) \quad (23.4)$$

という形のシュレーディンガー方程式になる。ここで、左辺の 2 つめの括弧の中の第 2 項は、古典力学にも表れた遠心力ポテンシャルである。古典力学では古典的な角運動量の大きさを L として、§7.2 で $U_{cf} = \frac{L^2}{2mr^2}$ と書いたものである。確かに量子力学では角運動量の大きさの 2 乗は $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ であった。

これから、(23.4) 式を考察していこう。今、 r から ρ へ

$$\rho \equiv \frac{2mZq^2}{\hbar^2 n} r, \quad \text{ただし} \quad n \equiv \sqrt{\frac{mZ^2 q^4}{-2E\hbar^2}} \quad (23.5)$$

と変数変換する。束縛状態を考えているので、エネルギー固有値 E が負であることを考慮した。この変数変換のもとで、(23.4) 式は

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (23.6)$$

と変形される。ここで、 $R(\rho)$ の漸近形を考えよう。まず、 $\rho \rightarrow 0$ 、すなわち $r \rightarrow 0$ のときには、(23.6) 式では $\frac{1}{\rho^2}$ の項が効くので、角括弧のなかの $-1/4$ や $1/\rho$ の項は無視して、

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R(\rho) \approx 0$$

として良い。整理すると

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) \approx l(l+1) R(\rho)$$

となるので、 $R(\rho) \propto r^s$ とすると、上式に代入して

$$s(s+1)\rho^s \approx l(l+1)\rho^s$$

となる。こうして、 ρ が 0 に近いときには波動関数 $R(\rho)$ は ρ のべき関数で、そのべきは $s = l$ となる。もちろん、 $s = -l - 1$ も解ではあるが、このときには $R(\rho) \propto \rho^{-l-1}$ となり、 $\rho \rightarrow 0$ で波動関数が発散するので物理的には許されない。よって、 $\rho \rightarrow 0$ では

$$R(\rho) \propto \rho^l$$

となるべきである。一方、 $\rho \gg 1$ と十分大きいところでは、(23.6) 式で $1/\rho$ や $1/\rho^2$ の項は無視できるので、今度は

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} \approx \frac{1}{4} R(\rho)$$

として良からう。よって、このときには $\rho \rightarrow \infty$ で発散しない波動関数として

$$R(\rho) \propto e^{-\frac{\rho}{2}}$$

が漸近形として許される。以上の知識のもとで、波動関数 $R(\rho)$ を

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} w(\rho)$$

と置いて、 $w(\rho)$ についての方程式に直そう。これを (23.6) に代入すると

$$\rho \frac{d^2 w(\rho)}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{dw(\rho)}{d\rho} + (n-l-1)w(\rho) = 0 \quad (23.7)$$

が得られる。今、 $w(\rho)$ を級数の形で求める：

$$w(\rho) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s$$

係数 a_s が求められれば、関数 $w(\rho)$ 、ひいては $R(\rho)$ が求まることになる。級数展開した $w(\rho)$ を (23.7) に代入して ρ のべきを揃えるように整理すると

$$\sum_{s=0}^{\infty} [a_{s+1}(s+1)(s+2l+2) + a_s(n-l-1-s)] \rho^s = 0$$

となる。ゆえに

$$a_{s+1} = -\frac{n-l-1-s}{(s+1)(s+2l+2)} a_s \quad (23.8)$$

という漸化式が得られる。ここで、級数展開が有限項で終わらないとすると、上の漸化式から大きな s では $\frac{a_{s+1}}{a_s} \rightarrow \frac{1}{s+1}$ となることがわかるので、大きな s では $a_s \approx \frac{1}{s!}$ のように振る舞う。このとき、

$$w(\rho) \approx \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \rho^s = e^\rho$$

のように指数関数の振る舞いをする。このときには波動関数 $R(\rho)$ は $R(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} w(\rho) \approx \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} e^\rho = \rho^l e^{+\frac{\rho}{2}}$ となってしまう、 $\rho \rightarrow \infty$ で発散してしまい、物理的ではない。したがって、級数は有限項で終わらなければならない。こうして、(23.8) 式から、ある s_0 が存在して、 $s = s_0$ より大きい s に対しては $a_s = 0$ とならなければならない。角運動量の大きさ l は 0 以上の整数値であることから、どこかで $a_s = 0$ となるには、 n もまた整数値で、かつ

$$n = l+1, l+2, l+3, \dots$$

のどれかを満たさなければならない。すなわち、

$$n \geq l+1, \quad n \text{ は自然数}$$

こうして、水素型原子のエネルギー固有値 E が決定された。すなわち、(23.5) 式より、

$$E_n = -\frac{Z^2 m q^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2 m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (23.9)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad n \geq l+1 \quad (23.10)$$

と得られる。

こうして、 $Z = 1$ とすると、水素原子のエネルギー準位が決定される。物理量の数値を入れると

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2} = -13.6 \text{ [eV]} \times \frac{1}{n^2}$$

となる[†]。 $n = 1$ が水素原子の基底状態のエネルギーで、 -13.6 eV であることがわかる。また、エネルギーは角運動量の大きさ l やその z 射影に依存しないので、 n を与えると決まる。同じエネルギー状態には異なる l や l_z の状態が含まれている。一つのエネルギー状態に複数の量子状態が存在するとき、エネルギーは縮退していると呼ばれ、このときの状態数を縮退度と呼ぶ。今の場合、 n を与えると、許される l は

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

であり、角運動量の大きさ l には $2l + 1$ 個の状態があったので、縮退度は

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

と得られる。

原子では軌道角運動量の大きさ l に関して、特別な呼び方がされる。

$$l = 0 \cdots s$$

$$l = 1 \cdots p$$

$$l = 2 \cdots d$$

$$l = 3 \cdots f$$

$$l = 4 \cdots g$$

以下、 $l = 5$ 以降は h, i, j とアルファベット順に続く[‡]。

波動関数 $R_{nl}(\rho) = R_{nl}(r)$ は a_s を求めることにより決定される。ただし、波動関数を規格化しておく。最初の幾つかを記しておこう。ここで、 $a_B \equiv \frac{\hbar^2}{mq^2} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ [m]}$ はボーア半径である。

$$1s : R_{10}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_B} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}}$$

$$2s : R_{20}(r) = \left(\frac{1}{2a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) e^{-\frac{r}{2a_B}}$$

$$2p : R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a_B} \right) e^{-\frac{r}{2a_B}}$$

$$3s : R_{30}(r) = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{3a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(3 - \frac{2r}{a_B} + \frac{2r^2}{9a_B^2} \right) e^{-\frac{r}{3a_B}}$$

$$3p : R_{31}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{9} \left(\frac{1}{3a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{2r}{a_B} - \frac{r^2}{3a_B^2} \right) e^{-\frac{r}{3a_B}}$$

$$3d : R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}} \left(\frac{1}{3a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r^2}{a_B^2} \right) e^{-\frac{r}{3a_B}}$$

[†] m として換算質量 $m = \frac{m_N m_e}{m_N + m_e}$ を代入した。

[‡] 量子力学成立以前の原子分光學から、s は sharp、p は principle、d は diffuse、f は fundamental の頭文字をとって名付けられていた。

§ 23.2 ラゲール陪多項式と水素原子の波動関数

前節で級数の形で求めた水素原子の波動関数は、ラゲール陪多項式で表わすことができる。まず、ラゲール多項式から記述を始めよう。

ラゲール微分方程式は

$$z \frac{d^2 L_k(z)}{dz^2} + (1-z) \frac{dL_k(z)}{dz} + kL_k(z) = 0 \quad (23.11)$$

この方程式の解がラゲール多項式 $L_k(z)$ である：

$$L_k(z) = e^z \frac{d^k}{dz^k} (e^{-z} z^k)$$

ラゲール多項式の母関数は

$$\frac{1}{1-t} e^{-\frac{tz}{1-t}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k(z)}{k!} t^k$$

母関数を認めれば、両辺を t で微分して、次の漸化式が得られる。

$$L_k(z) + (z - 2k + 1)L_{k-1}(z) + (k-1)^2 L_{k-2}(z) = 0$$

また、母関数を z で微分すれば、次の微分式が得られる。

$$z \frac{dL_k(z)}{dz} = kL_k(z) - k^2 L_{k-1}(z)$$

次にラゲール陪多項式を与えよう。(23.11) 式を m 回微分すると

$$z \frac{d^2 L_k^m(z)}{dz^2} + (m+1-z) \frac{dL_k^m(z)}{dz} + (k-m)L_k^m(z) = 0, \quad (23.12)$$

$$\text{ただし } L_k^m(z) = \frac{d^m}{dz^m} L_k(z)$$

ここで、(23.12) がラゲール陪微分方程式であり、 $L_k^m(z)$ はラゲール陪多項式である。ラゲール陪多項式の規格直交性は

$$\int_0^{\infty} dz e^{-z} z^m L_k^m(z) L_{k'}^m(z) = \frac{(k!)^3}{(k-m)!} \delta_{kk'}$$

で与えられる。

ここで、ラゲール陪微分方程式 (23.12) と、水素原子の波動関数 $w(\rho)$ が満たす (23.7) 式を見比べると、ラゲール陪微分方程式で $z \rightarrow \rho$ 、 $m \rightarrow 2l+1$ 、 $k \rightarrow n+l$ としたものに対応していることが読み取れる。したがって、 $w(\rho)$ はラゲール陪多項式で表わされる。こうして、規格化された水素型原子の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ は

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)! Z^3}{((n+l)!)^3 a_B^3}} e^{-\frac{Zr}{na_B}} \left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/na_B) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

と書ける。ここで、 a_B はボーア半径である。

24章 多粒子系の扱い

§ 24.1 粒子が区別できる場合

粒子が N 個ある場合には系のエネルギーは各粒子の運動エネルギーの和とポテンシャル・エネルギーの和である。したがって、系のハミルトニアンは運動量をその粒子の座標微分演算子に変えて

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \cdots + \frac{\hat{p}_N^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$$

と書ける。ただし、 $\hat{p}_a \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a}$ であり、添え字 a は粒子を区別する。ここで、すべての粒子は区別できるとしている。ハミルトニアンが N 個の粒子の位置座標 $\{\mathbf{r}_a\}$ に依存しているため、波動関数もまた N 個の粒子の位置座標を含む。時間に依存するシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t) = \hat{H} \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t)$$

と表される。定常状態では N 粒子系のエネルギーを E として、

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$$

から、時間に依存しないシュレーディンガー方程式として

$$\hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$$

が得られる。

粒子間の相互作用が無視できる場合には、各粒子は自分自身の座標にのみ依存するポテンシャル・エネルギーを感じ、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \cdots + \frac{\hat{p}_N^2}{2m_N} + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) + \cdots + V_N(\mathbf{r}_N) \\ &= \sum_{a=1}^N \left[\frac{\hat{p}_a^2}{2m_a} + V_a(\mathbf{r}_a) \right] \\ &\equiv \sum_{a=1}^N \hat{H}_a \end{aligned}$$

と書ける。こうして、ハミルトニアンは各粒子の座標に依存したハミルトニアン $\hat{H}_a \equiv \frac{\hat{p}_a^2}{2m_a} + V_a(\mathbf{r}_a)$ の和で書けるので、波動関数は各粒子に対応した波動関数 $\psi_a(\mathbf{r}_a)$ の積に変数分離される。すなわち、

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N)$$

と置こう。この波動関数をシュレーディンガー方程式に代入すると

$$\begin{aligned} & \left(\hat{H}_1 \psi_1(\mathbf{r}_1) \right) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N) + \psi_1(\mathbf{r}_1) \left(\hat{H}_2 \psi_2(\mathbf{r}_2) \right) \psi_3(\mathbf{r}_3) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N) + \cdots \\ & + \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_{N-1}(\mathbf{r}_{N-1}) \left(\hat{H}_N \psi_N(\mathbf{r}_N) \right) = E \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{aligned}$$

を得るが、両辺を $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$ で割ると、ハミルトニアンが演算された部分以外は除かれて

$$\frac{1}{\psi_1(\mathbf{r}_1)} \left(\hat{H}_1 \psi_1(\mathbf{r}_1) \right) + \frac{1}{\psi_2(\mathbf{r}_2)} \left(\hat{H}_2 \psi_2(\mathbf{r}_2) \right) + \cdots + \frac{1}{\psi_N(\mathbf{r}_N)} \left(\hat{H}_N \psi_N(\mathbf{r}_N) \right) = E$$

となる。左辺の第 a 項は座標 \mathbf{r}_a のみの関数であり、その和が座標によらない右辺に常に等しくなければならないことを意味している。任意の位置座標について成り立つためには左辺の各項も定数でなければならない。すなわち、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1(\mathbf{r}_1)} \hat{H}_1 \psi_1(\mathbf{r}_1) &= \epsilon_1 \\ \frac{1}{\psi_2(\mathbf{r}_2)} \hat{H}_2 \psi_2(\mathbf{r}_2) &= \epsilon_2 \\ &\vdots \\ \frac{1}{\psi_N(\mathbf{r}_N)} \hat{H}_N \psi_N(\mathbf{r}_N) &= \epsilon_N \\ \epsilon_a &\text{ は定数、かつ} \\ E &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + \cdots + \epsilon_N \end{aligned}$$

こうして、

$$\begin{aligned} \hat{H}_a \psi_a(\mathbf{r}_a) &= \epsilon_a \psi_a(\mathbf{r}_a), \quad a = 1, 2, \dots, N \\ E &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + \cdots + \epsilon_N \end{aligned}$$

となる。こうして、粒子間の相互作用が無視できる場合には、各粒子に対する 1 粒子シュレーディンガー方程式 $\hat{H}_a \psi_a(\mathbf{r}_a) = \epsilon_a \psi_a(\mathbf{r}_a)$ を N 個解くことにより、系のエネルギー固有値は $E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \cdots + \epsilon_N$ で、波動関数は $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N)$ として求めることができる。

§ 24.2 同種粒子の扱い

前節では、すべての粒子が区別できる—質量や電荷が異なるので、異なる種類の粒子であると識別できる—場合を考察した。今度は、質量や電荷などすべての性質が同じである同種粒子が複数ある場合の扱いを考えよう。

例えば同種粒子の衝突を考えてみよう。初めに図 72 のように左下と右上に粒子がありその後 2 粒子は衝突して右下と左上にあるとしよう。このとき、衝突後の 2 粒子は衝突前にはどちらの粒子であったか区別できるであろうか。図 72 のように 2 つの可能性を考えてみる。衝突前に 1, 2 名づけた粒子の軌跡をたどることができれば、衝突後、どちらが 1 でどちらが 2 の粒子かを言うことができる。しかしながら、粒子の軌跡をたどるためには、各時刻ごとに粒子の位置を確定し、かつその粒子がどこへ進もうとしているかという運動量もあわせて確定しておかねばならない。この操作ができれば、引き続き時刻でも粒子の位置と運動量がわかり、時刻ごとの粒子の位置を繋げば軌跡がたどれるであろう。しかし、不確定性原理のため粒子の位置と運動量を同時

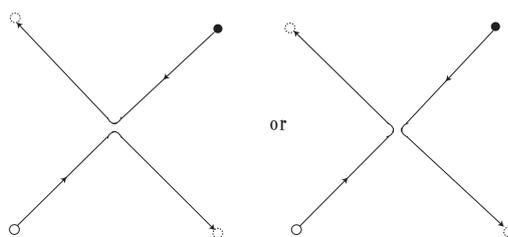


図 72:

に確定することはできない。ある時刻で粒子の位置を確定すると、そのときの運動量は全く不確定になり、次の瞬間に粒子はどこへ進んだかは不明である。こうして、量子力学では粒子の軌道は決まらない。すなわち、2粒子の衝突後、各粒子の軌道は決まらないので、衝突後の各粒子は衝突前にはどの粒子であるかを言うことはできない。このように、軌道概念が消失していることにより、同種の2粒子を区別することは原理的に不可能である。

同種粒子が区別できないという事実から導かれる粒子の統計性について考えよう。粒子1と粒子2の波動関数を $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ としよう。しかし、粒子1と粒子2は区別できないので、2つが入れ替わっていても状態としてはなら変わらない。すなわち、 $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ もまた同じシュレーディンガー方程式の解であるはずである。したがって、 $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ はもとの解 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ に比例している。波動関数の規格化を考慮すると、絶対値が1の定数倍の不定性は存在するので $|C| = 1$ として

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

となるであろう。ここで、さらに1と2を入れ替えよう。もう一度定数 C がかかり

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = C \cdot C\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

となる。こうして、

$$C^2 = 1, \quad \text{すなわち} \quad C = \pm 1$$

$$\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \pm\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

が得られる。 $C = 1$ のとき、波動関数は粒子の入れ替えに対して対称である。このような対称性に従う粒子をボーズ・アインシュタイン統計に従うと言い、ボーズ粒子またはボゾンと呼ばれる。また、 $C = -1$ のときは、波動関数は粒子の入れ替えに対して反対称であり、このような対称性に従う粒子をフェルミ・ディラック統計に従うと言い、フェルミ粒子またはフェルミオンと呼ばれる。構成論的場の量子論によると、粒子の統計性とスピン角運動量には対応があり、 \hbar を単位にしてボーズ粒子のスピンは整数、フェルミ粒子のスピンは半整数であることが知られている[§]。これはスピンと統計の関係である。

粒子間の相互作用が無視できる場合には多粒子系の波動関数はそれぞれの粒子に対応する波動関数の積で表された。同種粒子では粒子の交換に対する対称性を考慮しなければならない。ボーズ粒子系では粒子の入れ替えに対して波動関数は対称、すなわち波動関数の符号はかわらない。こうして、2粒子系では

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1))$$

と表される。ここで、 α_1, α_2 は量子状態を指定する量子数の組である。一般に、 N 粒子系でも粒子の入れ替えに対して波動関数は符号を変えないので、

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{すべての置換 } P} P[\psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N)]$$

と表される。ここで、 P はすべての粒子の入れ替え(置換)をとることを意味する。因子 $1/\sqrt{N!}$ は波動関数の規格化である。同様に、フェルミ粒子系では粒子の入れ替えに対して波動関数は反対称、すなわち任意の粒子の入れ替えに対し波動関数は符号を変える。こうして、2粒子系では

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)) \quad (24.1)$$

[§]単純な事実であるが、簡単に説明する方法は知られていない。

と表される。一般に、 N 粒子系でも粒子の入れ替えに対して波動関数は符号を変えるので、置換 P が偶置換では 1、奇置換では -1 を与える因子 $\epsilon(P)$ を用いて

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{すべての置換 } P} \epsilon(P) P[\psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_1) \\ \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) & \psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_N) & \psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_N) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}\end{aligned}$$

と表される。置換に符号因子を乗じたものが行列式になるので、2 行目のように、フェルミ粒子系の波動関数は行列式で表される。この行列式をスレーター行列式と呼ぶ。

さて、簡単のために 2 粒子系の波動関数 (24.1) で考える。今、2 つの粒子が同じ量子状態にあるとしよう。すなわち $\alpha_1 = \alpha_2$ とする。このとき、(24.1) は

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$$

となる。すなわち、同種のフェルミ粒子は同じ量子状態を占めることができない。これをパウリの排他律と呼ぶ。

最後に原子構造を考えよう。電子はスピン $\frac{1}{2}\hbar$ であり、フェルミ粒子である。したがって、同じ量子状態に 2 つの電子が占有することはできない。したがって、原子中の電子は、原子により決まるエネルギー準位を下から順に占有していくことが予想されが、実際にそのようになっている。水素原子のところでエネルギー準位を得た。多電子系ではエネルギー準位は水素原子とは異なるが、電子数が少ないときにはほぼ同様な準位構造を示す。まず、 $n = 1$ の準位を占めるが、このとき軌道角運動量 l は $l = 0$ のみであり、量子状態は 1 つである。しかしながら、電子はスピン量子数を持つので、スピンの“上向き”、“下向き”の 2 つの状態が存在する。したがって、最低のエネルギー準位に 2 つ電子が占有されれば、 $n = 1$ のエネルギー準位にはもはや電子は入れない。こうして、不活性な He 原子が構成される。次には $n = 2$ の準位を電子が占めるが、軌道角運動量は $l = 0$ と $l = 1$ が許されるので、縮退度は $4 = (2 \times 0 + 1) + 2 \times 1 + 1 = n^2$ であり、スピンに 2 つの状態があることからこの 2 倍の縮退度が存在する。したがって、さらに 8 個の電子が $n = 2$ のエネルギー準位を占有すれば $n = 1$ および $n = 2$ のエネルギー準位に電子が満たされる。これが Ne 原子であり、He 原子とともに不活性ガスとして知られている。このように、電子のとり得る状態が繰り返し現れる。この事実が原子の周期律を生み出す (表 1)。

主量子数	軌道角運動量	$(\ell = 0, 1, \dots, n-1)$	スピン状態	電子数	原子
$n = 1$	$\ell = 0$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 1 \\ 1 \times 2 = 2 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	1	H
			(↑↓)	2	He
$n = 2$	$\ell = 0$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 1 \\ 1 \times 2 = 2 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	3	Li
			(↑↓)	4	Be
	$\ell = 1$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 3 \\ 3 \times 2 = 6 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	5	B
			(↑↓)	6	C
			(↑↓) ↑ or ↓	7	N
			(↑↓)(↑↓)	8	O
(↑↓)(↑↓) ↑ or ↓	9	F			
(↑↓)(↑↓)(↑↓)	10	Ne			
$n = 3$	$\ell = 0$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 1 \\ 1 \times 2 = 2 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	11	Na
			(↑↓)	12	Mg
	$\ell = 1$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 3 \\ 3 \times 2 = 6 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	13	Al
			(↑↓)	14	Si
			(↑↓) ↑ or ↓	15	P
			(↑↓)(↑↓)	16	S
(↑↓)(↑↓) ↑ or ↓	17	Cl			
(↑↓)(↑↓)(↑↓)	18	Ar			
$n = 4$	$\ell = 0$	$\begin{pmatrix} 2\ell + 1 = 1 \\ 1 \times 2 = 2 \end{pmatrix}$	(↑)or(↓)	19	K
			(↑↓)	20	Ca
			⋮	⋮	

表1

25章 近似法

シュレーディンガー方程式を厳密に解いて、エネルギー固有値と波動関数を求めることができれば良いが、解析的に解ける場合は限られており、一般には数値計算に頼ることが必要となる。しかしながら、系統的な近似法があれば背景に存在する物理現象を見ながら正確なものに近い解が得られる。本章ではその様な近似法の幾つかを示す。

§ 25.1 変分法

もっともらしい波動関数の関数形を仮定して、関数にパラメータを含ませておき、エネルギー期待値が最小になるようにパラメータを決定して近似的な波動関数を求める一連の近似法を変分法と呼ぶ。エネルギー期待値を最小にするのは系の基底状態を求めるためであり、基底状態の波動関数が近似的に求まれば、この波動関数と直交する条件を新たに加えて、もう一度エネルギー期待値が最小になるように波動関数を求めれば、第1励起状態の波動関数が求まる。次々に得られる波動関数と全て直交するという条件の下でエネルギー期待値を最小にする近似的な波動関数を求めていくという一連の手続きとなる。ここでは、もっともらしい波動関数型を採用するところが鍵である。

§§25.1.1 変分法とヘリウム原子

He 原子の基底状態を近似的に求めよう。ヘリウム原子は中心に電荷が $+2e$ の原子核があり、その周りに電荷が $-e$ の電子が2個存在している。ヘリウムの原子核は重くて動かないとし、原点をヘリウム原子核の中心に置く。原子核からそれぞれの電子までの距離を r_1 、 r_2 、2つの電子間の距離を r_{12} 、また $q^2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ と書くと、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2) - \frac{2q^2}{r_1} - \frac{2q^2}{r_2} + \frac{q^2}{r_{12}}$$

$$\hat{\mathbf{p}}_1 \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}, \quad \hat{\mathbf{p}}_2 \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2},$$

$$r_1 \equiv |\mathbf{r}_1|, \quad r_2 \equiv |\mathbf{r}_2|, \quad r_{12} \equiv |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

となる (図 73)。ハミルトニアンの最後の項は電子間の斥力を表わしている。もしこの項が無視されれば、統計性を無視する範囲で、波動関数は互いに独立な2つの電子の波動関数 $\psi_1(\mathbf{r}_1)$ 、 $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ の積として、 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$ と変数分離された形に書け、正確に解くことができる。しかしながら、電子間斥力項のために変数分離は許されない。そこで、He 原子の基底状態の波動関数を変分法を用いて近似的に求めてみよう。電子間

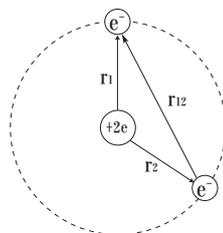


図 73:

斥力を無視すれば、He 原子の波動関数は水素原子の波動関数 $\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 2 \left(\frac{1}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}}$ の積で書けるはずである (§21.1)。ここで、 a_B はボーア半径である。そこで、おそらく He 原子の波動関数も電子間斥力を無視した場合の波動関数に近いと考えて、水素原子の波動関数の積に近い形を仮定しよう。パラメータ α を導入し、

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi a_B^3} e^{-\frac{\alpha}{a_B} r_1} \cdot e^{-\frac{\alpha}{a_B} r_2} \quad (25.1)$$

とおいてみよう。指数関数の前の係数は波動関数の規格化 $\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = 1$ をあらかじめ考慮している。決定すべきはパラメータ α である。 $\alpha = 1$ では 2 つの水素原子の波動関数の積に帰着する。基底状態でこのパラメータを決めるのに、エネルギー期待値が最小になるという条件を課そう。

$$E(\alpha) \equiv \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0, \quad E(\alpha) \text{ が最小} \quad (25.2)$$

ここで、(25.2) 式の上式の右辺の可能な積分を実行してしまうと

$$E(\alpha) = 2 \times \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\alpha}{a_B}\right)^2 - 2q^2 \left(\frac{\alpha}{a_B}\right) \right] + \left(\frac{\alpha^3}{\pi a_B^3}\right)^2 \int \int e^{-\frac{2\alpha}{a_B}(r_1+r_2)} \cdot \frac{q^2}{r_{12}} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

となる。右辺第 1 項の大括弧全体にかかる因子 2 は電子が 2 つあることに依るものである。大括弧の中身の第 1 項目は一つの電子の運動エネルギーの期待値、2 項目は 1 つの電子が原子核から受けるクーロンエネルギーである。第 2 項は電子間斥力の積分であるが、このままでは実行できないのでさらに近似してしまおう。§20.2.3 でみたルジャンドル多項式の母関数展開 $K(x, t)$ を思い起こしておこう。今、 $r_1 < r_2$ のとき、2 つのベクトルのなす角を θ として

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta + r_2^2}} = \frac{1}{r_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{r_2}{r_1} \cos \theta + \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2}}$$

となるが、最右辺はルジャンドル多項式の母関数 $K(x = \cos \theta, t = r_2/r_1)$ に一致しているので、ルジャンドル多項式 $P_l(x = \cos \theta)$ で展開される。すなわち、

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l \quad (25.3)$$

となる。また、 $r_1 < r_2$ のときには r_1 と r_2 を入れ替えればよい。因子 $\frac{1}{r_{12}}$ は電子間のクーロン斥力の積分に表れていたもので、これをルジャンドル展開で近似する。電子間の軌道角運動量は $l = 0$ とすると、今得られた展開式で $l = 0$ の項のみ残し、

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \approx \begin{cases} \frac{1}{r_1} & (r_1 > r_2) \\ \frac{1}{r_2} & (r_1 < r_2) \end{cases}$$

こうすると、残された電子間斥力項は積分されて、

$$\begin{aligned} \int \int e^{-\frac{2\alpha}{a_B}(r_1+r_2)} \frac{1}{r_{12}} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 &= (4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2\alpha}{a_B} r_1} \left[\int_0^{r_1} e^{-\frac{2\alpha}{a_B} r_2} \frac{r_2^2}{r_1} dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-\frac{2\alpha}{a_B} r_2} r_2 dr_2 \right] \\ &= (4\pi)^2 \cdot \frac{a_B^5}{32\alpha^5} \cdot \frac{5}{4} \end{aligned}$$

と、近似的に計算される。こうして、パラメータ α に依存したエネルギー期待値 $E(\alpha)$ は

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= 2(R_H\alpha^2 - 4R_H\alpha) + 2R_H\alpha \cdot \frac{5}{8} \\ &= 2R_H \left[\alpha^2 - 2 \left(2 - \frac{5}{16} \right) \alpha \right] \\ \text{ここで} \quad R_H &\equiv \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \frac{q^2}{2a_B} = \frac{mq^4}{2\hbar^2} = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \end{aligned}$$

となる。ここで、 R_H は水素原子のリュドベリ定数と呼ばれる。さて、エネルギー期待値が最小であるためには、 $\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0$ を満たさねばならない。この微分を実行すると

$$\alpha = 2 - \frac{5}{16}$$

となることは容易に得られる。よって、He 原子の基底状態のエネルギーは、変分法の近似の範囲で

$$\begin{aligned} E_{\text{He}} &= E\left(\alpha = 2 - \frac{5}{16}\right) \\ &= -2 \left(2 - \frac{5}{16} \right)^2 R_H \end{aligned}$$

と得られる。ここで、水素原子のエネルギー準位はリュドベリ定数を用いて、 $E_n = -\frac{R_H}{n^2}$ と表されることに注意しよう ((23.9))。He 原子の原子核の電荷は $2e$ であるので、水素型原子基底状態 ($n = 1$) のエネルギーは (23.9) ですでに求められている通り、 $Z = 2$ であることを考慮して、 $E = -\frac{2^2mq^4}{2\hbar^2} = 2^2R_H$ となる。今、近似的に得られた He 原子の基底状態のエネルギーは、括弧の中が 2 であれば電子間相互作用を無視した水素型原子のエネルギーを 2 倍したものに一致する。括弧の外の因子 2 が、電子が 2 個あることによるものである。しかしながら、括弧の中は $\left(2 - \frac{5}{16} \right)$ と 2 より小さくなっている。これは、電子が 2 個存在することにより、互いに相手の電子が原子核から感じる電荷を 2 から $\left(2 - \frac{5}{16} \right)$ に減じていることを意味する。すなわち、正電荷の原子核の周りに負電荷の電子が存在することにより、互いに電子は原子核の電荷を弱められて感じていること意味する。すなわち、遮蔽効果が見られると理解してよからう。

このように、近似的な扱いではあるが、計算機シミュレーションによる数値のみを見るだけでなく、物理的な過程を理解する助けとなる。

では、実験値と比較しておこう。He⁺ イオンは水素型原子であり、シュレーディンガー方程式は正確に解けている。He⁺ イオンのエネルギー準位を理論値と実験値であわせておくと、He 原子の基底状態のエネルギーと He⁺ イオンの基底エネルギーとの差で理論による He 原子の基底状態エネルギーと実験値によるそれとを比較すると

$$\text{エネルギー差 } \Delta E = \begin{cases} 24.58 \text{ eV} & \text{実験値} \\ 23.06 \text{ eV} & \text{本節の近似計算} \end{cases}$$

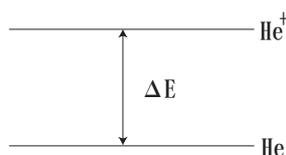


図 74:

となり、変分法による計算は良い結果を与えていると結論されよう。

§§25.1.2 変分法と分子軌道論

一般に複数の原子からなる分子のシュレーディンガー方程式を解くことは数値的にも大きな作業を伴う。ここでは、共有結合として知られている分子結合についてごく簡単に触れておくことにする。

まず、水素分子イオン H_2^+ を考えよう (図 75)。水素分子イオンは 2つの水素原子核 (陽子) の周りにひとつの電子が共有されている状態と考えられる。このシュレーディンガー方程式は、電子の運動エネルギーと原子核 A と電子、原子核 B と電子それぞれのクーロンエネルギーに原子核間のクーロンエネルギーを加えた水素分子イオンのハミルトニアン \hat{H} から出発することになる。ここでは、水素分子イオンの電子に対する波動関数を仮定して、変分法を適用して、物理的にどのような状況が生じているか理解しよう。水素分子イオン H_2^+ の波動関数 ψ は、原子核 A と電子からなる水素原子の波動関数 χ_A と、原子核 B と電子からなる水素原子の波動関数 χ_B の重ね合わせに近いであろう。そこで、係数を C_A 、 C_B とし、水素分子イオンの波動関数を

$$\psi = C_A \chi_A + C_B \chi_B$$

としてみよう。係数 C_A 、 C_B は、この波動関数を用いて計算される水素分子イオンのエネルギー期待値が最小になるように、変分法により決定することにする。波動関数 ψ は規格化されていないので、規格化のため $\psi / \sqrt{\int |\psi|^2 d^3\mathbf{r}}$ を規格化された波動関数と考えればよいので、エネルギー期待値 E は

$$\begin{aligned} E &= \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d^3\mathbf{r}}{\int \psi^* \psi d^3\mathbf{r}} \\ &= \frac{\int d^3\mathbf{r} (C_A^* \chi_A^* + C_B^* \chi_B^*) \hat{H} (C_A \chi_A + C_B \chi_B)}{\int d^3\mathbf{r} (C_A^* \chi_A^* + C_B^* \chi_B^*) (C_A \chi_A + C_B \chi_B)} \\ &= \frac{C_A^* C_A \alpha + C_A^* C_B \beta + C_B^* C_A \beta + C_B^* C_B \alpha}{C_A^* C_A + C_A^* C_B S + C_B^* C_A S^* + C_B^* C_B} , \\ \alpha &\equiv \int \chi_A^* \hat{H} \chi_A d^3\mathbf{r} = \int \chi_B^* \hat{H} \chi_B d^3\mathbf{r} \\ \beta &\equiv \int \chi_A^* \hat{H} \chi_B d^3\mathbf{r} = \int \chi_B^* \hat{H} \chi_A d^3\mathbf{r} \\ S &\equiv \int \chi_A^* \chi_B d^3\mathbf{r} = \int \chi_B^* \chi_A d^3\mathbf{r} \end{aligned}$$

のように書ける。ここで、波動関数 χ_A 、 χ_B は規格化されているとし、残る積分を α 、 β 、 S とおいた。その際、 χ_A 、 χ_B は水素原子の波動関数なので、積分が同じ値を与えることを用いている。エネルギー期待値が最

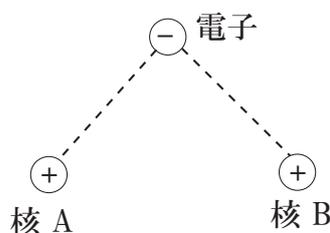


図 75:

小になるように C_A 、 C_B を決定しよう。すなわち、 $\frac{dE}{dC_A^*} = \frac{dE}{dC_B^*} = 0$ という条件を課す。変分を実行して

$$\frac{dE}{dC_A^*} = \frac{1}{C_A^*C_A + C_A^*C_BS + C_B^*C_AS^* + C_B^*C_B} (C_A\alpha + C_B\beta - E(C_A + C_BS)) = 0$$

$$\frac{dE}{dC_B^*} = \frac{1}{C_A^*C_A + C_A^*C_BS + C_B^*C_AS^* + C_B^*C_B} (C_A\beta + C_B\alpha - E(C_AS + C_B)) = 0$$

が得られる。 C_A 、 C_B を得るために必要な部分をまとめると

$$\begin{pmatrix} \alpha - E & \beta - ES \\ \beta - ES & \alpha - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} = 0$$

となる。こうして、この連立1次方程式が $C_A = C_B = 0$ となる不必要な解以外の解を持つためには、次の行列式が零でなければならない。

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta - ES \\ \beta - ES & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

よって、エネルギー期待値は

$$E = \frac{\alpha \pm \beta}{1 \pm S}$$

となり、 E をもとの連立1次方程式に代入すると、複号に注意して C_A 、 C_B は

$$C_A = C_B, \quad (\text{複号上 (+)})$$

$$C_A = -C_B, \quad (\text{複号下 (-)})$$

となる。波動関数 ψ を規格化して、 $\int \psi^* \psi d^3r = 1$ とすると、

$$C_A = C_B, \quad \rightarrow C_A = C_B = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}$$

$$C_A = -C_B, \quad \rightarrow C_A = -C_B = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}$$

が得られる。こうして、波動関数は

$$C_A = C_B \text{ のとき: } \psi_b = \frac{\chi_A + \chi_B}{\sqrt{2(1+S)}}$$

$$C_A = -C_B \text{ のとき: } \psi_a = \frac{\chi_A - \chi_B}{\sqrt{2(1-S)}}$$

と得られる。波動関数の様相を図 76 に示した。波動関数の絶対値の2乗は粒子を見いだす確率であったので、波動関数が ψ_b のときには原子核 A と B の間に電子を見いだす確率が比較的存在する。電子の電荷は負であり、2つの原子核の正電荷の間であって、2つの原子核を引きつけておく役割を果たす。こうして、この場合には結合性軌道と呼ばれる。これに反して、波動関数が ψ_a で表わされるときには、2つの原子核の間で波動関数 ψ_a は節を持ち、2つの正電荷を持つ原子核の丁度真ん中に負電荷を持つ電子が来ることは無い。いずれにせよ、2つの原子核の間に電子を見いだす確率は、 ψ_b の場合に比べて小さい。こうして、正電荷をもつ2つの原子核を負電荷の電子が取り持って結合させることができない。これは反結合性軌道と呼ばれる。このように、2つの波動関数を + で重ね合わせると、結合性軌道が得られることがわかる。

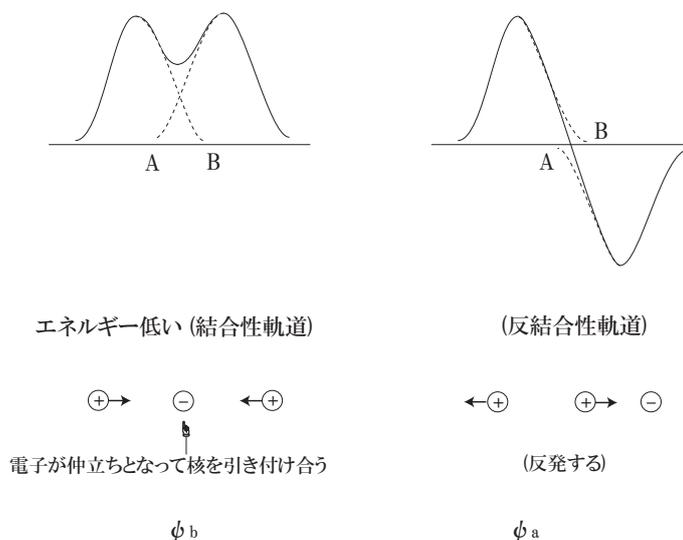


図 76:

今度は、原子 A の $2p_x$ 、 $2p_y$ 軌道面から、別の原子 B の $1s$ 軌道が x 軸の正方向から近づいてくる状況を考えてみよう (図 77)。このとき、 $2p_x$ 軌道の x 軸正の側の波動関数の符号を正にすると、原子 B の $1s$ 軌道の正符号の波動関数と結合性軌道を構成することができる。今度は、 x 軸正方向から 45° 方向から原子 B が近づいてくるとしよう。このときには、原子 A の $2p_x$ 、 $2p_y$ の波動関数を適当に重ね合わせて、 45° 方向に正符号の波動関数が生じるように、 45° 回転させると、結合性軌道を構成することが可能となる。この例では分子軌道の配向が変わった。

次には、一つの原子内で、 $1s$ 軌道と $2p_z$ 軌道を重ね合わせてみよう。 $1s$ 軌道の波動関数は常に正符号であるが、 $2p_z$ 軌道の波動関数は正負取り得る。このとき、正符号同士の領域は波動関数の正の重ね合わせで大きな値を与え、一層電子の確率密度を大きくすることができる。このようにして、電子の存在確率を大きくした

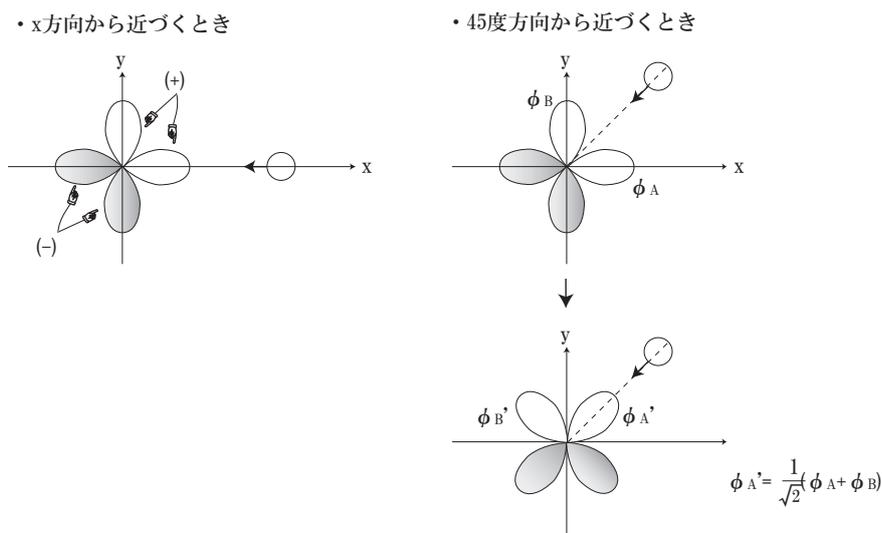


図 77:

BH₃, NH₃⁺, BF₃, …

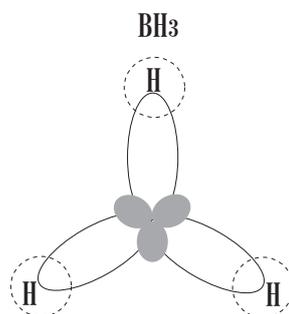


図 78:

重ね合わせ状態の波動関数を持つ原子 A と原子 B は、それぞれの原子にある電子を共有して結合することが可能となる。このように指向性を強化するように s 軌道と p 軌道を混成することが可能である。これを **sp 混成軌道** と呼ぶ。たとえば、CH 分子や C₂ 分子などでは sp 混成軌道が利用されている。

さらに、 s 軌道と p 軌道を 2 つ、例えば p_x と p_y 軌道を混成すると、互いに同等で同一平面内で 120° ずつ異なる方向性を持つ混成軌道 φ_a 、 φ_b 、 φ_c を作ることができる。混成する前の s 軌道や p_x 軌道の波動関数を ψ_s や ψ_{p_x} 等と記すことにすると、

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{p_x}, \quad \varphi_b = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{p_x} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{p_y}, \quad \varphi_c = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{p_x} - \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{p_y}$$

のように混成される。これを **sp² 混成軌道** と呼ぶ (図 78)。

さらに、 s 軌道とすべての p 軌道を混成すると、互いに同等で相互に正四面体角 109°28' ずつ異なる方向性を持つ混成軌道 φ_a 、 φ_b 、 φ_c 、 φ_d を作ることができる：

$$\begin{aligned} \varphi_a &= \frac{1}{2}(\psi_s + \psi_{p_x} + \psi_{p_y} + \psi_{p_z}), & \varphi_b &= \frac{1}{2}(\psi_s + \psi_{p_x} - \psi_{p_y} - \psi_{p_z}), \\ \varphi_c &= \frac{1}{2}(\psi_s - \psi_{p_x} - \psi_{p_y} + \psi_{p_z}), & \varphi_d &= \frac{1}{2}(\psi_s - \psi_{p_x} + \psi_{p_y} - \psi_{p_z}) \end{aligned}$$

これを **sp³ 混成軌道** と呼ぶ。

§ 25.2 WKB 近似

5 章 §5.5.2 では量子力学と古典力学との対応として、半古典近似である WKB 近似について述べた。ここでは、さらに WKB 近似について見ておこう。

§§25.2.1 WKB 近似での波動関数

波動関数を (5.15) 式の様において、量子力学と古典力学との対応をみた。WKB 近似の波動関数 (5.15) は

$$\psi(\mathbf{r}, t) = ae^{\frac{i}{\hbar}S} = e^{\frac{i}{\hbar}(iS + \hbar \ln a)} \quad (25.4)$$

であった。ここで、 S は古典力学の作用である。この波動関数をシュレーディンガー方程式に代入し整理すると、(5.17)、(5.18) 式が得られた。再掲しておこう。

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V &= 0 \\ \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\nabla^2 S + \frac{1}{m}\nabla S \cdot \nabla a &= 0\end{aligned}\quad (25.5)$$

第 1 式は古典力学のハミルトン・ヤコビ方程式であった。また、第 2 式は、両辺に $2a$ をかけると

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad (25.6)$$

とまとめ、作用 S の座標微分は運動量であることから、確率の保存を表わす連続方程式であった。

さて、作用関数 S は §4.5.3 で議論を展開したように、定常状態では簡約化された作用 S_0 を用いて

$$S = \int dt(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - H) = S_0(x) - Et$$

と表わされる。ここで、(25.5) 式から、

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + V &= E, \quad \text{すなわち} \quad \nabla S_0 = \pm \sqrt{2m(E - V)} = \pm \mathbf{p} \\ \text{よって} \quad S_0 &= \pm \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}\end{aligned}$$

と得られる。また、定常状態では WKB 近似の波動関数の振幅 a も時間に依存しないので、(25.6) 式から $\nabla \cdot \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0$ 、かつ $\nabla S = \mathbf{p}$ である。1次元運動の簡単な場合には、運動量は方向を持たず大きさ p であるので、 C をある定数として、

$$a = \frac{C}{\sqrt{p}}$$

であれば良い。こうして、 S_0 の正負の波動関数を重ね合わせて、WKB 近似の波動関数は、1次元の場合には (25.4) から

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{i\hbar^{-1} \int p dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-i\hbar^{-1} \int p dx} \quad (25.7)$$

と得られる。ここで、 C_1 、 C_2 はある定数である。

WKB 近似の波動関数の適応条件を検討しておこう。§5.5.2 で、WKB 近似の波動関数をシュレーディンガー方程式に代入し、 \hbar のべきを比較することで (25.5) 式を得た。この際に \hbar のべき展開が可能であるためには、 \hbar を含む項が \hbar を含まない項に比べて小さくなければならない。例えば、§5.5.2 で波動関数が代入された後のシュレーディンガー方程式 (5.16) を見ると

$$\frac{a}{2m}(\nabla S)^2 \gg \frac{i\hbar a}{2m}\nabla^2 S$$

が満たされなければならないことがわかる。空間 1次元では、大きさの比較で、上の式は

$$\frac{a}{2m}p^2 \gg \frac{\hbar a}{2m} \left| \frac{dp}{dx} \right|, \quad \text{すなわち} \quad \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$$

が満たされていないことがわかる。この条件は明らかに $p \approx 0$ のところでは満たされないので、 $p \approx 0$ の粒子の転回点では注意が必要である。

§§25.2.2 ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件

WKB 近似の範囲内で、1次元の束縛状態を考えよう。ポテンシャル・エネルギー $V(x)$ が下図 79 のような場合、粒子のエネルギーが E であったとする。領域 I、II、III での WKB 近似での波動関数は、無限遠方で波動関数が零でなければならないことから

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}} &= C_{\text{I}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} & (x < a) \\ \psi_{\text{II}} &= C'_{\text{II},1} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} + C'_{\text{II},2} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} = C_{\text{II}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx\right), & (a \leq x \leq b) \\ \psi_{\text{III}} &= C_{\text{III}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx} & (x > b)\end{aligned}$$

と書ける。ここで、領域 I と III では古典的な運動量 $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ が純虚数になっていることを考慮している。また、領域 II では係数を組み替えて指数関数を三角関数で表わしている。領域 I と III では、無限遠方では波動関数は急速に減衰するとして、

$$\psi_{\text{I}}(a) = \psi_{\text{III}}(b) = 0, \quad \text{すなわち} \quad C_{\text{I}} = C_{\text{III}} = 0$$

とすると、波動関数の接続から $\psi_{\text{II}}(a) = 0$ であるが、三角関数の中の積分領域からこれはすでに満たされている。同様に波動関数の接続から $\psi_{\text{II}}(b) = 0$ となるべきであり、この条件は

$$\psi_{\text{II}}(b) = C_{\text{II}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx\right) = 0, \quad \text{すなわち} \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx = \pi n, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

と書かれる。領域 a から b への積分を 2 倍するために b から a への積分を付け足すと、 b から a への積分では運動量は反対向きの $-p$ であるので、 $a \rightarrow b \rightarrow a$ への積分は、結局

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (25.8)$$

となる。古典的には (位) 相空間の閉じた軌道であれば何ら条件は付かないが、量子論的に許されるのは (25.8) から束縛状態で閉じた軌道に関して (位) 相空間の面積が $2\pi\hbar$ の自然数倍になるような (位) 相空間内の軌道 $(x, p(x))$ に制限されていることがわかる。(25.8) の条件をボーア・ゾンマーフェルト量子化条件と呼ぶ。

しかしながら、(25.8) の条件では、 $n = 0$ の場合には (位) 相空間の面積が零ということになり、粒子は $x = 0, p = 0$ に静止していることになる。これは明らかに不確定性原理 (20.2) に反しているので、量子化条件

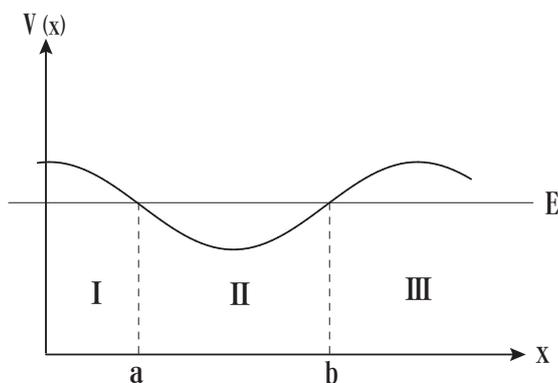


図 79:

としては不満足である。このようなことが起きたのは、粒子の転回点である $p = 0$ のところでも WKB 近似の波動関数を用いて、波動関数の接続条件から量子化条件を導いたことにある。 $p = 0$ の点は、明らかに WKB 近似の範囲を超えている。そこで、17 章で述べられたように、波動関数は $|\psi\rangle$ という状態が本質的であり、座標表示の波動関数 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ をとるか運動量表示の波動関数 $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$ を取るかは本質的では無かったことを思いだそう。こうして、座標空間での波動関数 $\psi(x)$ を、運動量 $p \approx 0$ での転回点付近では運動量空間での波動関数表示 $\psi(p)$ に切り替えておこう。そうすると、運動量空間では座標の転回点では無いので、運動量表示の波動関数で WKB 近似を適用すればよい。下の図 80 の様な (位) 相空間内の軌道 BDAC を考える。 $p \approx 0$ の転回点は A と B である。まず、X から B 近傍へは座標表示の波動関数

$$\psi(x) = A(x)e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

を用いる。しかし、点 B は危険な転回点であるので、B 近傍では運動量表示の波動関数へ切り替える。座標表示と運動量表示はフーリエ変換で結びついているので、運動量表示の量には上に棒を付けて

$$\bar{\psi}(p) = \bar{A}(p)e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}(p)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx A(x)e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

と表わされる。ここで、最右辺の被積分関数に注目しよう。指数関数は $e^{\frac{i}{\hbar}(S(x)-px)}$ となるが、 $S(x) - px$ が x の変化とともに大きく変動すると指数関数は正負に振動し、結果として x についての積分は小さな値しか残さない。積分に寄与するのは指数関数の肩の $S(x) - px$ が最小になる場合である。すなわち、

$$\frac{\partial}{\partial x}(S(x) - px) = \frac{\partial S}{\partial x} - p = 0$$

のところである。作用の座標微分が運動量であるというこの関係は、古典力学で満たされる関係式にほかならない。よって、この関係を満たす x は古典軌道に対応するので、 x_{cl} と書くことにし、 x を x_{cl} の周りで 2 次まで展開して、積分を評価しよう。すなわち、 $S(x) = S(x_{cl}) + \frac{\partial S}{\partial x}x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}x^2$ として、 $\frac{\partial S}{\partial x} = p$ に注意して

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} A(x_{cl}) e^{\frac{i}{\hbar}(S(x_{cl}) - px_{cl})} \int dx e^{\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} x^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} A(x_{cl}) e^{\frac{i}{\hbar}(S(x_{cl}) - px_{cl})} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{i}{2\hbar} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right]}} \\ &= A(x_{cl}) \left| \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(S(x_{cl}) - px_{cl})} e^{-i\frac{\pi}{4} \text{sgn} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right]} \end{aligned}$$

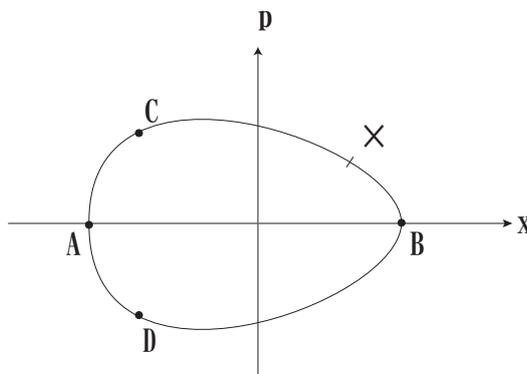


図 80:

となる。ここで、 $\sqrt{-i} = (1-i)/\sqrt{2} = e^{-\pi/4} i$ であることを用いた。また $\text{sgn}X$ は X の符号を意味する。こうして、転回点付近で、運動量表示の波動関数は

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(p) &= \bar{A}(p)e^{i\bar{S}(p)} \cdot e^{i\sigma_p}, \\ \bar{A}(p) &= A(x_{cl}) \left| \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|^{-\frac{1}{2}}, \\ \bar{S}(p) &= S(x_{cl}) - px_{cl}, \\ \sigma_p &= \sigma_x - \frac{\pi}{4} \text{sgn} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right], \quad \sigma_x = 0\end{aligned}$$

となる。転回点 B の前には (位) 相空間の軌道の図 80 から $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = \frac{\partial p(x)}{\partial x}$ は負であるが、転回点を通過した後は正に転じる。こうして、作用 S にあらたに加わった位相 σ_p は転回点の前後で $\frac{\pi}{4} - (-\frac{\pi}{4}) = \frac{\pi}{2}$ だけ余分な変化を蒙る。転回点 A でも同じく負から正に転じるので $\frac{\pi}{2}$ の変化を蒙る。こうして、(位) 相空間を一巡りしたとき、波動関数の 1 価性から位相は 2π の自然数倍であること、及び座標表示での波動関数の位相 $S(x)$ に転回点での位相の変化を取り込むために $-\sigma_p$ を 2 回加えるべきであることから、ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件 $S = \oint p dx = 2\pi\hbar n$ は、 $p \approx 0$ での転回点近傍での位相の変化により変更されて、

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar} S &\rightarrow \frac{i}{\hbar} \oint p dx - i\frac{\pi}{2} \times 2 = i2\pi n, \\ \text{すなわち} \quad \oint p dx &= 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (n = 0, 1, 2 \dots)\end{aligned}\tag{25.9}$$

と変更される。こうして右辺の括弧内に表れた n の補正值 $1/2$ が近似的に零点振動を表わすことになる。

§§25.2.3 ポテンシャル透過の WKB 近似

次に WKB 近似で 1 次元の散乱状態を扱おう。図 81 のように上に凸なポテンシャルエネルギーの領域に向かって左から粒子が入射し、領域 I から領域 III に進むトンネル効果を扱ってみよう。ただし、WKB 近似を用いることが可能なポテンシャルエネルギーの形状であるとする。すなわち、

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$$

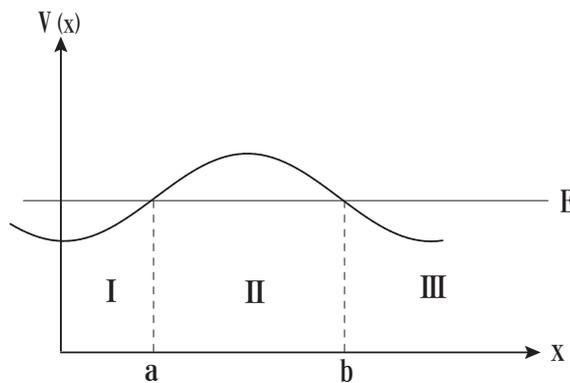


図 81:

が満たされているとする。すなわち、 $p(x)$ は x とともに緩やかにしか変化しないとする。

領域 I での WKB 近似の波動関数 ψ_I は

$$\psi_I = \frac{C_I}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx}$$

と書ける。このとき、確率の流れの密度 j_I は定義から

$$j_I = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_I \frac{\partial}{\partial x} \psi_I^* - \psi_I^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_I \right) \approx \frac{p}{m} \frac{|C_I|^2}{p} = \frac{|C_I|^2}{m}$$

となる。ここで、 $p(x)$ は x とともに殆ど変化しないという WKB 近似の条件から、 $\frac{dp}{dx} \approx 0$ とした。領域 II での波動関数は右に向かって減衰し

$$\psi_{II} = \frac{C_{II}}{\sqrt{p}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx}$$

と書ける。但し、運動量が純虚数になるので、 $|p| = \sqrt{2m(V-E)}$ とした。領域 III では

$$\psi_{III} = \frac{C_{III}}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx}$$

となる。点 a と b での波動関数の接続から、

$$C_I = C_{II}, \quad C_{III} = C_{II} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx}$$

が得られる。領域 III での確率の流れの密度 j_{III} は、 j_I と同様にして

$$j_{III} \approx \frac{|C_{III}|^2}{m}$$

となるので、透過係数 D † は確率の流れの密度の大きさの比として、

$$D = \frac{j_{III}}{j_I} = \frac{|C_{III}|^2}{|C_I|^2} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx}$$

と得られる。

一つの例として、重い原子核の α 崩壊を考えてみよう。重い原子核が崩壊し、 α 粒子が出てくる現象を、WKB 近似を用いてトンネル効果として理解しよう。ポテンシャル・エネルギー V を

$$V = \begin{cases} -V_0 & (r < R_0) \\ \frac{q_1 q_2}{r} & (r > R_0) \end{cases}$$

としよう (図 82)。ここで、 R_0 は原子核の半径であり、原子核内では飛び出す α 粒子は井戸型引力ポテンシャルの中で束縛されており、原子核の外では原子核の電荷 $(Z-2)e$ と、He 原子核である α 粒子の電荷 $2e$ とでクーロン斥力を感じている。また、 $q_1 \equiv \frac{2e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$ 、 $q_2 \equiv \frac{(Z-2)e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$ と置いた。WKB 近似では透過係数は先ほど計算されており、今の場合、

$$D = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{R_0}^R \sqrt{2m(V(r)-E)} dr \right)$$

†(27.48) を思いだそう。

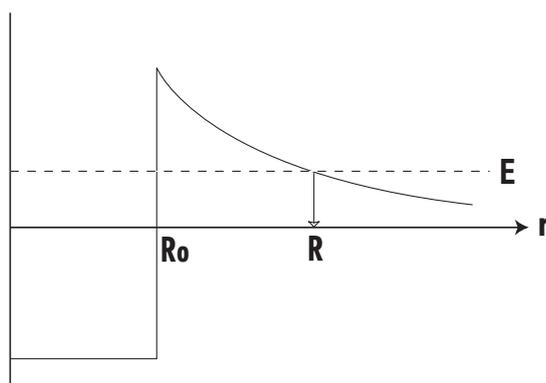


図 82:

である。ここで、積分は r について R_0 から $\frac{q_1 q_2}{R} = E$ を満たす R まで行なう。積分は初等的に実行できて、結果を示すと

$$\int_{R_0}^R \sqrt{2m(V(r) - E)} dr = \sqrt{2mER} \left(\arccos \sqrt{\frac{R_0}{R}} - \sqrt{\frac{R_0}{R}} \sqrt{1 - \frac{R_0}{R}} \right)$$

となる。さらに、 $R \gg R_0$ として $\sqrt{\frac{R_0}{R}}$ の 1 次までで近似すると、透過係数は

$$D \approx \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mq_1q_2} \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{R} - 2\sqrt{R_0} \right) \right)$$

のように得られる。この結果を用いると、原子核が α 崩壊するときの寿命を求めることが可能になる。原子核の中で α 粒子は自由に運動しているとすると、

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - V_0, \quad \frac{1}{2}mv^2 = E + V_0 \approx V_0$$

から $v \approx \sqrt{\frac{2V_0}{m}}$ となる。この α 粒子が単位時間に原子核の表面と衝突する回数は $\frac{v}{2R_0}$ であり、1 回の衝突のたびに透過係数 D の確率でトンネル効果により原子核内部から出て行くことになる (図 83)。よって、 α 粒子の出て行く確率 Γ は、原子核中にそもそも α 粒子が存在する確率を w としておくと、

$$\Gamma = \frac{v}{2R_0} \times D \times w$$

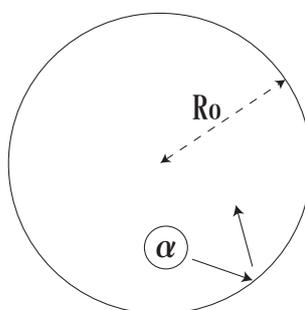


図 83:

と評価される。この逆数が原子核の寿命 τ となる。よって、

$$\tau = \frac{2R_0}{v} \frac{1}{D} \frac{1}{w} = \sqrt{\frac{2mR_0^2}{V_0}} \frac{1}{D} \frac{1}{w}$$

となる。両辺対数をとると、

$$\begin{aligned} \ln \tau &= \ln \frac{2R_0}{v} + \frac{2}{\hbar} \sqrt{2mq_1q_2} \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{R} - 2\sqrt{R_0} \right) - \ln w \\ &= \frac{1}{2} \ln \frac{2mR_0^2}{V_0} - \sqrt{\frac{8mR_0}{\hbar^2} \cdot \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0}} + \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v_\alpha} - \ln w \end{aligned}$$

のように評価される。 α 崩壊する原子核の寿命の対数は、出てくる α 粒子の速さ $v_\alpha \approx \sqrt{\frac{2E}{m}}$ の逆数に比例するという関係が得られる。

§ 25.3 摂動論

ある系のハミルトニアン \hat{H}_0 の解が正確にわかっている、すなわちハミルトニアンに対する固有値問題が正確に解けているとしよう。例えば、水素原子の場合、波動関数はラゲール多項式と球面調和関数の積で完全に解けており、エネルギー固有値も正確にわかっている。このように、完全に知られている系に、弱い擾乱項が加わったとしよう。例えば、前述の水素原子に、弱い電場、あるいは磁場を加えた場合である。加えた擾乱は静的でもよいし、時間に依存してもよい。このような付加項が加わると、一般にシュレーディンガー方程式は正確に解けなくなる。しかしながら、擾乱が弱い場合には、この擾乱による効果を逐次的に取り入れていくことが可能となる。このような近似理論を摂動論と呼ぶ[†]。本節では量子力学的な摂動論を構成する

§§25.3.1 時間に依存しない摂動—縮退が無い場合—

ハミルトニアン \hat{H}_0 に対するシュレーディンガー方程式は正確に解けているとしよう。すなわち、波動関数 $\psi_n^{(0)}$ も、その波動関数に応じたエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ も解かっているとす。ここで、上付き添え字 (0) が、ハミルトニアン \hat{H}_0 に応じた量であることを意味する。ハミルトニアン \hat{H}_0 を、非摂動ハミルトニアンと呼ぶことにする。このとき、時間に依存しないシュレーディンガー方程式は完全に解けていて

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (25.10)$$

が満たされている。この系にポテンシャル λV が加わったとする。ここで、 λ はあるパラメータであり、小さい量とする。ここで、 λV を摂動ポテンシャル、 λ を摂動パラメータと呼ぶことにしよう。ハミルトニアンは $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V$ であり、シュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(\mathbf{r}) &= E \psi(\mathbf{r}) \\ \hat{H} &= \hat{H}_0 + \lambda V \end{aligned} \quad (25.11)$$

である。このとき、波動関数 ψ とエネルギー固有値 E を近似的に求めていこう。

[†] 古典力学では、重力相互作用による天体の運動に関して用いられた。2つの天体の問題は第II部で見たように、ケプラー問題として解けるが、そこに第3の天体があると一般に正確な解は得られない。しかし、第3の天体の重力効果が弱い場合にはその影響を摂動として取り入れて近似的な解を得ることが可能である。

摂動パラメータ λ が零であれば非摂動系の解に戻るので、 λ が小さいとして、求める波動関数とエネルギー固有値を λ で展開しよう。非摂動系のハミルトニアン H_0 の固有関数 $\psi_n^{(0)}$ は完全系を張るので、求める非摂動系の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を $\psi_n^{(0)}$ で展開し、

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$$

と表す。波動関数を λ で展開するためには、展開係数 C_n を λ のべきで展開することになる。また、エネルギー固有値 E も λ で展開して、

$$\begin{aligned} C_n &= C_n^{(0)} + \lambda C_n^{(1)} + \lambda^2 C_n^{(2)} + \dots \\ E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (25.12)$$

とする。ここで、 $C_n^{(s)}$ 、 $E^{(s)}$ は λ に依らない。こうして、(25.12) を (25.11) に代入すると

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \lambda V) \sum_n \left(C_n^{(0)} + \lambda C_n^{(1)} + \lambda^2 C_n^{(2)} + \dots \right) \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \\ &= \left(E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \right) \sum_n \left(C_n^{(0)} + \lambda C_n^{(1)} + \lambda^2 C_n^{(2)} + \dots \right) \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

が得られる。この式に左から $\psi_m^{(0)*}(\mathbf{r})$ をかけて \mathbf{r} で積分し、 λ のべきで比較しよう。規格直交条件 $\int \psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}) \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{mn}$ を用いて

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & E_m^{(0)} C_m^{(0)} = E^{(0)} C_m^{(0)}, \\ \lambda^1 : & \sum_n V_{mn} C_n^{(0)} + E_m^{(0)} C_m^{(1)} = E^{(0)} C_m^{(1)} + E^{(1)} C_m^{(0)}, \\ \lambda^2 : & \sum_n V_{mn} C_n^{(1)} + E_m^{(0)} C_m^{(2)} = E^{(0)} C_m^{(2)} + E^{(1)} C_m^{(1)} + E^{(2)} C_m^{(0)} \end{aligned} \quad (25.13)$$

ただし $V_{mn} = \int \psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}) V \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$

が得られる。

今、量子状態として量子数 k を持つ状態 $\psi_k^{(0)}$ からの補正を考えよう。波動関数 (25.12) で、 k 状態を考えるので、第 0 近似では

$$C_k^{(0)} = 1, \quad C_m^{(0)} = 0 \quad (m \neq k)$$

とすれば良い。こうして (25.13) 第 1 式から

$$E^{(0)} = E_k^{(0)}$$

という、当然そうあるべき解が得られる。(25.13) 第 2 式からは

$$\begin{aligned} m = k : & V_{kk} + E_k^{(0)} C_k^{(1)} = E_k^{(0)} C_k^{(1)} + E^{(1)} \\ m \neq k : & V_{mk} + E_m^{(0)} C_m^{(1)} = E^{(0)} C_m^{(1)} \end{aligned}$$

となるが、この第 1 式から λ^1 の次数のエネルギーの補正 $E^{(1)}$ が得られる：

$$E^{(1)} = V_{kk} = \int \psi_k^{(0)*}(\mathbf{r}) V \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (25.14)$$

すなわち、エネルギーの1次補正 $\lambda E^{(1)}$ は零次の波動関数による摂動ポテンシャルの期待値であることがわかる。第2式からは $E^{(0)} = E_k^{(0)}$ を用いて波動関数の1次補正が決定される：

$$C_m^{(1)} = \frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (m \neq k)$$

ここで、 $m = k$ の場合は、波動関数が λ の1次までで規格化されているとして規格化条件から決定される。このとき、

$$C_k^{(1)} = 0$$

となる。

以上で1次の摂動論によるエネルギー固有値、波動関数の近似解が得られた。次に、 λ の2次の近似に進もう。(25.13) 第3式から $m = k$ として、

$$m = k \quad : \quad \sum_n V_{kn} C_n^{(1)} + E_k^{(0)} C_k^{(2)} = E_k^{(0)} C_k^{(2)} + E_k^{(1)} C_k^{(1)} + E^{(2)}$$

となるが、 $C_k^{(1)} = 0$ と k 以外の $C_m^{(1)}$ の表式を用いて、エネルギー固有値の2次補正 $E^{(2)}$ は

$$E_k^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{V_{kn} V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(= \sum_{n \neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \right) \quad (25.15)$$

となる。この補正式の分子を見ておこう。量子状態 k から摂動ポテンシャル V により量子状態 n に移り、さらに摂動ポテンシャル V を受けて量子状態 n から k に戻る形をしている。このとき摂動ポテンシャル V が2度作用されるので確かに2次の摂動項である。これにエネルギー分母 $E_k^{(0)} - E_n^{(0)}$ がついて、取り得る中間状態の n すべてについて和をとる形になっている。特に、 $k = 0$ の基底状態に関する2次の摂動エネルギー $E_0^{(2)}$ は、エネルギー分母が $E_0^{(0)} - E_n^{(0)} < 0$ ($E_n^{(0)}$ は励起エネルギー) であることから、常に負であることがわかる[‡]。(25.13) 第3式で $m \neq k$ とすることから波動関数の2次補正が決定されることは、1次の摂動で見た場合と同じである。結果のみを示すと

$$C_m^{(2)} = \sum_n \frac{V_{mn} V_{nk}}{(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} - \frac{V_{kk} V_{mk}}{(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})^2}$$

§§25.3.2 時間に依存しない摂動—縮退が有る場合—

ハミルトニアンが \hat{H}_0 で記述される非摂動系にエネルギーの縮退があるとしよう。すなわち、ある量子状態のエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ になる複数の固有状態 n が存在するとする。この複数の量子状態を n_1, n_2, \dots, n_r として表すことにする。すなわち、 r 重に縮退しているとしよう。このとき、シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}_0 \varphi_{n_\mu}^{(0)} = E_n^{(0)} \varphi_{n_\mu}^{(0)}$$

となる。ここで、 μ は $1, 2, \dots, r$ である。従って非摂動系の波動関数はこれらの波動関数 $\{\varphi_{n_\mu}^{(0)}\}$ の重ね合わせで

$$\psi_n^{(0)} = \sum_{\mu=1}^r C_{n_\mu}^{(0)} \varphi_{n_\mu}^{(0)}$$

[‡]相対論的にはこの限りでは無い。

と書ける。

この系に、摂動 λV が加わったとしよう。全系のハミルトニアン \hat{H} を

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V$$

とする。シュレーディンガー方程式は

$$(\hat{H}_0 + \lambda V)\psi_m(\mathbf{r}) = E\psi_m(\mathbf{r})$$

となる。今、エネルギー固有値が E_n となる非摂動系の量子状態に関する摂動項による補正を考えよう。波動関数 ψ_m とエネルギー E を λ で展開し、 λ の 1 次までで

$$\begin{aligned}\psi_m(\mathbf{r}) &\approx \psi_m^{(0)}(\mathbf{r}) + \lambda\psi_m^{(1)}(\mathbf{r}) \\ E &\approx E^{(0)} + \lambda E^{(1)}\end{aligned}$$

とする。これをシュレーディンガー方程式に代入すると、 λ の零次では、 $E^{(0)} = E_m^{(0)}$ となり、非摂動系のシュレーディンガー方程式が得られる。次に λ の 1 次では、

$$\hat{H}_0\psi_m^{(1)}(\mathbf{r}) + V\psi_m^{(0)}(\mathbf{r}) = E^{(0)}\psi_m^{(1)}(\mathbf{r}) + E^{(1)}\psi_m^{(0)}(\mathbf{r})$$

が得られる。これに左から $\varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})$ を掛けて \mathbf{r} で積分すると、

$$\int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\hat{H}_0\psi_m^{(1)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})V\psi_m^{(0)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = E^{(0)} \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\psi_m^{(1)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + E^{(1)} \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\psi_m^{(0)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

となる。ここで、 $m = n$ とし、波動関数 $\psi_m^{(0)}$ の展開 $\psi_m^{(0)} = \sum_{\mu=1}^r C_{m_\mu}^{(0)}\varphi_{m_\mu}^{(0)}$ を用いると、上の式は

$$\begin{aligned}E_n^{(0)} \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\psi_n^{(1)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})V \sum_{\nu} C_{n_\nu}^{(0)}\varphi_{n_\nu}^{(0)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \\ = E^{(0)} \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\psi_n^{(1)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + E^{(1)} \int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r}) \sum_{\nu} C_{n_\nu}^{(0)}\varphi_{n_\nu}^{(0)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}\end{aligned}$$

となる。ここで、零次のシュレーディンガー方程式の共役 $\varphi_{n_\mu}^{(0)*}\hat{H}_0 = E_n^{(0)}\varphi_{n_\mu}^{(0)*}$ を用いた。両辺、同じものを差し引き、波動関数の規格直交性 $\int \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})\varphi_{n_\nu}^{(0)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}$ を用いると、結果的に

$$E^{(1)}C_{n_\mu}^{(0)} = \sum_{\nu} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})V\varphi_{n_\nu}^{(0)}(\mathbf{r}) \cdot C_{n_\nu}^{(0)}$$

が得られる。表記を簡単にするため、零次のエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ に縮退した量子状態の指標 n_μ を簡単に μ で表すと、上式は

$$\begin{aligned}E^{(1)}C_{\mu}^{(0)} &= \sum_{\nu} V_{\mu\nu}C_{\nu}^{(0)} \\ V_{\mu\nu} &= \int d^3\mathbf{r} \varphi_{n_\mu}^{(0)*}(\mathbf{r})V\varphi_{n_\nu}^{(0)}(\mathbf{r})\end{aligned}$$

と簡潔に書かれる。すなわち、

$$\sum_{\nu} (V_{\mu\nu} - E^{(1)}\delta_{\mu\nu})C_{\nu}^{(0)} = 0$$

となる。ここで、 $C_\nu^{(0)} = 0$ という自明な解以外の解を持つためには

$$\det \left(V_{\mu\nu} - E^{(1)} \delta_{\mu\nu} \right) = 0 \quad (25.16)$$

が満たされなければならない。行列式を具体的に示せば

$$\begin{vmatrix} V_{n_1 n_1} - E^{(1)} & V_{n_1 n_2} & V_{n_1 n_3} & \cdots & V_{n_1 n_r} \\ V_{n_2 n_1} & V_{n_2 n_2} - E^{(1)} & V_{n_2 n_3} & \cdots & V_{n_2 n_r} \\ V_{n_3 n_1} & V_{n_3 n_2} & V_{n_3 n_3} - E^{(1)} & \cdots & V_{n_3 n_r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_r n_1} & V_{n_r n_2} & V_{n_r n_3} & \cdots & V_{n_r n_r} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (25.17)$$

となる。これを永年方程式と呼び、この行列式を解くことにより、エネルギーの1次の補正 $E^{(1)}$ が、一般には縮退の数 r だけ得られる。

縮退のある場合の摂動論により理解される現象として、§§20.3.1 で言及した1次のゼーマン効果を見ておこう。角運動量 l を持つ電子のエネルギーは角運動量の z 方向の射影 m に依存せず、 $2l + 1$ 重に縮退している。この原子に外部から一様な磁束密度 \mathbf{B} をかける。ベクトルポテンシャルを $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ としてハミルトニアン \hat{H} は、§§11.3.1 の式 (13.9) に与えられているように、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + V_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}(\mathbf{r})^2 + V_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

と書ける。ここで、 V_{Coulomb} は原子核からの電気エネルギー $V_{\text{Coulomb}} = -\frac{Zeq}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ である。また電荷 q は電子を考えているので、 $q = -e$ とすれば良い。ここで、 e は素電荷である。ただし、運動量 \mathbf{p} が微分演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ になっていることに注意しよう。したがって、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} との順序を保たなければならない。一様な磁場（磁束密度） \mathbf{B} に対して、ベクトルポテンシャルは

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

ととることができる。実際、 $\text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}$ となることが確かめられる。このとり方では $\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$ となるので、運動量演算子がナブラ演算子に比例することから $\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$ となる。こうして、上のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r}) + \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}(\mathbf{r})^2 \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r}) + \frac{e}{2m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{8m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \end{aligned}$$

となる。ここで、第3項はさらに $(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) = \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ と変形されることに注意しよう。ここで、 $\hat{\mathbf{L}}$ は軌道角運動量演算子である。こうして、今、一様な磁場の方向を z 軸にとると、上のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}} + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2)$$

となる。右辺第1、2項は磁場の存在しないときに原子を記述するももとのハミルトニアンであり、非摂動系のハミルトニアンとみなされる。第3項は素電荷 e の1乗に比例し、1次のゼーマン効果を与える。第4項は素電荷 e の2乗に比例し、2次のゼーマン効果を与える。ここでは e の2乗を無視し、1次のゼーマン効果に

ついて考察しよう。非摂動系のハミルトニアンを $\hat{H}_0 \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r})$ とする。この非摂動系の問題は解けていて、角運動量の z 射影には依らないエネルギー準位が得られている。水素原子型のシュレーディンガー方程式を考察した §21.1 を思い出そう。こうして、 e^2 を無視する範囲でハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z$$

と簡単化される。今、 $\hat{V} \equiv \frac{eB}{2m} \hat{L}_z$ として、摂動ポテンシャル \hat{V} を (摂動パラメータ λ を含んで) 定義すると、 $[\hat{H}_0, \hat{L}_z] = 0$ から $[\hat{H}_0, \hat{V}] = 0$ であるので、

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n | \hat{H}_0 \hat{V} - \hat{V} \hat{H}_0 | n \rangle = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) (\hat{H}_0 \hat{V} - \hat{V} \hat{H}_0) \psi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= (E_n - E_m) \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \hat{V} \psi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $n \neq m$ であれば、 $E_n \neq E_m$ であり、よって、

$$V_{nm} \equiv \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \hat{V} \psi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 0, \quad (n \neq m)$$

が導かれる。こうして、異なるエネルギー固有値に属する波動関数についての摂動ポテンシャルの行列要素は零になる。非摂動系のエネルギーは角運動量 l に関して縮退していたので、エネルギー E_n の状態を角運動量 l とその射影 l_z により指定しよう。すなわち、 $|l, l_z\rangle$ として状態を表す。このとき、状態 $|l, l_z\rangle$ に対する \hat{L}_z の固有値は $\hbar l_z$ であるので、

$$\langle l, l_z | \hat{V} | l, l'_z \rangle = \frac{eB}{2m} \langle l, l_z | \hat{L}_z | l, l'_z \rangle = \frac{e\hbar B}{2m} l_z \delta_{l_z l'_z}$$

となる。ここで、 l_z は $l_z = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ の $2l+1$ 個の値をとる。角運動量の大きさ l は 0 を含む自然数である。こうして、永年方程式 (25.17) は

$$\begin{vmatrix} -l \frac{e\hbar B}{2m} - E^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (-l+1) \frac{e\hbar B}{2m} - E^{(1)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & l \frac{e\hbar B}{2m} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

となる。これは簡単に解けて、 $2l+1$ 個の $E^{(1)}$ は

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar B}{2m} l_z, \quad (l_z = -l, -l+1, \dots, l-1, l)$$

と得られる。こうして、非摂動系では $2l+1$ 重に縮退していたエネルギーが、等間隔で $2l+1$ 個に分裂することがわかる。この現象を **1 次のゼーマン効果** と呼ぶ。§§20.3.1 ですでに言及したように、微細にみると $2l+1$ 個に分裂したエネルギー準位がさらに 2 つずつに分裂していることが観測された。この原因として、2 重に縮退していたエネルギー準位が磁場の効果で分裂したと考え、大きさ $1/2$ のスピン角運動量が導入された。この準位の分裂は **異常ゼーマン効果** と呼ばれた。

次に、水素原子を一様な電場の中に置いた場合を考察してみよう。水素原子の問題はすでに 21 章で解かれている。水素原子の第 1 励起状態は 4 重に縮退しており、電子軌道では $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ と表される。波動

関数 $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ は極座標 (r, θ, φ) を用いて

$$\begin{aligned}\psi_{200}(\mathbf{r}) &\equiv \phi_1^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_B^3}} \left(2 - \frac{r}{a_B}\right) e^{-r/(2a_B)}, \quad (2s) \\ \psi_{210}(\mathbf{r}) &\equiv \phi_2^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_B^3}} e^{-r/(2a_B)} \cdot \frac{r}{a_B} \cos \theta, \quad (2p_z) \\ \psi_{211}(\mathbf{r}) &\equiv \phi_3^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{64\pi a_B^3}} e^{-r/(2a_B)} \cdot \frac{r}{a_B} \sin \theta \cdot e^{i\varphi}, \quad \left(\frac{(2p_x) + i(2p_y)}{\sqrt{2}}\right) \\ \psi_{21-1}(\mathbf{r}) &\equiv \phi_4^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{64\pi a_B^3}} e^{-r/(2a_B)} \cdot \frac{r}{a_B} \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}, \quad \left(\frac{(2p_x) - i(2p_y)}{\sqrt{2}}\right)\end{aligned}$$

である。ここで、 a_B はボーア半径で、 m を電子の質量[§]として

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ [m]}$$

である。今、水素原子に外部から強さ \mathcal{E} の一様な電場を z 方向にかけたとしよう。ハミルトニアン \hat{H} は、電場をかける前のハミルトニアン $\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ からずれて

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \lambda V, \\ \lambda &= e \\ V &= \mathcal{E}r \cos \theta\end{aligned} \quad (25.18)$$

となる[¶]。電場の寄与による項 $\lambda V (= e\mathcal{E}r \cos \theta)$ を摂動論で扱おう。直接の計算から

$$\begin{aligned}V_{12} &\equiv \int \phi_1^{(0)}(\mathbf{r})^* V \phi_2^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = -3\mathcal{E}a_B, \\ V_{21} &\equiv \int \phi_2^{(0)}(\mathbf{r})^* V \phi_1^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = -3\mathcal{E}a_B, \\ V_{ij} &= 0 \quad (\text{上記以外})\end{aligned}$$

であることがわかる。こうして、 λV の摂動項による 1 次の摂動で、水素原子の第 1 励起状態のエネルギーは変化するが、その変化 $\lambda E^{(1)}$ は永年方程式

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3\mathcal{E}a_B & 0 & 0 \\ -3\mathcal{E}a_B & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

を解くことで得られる。この行列式は容易に計算され、結果として得られる 4 つの解 $E^{(1)}$ は

$$E^{(1)} = 3\mathcal{E}a_B, \quad -3\mathcal{E}a_B, \quad 0, \quad 0$$

となる。永年方程式で零でない行列要素を持つのは $2s$ 軌道と $2p_z$ 軌道の波動関数によるものであり、一様な電場のもとでこの 2 つの軌道のエネルギー E_1 (水素原子の第 1 励起エネルギー) の縮退が解けて $E = E_1 \pm 3e\mathcal{E}a_B$ と分裂することがわかる。また、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 軌道のエネルギーは、 z 方向の一様な電場の下では変化しない ($E^{(1)} = 0$)。電場による水素原子のエネルギーの縮退がとける現象はシュタルク効果と呼ばれている。

[§] 正確には、電子の換算質量である。

[¶] $z = r \cos \theta$ であるので、古典的には $H = H_0 + e\mathcal{E}z$ と書かれる。このとき、 z 方向のハミルトン方程式は $\frac{dp_z}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z} = -\frac{\partial H_0}{\partial z} - e\mathcal{E}$ となり、電荷 $-e$ の荷電粒子が z 方向に一様な電場のもとで受ける力 $-e\mathcal{E}$ を表していることがわかる。

§§25.3.3 時間に依存する摂動

これまでは摂動ポテンシャルが時間に依存しない場合を考えてきたが、ここでは時間に依存する摂動を考えておこう。摂動ハミルトニアンが時間に依存するとして、非摂動ハミルトニアンを \hat{H}_0 として、 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V(t)$ から出発する。時間依存のシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \lambda V(t)) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (25.19)$$

である。波動関数 Ψ を、非摂動系の波動関数 $\Psi^{(0)}$ で展開しよう。ここで、量子状態 k の非摂動波動関数 $\Psi_k^{(0)}$ は

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$$

を満たしている。非摂動系のハミルトニアンは時間に依存しないので、エネルギー固有値を $E_k^{(0)}$ として

$$\Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \cdot \psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$$

のように、時間に依存しない波動関数 $\psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$ で表される。ここで、 $\hat{H}_0 \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) = E_k^{(0)} \psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$ である。こうして、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$$

と展開する。展開係数を $a_k(t)$ とした。この波動関数をシュレーディンガー方程式 (25.19) に代入すると $i\hbar \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \Psi_k^{(0)} = \lambda V(t) \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}$ が得られるが、これに左から $\Psi_m^{(0)*}$ を掛けて \mathbf{r} で積分し、波動関数の規格直交性 $\int \Psi_m^{(0)}(\mathbf{r}, t)^* \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \delta_{km}$ を用いると、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_m(t)}{dt} &= \lambda \sum_k V_{mk}(t) a_k(t), \\ V_{mk}(t) &\equiv \int \Psi_m^{(0)}(\mathbf{r}, t)^* V(t) \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \\ &= V_{mk} e^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar} \\ V_{mk} &\equiv \int \psi_m^{(0)}(\mathbf{r})^* V(t) \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (25.20)$$

となる。

以下では、非摂動波動関数として i 番目の量子状態 $\Psi_i^{(0)}$ を考えよう。波動関数の展開係数 $a_k(t)$ を λ の冪で展開し

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \lambda a_k^{(1)}(t) + \dots$$

と書く。今、 i 状態からの摂動を考えているので

$$a_i^{(0)} = 1, \quad a_k^{(0)} = 0 \quad (k \neq i)$$

から出発すれば良い。これを (25.20) に代入すると、 λ の 1 次で

$$i\hbar \frac{da_m^{(1)}(t)}{dt} = V_{mi}(t)$$

が得られる。今、 i 番目の非摂動系の量子状態に対する補正を考えているので、このことを忘れないように係数 $a_m^{(1)}$ に i をつけて $a_m^{(1)} \equiv a_{mi}^{(1)}$ と書くことにしよう： $i\hbar \frac{da_{mi}^{(1)}(t)}{dt} = V_{mi}(t)$ 。形式的に積分を実行すると、 $a_{mi}^{(1)}(t)$ は

$$a_{mi}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int V_{mi}(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{mi} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_i^{(0)})t} dt$$

と書ける。よって、 $a_{ki}^{(0)} \equiv a_k^{(0)} = \delta_{ki}$ であったことに注意して、

$$a_{ki}(t) = \lambda a_{ki}^{(1)}(t) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \int V_{ki} e^{\frac{i}{\hbar}(E_k^{(0)} - E_i^{(0)})t} dt, \quad (k \neq i)$$

$$a_{ii}(t) = a_{ii}^{(0)} + \lambda a_{ii}^{(1)}(t) = 1 - \lambda \frac{i}{\hbar} \int V_{ii} dt$$

となる。

時刻 $t \rightarrow -\infty$ で $\Psi(\mathbf{r}, t = -\infty) = \Psi_i^{(0)}(\mathbf{r})$ であった状態は、時刻 t では、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_{ki}(t) \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$$

となっている。このとき、展開係数の絶対値の2乗、 $|a_{ki}(t)|^2$ は、時刻 t で系がエネルギー $E_k^{(0)}$ を持つ状態 k にある確率を意味する。よって、時刻 $t \rightarrow -\infty$ で初期状態 i にあった系は、摂動 $\lambda V(t)$ を受けて、時刻 $t \rightarrow \infty$ では終状態 f に遷移している遷移確率 W_{fi} は

$$W_{fi} = |a_{fi}(t \rightarrow \infty)|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{fi} e^{\frac{i}{\hbar}(E_f^{(0)} - E_i^{(0)})t} dt \right|^2$$

として得られることがわかる。

状態間の遷移についてもう少し考察を進めておこう。摂動ハミルトニアン $V(t)$ が時間 t にあらわに依存していないときには、摂動ハミルトニアンの非摂動波動関数による行列要素 $V_{fi}(t)$ は

$$\begin{aligned} V_{fi}(t) &= V_{fi} e^{i\omega_{fi}t}, \\ V_{fi} &= \int \psi_f^{(0)}(\mathbf{r})^* V \psi_i^{(0)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ \omega_{fi} &\equiv \frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

と表わされる。この状況で、 $t = 0$ に i 状態にあった系が、時刻 t に f 状態に遷移する確率を、摂動の1次までで計算しよう。このとき、

$$a_{fi}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} V_{fi} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t} dt = V_{fi} \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}$$

と得られるので、遷移確率 W_{fi} は

$$|a_{fi}^{(1)}|^2 = |V_{fi}|^2 \frac{4 \sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}$$

となる。時刻 t を大きく取ると、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha)$$

と、ディラックのデルタ関数になることを用いて、

$$|a_{fi}^{(1)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{fi}|^2 \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) \cdot t$$

となる。ここで表れたデルタ関数は、始状態と終状態でエネルギーが一致していること、すなわちエネルギー保存を表わしている^{||}。終状態 f が連続スペクトルのときには、終状態 f の周りの状態密度 $d\rho_f$ への遷移として、単位時間あたり

$$dw_{fi} \equiv \frac{|\lambda a_{fi}^{(1)}|^2}{t} d\rho_f = \frac{2\pi}{\hbar} |\lambda V_{fi}|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) d\rho_f \quad (25.21)$$

が得られる。この dw_{fi} を量子遷移確率速度と呼ぶ。

ここで、 $d\rho_f = \frac{d\rho_f}{dE_f} dE_f \equiv \rho(E_f) dE_f$ として、エネルギー E_f での状態密度 $\rho(E_f)$ を導入しておく、(25.21) は

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\lambda V_{fi}|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) \rho(E_f^{(0)}) dE_f^{(0)}$$

と書かれるので、エネルギー幅 $dE_f^{(0)}$ について積分すると、

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\lambda V_{fi}|^2 \rho(E_i^{(0)})$$

が得られる。

^{||}時刻 t が無限大のときにエネルギーが正確に一致していることに注意しよう。これは時間とエネルギーの不確定関係の表れである。

26章 量子力学的散乱

§ 26.1 2粒子散乱の一般論

§§26.1.1 重心運動の分離

21章の水素原子のところでは、原子核と電子の2体問題となるので電子の質量を換算質量に置き換えて原子核と電子の相対座標に関してシュレーディンガー方程式をたてた。ここでは、古典力学と同様に量子力学においても慣性中心（重心）座標と相対座標の分離ができることを明確に示しておこう。

2粒子の相互作用エネルギーは、空間の一様性、等方性から、2粒子間の距離にのみ依存した。したがって、質量 m_1 、 m_2 の2つの粒子の位置をそれぞれ \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 と表わすと、ポテンシャルエネルギー U は $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ と書ける。こうして、シュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \\ \nabla_i^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}, \quad (i=1,2)\end{aligned}$$

と書ける。ここで、相対座標 \mathbf{r} と慣性中心の座標（重心座標） \mathbf{R} を導入しよう。

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} \equiv \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

このとき、微分演算子 $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}$ は

$$\begin{aligned}\nabla_1 &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \\ &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \\ \nabla_2 &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\end{aligned}$$

となるので、ハミルトニアン \hat{H} は

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_G + \hat{H}_r \\ \hat{H}_G &\equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} \\ \hat{H}_r &\equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(r) \\ M &= m_1 + m_2 \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\end{aligned}$$

となる。ここで、 M は全質量、 μ は換算質量である。ハミルトニアンが重心座標 \mathbf{R} と相対座標 \mathbf{r} にのみ依存する部分の和として分離できたので、変数分離が可能である。波動関数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は \mathbf{R} と \mathbf{r} の関数と考えて良いので、 $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ と書くと、 $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$ としてシュレーディンガー方程式に代入すると

$$\begin{aligned}\hat{H}_G\phi(\mathbf{R}) &= E_G\phi(\mathbf{R}), \quad E_G = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} \\ \hat{H}_r\psi(\mathbf{r}) &= E_r\psi(\mathbf{r})\end{aligned}$$

と変数分離される。系のエネルギーは $E_G + E_r$ である。こうして、重心運動は単に並進運動のエネルギーを考慮すればよいので、2粒子間の相互作用は相対座標の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に反映する。こうして、自明な重心運動を分離し、以下では相対運動を考え、2粒子の散乱を量子力学的に扱うことにしよう。従って、相対座標を表わす添え字 r は省略することにする：

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(r)$$

21章で考察した水素原子の場合にも、原子核を原点にとって電子の位置を相対座標 \mathbf{r} にとり、電子の質量の代わりに換算質量をとったものが厳密な水素原子のエネルギー準位を与えている。

§§26.1.2 散乱位相差

たとえば、電子が原子核に向かって入射してきたと考えてみよう。無限遠方から電子が散乱中心としての原子核（原子核は電子に比べて重いので、慣性中心の位置はほぼ原子核である）に向かって入射してきたとしよう。2粒子間の相互作用は、ポテンシャルエネルギー U により表される。シュレーディンガー方程式は、換算質量を μ として、

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi(\mathbf{r}) + U(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

と書ける。ここで、ラプラシアン $\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2}$ である。このラプラシアンを極座標 ($x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$) で表すと、角運動量 §§20.2.1 で示した表式を用いて、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0$$

と書ける。角運動量の20章でも述べたように、角度部分に角運動量演算子の2乗

$$\hat{l}^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

が現れていることに再び注意しておこう。

空間の等方性から相互作用エネルギー U は2粒子間の相対座標の大きさ r にのみ依存している。このとき、角運動量は保存する。したがって、20章で詳述した角運動量の一般論から、角運動量の大きさ l とその z 射影 $l_z \equiv m$ が確定値を持つ状態を考えて良い。したがって、波動関数は20章で示したように

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

と変数分離できる。ここで、 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ は角運動量の大きさの2乗 \hat{l}^2 とその z 射影 \hat{l}_z の固有状態であり、球面調和関数であった：

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

また、球面調和関数は、ルジャンドル陪多項式 $P_l^m(\cos \theta)$ を用いて

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|}(\cos \theta) \cdot e^{im\varphi}$$

と得られている。

動径方向の波動関数 $R_{kl}(r)$ は、 $\psi(\mathbf{r})$ をシュレーディンガー方程式に代入し、球面調和関数の満たす式を利用すると

$$\frac{d^2 R_{kl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] R_{kl}(r) = 0 \quad (26.1)$$

という式を満たさねばならないことがわかる。以下、この方程式を分析していこう。

(i) 十分遠方での動径波動関数

散乱中心から十分遠方では、ポテンシャルの影響は無視できて、このときには $U(r) \approx 0$ としてよい。このとき (26.1) は

$$\frac{d^2 R_{kl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}(r)}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl}(r) = 0 \quad (26.2)$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$$

と簡単化される。ここで、入射粒子が軌道角運動量の大きさが零で散乱中心に向かってきている場合には、先ほどの式で $l=0$ と置くと

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR_{k0}(r)) + k^2 r R_{k0}(r) = 0$$

が得られる。波動関数の規格化条件から、波動関数は $r=0$ で発散してはいけないので、上の方程式で $r=0$ で発散しない解 $R_{k0}(r)$ は

$$R_{k0}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\sin kr}{r}$$

と得られる。ここで、係数は、エネルギーが正である連続スペクトルでの波動関数の規格化 $\int_0^\infty dr r^2 R_{k0}(r)^* R_{k'0}(r) = \delta(k - k')$ を考慮している。

次に、 $l \neq 0$ の場合を考えよう。このとき (26.2) で $t \equiv kr$ 、 $T_{kl}(t) \equiv \sqrt{kr} R_{kl}(r)$ とおくと、 $\frac{d}{dr} = k \frac{d}{dt}$ となることから、(26.2) は両辺 $k^2 t^{-1/2}$ で割って整理すると

$$\frac{d^2 T_{kl}(t)}{dt^2} + \frac{1}{t} \frac{dT_{kl}(t)}{dt} + \left[1 - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{t^2} \right] T_{kl}(t) = 0$$

となる。これは、後述するベッセルの微分方程式 (26.16) そのものである[†]。したがって、解は第1種のベッセル関数 $J_\nu(t)$ で表される[‡]。今、 $\nu = \pm \left(l + \frac{1}{2} \right)$ であり、

$$T_{kl}(t) = A J_{l+\frac{1}{2}}(t) + B J_{-(l+\frac{1}{2})}(t)$$

と表される。ここで、 $J_\nu(t)$ は ν 次の第1種ベッセル関数である。今、 $l=0$ の場合には

$$J_{\frac{1}{2}}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin(kr), \quad J_{-\frac{1}{2}}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos(kr)$$

[†] ベッセルの微分方程式、ベッセル関数については、後述する §§24.1.6 をみよ。

[‡] これも後述する。

であることが知られている[§]ので、 $l=0$ で先ほどの $r=0$ で発散しない解に帰着するためには $A=k$ かつ $B=0$ でなければならないことがわかる。結局、無限遠方で $U(r) \approx 0$ とみなされる領域での(26.2)の解としては

$$R_{kl}(r) = t^{-\frac{1}{2}} T_{kl}(t) = \sqrt{\frac{k}{r}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$$

が得られる。ここで r が大きい散乱中心から遠いところでは、 $J_{l+\frac{1}{2}}$ の漸近形(26.26)を用いて

$$R_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{r} \quad (26.3)$$

となる。

この結果から重要なことが引き出せる。今、 $r \rightarrow$ 大で遠心力ポテンシャルに対応する項 $\frac{l(l+1)}{r^2}$ は小さくなる。したがって、漸近的には r が大きいところでは遠心力ポテンシャルは無視できて、 $\frac{l(l+1)}{r^2} \approx 0$ として良い。このとき、動径方向のシュレーディンガー方程式の解は正弦関数(sin関数)であった。しかし、 $l=0$ の場合とは異なり、 $r=0$ で波動関数が発散せず有限でなければならないという条件は課されない。なぜなら、あくまでも $r \rightarrow \infty$ での漸近解であったので、 $r \approx 0$ では単純な正弦関数は解として採用されず、ベッセル関数を解として用いなければならないからである。こうして、 $r \approx 0$ で波動関数は発散しないという条件がはずれ、漸近解は(26.3)となった。すなわち、波動関数は、遠心力ポテンシャル(角運動量)の効果によって、位相が $-\frac{\pi l}{2}$ だけずらされたと解釈できる。こうして重要な結論が得られる。散乱中心からの距離 r が十分大きいときに漸近的に零になる相互作用($U(r \rightarrow \infty) \approx 0$)のもとでは、相互作用の影響は、漸近的な波動関数の位相をずらすという効果に反映される。

次に相互作用 $U(r)$ が零でないときを考察しよう。ただし、 $U(r)$ は r が十分大きいときには $\frac{1}{r}$ より早く零になるとする。このときには、 r が十分に大きいところでは $U(r)$ は零と置いてよいので、 r が十分に大きいところでの波動関数 $R_{kl}(r)$ の漸近解はやはり正弦関数(sin関数)で表される。しかしながら、遠心力ポテンシャルの効果が正弦関数の位相のずれに反映したように、同じく r が十分大きいところで消えるポテンシャルは漸近解としての正弦関数の位相に反映するであろう。相互作用ポテンシャル $U(r)$ の効果による漸近解の位相のずれを δ_l と書くと

$$R_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{r}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (26.4)$$

と表して良からう。ここで、相互作用ポテンシャル $U(r)$ に起因する位相差 δ_l を散乱位相差または単にフェーズシフトと呼ぶ。

今、漸近解の正弦関数の部分を

$$\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) = \sin\left(k(r + \Delta r) - \frac{\pi l}{2}\right)$$

と書くと、

$$\Delta r = \frac{\delta_l}{k}$$

となる。今、 $r > 0$ であるので、 δ_l が正であれば Δr が正であるので、相互作用がない($\delta_l \equiv 0$)場合に比べて波は原点側(散乱中心側)に引き込まれている。逆に、 δ_l が負であれば Δr も負であるので、相互作用がない

[§](26.24)、(26.25)を見よ。ここで、 $t = kr$ である。

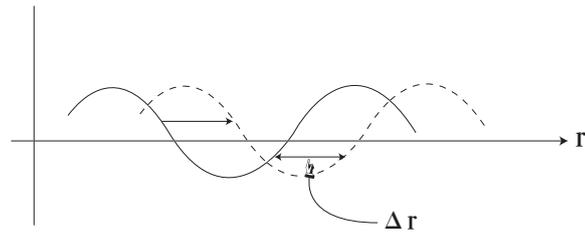


図 84:

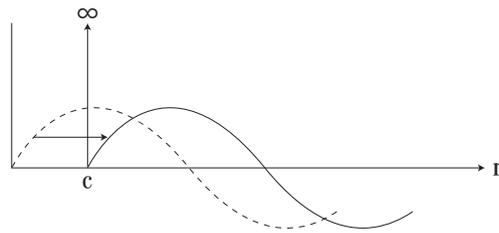


図 85:

($\delta_l \equiv 0$) 場合に比べて波は原点側（散乱中心側）から押し出される (図 84)。これは、 δ_l が正であれば引力を感じており、 δ_l が負であれば斥力を感じていることに対応している。すなわち、

$$\begin{cases} \delta_l > 0 : \text{波が内側にシフト (引力)} \\ \delta_l < 0 : \text{波が外側にシフト (斥力)} \end{cases}$$

であることを意味する。このように、散乱位相差により相互作用の性質が理解される。

具体的にハードコアポテンシャルと呼ばれる以下の斥力ポテンシャルを考えよう。

$$U(r) = \begin{cases} \infty & (r < c) \\ 0 & (r > c) \end{cases}$$

角運動量 $l = 0$ の場合を考えよう。 $r < c$ ではポテンシャルエネルギーは無限大であるので、波動関数は $r = c$ で零でなければならない (図 85)。また $r > c$ では相互作用がないので自由粒子の場合と同じ波動関数である。

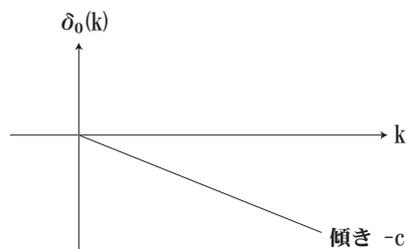


図 86:

したがって、波動関数の規格化因子を A とすると

$$\begin{aligned} R_{k0}(r) &= A \frac{\sin(k(r-c))}{r} \\ &= A \frac{\sin(kr + \delta_0(k))}{r}, \\ \delta_0(k) &= -kc \end{aligned}$$

となる (図 86)。確かに $\delta_0 < 0$ であり、斥力ポテンシャルに起因した散乱位相差が得られている。

§§26.1.3 平面波の球面波展開

散乱中心に向かって進む入射粒子は、散乱中心のポテンシャルの影響を受けるまでは自由粒子として振舞う。自由粒子は量子力学的には運動量の決まった平面波で表される。散乱の効果を受けると、散乱中心から球面波として散乱中心から外に向かって進行するのであろう (図 87)。そこで、あらかじめ、平面波を球面波の重ね合わせ状態で記述しておくことが便利である。

入射粒子は z 軸の正の方向に向かって、無限遠方から入射してきたとしよう。入射粒子の波動関数 ψ_{inc} は

$$\psi_{\text{inc}} = e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$$

と書ける。ここで、極座標をとり、 $z = r \cos \theta$ とした。入射波動関数は z 軸の周りの角度 φ に依存しないことを注意しておこう。散乱中心からの距離 r が十分大きいところでは、散乱ポテンシャル $U(r)$ は零と置いて良からう。また、 z 軸周りの角 φ に依存しないことから、角運動量の z 射影 m が零、すなわち $m = 0$ の角運動量の固有関数で、入射粒子の波動関数 ψ_{inc} を展開する。角運動量の z 射影が零である角運動量の固有関数は、ルジャンドル多項式 $P_l(\cos \theta)$ であった。動径方向の波動関数を $R_{kl}(r)$ と置いて展開すると、展開係数を α_l と書いて

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l'=0}^{\infty} \alpha_{l'} R_{kl'}(r) P_{l'}(\cos \theta) \quad (26.5)$$

と書けるはずである。ここで、未知の α_l を決定しよう。式 (26.5) の両辺に $P_l(\cos \theta) \sin \theta$ を掛けて θ について 0 から π まで積分すると、ルジャンドル多項式の規格直交性を用いて

$$\int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \alpha_l \frac{2}{2l+1} R_{kl}(r)$$

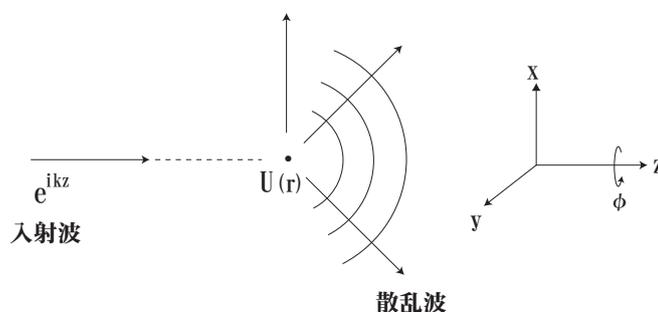


図 87:

が得られる。ここで、 $x = \cos \theta$ と置いて、 r が十分大きいところで $1/r$ の高次の項を無視する。ルジャンドル多項式の性質 $P_l(1) = 1$ 、 $P_l(-1) = (-1)^l$ に注意し、左辺を部分積分すると、

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \int_{-1}^1 dx e^{ikrx} P_l(x) = \left[P_l(x) \frac{e^{ikrx}}{ikr} \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{dx}{ikr} e^{ikrx} \frac{dP_l(x)}{dx} \\ &\approx \frac{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}}{ikr} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、第1式の最終式第2項は $1/r$ の高次項なので無視した。さらに、 l が0を含む自然数であることから $(-1)^l = e^{i\pi l}$ であるので、上式は

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \frac{2e^{i\pi l/2}}{kr} \cdot \frac{e^{i(kr-\pi l/2)} - e^{-i(kr-\pi l/2)}}{2i} \\ &= \frac{2i^l}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \end{aligned}$$

となる。一方、(右辺)の $R_{kl}(r)$ は(26.3)式で与えられるので、両辺を比較することから

$$\alpha_l = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{i^l}{k} (2l+1)$$

が得られる。こうして、平面波は球面波 $\frac{e^{ikr}}{r}$ で展開されて、

$$\begin{aligned} \psi_{\text{inc}} &= e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \\ &\approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \left[e^{i(kr-\frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr-\frac{\pi l}{2})} \right] \end{aligned} \quad (26.6)$$

と表すことができる。ここで、右辺の $[\dots]$ の中の第1項は外向きの波、すなわち全体に掛かっている $1/r$ と合わせて $\frac{e^{i(kr-\frac{\pi l}{2})}}{r}$ は散乱中心から外に向かって進行する外向き球面波を表しており、第2項 $\frac{e^{-i(kr-\frac{\pi l}{2})}}{r}$ は無限遠方から散乱中心へ向かう内向き球面波を表している。このように、 z 軸の正の向きに進行する平面波は、外向きと内向きの球面波の重ね合わせとなっていることがわかる。また、角運動量の大きさ l について和を取る形になっており、角運動量の大きさ l を持つ部分波展開による表式である。各部分波には位相差 $\frac{\pi l}{2}$ が存在することが見てとれる。これは、先に指摘したとおりである。

§§26.1.4 散乱振幅

散乱中心から離れた遠方、すなわち r の大きなところでは、散乱波は散乱中心で散乱された後に外向き球面波として進んでいく。したがって、入射波を ψ_{inc} 、散乱波を ψ_{scat} 、全波動関数を ψ_{tot} で表すと

$$\begin{aligned} \psi_{\text{tot}} &= \psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{scat}} \\ \psi_{\text{inc}} &= e^{ikz} \\ \psi_{\text{scat}} &= \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \end{aligned}$$

と書いてよい。ここで、散乱波は、 z 軸周りに対称なので、 z 軸周りの角 φ には依存せず、未定の関数として $f(\theta)$ を導入した。全波動関数を球面波で展開しよう。このとき、(26.5)であるが、動径方向の波動関数 $R_{kl}(r)$

としては自由粒子に対するものではなく、散乱を経ているので散乱位相差 δ_l を含んだ (26.3) を用いなければならない。展開係数を A_l とすると、 r の大きなところで

$$\begin{aligned}\psi_{\text{tot}} &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right) \\ &= \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) \left(e^{i(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} \right)\end{aligned}\quad (26.7)$$

と表される。このとき、 $\psi_{\text{scat}} = \psi_{\text{tot}} - e^{ikz}$ は内向き球面波を含まず、外向き球面波にならないので、平面波の球面波展開 (26.6) を (26.7) から引いたものに内向き球面波 e^{-ikr}/r の寄与を含まないようにするためには、

$$A_l = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$$

と採らねばならない。こうして展開係数が決定されたので、

$$\begin{aligned}\psi_{\text{tot}} &\approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \left(e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right), \\ \psi_{\text{scat}} &= \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) = \psi_{\text{tot}} - e^{ikz} \\ &\approx \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)\end{aligned}\quad (26.8)$$

となり、関数 $f(\theta)$ が決定される：

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)\quad (26.9)$$

この $f(\theta)$ を散乱振幅と呼ぶ。

これまでのところ、散乱過程は弾性散乱を考えており、粒子はエネルギーを失ったり、他の粒子に変化したりすることは無いとした。しかしながら、非弾性散乱では粒子の吸収などで粒子の存在確率が減少する場合がある。この効果は散乱後の外向き球面波にのみ影響を及ぼす。散乱後の全波動関数 (26.8) を見ると、確かに外向き球面波に散乱の効果である位相差 δ_l が表れている。したがって、非弾性散乱では外向き球面波の確率減少するので、 $0 \leq \eta_l \leq 1$ となる η_l を導入し、

$$\psi_{\text{tot}} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \left(\eta_l e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right),$$

となるとして良い。こうして、散乱振幅は

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} (2l+1) (\eta_l e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)\quad (26.10)$$

となる。

§§26.1.5 散乱微分断面積

散乱波の波動関数がわかったので、散乱がどのような結果に導くか、古典力学で見たのと同様に、散乱微分断面積を通して理解しよう (図 88)。散乱微分断面積 $d\sigma$ は、単位時間あたりに (θ, φ) 方向の微小立体角 $d\Omega$ の範

囲に散乱される粒子数を、単位時間に単位面積あたりを通過してくる入射粒子数で割った比として定義される。

$$d\sigma = \frac{(\theta, \varphi) \text{ 方向の } d\Omega \text{ の範囲に単位時間あたりに散乱される粒子数}}{\text{単位時間単位面積あたりの入射粒子数}} \\ = \frac{\text{散乱粒子が単位時間に面積要素 } dS \text{ を通過する確率}}{\text{入射粒子の確率の流れの密度}}$$

弾性散乱では波数 k または運動量 $p = \hbar k$ の大きさは散乱の前後で変わらないので、入射粒子の質量（換算質量）を μ として、

$$\begin{aligned} \text{(分母)} &= \left| \frac{\hbar}{2i\mu} (\psi_{\text{inc}}^* \nabla \psi_{\text{inc}} - \nabla \psi_{\text{inc}}^* \psi_{\text{inc}}) \right| = \frac{\hbar k}{\mu} \equiv v \\ \text{(分子)} &= v |\psi_{\text{scat}}|^2 dS = v |f(\theta)|^2 d\Omega \end{aligned}$$

となる。ここで v は入射粒子の速さであり、 $dS = r^2 d\Omega$ を用いた。こうして、散乱微分断面積の定義に代入すると、散乱微分断面積は散乱振幅のみで表すことができる：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (26.11)$$

こうして、散乱振幅として (26.10) を代入し、全立体角で積分すると全弾性散乱断面積 σ_{elastic} が得られる。ルジャンドル多項式 $P_l(\cos \theta)$ の規格直交性を用いると、

$$\sigma_{\text{elastic}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |\eta_l e^{2i\delta_l} - 1|^2 \quad (26.12)$$

が得られる。

得られた全弾性散乱断面積における角運動量の大きさ l の部分波の寄与を古典的に解釈しておこう。古典的には角運動量 L は無限遠方での入射粒子の速さ v_{in} と衝突係数 b によって

$$L = \mu v_{\text{in}} b$$

と書けた。ここで μv_{in} は運動量であるので、量子論的には $\hbar k$ と書かれる。よって、先の式は $L = \mu v_{\text{in}} b = \hbar k b$ となる。すなわち、

$$b(\equiv b_l) = \frac{L}{\hbar k} = \frac{\hbar l}{\hbar k} = \frac{l}{k}$$

となる。よって、角運動量 $l+1$ を持つ粒子の軌跡と l の軌跡の間の面積 ΔS は

$$\Delta S = \pi b_{l+1}^2 - \pi b_l^2 = \pi \frac{(l+1)^2}{k^2} - \pi \frac{l^2}{k^2} = \frac{\pi}{k^2} (2l+1)$$

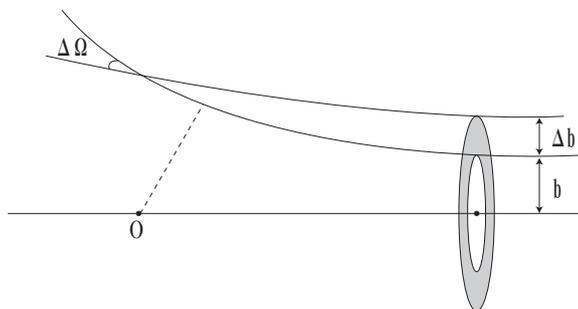


図 88:

となる。この因子が量子力学的な全弾性散乱断面積 (26.12) に表れている。残りの $|\eta e^{2i\delta_l} - 1|^2$ は波動性から起因していると考えられる。ただし、因子 $(2l+1)$ は角運動量の大きさ l の波動関数の縮退度 (z 射影 $l_z = -l, -l+1, \dots, l$) であるので、古典的な解釈は必要ないが、幾何学的には古典的な解釈が見やすい。

次に、非弾性散乱の全断面積を見ておこう。 $\eta_l \neq 1$ の時には非弾性散乱も起きており、非弾性散乱の全断面積を求める必要がある。今、全波動関数 ψ_{tot} で、 η_l により外向き球面波の振幅が減少している。すなわち、弾性散乱では 1 であった外向き球面波の確率が $|\eta_l|^2$ になっているので、もとの入射粒子は散乱により $1 - |\eta_l|^2$ だけその確率が減少している。よって、この非弾性過程による全断面積 $\sigma_{\text{inelastic}}$ は、確率の減少分として、

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{inelastic}} &= \int \frac{v|\psi_{\text{tot}}^{\text{内向き}}|^2}{v} dS - \int \frac{v|\psi_{\text{tot}}^{\text{外向き}}|^2}{v} dS \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1)(1 - |\eta_l|^2)\end{aligned}\quad (26.13)$$

となる。ここで、 $\psi_{\text{tot}}^{\text{内向き}}$ 、 $\psi_{\text{tot}}^{\text{外向き}}$ は、全波動関数のうち内向き球面波、および外向き球面波の部分それぞれを表す。

こうして散乱過程の全断面積 σ は

$$\begin{aligned}\sigma &= \sigma_{\text{elastic}} + \sigma_{\text{inelastic}} \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1)(2 - S_l - S_l^*) \\ S_l &\equiv \eta_l e^{2i\delta_l}\end{aligned}\quad (26.14)$$

と書ける。

最後に、前方の散乱振幅 $f(\theta = 0)$ を見ておこう。このとき、

$$\begin{aligned}f(0) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} (2l+1)(\eta_l e^{2i\delta_l} - 1) \\ &= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i(1 - S_l)\end{aligned}$$

と書き表される。全断面積 (26.14) と比較すると、前方散乱の散乱振幅 $f(0)$ の虚数部 $\text{Im } f(0)$ は

$$\text{Im } f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma$$

と表される。これを光学定理と呼ぶ。

§§26.1.6 数学的補遺-ベッセル関数-

散乱問題ではベッセル関数が利用されるので、ここで簡単に纏めておこう。まず、ベッセル関数に進む前に、ガンマ関数について記しておこう。ガンマ関数 $\Gamma(z)$ は

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{z-1} dx$$

で定義される。積分を実行することと、部分積分を行なうことにより

$$\Gamma(1) = 1, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$$

が得られる。最後の式はガンマ関数の定義から、部分積分を用いて示される。特に n が正の整数であるときには、 $\Gamma(n+1) = n!$ のように、階乗 ($n! = n(n-1)(n-2)\cdots 2 \cdot 1$) で書ける。

次にベッセル関数 $J_\nu(x)$ を導入する。ベッセル関数はその母関数 $K(x, t)$ から

$$K(x, t) \equiv e^{\frac{x}{2}(t - \frac{1}{t})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n \quad (26.15)$$

により導入される。ただし、 ν を整数 n とした。整数でない場合は後に議論する。このベッセル関数は、次のベッセル微分方程式を満たす。ただし、以下での ν は整数に限らない：

$$\frac{d^2 J_\nu(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dJ_\nu(x)}{dx} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) J_\nu(x) = 0 \quad (26.16)$$

以下では種々の漸化式を導くために、(26.15) で定義されている $J_n(x)$ がベッセル微分方程式 (26.16) を満たすことを示そう。母関数展開 (26.15) の両辺を t で微分すると $\frac{\partial K}{\partial t} = \frac{x}{2} \left(1 + \frac{1}{t^2}\right) K = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n J_n(x) t^{n-1}$ となるが、中辺の K に再び展開式 (26.15) を代入して両辺 t のべきで比較すると

$$\frac{2n}{x} J_n(x) = J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) \quad (26.17)$$

という漸化式が得られる。また、 t の代わりに x で微分すると $\frac{\partial K}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(t - \frac{1}{t}\right) K = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{dJ_n(x)}{dx} t^n$ となり、中辺に展開式を再び用いて t のべきで比較すると

$$\frac{dJ_n(x)}{dx} = \frac{1}{2} (J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x)) \quad (26.18)$$

が得られる。さらに、(26.17)、(26.18) から $J_{n-1}(x)$ または $J_{n+1}(x)$ を消去すると

$$\left(\frac{n}{x} - \frac{d}{dx}\right) J_n(x) = J_{n+1}(x), \quad \left(\frac{n}{x} + \frac{d}{dx}\right) J_n(x) = J_{n-1}(x)$$

がそれぞれ得られる。従って、

$$\left(\frac{n}{x} - \frac{d}{dx}\right) \left(\frac{n}{x} + \frac{d}{dx}\right) J_n(x) = \left(\frac{n-1}{x} - \frac{d}{dx}\right) J_{n-1}(x) = J_n(x)$$

となる。一方、左辺の括弧の積を先に計算すると

$$\left(\frac{n}{x} - \frac{d}{dx}\right) \left(\frac{n}{x} + \frac{d}{dx}\right) J_n(x) = \left(\frac{n(n-1)}{x^2} + \frac{n-1}{x} \frac{d}{dx} + \left(\frac{n}{x^2} - \frac{n}{x} \frac{d}{dx}\right) - \frac{d^2}{dx^2}\right) J_n(x)$$

となるので、右辺同士等しいとおいて整理すると

$$\frac{d^2 J_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dJ_n(x)}{dx} + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right) J_n(x) = 0$$

が得られる。これはベッセル微分方程式 (26.15) で $\nu = n$ としたものである。よって、 $J_n(x)$ はベッセル微分方程式を満たしている。

次に、ベッセル微分方程式を解こう。今、(26.15) で $J_\nu(x)$ のかわりに $u(x)$ と書くことにする。ここで、

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{k+\alpha}, \quad (c_0 \neq 0)$$

と、 x のべき展開の形に置いてみよう。これをベッセル微分方程式に代入して、 x のべきで比較すると

$$x^{\alpha-2} : (\alpha^2 - \nu^2)c_0 = 0, \quad (26.19)$$

$$x^{\alpha-1} : ((\alpha+1)^2 - \nu^2)c_1 = 0, \quad (26.20)$$

$$x^{\alpha+k-2} \quad (k \geq 2) : ((\alpha+k)^2 - \nu^2)c_k + c_{k-2} = 0, \quad (26.21)$$

が得られる。ここで、 $c_0 \neq 0$ としているので、

$$\alpha = \pm\nu, \quad c_1 = 0, \quad c_k = -\frac{1}{(\alpha+k-\nu)(\alpha+k+\nu)}c_{k-2}$$

が得られる。ただし、最後の漸化式では $c_1 = 0$ から k は偶数である。あらためて k を $2k$ と書こう。ここで、 $\alpha = \nu \equiv n$ (正の整数) とし、 $c_0 = \frac{1}{2^n n!}$ とすると c_k についての漸化式は解けて、

$$c_{2k} = -\frac{1}{2^{2k}(k+n)}c_{2(k-1)} = \cdots = \frac{(-1)^k n!}{2^{2k} k! (k+n)!} c_0 = \frac{(-1)^k}{k!(k+n)!} \frac{1}{2^{n+2k}}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

となる。こうして、

$$u(x) \equiv J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{k+n} = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{n+2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(k+n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k} \quad (26.22)$$

のように、級数解が得られた。もちろん、この $J_n(x)$ は母関数 (26.15) から得られるものに一致する。母関数からは

$$\begin{aligned} K(x, t) = e^{\frac{x}{2}(t-\frac{1}{t})} &= e^{\frac{x}{2}t} e^{-\frac{x}{2t}} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(\frac{xt}{2}\right)^r \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{x}{2t}\right)^k = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{x}{2}\right)^{r+k} \cdot \frac{t^{r-k}}{r!k!} \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} J_n(x) \cdot t^n \end{aligned}$$

となるはずであるので、 $r-k=n$ において和を取り直して最後の両辺を比較すると (26.22) が再び得られる。実は両者が一致するように c_0 の値を選んだのである。

最後に、 $\alpha = \nu$ で、 ν が整数で無いときを考えよう。このときには、今まで表れた階乗をガンマ関数で置き直せば矛盾無く上の議論はそのまま使える。実際、 c_k についての漸化式を解く際に

$$c_0 = \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu+1)}$$

と取ると、

$$\begin{aligned} c_{2k} &= \frac{-1}{2^{2k}(k+\nu)}c_{2(k-1)} = \cdots = \frac{(-1)^k}{2^{2k} k! (k+\nu)(k+\nu-1)\cdots(1+\nu)}c_0 \\ &= \frac{(-1)^k \Gamma(\nu+1)}{2^{2k} k! \Gamma(\nu+k+1)} \cdot \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu+1)} = \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^{\nu+2k} \end{aligned}$$

が得られるので、最終的にベッセル関数は

$$J_\nu(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2k} \quad (26.23)$$

が得られる。これを第 1 種のベッセル関数と呼ぶ。

ベッセルの微分方程式は2階線形常微分方程式であるので、一般解としては線形独立な2つの解を持つはずである。 ν が整数で無いときには $\alpha = \pm\nu$ であったので

$$J_{-\nu}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(-\nu + k + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu+2k}$$

が $J_{\nu}(x)$ とともに線形独立な2つの解を与える。しかしながら ν が整数 n のときには $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$ という関係があり、2つは独立でない。このことを簡単に見ておこう。母関数展開で t の代わりに $-1/t$ とすると

$$e^{\frac{x}{2}(-\frac{1}{t}+t)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \left(\frac{-1}{t}\right)^n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{-n}(x) \cdot (-1)^{-n} t^n$$

となる。ここで、最右辺では、 n を $-n$ として和を書き直した。こうして、 $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$ が得られる。

このときには独立なもう一つの解として

$$Y_{\nu}(x) = \frac{J_{\nu}(x) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu\pi}$$

を取る。この $Y_{\nu}(x)$ は第2種ベッセル関数、またはノイマン関数と呼ばれる。また、線形独立な解を $J_{\nu}(x)$ と $Y_{\nu}(x)$ の代わりに

$$H_{\nu}^{(1)}(x) \equiv J_{\nu}(x) + iY_{\nu}(x), \quad H_{\nu}^{(2)}(x) \equiv J_{\nu}(x) - iY_{\nu}(x)$$

と取ることがある。これをそれぞれ第1種、第2種のハンケル関数と呼ぶ。

ここからは半整数(半奇数)次の第1種ベッセル関数について見ておこう。ガンマ関数を順次、次数の低いガンマ関数に落としていくことにより $\nu = 1/2$ のときには

$$\begin{aligned} J_{\frac{1}{2}}(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k + \frac{1}{2} + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)!} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x \end{aligned} \quad (26.24)$$

のように書ける。同様に

$$J_{-\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x \quad (26.25)$$

となる。

一般の $\nu = l + 1/2$ (l は自然数)に対してベッセル関数の漸近形を与えておこう。漸化式(26.17) $J_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} J_{\nu}(x) - J_{\nu-1}(x)$ を繰り返し用いると、 $J_{-\frac{1}{2}}(x)$ と $J_{\frac{1}{2}}(x)$ とから $J_{\frac{3}{2}}(x)$ 、 $J_{\frac{5}{2}}(x) \cdots$ が得られる。実際、

$$\begin{aligned} J_{\frac{3}{2}}(x) &= \frac{1}{x} J_{\frac{1}{2}}(x) - J_{-\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\frac{1}{x} \sin x - \cos x\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\cos(x-\pi) - \frac{1}{x} \sin(x-\pi)\right) \\ J_{\frac{5}{2}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\frac{3}{x} \left(\cos(x-\pi) - \frac{1}{x} \sin(x-\pi)\right) - \sin x\right] = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\left(1 - \frac{3}{x^2}\right) \cos\left(x - \frac{3\pi}{2}\right) - \frac{3}{x} \sin\left(x - \frac{3\pi}{2}\right)\right] \end{aligned}$$

一般に、 $\nu = n + 1/2$ に対して

$$J_{\nu}(x) = J_{n+\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[U_{\nu}(x) \cos\left(x - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) - V_{\nu}(x) \sin\left(x - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right]$$

$$\begin{aligned} \Gamma(k + \frac{1}{2} + 1) &= (k + \frac{1}{2}) \Gamma(k + \frac{1}{2}) = \cdots = (k + \frac{1}{2})(k - \frac{1}{2})(k - \frac{3}{2}) \cdots (k - \frac{2k-1}{2}) \Gamma(\frac{1}{2}) = (2k+1)(2k-1) \cdots 1 \cdot \frac{1}{2^{k+1}} \sqrt{\pi} = \\ &= \frac{(2k+1)!}{k! 2^{2k+1}} \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

と書ける。ここで、 $U_\nu(x)$ 、 $V_\nu(x)$ は $\frac{1}{x}$ の多項式で $|x| \rightarrow \infty$ のときには、

$$U_\nu(x) = 1 - \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)}{2!(8x)^2} + \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)(4\nu^2 - 7^2)}{4!(8x)^4} + \dots$$

$$V_\nu(x) = \frac{4\nu^2 - 1^2}{1!8x} - \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)}{3!(8x)^3} + \dots$$

となることが知られている。したがって、大きな x に対しては

$$J_\nu(x) = J_{n+\frac{1}{2}}(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{2}\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{n\pi}{2}\right) \quad (26.26)$$

が得られる。この漸近形は、遠心力による散乱位相差の解析 (26.3) において既に用いられている。

§ 26.2 遅い粒子の散乱—散乱長と有効距離—

§§26.2.1 散乱長

本節では入射粒子のエネルギーが小さい、遅い場合の散乱を考えよう。散乱ポテンシャルが $U(r)$ であるときのシュレーディンガー方程式を再び記しておこう。

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi = 0 \quad (26.27)$$

エネルギーの小さな遅い粒子が入射してきた場合には、エネルギーが小さいため角運動量が $l=0$ の場合以外では遠心力ポテンシャル $U_{\text{遠心力}} \propto \frac{l(l+1)}{r^2}$ のため散乱中心に近づけない。よって、入射粒子の速さが遅いときには $l=0$ の場合のみ考えれば良い。こうして、シュレーディンガー方程式 (26.27) で $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$ とおくと

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) + k^2 u(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) u(r) = 0,$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \quad (26.28)$$

と変形される。十分遠方では散乱ポテンシャルの影響は消え、 $U(r) \rightarrow 0$ としてよいので、十分遠方ではシュレーディンガー方程式の解は、(26.28) で $U(r) \approx 0$ と置いて

$$u(r) \approx \sin(kr + \delta_0)$$

と書ける。ここで、 δ_0 はフェーズシフトである。遠方でこの $u(r)$ と一致し、原点で発散せずに例えば 1 に規格化された波動関数を $v(r)$ と書くと

$$v(r) = \frac{\sin(kr + \delta_0)}{\sin \delta_0} \quad (26.29)$$

となることがわかる。今、入射粒子のエネルギー E は小さいので波数 k も小さく、 $k \rightarrow 0$ で

$$v = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{\sin \delta_0} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin kr \cos \delta_0 + \cos kr \sin \delta_0}{\sin \delta_0}$$

$$= 1 - \frac{r}{a}$$

$$\frac{1}{a} \equiv - \lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \quad (26.30)$$

となる。ここで、 $k \ll 1$ で $\cos kr \approx 1$ と $\sin kr \approx kr$ を用いた。遅い粒子であるので散乱の影響も小さく、位相差 δ_0 も小さいことが期待される。よって、 $\cot \delta_0 = \frac{\cos \delta_0}{\sin \delta_0} \approx \frac{1}{\delta_0}$ から (26.30) は

$$a \approx -\frac{\delta_0}{k}$$

となる。散乱の断面積 σ は (26.12) から $l=0$ でかつ完全弾性散乱であるので $\eta_0 = 1$ より

$$\sigma = \left[\frac{\pi}{k^2} |e^{2i\delta_0} - 1|^2 \right]_{k \rightarrow 0} \approx \left[\frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \right]_{k \rightarrow 0} \approx \left[\frac{4\pi}{k^2} \delta_0^2 \right]_{k \rightarrow 0} = 4\pi a^2$$

となる。すなわち、散乱の全断面積は、半径 a の球の表面積に等しい。この a を散乱長と呼ぶ。粒子が遅いので、散乱半径 a の球の表面から波動が舐めるように影響され、断面積に結果すると言えよう^{||}。

また、散乱振幅 $f(\theta)$ は (26.9) で $l=0$ として

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) \approx \frac{\delta_0}{k} = -a$$

と得られ、角 θ によらず等方的である。§§24.1.2 で調べたように、散乱位相差が負であると斥力、正であると引力であったので、上式から散乱長 a の正負で読み直すと、

$$\begin{aligned} a > 0 &\longrightarrow \delta_0 < 0, & \text{斥力} \\ a < 0 &\longrightarrow \delta_0 > 0, & \text{引力} \end{aligned} \quad (26.31)$$

となる。

§§26.2.2 有効距離

十分小さいエネルギー、すなわち波の波数 k が 0 の極限での散乱位相差 δ_0 は散乱長 a で表わされた。ここでは、 k が小さいとして散乱位相差を考えたときの k の次の次数を考えよう。今、小さいエネルギー E_1, E_2 に対応する波動関数 $\psi = u/r$ において、関数 u を u_1, u_2 としておく。今、 r に関する微分を $'$ で表わす。すなわち、 $u' = \frac{du}{dr}$ 等である。シュレーディンガー方程式 (26.28) は

$$\begin{aligned} u_1'' + k_1^2 u_1 - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) u_1 &= 0 \\ u_2'' + k_2^2 u_2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) u_2 &= 0 \\ k_i &\equiv \frac{\sqrt{2\mu E_i}}{\hbar} \end{aligned}$$

と書ける。上式に u_2 、下式に u_1 を掛けて辺々引き算し、 r について 0 から無限大まで積分すると

$$[u_2 u_1' - u_1 u_2']_0^\infty = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty u_1 u_2 dr \quad (26.32)$$

が得られる。ただし、原点 $r=0$ で波動関数 $\psi = \frac{u(r)}{r}$ は発散しないので、 $u_1(0) = u_2(0) = 0$ でなければならない。一方、(26.29) 式のように $U(r) \rightarrow 0$ の解を v で表わすと、

$$u_1 \rightarrow v_1 = \frac{\sin(k_1 r + \delta_0)}{\sin \delta_0}, \quad u_2 \rightarrow v_2 = \frac{\sin(k_2 r + \delta_0)}{\sin \delta_0}$$

^{||} 古典的には半径 a の剛体球による散乱では、剛体球を見込む面積 πa^2 が散乱断面積であった。

であるので、(26.32)と同様に

$$[v_2 v_1' - v_1 v_2']_0^\infty = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty v_1 v_2 dr \quad (26.33)$$

が得られる。ただし、 u のときとは違い、 $v_1(0) = v_2(0) = 1$ を満たす。また、 $r \rightarrow \infty$ ではポテンシャル $U(r)$ は $U(r) \rightarrow 0$ であるので、 $r \rightarrow \infty$ では $u_i(r)$ と $v_i(r)$ は一致する。これらの事実を用いて、(26.33) から (26.32) を引き算し、 $u_i(0)$ 、 $v_i(0)$ の値を用いると

$$v_2'(0) - v_1'(0) = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty (v_1 v_2 - u_1 u_2) dr \quad (26.34)$$

が得られる。ここで、 $k_1 \rightarrow 0$ とし、 $k_2 = k$ と書くと、(26.30) を用いて

$$v_2'(0) = \left. \frac{k \cos(kr + \delta_0)}{\sin \delta_0} \right|_{r=0} = k \cot \delta_0, \quad v_1'(0) = \lim_{k_1 \rightarrow 0} \left. \frac{k_1 \cos(k_1 r + \delta_0)}{\sin \delta_0} \right|_{r=0} = \lim_{k_1 \rightarrow 0} k_1 \cot \delta_0 = -\frac{1}{a}$$

であるので、(26.34) は

$$\begin{aligned} k \cot \delta_0 &= -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty (v_1 v_2 - u_1 u_2) dr \\ &\equiv -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} k^2 \rho(0, E) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\rho(0, E)$ を定義した。十分低いエネルギーでは、関数 v_i 、 u_i ともにエネルギーが 0、すなわち波数が 0 の極限をとった関数 v_0 、 u_0 で近似して

$$\begin{aligned} k \cot \delta_0 &\approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} k^2 r_e \\ r_e &\equiv \rho(0, 0) = 2 \int_0^\infty (v_0^2 - u_0^2) dr \end{aligned} \quad (26.35)$$

と書ける。こうして、散乱位相差 δ_0 は k^2 までで近似された。ここで導入された r_e を有効距離と呼ぶ。

このように、ポテンシャルによる散乱の情報は散乱位相差 δ_l で特徴付けられるが、角運動量 $l = 0$ を持つ遅い粒子の散乱では、散乱位相差 δ_0 は散乱長 a と有効距離 r_e の 2 つの量で特徴付けられる。量が 2 つであるので、ポテンシャルの深さと広がり の 2 つの量を適当に選ぶと、遅い粒子の散乱のデータを再現できることを意味する。この近似は、ポテンシャルの形によらず深さと広がりだけで決まることから、形に依らない近似と呼ばれる。

§ 26.3 弱い摂動としての散乱

§§ 26.3.1 ボルン近似

散乱ポテンシャル $U(r)$ が弱い摂動とみなすことのできる場合を考察しよう。時間に依存する摂動論 §23.3.3 において、遷移確率として (25.21) を導いた。今、散乱ポテンシャル $U(r)$ を摂動として扱っているので、遷移確率 dw は

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\lambda V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\rho_f \quad (26.36)$$

だった。ここで、 i, f はそれぞれ初期状態、終状態を表す添え字である。ここで、

$$\begin{aligned}\lambda V_{fi} &= \int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}} d^3\mathbf{r} \\ \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (\delta\text{-関数で規格化}) \\ \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (\text{入射波の流れの密度を1に規格化}) \\ d\rho_f &= d^3\mathbf{p}, \quad (\text{終状態の運動量空間での体積要素}) \\ \delta(E_f - E_i) &= \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) = 2m\delta(p'^2 - p^2)\end{aligned}$$

と書ける。ただし、波動関数の規格化は上式に示したとおりにとることとする。今、立体角を Ω と記すと $d^3\mathbf{p}' = dp'_x dp'_y dp'_z = p'^2 dp' d\Omega = \frac{p'}{2} d(p'^2) d\Omega$ であるので、遷移確率 (26.36) は p'^2 について積分してしまうと散乱部分断面積 $d\sigma$ が得られ、

$$\begin{aligned}d\sigma = \int dw_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \psi_{\mathbf{p}'}^* U \psi_{\mathbf{p}} d^3\mathbf{r} \right|^2 \cdot \int \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) \frac{p'}{2} d(p'^2) d\Omega \\ &= \frac{2\pi m p}{\hbar} \left| \int \psi_{\mathbf{p}'}^* U \psi_{\mathbf{p}} d^3\mathbf{r} \right|^2 d\Omega \\ &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int U(r') e^{-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\cdot\mathbf{r}'/\hbar} d^3\mathbf{r}' \right|^2 d\Omega\end{aligned}\quad (26.37)$$

となる。この結果はボルン近似として知られているものに一致している。散乱微分断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ が (26.11) のように散乱振幅 $f(\theta)$ の絶対値の2乗であらわされることから、

$$\begin{aligned}|f(\theta)| &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int U(r') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}' \right| \\ \mathbf{q} &\equiv \frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar}\end{aligned}\quad (26.38)$$

と表される[†]。

今、中心対称場を扱っているので、散乱断面積 (26.37) の中の因子で

$$\begin{aligned}\int U(r') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} &= \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi \sin\theta' d\theta' U(r') e^{-iqr' \cos\theta'} \\ &= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr' \cdot r' \sin(qr') U(r')\end{aligned}$$

となる。よって (26.38) では、

$$|f(\theta)| = \frac{2m}{\hbar^2 q} \left| \int_0^\infty U(r') \sin(qr') \cdot r' dr' \right| \quad (26.39)$$

[†] 散乱後の波動関数 ψ を $U(r) = 0$ での波動関数 $\psi^{(0)}$ と $U(r)$ が摂動項として影響をもたらしたときの1次の波動関数を $\psi^{(1)}$ として、 $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ のように表して摂動論により $\psi^{(1)}$ を求めると、 $\psi^{(1)}(r) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(r') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' + k|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)} d^3\mathbf{r}'$ と得られることを示すことができる。さらに、 $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| = \sqrt{r^2 - 2rr' \cos\theta + r'^2} = r\sqrt{1 - \frac{2r'}{r} \cos\theta + \frac{r'^2}{r^2}} \approx r\left(1 - \frac{r'}{r} \cos\theta\right) = r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}'$ と近似されるので散乱後の運動量の方向 \mathbf{n}' から $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$ とすると、散乱振幅 $f(\theta)$ は $\psi^{(1)} \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(r') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}' \equiv \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta)$ から、 $f(\theta) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}'$ となる。ここで、 $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$ 等から、散乱振幅 $f(\theta)$ の絶対値の2乗をとることから、散乱断面積 $d\sigma$ が再び得られる。

と書ける。ただし、 r が散乱中心から十分離れた $r \gg 1$ の場合である。ここで、 a を場の作用半径（散乱のポテンシャル $U(r)$ が有効な距離）として、さらに近似しよう。

(a) $ka \ll 1$ （遅い粒子）

このとき、 $r \leq a$ でなければポテンシャルの影響は小さいとして、 $\sin(qr) \approx qr$ とすると、(26.39) は

$$|f(\theta)| = \frac{2m}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty U(r') r'^2 dr' \right|$$

となる。右辺は角 θ に依存しなくなるので、散乱は等方的であり、これは遅い粒子の散乱で散乱長 a を求めた場合と同じ結論である。

(b) $ka \gg 1$ （速い粒子）

このとき、 $|f(\theta)|$ の右辺の被積分関数の中の $\sin qr'$ は、 k すなわち q が大きいことから r' の変化に伴い激しく振動する。従って、 r' に関する積分は、正負に激しく振動する $\sin qr'$ の因子により殆ど 0 である。積分に寄与するのは q が 0 に近い場合、すなわち k と k' がほぼ同じ方向にある場合だけである。入射粒子の運動方向からみて、角度にして $\Delta\theta \sim \frac{1}{ka}$ 程度に散乱が起きる前方散乱となる。

§§26.3.2 ラザフォード散乱

前小節の例として、電荷 Ze を持つ原子核による電荷 ze の粒子の散乱、すなわち、クーロン場 $U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zze^2}{r}$ による散乱を考えてみよう。これは、ラザフォード散乱として古典的にも考察した現象である (§8.4)。ボルン近似の結果 (26.38) は

$$|f(\theta)| = \frac{mZze^2}{2\pi\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \left| \int \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}}{r'} d^3\mathbf{r}' \right|$$

となる。右辺の積分は $\int \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}}{r'} d^3\mathbf{r}' = \frac{4\pi}{q^2}$ となるので[‡] $|f(\theta)|$ は

$$|f(\theta)| = \frac{mZze^2}{2\pi\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{4\pi}{q^2}$$

となる。ここで、 $k' \equiv |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| \equiv k$ より $q^2 = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2 = 2k^2 - 2k^2 \cos\theta = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$ となる。また、 $v \equiv \frac{\hbar k}{m}$ で速度 v を導入すると、前式は

$$|f(\theta)| = \frac{1}{2mv^2} \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

となる。こうして、散乱振幅が求まったので、散乱の微分断面積 $d\sigma$ は

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \left(\frac{1}{2mv^2} \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega$$

と得られる。これは古典力学で求めた微分断面積と一致している。§8.4 では電荷 Ze に対するアルファ粒子の散乱を考えたので、上式で $z = 2$ としたものである。

[‡] 今、 $\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \frac{1}{r} = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$ と、 $1/r$ の微分がデルタ関数で表わされる。ここで、 $1/r$ のフーリエ変換を $\varphi_{\mathbf{q}}$ と表わすと、 $\frac{1}{r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{q}$ 、 $\varphi_{\mathbf{q}} = \int \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$ と書ける。また、デルタ関数のフーリエ変換表示 $\delta^3(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{q}$ にも注意する。こうして、微分を実行した式 $\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \frac{1}{r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \varphi_{\mathbf{q}} (-q^2) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{q}$ と、左辺の $1/r$ の微分がデルタ関数となるという事実から、デルタ関数のフーリエ変換表示を用いて両辺比較すると $\varphi_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{q^2}$ が得られる。

27章 相対論的粒子の方程式

これまでは光速 c よりも小さな速度しか扱わない非相対論的な世界での量子論を構成してきたが、相対論的な粒子に対する量子力学の波動方程式を考察しておこう。ただし、相対論ではエネルギー E と質量 m の関係、 $E = mc^2$ から、エネルギーが十分高い場合にはエネルギーが質量に転化し、粒子が生成されることになる。したがって、相対論的な波動方程式を書き下しても、粒子の生成・消滅を考慮に入れなければならない、相対論的な扱いでは本質的に多粒子問題（多体問題）を扱わなければならないことになる。こうして、1つの粒子を見出す確率、あるいは決まった個数の粒子のセットを見いだす確率を問題にしていた量子力学では不十分で、粒子の生成・消滅まで扱う場の量子論に進まなければならない。場の量子論では粒子を表す場を量子化して、粒子性と波動性を統一的に扱うことになる。ここでは詳細に立ち入らないことにし、相対論的な粒子が従う方程式を考察することにする。

§ 27.1 相対論的粒子の方程式

特殊相対論ではエネルギー E と運動量 \mathbf{p} 、質量 m の間に

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

の関係があった。量子力学ではエネルギーはハミルトニアンに対応し、波動関数にハミルトニアンを作用させる演算は時間微分に虚数単位 i を掛けたものを作用させる演算に等値された。運動量は運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ になった。まとめておくと

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

と対応させれば良いことがわかる。こうして相対論でのエネルギー、運動量、質量の関係は

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + m^2 c^4$$

となる。もちろん微分演算は量子論の波動関数 ϕ に作用するべきであるので、相対論的な波動方程式として、

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \right) \phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (27.40)$$

が得られる。これをクライン・ゴールドン方程式と呼ぶ。この方程式は相対論的な記法を用いると見やすい形になる。微分演算子を

$$\partial_\mu \equiv \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)$$

とし、和に関してアインシュタインの記法 $\partial_\mu \partial^\mu \equiv \sum_{\mu=0}^3 \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2}$ を用いると、(27.40) は

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi = 0 \quad (27.41)$$

のようになる。この方程式に従う実場 $\phi(\mathbf{r}, t)$ で記述される粒子は、スピン0の粒子であることが、場の量子論により理解されている。

クライン・ゴールドン方程式は時間・空間について2階の微分方程式である。非相対論的なシュレーディンガー方程式は時間については1階の微分方程式であった。そこで、今度は時間について1階の相対論的な波動方程

式を探してみよう。相対論では時間・空間は対等に扱うので、空間微分も1階でなければならない。また、時間・空間に関して1階微分方程式としての波動方程式は、相対論の関係 $E = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ を満たさなければならない。すなわち、時間・空間に関してもう一度微分した形では、クライン・ゴールドン方程式に帰着せねばならないということである。そこで、係数を γ^μ として、相対論的な記法で波動方程式を次のように仮定しよう。

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

この波動方程式の解もクライン・ゴールドン方程式を満たし、エネルギー・運動量・質量の間のアインシュタインの関係式を満たすことを条件とするために、上の式の左から $i\gamma^\nu \partial_\nu + \frac{mc}{\hbar}$ を掛けると

$$\begin{aligned} \left(i\gamma^\nu \partial_\nu + \frac{mc}{\hbar}\right) \left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}, t) &= \left(-\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left(-\frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) \partial_\mu \partial_\nu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

と書き表される。ここで、1行目から2行目へは和の記号 μ と ν を入れ替えたものを加えて2で割り、 x^μ と x^ν の微分は交換 ($\partial_\mu \partial_\nu = \partial_\nu \partial_\mu$) することを用いた。この式がクライン・ゴールドン方程式 (27.41) を満たすためには

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

が成り立たなければならない。これを満たすには、 γ^μ としては最低 4×4 行列を取らなければならない。たとえば、 $\mathbf{1}$ を 2×2 の単位行列、 σ^i ($i = 1, 2, 3$) を 2×2 のパウリ行列として

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

ととれば良い。もう一度纏めておこう。

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{27.42}$$

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

この波動方程式をディラック方程式とよび、行列 γ^μ をディラック行列と呼ぶ。ディラック行列が 4×4 行列になっているので、波動関数 ψ は4成分持たねばならない。場の量子論によれば、ディラック方程式により記述される粒子はスピン $1/2$ を持つ。スピン $1/2$ であれば成分は2つでパウリスピンを構成するが、残りの2成分に関しても場の量子論によると、スピン $1/2$ を持つ反粒子を表わしている。こうして、ディラック方程式はスピン $1/2$ の粒子とその反粒子を同時に記述することになる。この4成分の量はディラックスピノールと呼ばれる量である。

電磁場 $A_\mu(\mathbf{r}, t)$ が存在する場合には、粒子の電荷を q として、運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ を $\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}$ におきかえれば良かった。相対論的な記法では、

$$i\partial_\mu \longrightarrow i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar} A_\mu$$

ということである。ここで、 $i\hbar\partial_\mu = \left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\hat{\mathbf{p}}\right)$ であり、また $A_\mu = \left(\frac{\phi}{c}, -\mathbf{A}\right)$ であり、 ϕ はスカラーポテンシアル（電位）、 \mathbf{A} はベクトルポテンシアルである。こうして、電磁場中でのディラック方程式は

$$\left[\gamma^\mu \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right) - \frac{mc}{\hbar}\right] \psi = 0$$

となる。この相対論的に構成されたディラック方程式を、非相対論的領域で妥当な形に近似してみよう。まず、左から $\left[\gamma^\nu \left(i\partial_\nu - \frac{q}{\hbar}A_\nu\right) + \frac{mc}{\hbar}\right]$ を作用させる。ここで、

$$\begin{aligned} \gamma^\nu\gamma^\mu &= \frac{1}{2}(\gamma^\nu\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^\nu) + \frac{1}{2}(\gamma^\nu\gamma^\mu - \gamma^\mu\gamma^\nu) \\ &= g^{\mu\nu} + i\sigma^{\mu\nu} \\ \sigma^{\mu\nu} &= \frac{i}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) \end{aligned} \quad (27.43)$$

となるので、 $\sigma^{\mu\nu}$ は添え字 μ, ν の入れ替えに対して符号が変わる（反対称）ことを使うと、

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\gamma^\nu \left(i\partial_\nu - \frac{q}{\hbar}A_\nu\right) + \frac{mc}{\hbar}\right] \left[\gamma^\mu \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right) - \frac{mc}{\hbar}\right] \psi \\ &= \left[\left(i\partial^\mu - \frac{q}{\hbar}A^\mu\right) \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right) - \frac{m^2c^2}{\hbar^2} + i\sigma^{\mu\nu} \left(i\partial_\nu - \frac{q}{\hbar}A_\nu\right) \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right)\right] \psi \\ &= \left[\left(i\partial^\mu - \frac{q}{\hbar}A^\mu\right) \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right) - \frac{m^2c^2}{\hbar^2} + \frac{q}{\hbar}\sigma^{\mu\nu}\partial_\nu A_\mu\right] \psi \end{aligned}$$

となる。ここで、最後の項 $\sigma^{\mu\nu}$ の反対称性から $\sigma^{\mu\nu}\partial_\nu A_\mu = \frac{1}{2}\sigma^{\mu\nu}(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu)$ とかけるが、電磁場テンソル $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ を用いると、結局

$$\left[\left(i\partial^\mu - \frac{q}{\hbar}A^\mu\right) \left(i\partial_\mu - \frac{q}{\hbar}A_\mu\right) - \frac{m^2c^2}{\hbar^2} - \frac{1}{2}\frac{q}{\hbar}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \psi = 0$$

となる。また、 $p_\mu = i\hbar\partial_\mu$ を用いて表わすと

$$\left[(p^\mu - qA^\mu)(p_\mu - qA_\mu) - m^2c^2 - \frac{\hbar}{2}q\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \psi = 0 \quad (27.44)$$

が得られる。今、波動関数がエネルギー W を持つ定常状態、すなわち $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Wt}\psi(\mathbf{r})$ であれば、(27.44) 式は

$$\left[\left(\frac{W}{c} - \frac{q}{c}\phi\right)^2 - (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 - m^2c^2 - \frac{\hbar}{2}q\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \psi = 0$$

すなわち、

$$\left(\frac{W - q\phi}{c}\right)^2 \psi = \left[(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + m^2c^2 + \frac{\hbar}{2}q\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \psi \quad (27.45)$$

と書ける。ここで、エネルギー W は質量エネルギー mc^2 とそれ以外の部分にわけて

$$W = mc^2 + E, \quad E \ll mc^2$$

としよう。このとき、(27.45) の左辺は

$$\left(\frac{W - q\phi}{c}\right)^2 = \left(mc + \frac{E}{c} - \frac{q\phi}{c}\right)^2 = m^2c^2 + 2m(E - q\phi) + \frac{1}{c^2}(E - q\phi)^2$$

となるが、第1項の m^2c^2 は(27.45)の右辺にもあり、相殺する。第3項は $E \ll mc^2$ より第2項に比べて小さいので無視すると、(27.45)は

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + q\phi(\mathbf{r}) + \frac{\hbar q}{4m} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] \psi(\mathbf{r})$$

と書ける。さて、波動関数 ψ は4成分のスピンールであったが、上の2成分 χ と、下の2成分 φ にわけて書こう。そこで、上の2成分 χ がスピン1/2を持つ我々の欲しい非相対論的な粒子であるとする。今、 $\sigma^{\mu\nu}$ を具体的に表わしておこう。 $\sigma^{\mu\nu}$ は反対称であるので、独立なものは6つである。今、添え字 i, j を1, 2, 3を表わすとして、

$$\sigma^{0i} = \frac{i}{2}(\gamma^0\gamma^i - \gamma^i\gamma^0) = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^{ij} = \frac{i}{2}(\gamma^i\gamma^j - \gamma^j\gamma^i) = \epsilon^{ijk} \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix}$$

となる。ここで、繰り返す k については1から3まで和を取る。 ϵ^{ijk} は完全反対称テンソルである[§]。こうして、

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + q\phi(\mathbf{r}) + \frac{\hbar q}{4m} (2\sigma^{0i} F_{0i} + \sigma^{ij} F_{ij}) \right] \psi(\mathbf{r})$$

となる。ここで、電場の x, y, z 成分を $E_i (i=1, 2, 3)$ 、磁束密度を B_i と書くと、電磁場テンソルとは $F_{0i} = E_i/c$ 、 $F_{12} = -B_3$ 、 $F_{23} = -B_1$ 、 $F_{31} = -B_2$ の関係がある。今、波動関数 ψ の上成分 χ のみを取り、 φ は無視すると、上式は2成分の波動方程式として

$$E\chi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + q\phi(\mathbf{r}) - \frac{\hbar q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \chi(\mathbf{r})$$

となる。ここで、スピン1/2の演算子を \mathbf{s} 、その大きさを $s (= 1/2)$ と書くと、 $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{s} = \frac{\mathbf{s}}{s}$ となるので、結局、

$$\begin{aligned} E\chi(\mathbf{r}) &= \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + q\phi(\mathbf{r}) - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \right] \chi(\mathbf{r}) \\ \hat{\boldsymbol{\mu}} &= \frac{\hbar q}{2m} \frac{\mathbf{s}}{s} \end{aligned} \quad (27.46)$$

となる。この $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ は磁気モーメントである。この方程式は §22.5 ですでに用いた。このように、相対論的に正しいスピン1/2の波動方程式から、磁気モーメントが自然に導出される。

§27.2 径路積分再考

§§27.2.1 時間発展演算子と径路積分

量子論は粒子の取り得る可能な径路をすべて足し上げることにより構成された。これが径路積分による定式化であった。そこからシュレーディンガー方程式を導いたが、今度は可能な径路を積分する代わりに、運動量などの力学量が演算子になり、演算子が作用するものとして波動関数(量子状態)の導入が必要であった。本小節では、径路積分と演算子の関係について見ておこう。まずはシュレーディンガー方程式流の演算子形式から出発しよう。

時間に依存したシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (27.47)$$

$\epsilon^{ijk} = \begin{cases} 1 & ((i, j, k) = (1, 2, 3) \text{ とその偶置換}) \\ -1 & ((i, j, k) = (3, 2, 1) \text{ とその偶置換}) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases}$

と表わされる。時刻 t での状態を $|\psi(t)\rangle$ と書くと、時刻 t_0 から t へは時間発展演算子 $\hat{U}(t, t_0)$ を導入して、

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (27.48)$$

と表わされる。この状態 $|\psi(t)\rangle$ をシュレーディンガー方程式 (27.47) に代入すると

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t, t_0) \quad (27.49)$$

が得られる。この方程式の解は容易に得られて

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right) \quad (27.50)$$

となる。微小な時間間隔 Δt を考えると、

$$\hat{U}(t+\Delta t, t) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t \quad (27.51)$$

のように Δt で展開して良いことを注意しておこう。

さて、状態 $|i\rangle$ から状態 $|f\rangle$ への遷移振幅を考えよう。初期の時刻 t_0 に状態 $|i\rangle$ であったものが、時刻 t で状態 $|f\rangle$ になっている遷移振幅は

$$\begin{aligned} \langle f|i\rangle &= \langle f|\hat{U}(t, t_0)|i\rangle \\ &= \langle f|\hat{U}(t_N, t_{N-1})\hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2})\cdots\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|i\rangle \end{aligned} \quad (27.52)$$

と書ける。ここで、時間発展演算子を、時間間隔 $t-t_0$ を微小時間間隔 $\Delta t = \frac{t-t_0}{N}$ に分割し、 $t_i = t_0 + i\Delta t$ として積の形に書いた。ここで、時間発展演算子 $\hat{U}(t_{i+1}, t_i)$ の前後に完全系

$$\int dx|x\rangle\langle x| = 1, \quad \int dp|p\rangle\langle p| = 1 \quad (27.53)$$

を挟んでいく。ここで、

$$\langle p(t_k)|\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})|x(t_k)\rangle = H(p(t_k), x(t_k))\langle p(t_k)|x(t_k)\rangle = H(p(t_k), x(t_k))\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(t_k)\cdot\mathbf{x}(t_k)} \quad (27.54)$$

であるので、微小時間間隔であることから

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_{k+1}, t_k) &= \int dp(t_k)|p(t_k)\rangle\langle p(t_k)|\hat{U}(t_{k+1}, t_k) \int dx(t_k)|x(t_k)\rangle\langle x(t_k)| \\ &= \int dp(t_k) \int dx(t_k)|p(t_k)\rangle\langle p(t_k)|x(t_k)\rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(p(t_k), x(t_k))\Delta t\right) \langle x(t_k)| \end{aligned} \quad (27.55)$$

が得られる。ここで、(27.51) を用いた。

以上により、

$$\begin{aligned} \langle f|i\rangle &= \langle f| \int dp(t_{N-1}) \int dx(t_{N-1})|p(t_{N-1})\rangle\langle p(t_{N-1})|x(t_{N-1})\rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(p(t_{N-1}), x(t_{N-1}))\Delta t\right) \langle x(t_{N-1})| \\ &\quad \times \int dp(t_{N-2}) \int dx(t_{N-2})|p(t_{N-2})\rangle\langle p(t_{N-2})|x(t_{N-2})\rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(p(t_{N-2}), x(t_{N-2}))\Delta t\right) \langle x(t_{N-2})| \cdots \\ &\quad \times \int dp(t_0) \int dx(t_0)|p(t_0)\rangle\langle p(t_0)|x(t_0)\rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(p(t_0), x(t_0))\Delta t\right) \langle x(t_0)|i\rangle \\ &= \prod_{k=0}^{N-1} \int dp(t_k) \prod_{k=0}^{N-1} \int dx(t_k) \langle f|p(t_{N-1})\rangle\langle x(t_0)|i\rangle \prod_{k=0}^{N-1} \langle p(t_k)|x(t_k)\rangle \prod_{k=1}^{N-1} \langle x(t_k)|p(t_{k-1})\rangle \\ &\quad \times \prod_{k=0}^{N-1} \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(p(t_k), x(t_k))\Delta t\right) \end{aligned} \quad (27.56)$$

となる。ここで、 $1 - \frac{i}{\hbar} H(p(t_k), x(t_k)) \Delta t \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(p(t_k), x(t_k)) \Delta t\right)$ と戻し、 $\langle x(t_k) | p(t_k) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} p(t_k)x(t_k)}$ であることを用い、さらに $|i\rangle = |x(t_0)\rangle$ 、 $|f\rangle = |x(t_N)\rangle$ とおくと、上式は

$$\langle f | i \rangle = \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dx(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} ([\mathbf{p}(t_k) \cdot (\mathbf{x}(t_{k+1}) - \mathbf{x}(t_k))] - H(p(t_k), x(t_k)) \Delta t)\right) \quad (27.57)$$

と書ける。ここで、指数関数の肩を見ると、

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{p}(t_k) \cdot (\mathbf{x}(t_{k+1}) - \mathbf{x}(t_k)) - H(p(t_k), x(t_k)) \Delta t) &= \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\mathbf{p}(t_k) \cdot \frac{\mathbf{x}(t_{k+1}) - \mathbf{x}(t_k)}{\Delta t} - H(p(t_k), x(t_k)) \right] \\ &= \int dt \left(\mathbf{p}(t) \cdot \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} - H(p(t), x(t)) \right) \end{aligned} \quad (27.58)$$

となる。さらに §§1.2 で行ったように、各時刻 t_k でスライスされた時間面での積分 $\prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dx(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$ を、径路にわたる積分 $\mathcal{D}p(t)\mathcal{D}x(t)$ に読み替えると、最終的に

$$\langle f | i \rangle = \int \mathcal{D}p(t) \int \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt [p\dot{x} - H(p, x)]\right) \quad (27.59)$$

が得られる[¶]。これは、位相空間での径路積分である。

§§27.2.2 配位空間での径路積分

今、ハミルトニアン H が

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (27.60)$$

のように、運動量に関して2次関数であるとしよう。このとき、位相空間での径路積分 (27.59) は運動量に関して積分することができる。式 (27.57) に立ち返って、運動量についての積分を実行しよう。

$$\begin{aligned} \langle f | i \rangle &= \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dx(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left([\mathbf{p}(t_k) \cdot (\mathbf{x}(t_{k+1}) - \mathbf{x}(t_k))] - \frac{p(t_k)^2}{2m} - V(x(t_k)) \Delta t \right)\right) \\ &= \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dx(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left(-\frac{1}{2m} [\mathbf{p}(t_k) - m\dot{\mathbf{x}}(t_k)]^2 + \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}(t_k)^2 - V(x(t_k)) \right) \Delta t \right) \end{aligned} \quad (27.61)$$

と書き直されるので、運動量 $p(t_k)$ 積分はフレネル積分 $\int dq e^{-i\frac{1}{2}aq^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{ia}}$ を用いて実行できる。空間が3次元であることに注意して運動量積分を実行すると

$$\langle f | i \rangle = \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dx(t_k)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{\hbar m}{i\Delta t}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - V(x(t))\right)\right) \quad (27.62)$$

[¶]初期状態 $|i\rangle$ と終状態 $|f\rangle$ が $|x(t_0)\rangle$ 、 $|x(t_N)\rangle$ でない場合には $\langle f | p(t_{N-1}) \rangle = \psi_f^*(x(t_f))$ 、 $\langle f | x(t_0) \rangle = \psi_i(x(t_0))$ として、 $\langle f | i \rangle = \int \mathcal{D}p(t) \int \mathcal{D}x(t) \psi_f^*(x(t_f)) \psi_i(x(t_0)) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt [p\dot{x} - H(p, x)]\right)$ となる。

が得られる。余分な因子まで含めて、径路についての積分として書き直すと

$$\begin{aligned}\langle f|i\rangle &= \int \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - V(x(t))\right)\right) = \int \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \\ S &= \int dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right) = \int dt L(x, \dot{x})\end{aligned}\quad (27.63)$$

とかける。これは §§1.2 で導いた配位空間での径路積分そのものである。ここで S は作用、 L はラグランジアンである。

§§27.2.3 正準量子化

位相空間での径路積分を求める際に、各時刻毎に切って、完全系を挟んでいったことを思い出そう。この導出から容易にわかることであるが、ある演算子 $\hat{F}(\hat{p}, \hat{x})$ の行列要素は

$$\langle F(p, x) \rangle \equiv \langle f|\hat{F}(\hat{p}, \hat{x})|i\rangle = \int \mathcal{D}p \int \mathcal{D}x F(p, x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt [p\dot{x} - H(p, x)]\right) \quad (27.64)$$

と得られる。今、

$$x(t) = \bar{x}(t) + \eta(t), \quad p(t) = \bar{p}(t) + \zeta(t) \quad (27.65)$$

として、 $\eta(t)$ 、 $\zeta(t)$ は小さいとして展開し、展開の1次までとると (27.64) 式は、

$$\begin{aligned}\langle F(p, x) \rangle &= \int \mathcal{D}p \int \mathcal{D}x F(\bar{p} + \zeta, \bar{x} + \eta) e^{\frac{i}{\hbar} S(\bar{p} + \zeta, \bar{x} + \eta)} \\ &= \int \mathcal{D}p \int \mathcal{D}x \left[F(\bar{p}, \bar{x}) + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} \zeta_i + \frac{\partial F}{\partial x_i} \eta_i \right) \right] \left[1 + \frac{1}{\hbar} \sum_i \left(\frac{\partial S}{\partial p_i} \zeta_i + \frac{\partial S}{\partial x_i} \eta_i \right) \right] e^{\frac{i}{\hbar} S(\bar{p}, \bar{x})} \\ &= \langle F(\bar{p}, \bar{x}) \rangle + \sum_i \zeta_i \left\langle \frac{\partial F}{\partial p_i} + \frac{i}{\hbar} F \frac{\partial S}{\partial p_i} \right\rangle + \sum_i \eta_i \left\langle \frac{\partial F}{\partial x_i} + \frac{i}{\hbar} F \frac{\partial S}{\partial x_i} \right\rangle\end{aligned}\quad (27.66)$$

となる。ここで、任意の ζ_i 、 η_i について成り立つはずなので、

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\partial F}{\partial p_i} \right\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial p_i} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial F}{\partial x_i} \right\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial x_i} \right\rangle\end{aligned}\quad (27.67)$$

が得られる。

今、 F として、時刻 t_k での運動量 $p_j(t_k)$ を取ろう。(27.67) の第1式から

$$\delta_{ij} = -\frac{i}{\hbar} \left\langle p_j(t_k) \frac{\partial S}{\partial p_i(t_k)} \right\rangle \quad (27.68)$$

が得られる。ここで、もともと、

$$S = \int dt (p\dot{x} - H) = \sum_k [p(t_k)(x(t_{k+1}) - x(t_k)) - H(p(t_k), x(t_k))\Delta t] \quad (27.69)$$

であったので、

$$\frac{\partial S}{\partial p(t_k)} = x(t_{k+1}) - x(t_k) - \frac{\partial H}{\partial p(t_k)} \Delta t \longrightarrow x(t_{k+1}) - x(t_k) \quad (27.70)$$

となる。したがって、(27.68) 式は

$$\delta_{ij} = -\frac{i}{\hbar} \langle p_j(t_k)x_i(t_{k+1}) - p_j(t_k)x_i(t_k) \rangle \quad (27.71)$$

と書ける。ここで、経路積分の導出過程 (27.56) 及び (27.55) をよく見ると、 $\langle \hat{p}\hat{x} \rangle_{t=t_k}$ を求める際には、左の \hat{p} はさらに左に挟んだ $\langle p(t_k) |$ に作用して $p(t_k)$ を与え、右の \hat{x} はさらに右に挟んだ完全系の $|x(t_k)\rangle$ に作用して $p(t_k)$ を与える。ところが、 $\langle \hat{x}\hat{p} \rangle_{t=t_k}$ を求める際には完全系のはさみ方から、左の \hat{x} は次の時刻で右に挟んだ $\langle x(t_{k+1}) |$ に作用して $x(t_{k+1})$ を与え、右の \hat{p} は同じ時刻で左に挟んだ完全系の $|p(t_k)\rangle$ に作用して $p(t_k)$ を与える。こうして、

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}\hat{p} \rangle_{t=t_k} &= \langle x(t_{k+1})p(t_k) \rangle = \langle p(t_k)x(t_{k+1}) \rangle, \\ \langle \hat{p}\hat{x} \rangle_{t=t_k} &= \langle p(t_k)x(t_k) \rangle \end{aligned} \quad (27.72)$$

が得られる。ここで、第 1 式の最後の等式は、行列要素の中の $x(t_{k+1})$ も $p(t_k)$ ももやは c -数であるので順序に依らないことを用いた。こうして、(27.71) 式は、両辺 $i\hbar$ を掛けておくと

$$\langle \hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{x}_i \rangle_{t=t_k} = i\hbar\delta_{ij} \quad (27.73)$$

となる。ここで、 $t = t_k$ は 2 つの行列要素が同時刻で取られるべきことを意味している。状態を指定せずを得られた関係であるので、これは演算子の関係として、次の等式が成り立つことを意味している。

$$\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{x}_i (= [\hat{x}_i, \hat{p}_j]) = i\hbar\delta_{ij} \quad (27.74)$$

これを正準交換関係と呼ぶ。

この関係を満たす一つの表現としては、

$$\hat{x}_i = x_i, \quad \hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (27.75)$$

ととれる。こうして、確かにハミルトニアン \hat{H} は古典力学の表式と同じく $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(x)$ と書かれることが示される。

このように、経路積分から演算子形式に移る手続きは、正準共役な関係にある古典的な力学変数を演算子に昇格し、それらに上で与えた正準交換関係を課すことにあたる。正準共役な力学量に正準交換関係を与えて、経路積分に依らず直接量子論を展開する方法は、正準量子化と呼ばれる。

§ 27.3 最小作用の原理と相対論的粒子の運動方程式

§25.1 では相互作用をしていない相対論的粒子の運動方程式を与えた。古典力学では力学量は、位置 $q_i(t)$ 、運動量 $p_i(t)$ で与えられた。ところが、相対論に基づく電磁場や相対論的な場では、位置 x は時間 t と同様に場の時空点を定めるパラメータとなり、力学量ではない。力学量は新たに現われた場自身である。そこで、場の理論を構成する必要に迫られる。ここでは粒子の力学との類推で場の理論を考えてみよう。

一般に、考える場を $\phi_i(x)$ と書くことにしよう。ここで、 $x = (t, \mathbf{r})$ である^{||}。粒子の力学では与えられた時刻 t での力学量 $q_i(t)$ の時間発展を考えた。場の力学では時間空間 x での場の量 $\phi_i(x)$ の時空発展を考えることになる。ここで、粒子の力学では時刻 t での力学量 $q_i(t)$ を指定するのは添え字 i であった。これは粒子の番号

^{||}本節では煩雑さを避けるために、 $\hbar = 1$ 、 $c = 1$ となる自然単位系で考える。

や、 x, y, z 成分などである。場の力学では時刻 t での力学量 $\phi_i(t, \mathbf{r})$ を指定するのは、場の成分 i に加え、連続変数となる場の位置 \mathbf{r} が必要となる。そこで、

$$\begin{aligned} q_i(t) &\longrightarrow \phi_i(x) \\ i &\longrightarrow i \text{ and } \mathbf{r} \\ \sum_i &\longrightarrow \sum_i \int d^3\mathbf{r} \\ \delta_{ij} &\longrightarrow \delta_{ij} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (27.76)$$

の対応が存在することになる。場の運動方程式を与える作用は、粒子の場合の作用 $\int dt L(q_i(t), \dot{q}_i(t))$ に対応して

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\phi_i(x), \partial_\mu \phi_i(x)) \quad (27.77)$$

と書けるはずである。ここで、 $d^4x = dt d^3\mathbf{r}$ であり、ラグランジュ関数の中の力学量の微分は時間微分だけでなく空間微分も現われ、 $\partial_\mu \phi_i(x) = \left(\frac{\partial \phi_i(x)}{\partial t}, \frac{\partial \phi_i(x)}{\partial \mathbf{r}} \right)$ にも依存する。この $\mathcal{L}(\phi_i(x), \partial_\mu \phi_i(x))$ をラグランジアン密度と呼ぶ。古典場 $\phi_i(x)$ の作用が (27.77) と得られたので、場 $\phi_i(x)$ の経路積分として場の量子論を構成することができる。

その前に、最小作用の原理から、オイラー・ラグランジュ方程式としての運動方程式を求めておこう。これは粒子の力学で実行したのと同じである。最小作用の原理が述べる内容は、場 $\phi_i(x)$ を $\phi_i(x) + \delta\phi_i(x)$ とずらしても作用が (1 次の変分の範囲内で) 不変であるということである。これを実行する。

$$\begin{aligned} \delta S &= \int d^4x \mathcal{L}(\phi_i + \delta\phi_i, \partial_\mu \phi_i + \partial_\mu \delta\phi_i) - \int d^4x \mathcal{L}(\phi_i, \partial_\mu \phi_i) \\ &= \int d^4x \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i} \delta\phi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_i)} \delta(\partial_\mu \phi_i) \right) \\ &= \int d^4x \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_i)} \right) \right) \delta\phi_i \\ &= 0 \end{aligned}$$

ここで、1 行目から 2 行目へはテイラー展開を行い、2 行目から 3 行目へは微分 ∂_μ と変分 δ は可換であることと、部分積分を用い、表面項は零と要請した。また、繰り返す添え字 ($\mu (= 0, 1, 2, 3)$) については和をとる。こうして、任意の変分 $\delta\phi_i(x)$ に対して作用の変分 δS が零であるので、

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_i)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i} = 0 \quad (27.78)$$

が得られる。これが相対論的な古典場の運動方程式である。

クライン・ゴールドン場とディラック場に対して運動方程式に至るラグランジアン密度を求めておこう。実スカラー場のクライン・ゴールドン場 $\phi(x)$ にたいしては

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi(x) \partial^\mu \phi(x) - m^2 \phi(x)^2) \quad (27.79)$$

ととれば良い。実際、(27.78) に代入すれば

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi(x) = 0$$

が得られる。これは ($\hbar = c = 1$ の自然単位系の下で) クライン・ゴールドン方程式 (27.41) そのものである。

次に、複素スカラー場 $\varphi(x)$ のクライン・ゴールドン場を考えよう。今度は $\varphi(x)$ と $\varphi^*(x)$ は独立なので、先の一般論で $\phi_1 = \varphi^*(x)$ 、 $\phi_2 = \varphi(x)$ と見なし、 ϕ_1 に対するオイラー・ラグランジュ方程式を考える。このときにはラグランジアン密度として、

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \varphi^*(x) \partial^\mu \varphi(x) - m^2 \varphi^*(x) \varphi(x) \quad (27.80)$$

ととれば良い。実際、(27.78) に代入すれば

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \varphi(x) = 0$$

が得られる。もちろん ϕ_2 に対してオイラー・ラグランジュ方程式を導出すれば、この方程式の複素共役なものも得られる。

最後にディラック場 $\psi(x)$ に対するラグランジアン密度を考えよう。ディラック場は複素場なので、 $\psi(x)$ と $\psi^*(x)$ は独立に扱える。しかしながら、作用はローレンツ変換に対してスカラー量でなければならず、ディラック場から作られるスカラー量は $\bar{\psi}\psi$ であることが知られている。そこで、 $\psi(x)$ と $\bar{\psi}(x)$ を独立な場と見なし、 $\phi_1 = \bar{\psi}$ 、 $\phi_2 = \psi$ とみなすと、 ϕ_1 に対するオイラー・ラグランジュ方程式がディラック方程式に帰着するように

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x)$$

と取ればよい、 $\bar{\psi}$ で変分することにより、

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0$$

が得られる。これはディラック方程式 (27.42) である。

§ 27.4 場の量子化

相対論的な粒子の場のラグランジアン密度、すなわち作用が得られたので、径路積分

$$\int \mathcal{D}\phi_i e^{i \int d^4x \mathcal{L}(\phi_i(x), \partial_\mu \phi_i(x))}$$

を行えば場の量子論を構成していくことができる。しかしながら、ここでは演算子形式、すなわち §25.2 で見た正準量子化を行っておこう。

まず、場の“一般化運動量” $\pi_i(x)$ を、粒子の力学と同様に定義する。

$$\pi_i(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi_i)}$$

クライン・ゴールドン場やディラック場に対しては

$$\begin{aligned} \pi(x) &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi)} = \dot{\phi}(x), & \text{実クライン・ゴールドン場} \\ \pi(x) &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \varphi)} = \dot{\varphi}^*(x), & \text{複素クライン・ゴールドン場} \\ \pi(x) &= \partial \mathcal{L} / (\partial(\partial_t \psi)) = \bar{\psi} i \gamma^0 = i \psi^*(x), & \text{ディラック場} \end{aligned} \quad (27.81)$$

のように得られる**。正準量子化するためには式 (27.76) の対応関係を考慮する。この対応に注意して

$$\begin{aligned} [\phi(t, \mathbf{r}), \pi(t, \mathbf{r}')] &= [\phi(t, \mathbf{r}), \dot{\phi}(t, \mathbf{r}')] = i \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), & \text{実クライン・ゴールドン場} \\ [\varphi(t, \mathbf{r}), \dot{\varphi}^*(t, \mathbf{r}')] &= i \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), & \text{複素クライン・ゴールドン場} \end{aligned}$$

**ディラック場については注意が必要である。ディラック場はスピン 1/2 のフェルミ粒子を記述するので、パウリの排他律を満たす。そのためにスピノール場 ψ は普通の数ではなく、グラスマン数で表わさなければならない。グラスマン数は反交換関係を満たす代数を構成し、微分に関しても右から微分するか左から微分するかで符号が異なる。ここでは右微分で共役運動量の場を定義した。

と、正準量子化される。ここで、交換関係を取る場の時刻は同じに取る。これを同時刻交換関係と呼ぶ。

後に見るように、ディラック場の場合には、フェルミ統計に従うことから、交換関係ではなく、同時刻反交換関係で量子化しなければならない。

$$\begin{aligned} \{ \psi(t, \mathbf{r}), \pi(t, \mathbf{r}') \} &= \{ \psi(t, \mathbf{r}), i\psi^*(t, \mathbf{r}') \} = \psi(t, \mathbf{r})i\psi^*(t, \mathbf{r}') + i\psi^*(t, \mathbf{r}')\psi(t, \mathbf{r}) = i\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \text{すなわち} \quad \{ \psi(t, \mathbf{r}), \psi^*(t, \mathbf{r}') \} &= \psi(t, \mathbf{r})\psi^*(t, \mathbf{r}') + \psi^*(t, \mathbf{r}')\psi(t, \mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

と量子化される。

§§27.4.1 生成消滅演算子

さて、場の正準量子化の意味を少し見ておこう。そのために既に学んだ非相対論的なシュレーディンガー場 ψ で考えよう。オイラー・ラグランジュ方程式としてシュレーディンガー方程式を導く作用は

$$S = \int dt d^3\mathbf{r} \mathcal{L} = \int dt d^3\mathbf{r} \psi^*(t, \mathbf{r}) \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi(t, \mathbf{r})$$

と得られる。ここで、 ψ とその複素共役である ψ^* は独立なので、 ψ^* に関する変分をとればただちにシュレーディンガー方程式 $i \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} - \hat{H} \psi(t, \mathbf{r}) = 0$ が導かれる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \psi^*(t, \mathbf{r}) \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi(t, \mathbf{r}) \quad (27.82) \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \psi^*} \right) &= 0 \quad \longrightarrow \quad i \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} - \hat{H} \psi(t, \mathbf{r}) = 0 \end{aligned}$$

このとき、 ψ に共役な場の正準運動量 $\pi(t, \mathbf{r})$ は

$$\pi(t, \mathbf{r}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}(t, \mathbf{r})} = i\psi^*(t, \mathbf{r}) \quad (27.83)$$

である。こうして、正準量子化を行おう。 ψ で表わされる場がボソンかフェルミオンかで交換関係か反交換関係で量子化を行う。同時に記述していくため。交換子は $[\dots, \dots]_-$ 、反交換子は $[\dots, \dots]_+$ で表わす。量子化された後は(反)交換しない演算子となるので、 $\hat{}$ (ハット)を付けて表わそう。また、演算子になったので複素共役 $*$ はエルミート共役 \dagger と書き換える。

$$[\hat{\psi}(t, \mathbf{r}), \hat{\pi}(t, \mathbf{r}')]_{\mp} = [\hat{\psi}(t, \mathbf{r}), i\hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}')]_{\mp} = \hat{\psi}(t, \mathbf{r})i\hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}') \mp i\hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}')\hat{\psi}(t, \mathbf{r}) = i\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

すなわち、

$$[\hat{\psi}(t, \mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}')]_{\mp} = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (27.84)$$

と正準量子化される。ここで、場 ψ を完全系 $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$ で展開しよう。

$$\hat{\psi}(t, \mathbf{r}) = \sum_n \hat{a}_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}), \quad \hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger(t) \varphi_n^*(\mathbf{r}),$$

ここで、演算子の性質を持つのは展開係数 $\hat{a}_n(t)$ である。 $\varphi_n(\mathbf{r})$ は量子数 n で指定されており、規格直交化条件と完全性の条件

$$\int d^3\mathbf{r} \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}) = \delta_{nm}, \quad \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

を満たす。規格直交条件を用いると、 $\hat{\psi}$ の展開は、逆に

$$a_n(t) = \int d^3\mathbf{r} \varphi_n^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}(t, \mathbf{r}), \quad a_n^\dagger(t) = \int d^3\mathbf{r} \varphi_n(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r})$$

と解けて、(反) 交換関係は

$$[\hat{a}_n(t), \hat{a}_m^\dagger(t)]_{\mp} = \delta_{nm}, \quad [\hat{a}_n(t), \hat{a}_m(t)]_{\mp} = [\hat{a}_n^\dagger(t), \hat{a}_m^\dagger(t)]_{\mp} = 0$$

が得られる。

演算子 \hat{a}_n 、 \hat{a}_n^\dagger について考察しよう。これらは演算子であるので、演算子が作用する状態が存在しなければならない。まず、(27.82)、(27.83) から量子化されたあとのハミルトニアン密度 \mathcal{H} とハミルトニアン H を、粒子の力学と同様にして導入しよう。このとき、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \hat{\pi} \dot{\hat{\psi}} - \mathcal{L} = \hat{\psi}^\dagger \hat{H} \hat{\psi} \\ H &= \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger \hat{H} \hat{\psi} \end{aligned} \quad (27.85)$$

となる*。ここで、完全系 $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$ を、量子力学のハミルトニアン \hat{H} の固有状態に取ろう。エネルギー固有値を ϵ_n とする。このとき、上のハミルトニアン H は ψ の展開と、完全系の規格直交性を用いて、

$$\begin{aligned} H &= \sum_{nm} H_{mn} a_m^\dagger a_n = \sum_n \epsilon_n a_n^\dagger a_n \\ H_{mn} &= \int d^3\mathbf{r} \varphi_m^*(\mathbf{r}) \hat{H} \varphi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n \delta_{mn} \end{aligned}$$

となる。系のエネルギーには下限が存在するので、その状態を $|0\rangle$ と書く。これを真空と呼ぶ。最低エネルギーを零にとると

$$H|0\rangle = 0, \quad \text{すなわち} \quad \hat{a}_n|0\rangle = 0 \quad (\text{すべての } n \text{ に対して})$$

となる。次に粒子数演算子 \hat{N} を定義する。

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) \hat{\psi}(t, \mathbf{r}) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n = \sum_n \hat{n}_n$$

まず、交換関係で正準量子化したボーズ粒子の系で考えよう。 \hat{a}_n 、 \hat{a}_m^\dagger の交換関係を用いると、状態 $(\hat{a}_n^\dagger)^{l_n} |0\rangle$ ($l_n = 0, 1, 2, \dots$) に対して、

$$\hat{N}(\hat{a}_n^\dagger)^{l_n} |0\rangle = l_n (\hat{a}_n^\dagger)^{l_n} |0\rangle$$

が容易に得られる。また、状態 $|l_1, l_2, \dots, l_p\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{l_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{l_2} \dots (\hat{a}_p^\dagger)^{l_p} |0\rangle$ に対しては

$$\begin{aligned} \hat{N}|l_1, l_2, \dots, l_p\rangle &= (l_1 + l_2 + \dots + l_p) |l_1, l_2, \dots, l_p\rangle \\ H|l_1, l_2, \dots, l_p\rangle &= (\epsilon_1 l_1 + \epsilon_2 l_2 + \dots + \epsilon_p l_p) |l_1, l_2, \dots, l_p\rangle \end{aligned}$$

が得られ、 \hat{N} の固有値は粒子数と解釈されることがわかる。すなわち、状態 $|l_1, l_2, \dots, l_p\rangle$ は、量子状態 m に l_m 個の粒子が存在し、 $\hat{n}_m = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m$ の固有値 l_m は粒子数そのものである。こうして、量子化された場に対す

ここで、 ψ^ に共役な場の運動量 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0$ であることに注意せよ。

る状態は、 $\{(\hat{a}_1^\dagger)^{l_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{l_2}\dots|0\rangle\}$ で張られる粒子数状態であり、この空間をフォック (Fock) 空間と呼ぶ。また、 \hat{a}_n 、 \hat{a}_m^\dagger の交換関係から、規格化された粒子数状態 $|l_n\rangle$ に対して

$$|l_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{l_n!}}(\hat{a}_n^\dagger)^{l_n}|0\rangle$$

$$\hat{a}_n|l_n\rangle = \sqrt{l_n}|l_n-1\rangle, \quad \hat{a}_n^\dagger|l_n\rangle = \sqrt{l_n+1}|l_n+1\rangle$$

が得られ、 \hat{a}_n^\dagger 、 \hat{a}_n は粒子を生成、消滅させる生成消滅演算子であることがわかる。

一方、反交換関係で量子化されるフェルミ粒子系では、 $\hat{a}_m^{\dagger 2} = \hat{a}_m^2 = 0$ より、

$$\hat{n}_m^2 = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = \hat{a}_m^\dagger (1 - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m) \hat{a}_m = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = \hat{n}_m$$

すなわち $\hat{n}_m(\hat{n}_m - 1) = 0$ (27.86)

となる。従って、量子状態 m の粒子数演算子 \hat{n}_m の固有値は 0 または 1 であることがわかる。こうして、反交換関係で正準量子化された場合には一つの量子状態に 1 個までしか粒子が存在することができず、パウリの排他律を満たすことがわかる。このように、フェルミ粒子系では反交換関係で正準量子化しないとけないのである[†]。

このように、場が量子化されると、場は演算子となり

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad \hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \varphi_n^*(\mathbf{r})$$

となる。ここで、 $\varphi_n(x)$ が物質粒子の波動性を表わし、粒子を生成・消滅させる \hat{a}_n^\dagger または \hat{a}_n で物質粒子の粒子性を表わしている。このように場の量子化によってはじめて、§1.1 で述べた物質粒子の粒子と波動の 2 重性が理解できる。

§27.4.2 スカラー場の量子化

自由スカラー場のラグランジアン密度 (27.79) から出発する。場 $\phi(x)$ に共役な場の運動量 $\pi(x)$ は (27.81) で既に得られている。こうして、正準交換関係は $[\phi(t, \mathbf{r}), \dot{\phi}(t, \mathbf{r}')] = i\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ であった。ハミルトニアン密度 \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{L} = \frac{1}{2}(\pi(x)^2 + (\nabla\phi(x))^2 + m^2\phi(x)^2)$$

となる。平面波 $e^{-ipx} = e^{-i(p_0t - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}$ はクライン・ゴールドン方程式の解となる。ここで、 $p_0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ である。この平面波解で場を展開すると、 $\phi(x)$ が実場であることに注意 ($\phi(x)^* = \phi(x)$) して

$$\phi(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx})$$

$$\pi(x) = \dot{\phi}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (-ip_0 a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + ip_0 a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \quad (27.87)$$

となる。ただし、適当な規格化因子を導入した。これを逆に解くと

$$a_{\mathbf{p}} = \int \frac{d^3\mathbf{r}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (p_0\phi(x) + i\pi(x)) e^{ipx}$$

$$a_{\mathbf{p}}^\dagger = \int \frac{d^3\mathbf{r}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (p_0\phi(x) - i\pi(x)) e^{-ipx}$$

[†]この事実に対応して、フェルミ粒子系での経路積分ではフェルミ粒子を表わす場はグラスマン数でなければならない。

となり、これらの交換関係は

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger] = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})$$

となる。こうして、 $a_{\mathbf{p}}^\dagger$ 、 $a_{\mathbf{p}}$ は運動量 \mathbf{p} 、エネルギー $p_0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ の自由粒子を生成、消滅する演算子となる。また、ハミルトニアン H は

$$H = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H} = \int d^3\mathbf{p} \frac{1}{2} p_0 (a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} + a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger)$$

と得られる。

複素スカラー場 $\varphi(x)$ についても同様である。今度は2種の生成消滅演算子を導入し

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + c_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \\ \pi(x) = \dot{\varphi}^*(x) &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{\sqrt{(2\pi)^3 2p_0}} (ip_0 a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx} - ip_0 c_{\mathbf{p}} e^{-ipx}) \end{aligned} \quad (27.88)$$

と展開する。 $\varphi(x)$ と $\pi(x)$ の正準交換関係から

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger] = [c_{\mathbf{p}}, c_{\mathbf{q}}^\dagger] = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})$$

が得られる。

第VI部 統計・熱力学

28章 熱力学の三法則

本章以降では、しばらく、粒子が極めて多数存在する状況を扱う。そのため、一つ一つの粒子の運動を追う代わりに、多数の粒子について、物理量の統計平均を扱う。

§ 28.1 粒子の確率分布

§4.7において、位相空間の体積は、系の時間発展で不変であることを見た。この事実がリウビルの定理を構成している。

$$\Gamma(t) = \int \cdots \int dq_1 dq_2 \cdots dq_s dp_1 dp_2 \cdots dp_s \left(\equiv \int dq dp \right) = \Gamma(0) \quad (28.1)$$

今、 $2s$ 次元の位相空間を考え、位相空間の領域 $d\Gamma = dq dp$ に存在する粒子を考え、その確率密度分布を $\rho(q, p)$ としよう。位相空間の領域 $d\Gamma$ に存在する粒子の確率は

$$\rho(q, p) dq dp \quad (28.2)$$

で与えられる。粒子数は保存するので、位相空間上で、粒子の連続の方程式が成り立つべきである。位相空間での粒子数分布の速度は $v_i = \left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt} \right)$ と書けるので、位相空間上での $2s$ 次元ベクトルの“発散”を div と書く

$$\frac{\partial \rho(q, p)}{\partial t} + \text{div } j = 0 \quad (28.3)$$

が成り立つ。ここで、 $j_i = \rho v_i$ であり、発散は $\text{div } j = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial j_i}{\partial q_i} + \frac{\partial j_{i+s}}{\partial p_i} \right)$ と定義される。こうして、位相空間上での粒子数の保存則を示す連続の方程式 (28.3) は、確率密度分布 ρ が座標 q と運動量 p の関数であることに注意して

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \rho(q, p)}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \left(\rho \frac{dq_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\rho \frac{dp_i}{dt} \right) \right) \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{dq_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{dp_i}{dt} \right) \right) + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) \end{aligned} \quad (28.4)$$

となる。ここで、正準方程式（ハミルトン方程式）

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (28.5)$$

を用いよう。ここで、 H は系のハミルトン関数である。このとき、(28.4) 式は、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0 \quad (28.6)$$

と書ける。ここで、座標微分と運動量微分は交換すること、及びポアソン括弧の定義 (4.10) を用いることで、(28.6) 式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{ H, \rho \}_P \quad (28.7)$$

と纏められる。これは位相空間での粒子の確率分布関数が満たす方程式で、リュービル-フォン・ノイマン方程式と呼ばれる。

さて、確率分布関数の時間に関する完全導関数を導いてみよう。確率分布関数が座標 q と運動量 p を通しても時間に依存することに注意して

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) \\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \{ \rho, H \}_P \\ &= 0 \end{aligned} \tag{28.8}$$

と示される。ここで、1行めから2行目へは正準方程式を用い、2行目から3行目へはポアソン括弧の定義を用いた。最後の等式は、リュービル-フォン・ノイマン方程式が満たされることから成り立つ。こうして、位相空間上での粒子の確率分布関数は時間に依存しないことが示された。したがって、(28.2) 式の粒子の存在確率は、リュービルの定理 (28.1) と、 ρ 自身が時間に依存しないことから、時間に依存しない定数と考えてよいことがわかる。

さて、 ρ は位相空間 (q, p) における粒子の確率分布関数であったので、全位相空間での積分は1に規格化されている。

$$\int \rho(q, p) dq dp = 1 \tag{28.9}$$

こうして、物理量 $f(q, p)$ の統計平均 \bar{f} は

$$\bar{f} \equiv \int f(q, p) \rho(q, p) dq dp \tag{28.10}$$

として与えられる。

ここからは、考えている全系 (12) を2つの部分系 (1) と (2) に分け、それぞれの部分系はエネルギーのみやり取りできるとしよう。[‡] 元の系を合成系として考えると、確率分布は $\rho_{(12)}(q, p) dq dp$ であるが、これを2つの部分系の言葉で表すと、

$$\rho_{(12)}(q, p) dq dp = \left(\rho_{(1)}(q^{(1)}, p^{(1)}) dq^{(1)} dp^{(1)} \right) \left(\rho_{(2)}(q^{(2)}, p^{(2)}) dq^{(2)} dp^{(2)} \right) \tag{28.11}$$

となる。よって、

$$\rho_{(12)} = \rho_{(1)} \rho_{(2)} \tag{28.12}$$

と、部分系の分布関数の積で表される。したがって、その対数をとると、

$$\ln \rho_{(12)} = \ln \rho_{(1)} + \ln \rho_{(2)} \tag{28.13}$$

と加法的に書ける。ここで、(28.8) より、全系の確率分布関数 $\rho_{(12)}$ は時間に依存しないことが示されている。したがって、 $\rho_{(12)}$ は時間に依存しない保存量の特殊な組み合わせで表されるべきである。有限の系を考えるので、箱に閉じ込める状況を考慮すると、運動量や角運動量は良い保存量ではない。唯一残される保存量はエネルギー E である。エネルギーは加法的であるので、(28.13) の $\ln \rho$ が加法的であることから、

$$\ln \rho = \alpha + \beta E \tag{28.14}$$

[‡]粒子をやり取りできる場合は後に議論する。

と書けるだろう。ここで、 α 、 β はある定数である。こうして

$$\rho = Ce^{\beta E}, \quad (C = e^\alpha), \quad \text{ただし } E = H(q, p) \quad (28.15)$$

と表されることがわかる。 C は規格化(28.9)から決まる定数である。ここで注意しておくべきは、部分系の $\rho_{(1)}$ や $\rho_{(2)}$ はもはや時間に対して不変ではないことである。エネルギーをやり取りできるので、(28.14)に現れる E は各部分系のエネルギー E_1 または E_2 であり、これら自身は保存しない。時間に依らず一定であるのは、その和、 $E = E_1 + E_2$ である。

次にエントロピーと呼ばれる量を導入しよう。位相空間の微小な体積 $\Delta q \Delta p$ を、粒子が取り得る状態数と考えよう。量子力学では取り得る量子状態の個数は勘定できるが、古典力学では位相空間の拡がりになってしまう。そこで、半古典論でのボーア・ゾンマーフェルトの条件(23.9)を考慮しよう。1自由度あたり、 $p_x dx$ は位相空間の面積 $2\pi\hbar$ の領域当たり n の状態数の存在に対応している[§]。今、 s 自由度であるので、量子論に対応する状態数 $\Delta\Gamma$ として

$$\Delta\Gamma = \frac{\Delta q \Delta p}{(2\pi\hbar)^s} \quad (28.16)$$

をとれば良い。こうして、系のエントロピー S を

$$S = k_B \ln \Delta\Gamma = k_B \ln \frac{\Delta q \Delta p}{(2\pi\hbar)^s} \quad (28.17)$$

と導入しよう。ここで、 k_B はボルツマン定数と呼ばれる定数である。考えている部分系ではもはや ρ は時間に依らない一定量ではなく、それとともに位相空間の体積 $\Delta q \Delta p$ も時間に依存するようになるが、(28.2)から、部分系ではあっても $\rho \Delta q \Delta p$ は時間に依らない定数であった。したがって、(28.17)は

$$\begin{aligned} S &= k_B \ln \frac{\Delta q \Delta p}{(2\pi\hbar)^s} \\ &= -k_B \ln \rho + (\text{定数}) \end{aligned} \quad (28.18)$$

と表される。こうしてエントロピーは導入されるが、未知の定数項の為、古典論ではエントロピーの絶対値は決まらないことがわかる。

古典論では位相空間上での粒子の確率分布は、その部分系のエネルギー E で決まることが分かった。量子力学ではあるエネルギー E_n に存在する粒子の確率分布関数を $w(E_n)$ と書くことにしよう。このとき、古典論の表式(28.14)に対応して、

$$\ln w(E_n) = \alpha + \beta E_n \quad (28.19)$$

となるが、部分系のエネルギーは平均として \bar{E} を持つとすると、エントロピーは

$$\begin{aligned} S &= -k_B \ln w(\bar{E}) \\ &= -k_B \sum_n w(E_n) \ln E_n \\ &\equiv -k_B \overline{\ln w(E_n)} \end{aligned} \quad (28.20)$$

と、平均で表されることに注意しよう。一般に、量子力学の基底状態は縮退していないので、系が基底状態にしか存在しないとき、 $w(E_0) = 1$ 、 $w(E_n) = 0 (n > 0)$ となるので、(28.20)で定義されるエントロピー S は零になる。一般に、後に導入する絶対温度で絶対零度の時には系は基底状態にあるので、絶対零度でエントロピーは零である。これを熱力学第3法則と呼ぶ。これにより、古典論でもエントロピーの絶対値を求めることが出来る。

[§] $n + \frac{1}{2}$ の $1/2$ は量子論に特有の零点エネルギーを与えるものであるので、古典論との対応を考える際には無視する。

§ 28.2 エントロピー増大の法則と平衡状態

簡単のため、古典論に戻って考える。エントロピーの定義 (28.17) から、位相空間の体積[¶] $\Delta\Gamma$ は

$$\Delta\Gamma = e^{\frac{1}{k_B}S} \quad (28.21)$$

となる。自然が進む方向は、位相空間の体積 $\Delta\Gamma$ が大きくなる方向である^{||}。量子論では状態数が多くなると言ってもよい。自然は $\Delta\Gamma$ が大きくなる方向に進むということは、(28.21) から、エントロピー S が増大する方向ということである。系が時間発展する方向はエントロピーが増える方向であることを、エントロピー増大の法則と呼ぶ。また、熱力学第 2 法則の内容である。

多数の粒子からなる系が時間発展を行い、それ以上、見かけ上の巨視的な変化が起こらなくなったとき、系は平衡状態にあると呼ぼう。このとき、増大したエントロピーは最大の状態にあると言える^{**}。系を 2 つに分けて考えてみよう。確率密度関数 ρ または $w(E_n)$ はエネルギーの関数であったので、エントロピーもまたエネルギーの関数である。全体系のエントロピー S は、部分系 1 と 2 のエントロピーの和 $S = S_1 + S_2$ であることは (28.13) と (28.18) から明らかである。部分系のエネルギーをそれぞれ E_1 、 E_2 とすると、全系のエネルギー $E = E_1 + E_2$ は一定であり、 E_1 または E_2 で特徴づけられるので、 $E_2 = E - E_1$ を考慮すると、 $S(E) = S_1(E_1) + S_2(E_2)$ であるが、全系のエネルギー E は一定で固定されているとすると、すべて E_1 の関数と考える

$$S(E_1) = S_1(E_1) + S_2(E_2 = E - E_1) \quad (28.22)$$

と表される。ここで、全系は平衡状態にあり、エントロピーは最大化されているとしよう。このとき、エネルギー E_1 の変化によっても全系は変化しないので、

$$\frac{dS(E_1)}{dE_1} = \frac{dS_1(E_1)}{dE_1} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{dE_2}{dE_1} = 0 \quad (28.23)$$

であるが、中辺第 2 項は $\frac{dE_2}{dE_1} = -1$ であることに注意すると、上式は

$$\frac{dS_1(E_1)}{dE_1} = \frac{dS_2(E_2)}{dE_2} \quad (28.24)$$

となる。こうして、平衡で等しい量として絶対温度 T を導入しよう。

$$\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T} \quad (28.25)$$

エントロピーが最大になり、部分系 1 と 2 が平衡にある時、(28.24) と温度の定 (28.25) から

$$T_1 = T_2 \quad (28.26)$$

が成り立つ。

[¶]量子論では状態数そのものである。

^{||}容器に満たされた水に、一滴、インクを垂らしたと考えればよい。容器の水を外界とする、部分系としてのインクの分子集団は、限られた運動量を持って狭い領域に留まっていることは無い。やがて、容器全体に拡がっていく。部分系の取り得る配位空間（通常の体積）が増加しているので、当然、位相空間は大きくなっている。逆に、拡がっていたインクの分子が狭い配位空間（狭い体積の領域）にひとりだに集積してくることは無い。

^{**}宇宙全体を考えると、エントロピー増大の法則から宇宙は平衡状態にあり、何ら変化を起こさなくなると考えるかもしれない（宇宙の熱的死と呼ばれる）。しかしながら、一般相対論のところで見たように、宇宙論的に考えると、重力場は時空の計量を決めるので、物体が置かれている外的条件としての時空間の計量は本質的に時間に依存し、宇宙膨張、あるいは重力による宇宙の収縮等、平衡に成り得ない。

今、絶対温度をエントロピーのエネルギー変化率の逆数で導入した。互いに平衡にない部分系 1、2 を考えると、全系のエントロピーは未だ増大している。すなわち $\frac{dS}{dt} > 0$ である。ここで、 t は時間である。全系のエネルギー E は一定であるとして、こうして、

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{dS_1}{dt} + \frac{dS_2}{dt} = \frac{dS_1}{dE_1} \frac{dE_1}{dt} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{dE_2}{dt} \\ &= \frac{dS_1}{dE_1} \frac{dE_1}{dt} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{dE_2}{dE_1} \frac{dE_1}{dt} = \left(\frac{dS_1}{dE_1} - \frac{dS_2}{dE_2} \right) \frac{dE_1}{dt} \\ &= \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \frac{dE_1}{dt} \\ &> 0 \end{aligned} \quad (28.27)$$

が得られる。ここで、物体 2 の方が物体 1 より温度が高い ($T_2 > T_1$ 、すなわち $\frac{1}{T_1} > \frac{1}{T_2}$) としよう。このとき、(28.27) より、 $\frac{dE_1}{dt} > 0$ が得られる。こうして、エネルギーは高温の物体 2 から低温の物体 1 へ時間とともに流れていくことが理解される。

§ 28.3 熱力学第 1 法則

系のエネルギーの時間変化があるパラメータ λ で決定されているとしよう。エネルギー E の時間変化は、パラメータ λ で支配されているので、

$$\frac{dE(\lambda)}{dt} = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} \quad (28.28)$$

となる。統計平均を考えると、統計平均と時間微分の操作は可換であるので

$$\frac{dE}{dt} = \overline{\frac{dE(\lambda)}{dt}} = \overline{\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt}} \quad (28.29)$$

となる。一方、系のエネルギーはパラメータ λ とエントロピー S の関数であるとみると、エントロピー一定の条件

$$\frac{dE}{dt} = \left(\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \right)_S \frac{d\lambda}{dt} \quad (28.30)$$

と書ける。ここで、微分の下付き添え字 S は、変数 S を一定にとって λ で微分することを意味する。こうして、エントロピー一定の過程では

$$\overline{\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}} = \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda} \right)_S \quad (28.31)$$

となる。エントロピー一定で変化する過程を断熱過程と呼ぶ。

さて、ポテンシャル・エネルギーの座標微分に負号を付けたものが力であった。位置 \mathbf{r} に働く力 \mathbf{F} は

$$\mathbf{F} = - \frac{\partial E}{\partial \mathbf{r}} \quad (28.32)$$

であるが、(28.31) から、多粒子系での平均の力 $\overline{\mathbf{F}}$ は

$$\overline{\mathbf{F}} = - \overline{\frac{\partial E(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}} = - \left(\frac{\partial E}{\partial \mathbf{r}} \right)_S = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \quad (28.33)$$

と表される。ここで、 V は考えている系の体積である。体積を位置 \mathbf{r} で微分したものは、位置ベクトル \mathbf{r} に垂直な平面の面積素片 ds に他ならない。ここに、 ds は、大きさが面積素片、方向は面積素片に垂直な \mathbf{r} 方向を向くベクトルである。こうして、(28.33) は

$$\bar{\mathbf{F}} = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S ds \quad (28.34)$$

と書ける。単位面積あたりに働く力は圧力であったので、単位面積に働く圧力の大きさ P は

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S \quad (28.35)$$

と得られる。

さて、系のエネルギー E が、エントロピー S と体積 V の関数と考えよう。エネルギーの体積微分は (28.35) で与えられており、エントロピー微分は (28.25) の逆から

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_V = T \quad (28.36)$$

と得られる。こうして、

$$dE = TdS - PdV \quad (28.37)$$

が成り立つことがわかる。これは熱力学第 1 法則として知られる関係式である。

さて、(28.33) 式に戻ってみよう。物体に働く力によって物体が $d\mathbf{r}$ の方向に体積 dV だけ膨張した時、物体は外に仕事をしている。従って、物体がした仕事は

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{F}} \cdot d\mathbf{r} &= - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} \\ &= PdV \end{aligned} \quad (28.38)$$

と書ける。逆に、これに負号をつけると、物体がされた仕事になる。すなわち、物体は

$$dW = -PdV \quad (28.39)$$

の仕事 dW をされている。 dW の仕事により、系のエネルギーは dE だけ増加するはずである。これが、(28.37) の右辺第 2 項の意味合いである。では、第 1 項 TdS は何であろうか。これは、直接外界から系へエネルギーが流入している効果であると考えられる。物体が接触している他の物体から直接エネルギーをやりとりする。このエネルギーの移動形態を熱と呼ぶ。従って、系に流入した熱 dQ は

$$dQ = TdS \quad (28.40)$$

と書ける。こうして、熱力学第 1 法則 (28.37) は

$$\begin{aligned} dE &= dQ + dW, \\ \text{ただし } dQ &= TdS, \quad dW = -PdV \end{aligned} \quad (28.41)$$

とも表現される。こうして、熱力学第 1 法則は、外から為された仕事 dW と、外から移動してきた熱 dQ により、系のエネルギーは dE だけ増加することを示している。従って、ここで考えているエネルギー E は静止した系のもつエネルギーであり、系全体の並進や回転運動のエネルギーは除く。系が持つ固有のエネルギーを内部エネルギーと呼ぶ。

29章 カノニカル分布

§ 29.1 カノニカル分布

前章で得られた (28.25) の温度の定義と、エントロピーの定義 (28.20) 及び (28.19) を用いると

$$\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE} = -k_B \beta \quad (29.1)$$

となるので、係数 β が $\beta = -\frac{1}{k_B T}$ と得られる。こうして、(28.19) または古典的に (28.15) は

$$w(E_n) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{k_B T}}, \quad \text{または} \quad \rho(E) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (29.2)$$

ときまる。ここで、 $Z^{-1} = C (= e^\alpha)$ は、確率の和が 1 であること、すなわち $\sum_n w(E_n) = 1$ または (28.9) により決定される。

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}, \quad \text{または} \quad Z = \int \frac{dqdp}{(2\pi\hbar)^s} e^{-\frac{H(q,p)}{k_B T}} \quad (29.3)$$

ここで、2 式目は古典的な場合であり、量子的な状態数との対応 (28.16) を考慮している。これは導出から明確であるように、全系を部分系と外界 (熱浴と呼ばれる) に分け、部分系に着目して得られたものであり、着目する (部分) 系は外界とエネルギーのやり取りをする。この下で得られた分布をカノニカル分布、または正準分布と呼ぶ。また、ギブス分布とも呼ばれる。また、 Z は分配関数と呼ばれ、カノニカル分布のすべての情報を含んでいる。

§ 29.2 マクスウェル分布

古典論で考えよう。粒子のエネルギーは、各粒子の運動エネルギー $K(p)$ とポテンシャルエネルギー $U(q)$ の和で表される。こうして、正準分布関数 $\rho(q, p)$ から、位相空間での確率分布は

$$dw = \frac{1}{Z} e^{-\frac{K(p)+U(q)}{k_B T}} \quad (29.4)$$

となる。ここで、一つの粒子に着目し、その運動量分布のみ考えよう。考えている粒子の運動エネルギーを残し、他の粒子の運動量及び、すべての座標について積分した量を考える。

$$\begin{aligned} dw_v &= \frac{1}{Z} \int \cdots \int e^{-\frac{K(p)-\frac{1}{2m}p^2}{k_B T}} e^{-\frac{U(q)}{k_B T}} e^{-\frac{p^2}{2m}} dqdp \\ &= A e^{-\frac{m}{2k_B T}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} dv_x dv_y dv_z \end{aligned} \quad (29.5)$$

ここで、着目している粒子の運動量 \mathbf{p} を残して、すべて積分した。新たに記述した定数 A は、確率が 1 となるように決める。^{††}

$$\begin{aligned} 1 &= \int \int \int dw_v dv_x dv_y dv_z = A \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{\frac{3}{2}}, \\ \text{すなわち} \quad dw_v &= \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2k_B T}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} \end{aligned} \quad (29.6)$$

^{††}積分として

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

が得られる。第 2、3 番目は第 1 番目の積分式を α で微分していけば得られる。

これは粒子の速度分布を決める確率分布関数であり、この分布をマクスウェル分布と呼ぶ。

粒子の運動エネルギーの平均値を考えてみよう。確率分布が (29.6) で与えられたので、ある方向 (x 方向としよう) の運動エネルギーの平均は

$$\overline{\frac{1}{2}mv_x^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2}mv_x^2 e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}} dv_x = \frac{1}{2}k_B T \quad (29.7)$$

と得られる。他の方向も同じである。すなわち、1 自由度あたり同じエネルギー $\frac{1}{2}k_B T$ が分配されているといえる。この事実はエネルギー等分配則と呼ばれる。粒子の運動エネルギーの平均は 3 方向あわせて $\frac{3}{2}k_B T$ となる。したがって、相互作用の無い ($U(q) = 0$) 自由粒子の集団の場合、系の温度を単位温度 (1K と呼ぶ) 上昇させるのに必要なエネルギー C は

$$C = \frac{dE}{dT} = N \cdot \frac{3}{2}k_B \quad (29.8)$$

となる。ここで、 N は全粒子数である。

§ 29.3 ボルツマン分布

系の粒子の確率分布が古典的なカノニカル分布であるとしよう。エネルギー E_k を持つ粒子の平均数 n_k は、当然その存在確率に比例するので、

$$n_k = n e^{-\frac{E_k}{k_B T}} \quad (29.9)$$

と書ける。ここで、 n は全粒子数が N であることから決まる定数である。今、カノニカル分布で運動量積分を実行し、さらに注目している粒子以外の座標積分も実行したとしよう。注目している粒子のポテンシャルエネルギーを $u(x, y, z)$ とすると、粒子が位置 (x, y, z) にある確率 $dw_{\mathbf{r}}$ は、確率の和を 1 とするための係数を a として、

$$dw_{\mathbf{r}} = a e^{-\frac{u(x, y, z)}{k_B T}} dx dy dz \quad (29.10)$$

とかけるので、体積素片 $dV = dx dy dz$ にある粒子数 $n(x, y, z)$ は

$$n(x, y, z) = n_0 e^{-\frac{u(x, y, z)}{k_B T}} \quad (29.11)$$

と書ける。この粒子分布をボルツマン分布と呼ぶ。

例えば、地表面で鉛直上向きに z 軸をとると、質量 m の粒子に働く重力によるポテンシャルエネルギーは、重力加速度を g とし、地表面をエネルギーの基準面にとると $u(x, y, z) = mgz$ であるので、地表面での粒子密度を n_0 として、

$$n(z) = n_0 e^{-\frac{mgz}{k_B T}} \quad (29.12)$$

と表されることがわかる。地表面付近での空気分子の粒子は (29.12) に従い分布する。上空に行くほど分子数は少なくなることがわかる。

30章 自由エネルギー

§ 30.1 エンタルピー

エネルギー保存則としての熱力学第1法則は(28.37)の形に得られた。今、内部エネルギー E は S と V の関数となっている。そこで、体積 V の代わりに圧力 P を独立変数とする関数 H を考えよう。[‡] H を次のようにして導入する。

$$H = E + PV \quad (30.1)$$

この熱力学関数をエンタルピーと呼ぶ。このとき、微分をとり、(28.37)を用いると

$$\begin{aligned} dH &= dE + PdV + VdP \\ &= TdS + VdP \quad (= dQ + VdP) \end{aligned} \quad (30.2)$$

が得られる。確かに、 S と P を独立変数とすることがわかる。こうして、

$$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_P, \quad V = \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_S \quad (30.3)$$

が得られる。

エントロピーが一定のまま進む断熱過程を考えよう。このとき $dS = 0$ である。さらに、過程が圧力一定のまま進行する定圧変化であるとする。このとき $dP = 0$ でもあるので、断熱かつ等圧過程では

$$H = \text{一定} \quad (30.4)$$

である。

ここで、体積一定、または圧力一定のまま物質の温度を単位温度上昇させるのに必要なエネルギー、**熱容量**を導入しておこう。体積一定の時には(28.41)から

$$C_V = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \quad (30.5)$$

一方、圧力一定の時には(30.2)より

$$C_P = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (30.6)$$

となる。ここで、 C_V 、 C_P は、それぞれ**定積熱容量**、**定圧熱容量**と呼ばれる。

§ 30.2 ヘルムホルツの自由エネルギー

今度は、独立変数が温度 T と体積 V であるような熱力学関数を導入しよう。

$$F = E - TS \quad (30.7)$$

この熱力学関数 F をヘルムホルツの自由エネルギーと呼ぶ。微分を取り、(28.37)を用いることで

$$\begin{aligned} dF &= dE - TdS - SdT \\ &= -PdV - SdT \end{aligned} \quad (30.8)$$

[‡]ここで、 H と表記したが、ハミルトン関数ではない。

が得られる。こうして、

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \quad (30.9)$$

となる。

温度が一定で変化が起こる等温過程で物体に為される仕事 dW を考えよう。等温過程であるので、温度の変化はない。すなわち $dT = 0$ が満たされる。こうして、

$$dW = dE - TdS = d(U - TS) = dF \quad (30.10)$$

となる。したがって、等温過程で物体に為される仕事は、そのヘルムホルツの自由エネルギーの変化分に等しいことがわかる。

また、(30.7) から $E = F + TS$ と書ける。一方、(30.9) から S は F の T 微分で得られることがわかっているので、

$$E = F + TS = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -T^2\left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{F}{T}\right)_V \quad (30.11)$$

と、内部エネルギーがヘルムホルツの自由エネルギーから得られることが直ちにわかる。

§ 30.3 ギブスの自由エネルギー

引き続き、独立変数を温度 T と圧力 P に持つ熱力学関数を考える。次の熱力学関数 G を導入しよう。

$$G = F + PV (= H - TS = E + PV - TS) \quad (30.12)$$

これをギブスの自由エネルギーと呼ぶ。微分を取り、(30.8) を用いると

$$dG = -SdT + VdP \quad (30.13)$$

が得られ、確かに T と P の関数であることがわかる。こうして、

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T \quad (30.14)$$

が得られる。

§ 30.4 熱力学的過程の進む方向

一般に熱力学的過程はエントロピー S が時間 t とともに増大する方向に進むことをみた。不可逆過程では、受け取った熱量 dQ に無関係にエントロピーは増大する。このときには (28.40) ではなく、次の不等式が成り立つ。

$$\frac{dQ}{dt} < T\frac{dS}{dt} \quad (30.15)$$

こうして、エントロピーが時間とともに増大することは、(28.37) から

$$\frac{dE}{dt} + P\frac{dV}{dt} < T\frac{dS}{dt} \quad (30.16)$$

という不等式が成り立つこととなる。

過程が等温 ($T = \text{一定}$) かつ定積 ($V = \text{一定}$) である場合には、上式は

$$\frac{dE}{dt} - T \frac{dS}{dt} < -P \frac{dV}{dt} = 0 \quad (30.17)$$

となる。ここで、 V が一定であることを用いた。さらに T が一定であるので、左辺第 2 項の T を時間微分の中に入れて

$$\frac{d(E - TS)}{dt} = \frac{dF}{dt} < 0 \quad (30.18)$$

が得られる。ここで、(30.7) を用いた。

また、等温 ($T = \text{一定}$) かつ等圧 ($P = \text{一定}$) の過程では (30.16) は

$$\frac{dE}{dt} + \frac{d(PV)}{dt} - \frac{d(TS)}{dt} < 0 \quad (30.19)$$

と書けるが、(30.12) より

$$\frac{dG}{dt} < 0 \quad (30.20)$$

と書ける。こうして、系のエントロピーが増大する方向に進む過程は、自由エネルギーが減少する方向であることがわかる。平衡では自由エネルギーは極小値をとる。

§ 30.5 粒子数が変化する場合

以上では、体積等が変化する場合を考えた。これ以外にも、考えている部分系が外界と粒子等をやり取りする場合がある。系の状態を定める他のパラメータ λ_i が存在すれば、 λ_i に比例する項を熱力学関数に付け加えて、

$$dE = TdS - PdV + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i, \\ T = \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_V, \quad P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S, \quad (30.21)$$

$$dH = TdS + VdP + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i, \\ T = \left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_V, \quad V = \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_S, \quad (30.22)$$

$$dF = -PdV - SdT + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i, \\ P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T, \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad (30.23)$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i, \\ S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T, \quad (30.24)$$

とすればよい。

系が外界と粒子数のやり取りをする場合、 λ_i として、系の粒子数 N をとれば良い。このとき、 Λ_i を μ と記し、物体の化学ポテンシャルと呼ぶ。(30.21)~(30.24) から明らかなように

$$\begin{aligned} dE &= TdS - PdV + \mu dN, \\ dH &= TdS + VdP + \mu dN, \\ dF &= -PdV - SdT + \mu dN, \\ dG &= -SdT + VdP + \mu dN, \\ \mu &= \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(\frac{\partial H}{\partial N}\right)_{S,P} = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{P,T} \end{aligned} \quad (30.25)$$

となる。

また、熱力学関数は粒子数に対して相加的な量であり、また圧力、温度はそうでないことから、ある関数 f を用いて

$$G = Nf(P, T)$$

と書けるはずである。こうして、(30.25) から

$$G(P, T, N) = N\mu \quad (30.26)$$

でなければならないことがわかる。化学ポテンシャルは1粒子当たりのギブス自由エネルギーである。こうして、化学ポテンシャルは圧力 P と温度 T の関数であることがわかる： $\mu = \mu(P, T)$ 。1粒子当たりのエントロピーを s 、1粒子当たりの体積を v と書くと、(30.25) の G を1粒子当たりの量に書き直して、

$$d\mu = -sdT + vdP \quad (30.27)$$

が得られる。

今、一定体積の系を取り、粒子数は変化する場合を考えよう。このとき、(30.25) よりヘルムホルツの自由エネルギーに関して

$$dF = -SdT + \mu dN = -SdT - Nd\mu + d(N\mu) \quad (30.28)$$

となる。今、 $N\mu = G$ であり、(30.7)、(30.12) から $F - G = -PV$ であるので、

$$d(F - N\mu) = d(F - G) = d(-PV) = -SdT - Nd\mu \quad (30.29)$$

が得られる。ここで、新たな熱力学関数として $\Omega = -PV$ を導入すると

$$\begin{aligned} d\Omega &= -SdT - Nd\mu, & \Omega &= -PV \\ N &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = V\left(\frac{\partial P}{\partial \mu}\right)_{T,V} \end{aligned} \quad (30.30)$$

という関係が得られる。ここで、 Ω は大きなポテンシャルと呼ばれる。ここで、 $\Omega = -PV = F - G$ かつ (30.7) と (30.25) より

$$\Omega = E - TS - N\mu \quad (30.31)$$

となる。単位体積当たりの大きなポテンシャルを Φ と書くことにしよう。このとき

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{\Omega}{V} = e - Ts - n\mu, \\ d\Phi &= -sdT - nd\mu, \\ n &= -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\right)_T, & s &= -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_\mu \end{aligned} \quad (30.32)$$

となる。熱力学関数 Φ を熱力学ポテンシャルと呼ぶ。

§ 30.6 分配関数と自由エネルギー

§§30.6.1 カノニカル分布

2章で導入されたカノニカル分布では、分配関数 Z に系の情報が含まれていた。(28.19) 及び (28.20) と、(29.1) から $\beta = -\frac{1}{k_B T}$ であったことを用いて

$$S = -k_B \overline{\ln w_n} = -k_B \left(\ln \alpha - \frac{\bar{E}}{k_B T} \right) \quad (30.33)$$

となるので、(30.7) を思い出すと

$$\ln \alpha = \frac{\bar{E} - TS}{k_B T} = \frac{F}{k_B T} \quad (30.34)$$

と、ヘルムホルツの自由エネルギー F で表される。こうして、

$$w_n = \exp \left(\frac{F - E_n}{k_B T} \right) \quad (30.35)$$

と表される。こうして、確率分布関数 w_n の規格化の条件 $\sum_n w_n = 1$ から

$$1 = \sum_n w_n = e^{\frac{F}{k_B T}} \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = e^{\frac{F}{k_B T}} Z$$

と書ける。ここで、 Z は (29.3) で導入された分配関数である。こうして

$$F = -k_B T \ln Z, \quad Z = e^{-\frac{F}{k_B T}} \quad (30.36)$$

と表されることがわかる。

§§30.6.2 グランドカノニカル分布

今度は部分系のエネルギーに加えて、粒子数を外界とやり取りできる場合を考えよう。エネルギーを E_{iN} 、粒子数を N とする。(28.19) の議論から、粒子数も相加的な量であるので、粒子数分布 $w(E_{iN}, N)$ は

$$\ln w_{iN} = \ln w(E_{iN}, N) = \alpha + \beta E_{iN} + \gamma N \quad (30.37)$$

と書ける。系のエントロピー S は (28.20) より

$$\begin{aligned} S &= -k_B \ln w(\bar{E}, \bar{N}) = -k_B \sum_{i,N} w(E_{iN}, N) \ln w(E_{iN}, N) \\ &= -k_B (\alpha + \beta \bar{E} + \gamma \bar{N}) \end{aligned} \quad (30.38)$$

となる。ここで、(30.25) から、 E や N は統計平均が取られた量として

$$\begin{aligned} dS &= \frac{1}{T} dE + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN, \\ \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N} &= \frac{1}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T} \end{aligned} \quad (30.39)$$

が成り立つので、(30.38) から

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N} = -k_B \beta = \frac{1}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -k_B \gamma = -\frac{\mu}{T}$$

から

$$\beta = -\frac{1}{k_B T}, \quad \gamma = \frac{\mu}{k_B T}$$

と決まる。こうして、エネルギーと粒子数が変わり得る部分系の粒子の分布関数として

$$w_{iN} = w(E_{iN}, N) = e^\alpha e^{-\frac{E_{iN} - \mu N}{k_B T}} \quad (30.40)$$

の形をもつことがわかる。もう一度エントロピーの表式 (30.38) に戻り、平均量である上付きのバーを外して書くと

$$S = -k_B \alpha + \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T}, \quad \text{すなわち} \quad k_B T \alpha = E - TS - \mu N = \Omega \quad (30.41)$$

であることがわかる。ここで、(30.31) で導入された大きなポテンシャルを用いた。こうして $\alpha = \frac{\Omega}{k_B T}$ であることがわかったので、分布関数 w_{iN} は

$$w_{iN} = w(E_{iN}, N) = \exp\left(\frac{\Omega - E_{iN} + \mu N}{k_B T}\right) \quad (30.42)$$

と決まる。この分布はグランドカノニカル分布と呼ばれる。

さて、規格化の条件

$$1 = \sum_{i,N} w_{iN} = e^{\frac{\Omega}{k_B T}} \sum_N \left(e^{\frac{\mu N}{k_B T}} \sum_i e^{-\frac{E_{iN}}{k_B T}} \right) \quad (30.43)$$

より、大きなポテンシャル Ω は

$$\Omega = -k_B T \ln \left[\sum_N \left(e^{\frac{\mu N}{k_B T}} \sum_i e^{-\frac{E_{iN}}{k_B T}} \right) \right] \quad (30.44)$$

と表される。こうして、粒子数も変わり得るグランドカノニカル分布から得られる大きなポテンシャルは、グランドカノニカルポテンシャルとも呼ばれる。

§ 30.7 熱力学的諸量の関係

§§30.7.1 マクスウェルの関係式

(30.21) から直ちに

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V \quad (30.45)$$

が得られる。同様に、(30.22)、(30.23)、(30.24) より

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S &= \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P, \\ \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V &= \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T, \\ \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T &= -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \end{aligned} \quad (30.46)$$

が得られる。(30.45)、(30.46) は併せて、マクスウェルの関係式と呼ばれる。

§§30.7.2 熱容量

定積熱容量 C_V は (28.5) で導入されている。ここで、 $dQ = TdS$ であったので、 $C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$ となる。体積 V による変化を考えると

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_V}{\partial V} \right)_T &= T \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} = -T \frac{\partial^3 F}{\partial V \partial T^2} = -T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \\ &= T \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_V \end{aligned} \quad (30.47)$$

と、ヘルムホルツの自由エネルギーを用いて表され、かつ圧力の温度変化で表される。ここで、マクスウェルの関係式 (30.23) 及び (30.9) を用いた。同様にして、定圧熱容量 C_P の圧力変化に関して

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_P}{\partial P} \right)_T &= T \frac{\partial^2 S}{\partial P \partial T} = -T \frac{\partial^3 G}{\partial P \partial T^2} = -T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T \\ &= -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2} \right)_P \end{aligned} \quad (30.48)$$

と、ギブスの自由エネルギーを用いて表され、体積の温度変化で表される。ここで、マクスウェルの関係式 (30.24) 及び (30.14) を用いた。

さて、熱力学第1法則 (28.37) において、内部エネルギー E を温度と体積の関数に変換したとする。このとき、熱容量の定義 (3.5)、(3.7) から

$$\begin{aligned} dQ &= dE + PdV \\ &= \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T dV \right] + PdV, \\ \text{すなわち } C_P &= C_V + \left[\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T + P \right] \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \end{aligned} \quad (30.49)$$

が成り立っている。一方、ヤコビアンを用いると*

$$\begin{aligned} C_V &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = T \frac{\partial(S, V)}{\partial(T, V)} = T \frac{\frac{\partial(S, V)}{\partial(T, P)}}{\frac{\partial(T, V)}{\partial(T, P)}} \\ &= T \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P}{\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T} = C_P - T \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P}{\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T} \end{aligned} \quad (30.50)$$

が成り立つ。ここで、マクスウェルの関係式 (30.46) を用いると最終的に

$$C_P - C_V = -T \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P^2}{\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T} \quad (30.51)$$

が得られる。ここで、圧力 P を増大すると体積 V は収縮するので、 $\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$ は負である。こうして、(30.51) から

$$C_P > C_V \quad (30.52)$$

*ヤコビアン

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{vmatrix} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x}$$

を用いると、

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_y, \quad \frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial(u, v)}{\partial(t, s)} \frac{\partial(t, s)}{\partial(x, y)}$$

が成り立つので、計算に便利である。

であることがわかる。体積膨張率 β 及び、等温圧縮率 χ_T を次のようにして導入しよう。

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \\ \chi_T &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T\end{aligned}\quad (30.53)$$

このとき、(30.51) は

$$C_P - C_V = \frac{TV\beta^2}{\chi_T} \quad (30.54)$$

と書ける。以下に、銅の実験値を記しておこう。

ここで、(30.49) に戻ろう。 $\left[\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T + P \right] \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = C_P - C_V$ となることを逆に利用して、

$$dQ = C_V T + (C_P - C_V) \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_P dV \quad (30.55)$$

と書ける。断熱過程では $dQ (= TdS) = 0$ であったので、

$$\begin{aligned}C_V T + (C_P - C_V) \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_P dV &= 0, \\ \text{すなわち} \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_{\text{断熱}} &= -\frac{C_P - C_V}{C_V} \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_P = -(\gamma - 1) \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_P\end{aligned}\quad (30.56)$$

となる。ここで、

$$\gamma = \frac{C_P}{C_V} > 1 \quad (30.57)$$

と定義した。

§§30.7.3 熱力学的不等式

外界と接触している部分系を考えよう。系は外界の温度 T_0 と圧力 P_0 と一致している。このとき、ギブスの自由エネルギー G は

$$G = E - T_0 S + P_0 V \quad (30.58)$$

表 1: 銅での実験値

T/K	$C_P / \text{cal/mol}\cdot\text{K}$	C_V	$TV\beta^2/\chi_T$
50	1.38	1.38	0.000154
100	3.88	3.86	0.0230
200	5.41	5.32	0.0931
500	6.25	5.95	0.298
800	6.70	6.14	0.555
1200	7.34	6.34	1.00

となる。系は外界と接触しており、外界の温度、圧力のまま、仮想的に外界との平衡状態からずらしてみよう。

$$\delta G = \delta E - T_0 \delta S + P_0 \delta V > 0 \quad (30.59)$$

となる。ここで、平衡では、(30.20) より、ギブスの自由エネルギーは最小であることから、平衡からずらすと必ず $\delta G > 0$ となることを記した。今、内部エネルギー E は、エントロピー S と体積 V の関数であったので、(30.59) 式は、2次まで展開することで

$$\begin{aligned} \delta G &= \left[\left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_V \delta S + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S \delta V \right] - T_0 \delta S + P_0 \delta V \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_V (\delta S)^2 + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \delta S \delta V + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right)_S (\delta V)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_V (\delta S)^2 + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \delta S \delta V + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right)_S (\delta V)^2 \right] > 0 \end{aligned} \quad (30.60)$$

となる。ここで、(30.21) を用いた。この不等式が任意の δS 、 δV で成り立つためには

$$\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} > 0, \quad \frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \right)^2 > 0 \quad (30.61)$$

が成り立たねばならない。まず、第1式から、(30.21) を用いて

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_V = \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_V = \frac{T}{C_V} > 0 \quad (30.62)$$

が得られる。ここで、(30.5) で $dQ = TdS$ から、2番目の等式を得る。こうして、定積熱容量 C_V に対して、

$$C_V > 0 \quad (30.63)$$

を得る。次に、(30.62) の第2の式から、(28.35)、(28.36) を用いて

$$\begin{aligned} 0 &< \frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \right)^2 \\ &= - \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S \left(\frac{\partial P}{\partial S} \right)_V \\ &= - \frac{\partial(T, P)}{\partial(S, V)} = - \frac{\frac{\partial(t, P)}{\partial(T, V)}}{\frac{\partial(S, V)}{\partial(T, V)}} = - \frac{(\frac{\partial P}{\partial V})_T}{(\frac{\partial S}{\partial T})_V} \\ &= - \frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \end{aligned} \quad (30.64)$$

が得られる。こうして、

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T < 0, \quad \text{すなわち} \quad \chi_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T > 0 \quad (30.65)$$

となり、(30.52) が正しいことが示され、かつ (30.53) の等温圧縮率 χ_T が正であることが言える。

§ 30.8 最大仕事とカルノーサイクル

異なった温度、 T_1 と T_2 ($> T_1$) を持つ2物体間で、エネルギーのやり取りをして仕事をしよう。エネルギーのやり取りが直接の物体間の接触で行われるときには、高温の物体から低温の物体へ熱が流れるだけで、外部

に仕事を取り出すことが出来ない。そこで、可逆過程によりエネルギーのやり取りをすることが必要となる。そのためには2物体の間に作業物体を導入し、仕事を取り出す過程が終わると、可逆過程であることから作業物体はもとの状態に戻っていなければならない。

まず、(i) 作業物体は高温の物体から温度 T_2 で、等温過程でエネルギーを受け取り、外部に仕事をする。次に温度 T_2 の物体から切り離し、(ii) 作業物体は断熱的に温度 T_1 まで冷却し、この時に外部に仕事をする。(iii) 温度 T_1 の物体に接触させ、等温過程で外から仕事をする。(iv) 最後に断熱過程で作業物体は断熱的に温度 T_2 まで外から仕事をされ、温度を上昇させ、最初の状態に戻す。このサイクルで高温の物体はエネルギー $-\delta E_2 = -T_2 \delta S_2$ を失い、低温の物体はエネルギー $\delta E_1 = T_1 \delta S_1$ を得る。従って、作業物体が為した仕事 δR は、高温の物体が失ったエネルギーと低温の物体が得たエネルギーの差であるので

$$\delta R = -\delta E_2 - \delta E_1 = -T_2 \delta S_2 - T_1 \delta S_1 \quad (30.66)$$

である。可逆過程であるので、エントロピーの和 $S_1 + S_2$ は一定であるので、 $\delta S_1 + \delta S_2 = 0$ より、上式は

$$\delta R = -(T_2 - T_1) \delta S_2 = -(T_2 - T_1) \frac{\delta E_2}{T_2} \quad (30.67)$$

となる。仕事になったエネルギー ΔE_2 と、外部にした仕事の比は熱効率と呼ばれ、今考えた可逆過程での熱効率 $\eta_{\text{最大}}$ は

$$\eta_{\text{最大}} = \frac{T_2 - T_1}{T_2} \quad (30.68)$$

と表される。これが最大仕事の熱効率であり、ここで考えた可逆過程はカルノーサイクルと呼ばれる。こうして、低温の物体が絶対零度でない限り、熱効率は決して1にならないことがわかる。

31章 相転移

互いに接触しあいながら、相互に平衡を保って同時に存在することのできる物質の状態を相と呼ぶ。2つの系が、それぞれの相にあり、これらは平衡状態にあるとしよう。2つの系はエネルギーと粒子のやり取りをできるものとする。平衡では全系のエントロピー S は最大に達しているので、

$$dS = dS_I + dS_{II} = 0 \quad (31.1)$$

が成り立つ。添え字 I、II はそれぞれの系の量を表す。(30.25) より、

$$dS_I = \frac{dE_I}{T_I} + \frac{P_I}{T_I} dV_I - \frac{\mu_I}{T_I} dN_I, \quad dS_{II} = \frac{dE_{II}}{T_{II}} + \frac{P_{II}}{T_{II}} dV_{II} - \frac{\mu_{II}}{T_{II}} dN_{II} \quad (31.2)$$

であるが、系全体としてエネルギーは一定 ($dE = 0$)、体積は一定 ($dV = 0$)、粒子数は一定 ($dN = 0$) であるので、

$$dE = dE_I + dE_{II} = 0, \quad dV = dV_I + dV_{II} = 0, \quad dN = dN_I + dN_{II} = 0 \quad (31.3)$$

が成り立つので、(31.2) の両辺を足して (31.3) を用いると

$$dS = \left(\frac{1}{T_I} - \frac{1}{T_{II}} \right) dE_I + \left(\frac{P_I}{T_I} - \frac{P_{II}}{T_{II}} \right) dV_I - \left(\frac{\mu_I}{T_I} - \frac{\mu_{II}}{T_{II}} \right) dN_I = 0 \quad (31.4)$$

が得られるが、系 I の任意の変化 dE_I 、 dV_I 、 dN_I に対して成り立つためには

$$T_I = T_{II}, \quad P_I = P_{II}, \quad \mu_I = \mu_{II} \quad (31.5)$$

が成り立たねばならないことがわかる。すなわち、2相が平衡にある(相平衡)ときには、両相の温度 T 、圧力 P 、化学ポテンシャル μ は等しいことがわかる。

化学ポテンシャルは1粒子当たりのギブス自由エネルギーであったことを思い出そう。ギブス自由エネルギーは圧力と温度の関数であったので、2相が共存する場合、(31.5) から

$$\mu_I(P, T) = \mu_{II}(P, T) \quad (31.6)$$

ということになる。こうして、平衡で圧力 P と温度 T の間に一つの関係が存在する。圧力-温度の関係を2次元グラフに表すと、 P - T 面内に共存曲線が引けることになる。2相が平衡にある時、温度 T を与えた時に決まる圧力を飽和蒸気圧と呼び、圧力 P が与えられた時に決まる温度は沸点、あるいは融点と呼ばれる。

次に3相が平衡にあるとしよう。このとき、

$$T_I = T_{II} = T_{III}, \quad P_I = P_{II} = P_{III}, \quad \mu_I = \mu_{II} = \mu_{III} \quad (31.7)$$

が得られる。こうして、

$$\mu_I(P, T) = \mu_{II}(P, T) = \mu_{III}(P, T) \quad (31.8)$$

となる。平衡では圧力と温度の間に2つの関係が存在することになり、 P - T 相図上で平衡点は1点に決まる。これを三重点と呼ぶ。

さて、ある相から別の相へ相転移が起きるとしよう。相平衡の条件から、転移は定温・定圧で起きる。定圧変化する場合にはエネルギーの変化はエンタルピーの変化に等しかったので、相 I から相 II への転移で吸収される熱 Q は

$$Q = H_{II} - H_I \quad (31.9)$$

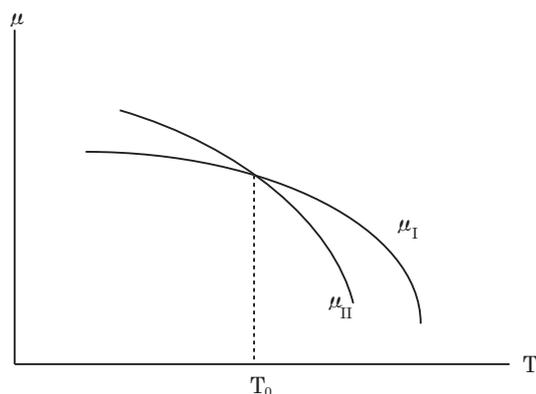


図 89:

となる。この熱量 Q は潜熱と呼ばれる。

(30.12) から、1 粒子当たりのギブスの自由エネルギー、すなわち化学ポテンシャルは、1 粒子当たりの量を小文字で記すと

$$\mu = e - Ts + Pv \quad (31.10)$$

と書ける。平衡点では $\mu_I = \mu_{II}$ であるので、

$$(e_{II} - e_I) - T(s_{II} - s_I) + P(v_{II} - v_I) = 0, \quad \text{すなわち} \quad (h_{II} - h_I) - T(s_{II} - s_I) = 0 \quad (31.11)$$

が成り立つ。ここで、 h は 1 粒子当たりのエンタルピー (30.1) である。(31.9) とあわせて、1 粒子当たりの潜熱 q は

$$q = T(s_{II} - s_I) \quad (31.12)$$

となる。今、図 89 のように、温度 T_0 で 2 相は共存 ($\mu_{II} = \mu_I$) しており、 $T > T_0$ の高温では相 II が実現しているとしよう ($\mu_{II} < \mu_I$)。図から明らかなように、平衡点では

$$\frac{\partial \mu_I}{\partial T} > \frac{\partial \mu_{II}}{\partial T} \quad (31.13)$$

が成り立つ。ここで、(30.14) から 1 粒子当たり、 $s = -\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P$ の関係があるので、(31.13) から $s_I < s_{II}$ であることがわかる。こうして、温度が上昇して相 I から相 II へ相転移する際、

$$q = T(s_{II} - s_I) > 0 \quad (31.14)$$

となり、相 I から相 II へ転移するとき熱が吸収 ($q > 0$) されることがわかる。すなわち、相転移中、共存状態では加熱しても温度一定のままである。

2 相の平衡条件 (31.6) に戻ろう。2 相の共存線に沿っての変化を考える。共存曲線上であるので、圧力 P を温度 T の関数とみると

$$\frac{\partial \mu_I}{\partial T} + \frac{\partial \mu_I}{\partial P} \frac{dP}{dT} = \frac{\partial \mu_{II}}{\partial T} + \frac{\partial \mu_{II}}{\partial P} \frac{dP}{dT} \quad (31.15)$$

が得られる。ここで、(30.14) から 1 粒子当たり $s = -\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_P$ 、 $v = \left(\frac{\partial\mu}{\partial P}\right)_T$ より、上式から

$$\frac{dP}{dT} = \frac{s_{\text{I}} - s_{\text{II}}}{v_{\text{I}} - v_{\text{II}}} \quad (31.16)$$

が得られる。(31.12) の潜熱 q を用いると、

$$\frac{dP}{dT} = \frac{q}{T(v_{\text{II}} - v_{\text{I}})} \quad (31.17)$$

となる。これをクラウジウス・クラペイロンの式と呼ぶ。逆に、

$$\frac{dT}{dP} = \frac{T(v_{\text{II}} - v_{\text{I}})}{q} \quad (31.18)$$

と書くと、圧力変化に伴う転移温度の変化、すなわち融点または沸点の変化を求めることが出来る。一般に、気体の体積の方が液体の体積より大きく、温度上昇により液体（相 I）から気体（相 II）に転移するので、 $v_{\text{II}} > v_{\text{I}}$ により、(31.18) より $\frac{dT}{dP} > 0$ が有られる。すなわち、圧力上昇により液体の沸点は上昇することがわかる。

相転移が起きるとき、1 粒子当たりのエントロピー $s = -\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_P$ 、及び体積 $v = \left(\frac{\partial\mu}{\partial P}\right)_T$ に不連続が生じるとき、その転移を一次相転移と呼ぶ。一方、不連続が生じず、連続的に転移が起きるとき、その転移を二次相転移と呼ぶ。

さて、等温変化では、(30.65) の熱力学的不等式から $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_V < 0$ が満たされなければならなかった。こうして、 T - V 面で等温曲線を描いた際には、 $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_V > 0$ となる領域は物理的に許されない状態である。図 90 で破線で描かれた領域 CD 間である。体積を圧縮していき、相 II で体積 V_{II} の B 点まで圧縮されたとしよう。等温曲線は物理的に許されない DC 間をさけて、A まで圧力一定で体積が圧縮され、II 相から I 相へ相転移を起こす。このとき、相平衡の条件から圧力は一定 (P_0) である。I 相になると再び体積の圧縮とともに圧力は増加する。では、等温曲線のどこで、I 相と II 相は繋がれるだろうか。

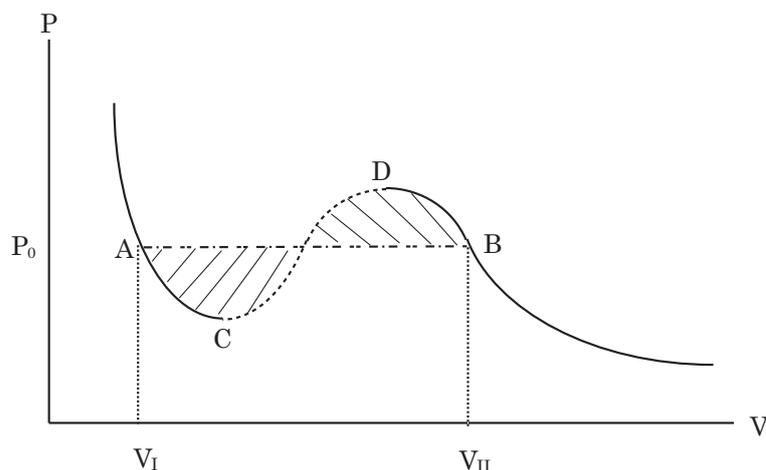


図 90:

一般に、いくつかの物質からなる系を考えよう。物質の種類を 1, 2, ... と記すと、ギブスの自由エネルギー G は

$$G = G(T, P, N_1, N_2, \dots) \quad (31.19)$$

となる。すべての種類の粒子数を λ 倍すると、自由エネルギーも λ 倍されることから、

$$G(T, P, \lambda N_1, \lambda N_2, \dots) = \lambda G(T, P, N_1, N_2, \dots) \quad (31.20)$$

となるが、両辺を λ で微分してから $\lambda = 1$ と置くことにより、

$$\left(\frac{\partial G}{\partial N_1}\right)_{T, P, N_2, N_3, \dots} N_1 + \left(\frac{\partial G}{\partial N_2}\right)_{T, P, N_1, N_3, \dots} N_2 + \dots = G(T, P, N_1, N_2, \dots) \quad (31.21)$$

が得られる。ここで、 $\left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{T, P, N_1, N_2, \dots} = \mu_i$ より

$$G(T, P, N_1, N_2, \dots) = \sum_i \mu_i N_i \quad (31.22)$$

が得られる。こうして、

$$dG = \sum_i N_i d\mu_i + \sum_i \mu_i dN_i \quad (31.23)$$

であるが、(30.24) より ($\Lambda_i = \mu_i$, $d\lambda_i = dN_i$)

$$\begin{aligned} dG &= \sum_i N_i d\mu_i + \sum_i \mu_i dN_i = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dN_i \\ \text{すなわち} \quad \sum_i N_i d\mu_i &= -SdT + VdP \end{aligned} \quad (31.24)$$

となる。(31.24) をギブス・デュエムの式と呼ぶ。

さて、図 90 に戻って、相転移線 AB を決定することを考えよう。等温過程であるので $dT = 0$ を用いると、今、考えている物質の種類は 1 種類であるので、ギブス・デュエムの式より $i = 1$ のみ考えて ($\mu_i = \mu$ と、添え字を除く)

$$Nd\mu = VdP = d(PV) - P_0dV - (P - P_0)dV \quad (31.25)$$

と変形できる。平衡状態では相 I と相 II で $\mu_I = \mu_{II}$ であり、相変化の途中で常に成り立っているので、

$$\int_I^{II} d\mu = 0 \quad (31.26)$$

が満たされる。(31.26) の両辺に N を掛けてから (31.25) を代入すると

$$0 = [PV]_I^{II} - P_0[V]_I^{II} - \int_I^{II} (P - P_0)dV \quad (31.27)$$

となるが、右辺の第 1 項と第 2 項は同じものを与え打ち消す (相転移では $P_I = P_{II} \equiv P_0$) ので、

$$\int_I^{II} (P - P_0)dV = 0 \quad (31.28)$$

が得られる。この式は、図 90 で右斜線を付けた面積と左斜線を付けた面積が等しい (打ち消す) ことを意味している。これをマクスウェルの規則 (マクスウェルの等積原理) と呼ぶ。

32章 理想気体

§ 32.1 理想気体の状態方程式

粒子間に相互作用が無く、粒子が質量 m の質点と見なされる場合を考察しよう。粒子のエネルギーは

$$H(q, p) = \epsilon(p) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (32.1)$$

である。こうして分配関数 (29.3) から、1 粒子当たり

$$Z_1 = \int \int \frac{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{\epsilon(p)}{k_B T}\right) = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (32.2)$$

の寄与が存在する。ここで、 $\int d^3\mathbf{r} = V$ と系の体積を与えることと、§2.2 の脚注で与えた積分公式を用いた。 N 粒子では Z_1^N となることが期待されるが、古典的な粒子では量子力学に従う粒子のように、粒子の区別を行ってしまっているため、数えすぎが生じてしまう。 N 個の粒子の可能な置換の数だけ数えすぎているので、 $N!$ で割っておく必要が生じる。こうして、 N 粒子系の自由粒子の分配関数は

$$Z = \frac{1}{N!} Z_1^N = \frac{1}{N!} V^N \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \quad (32.3)$$

となる。ヘルムホルツの自由エネルギー F は (30.36) より

$$F = -Nk_B T \ln \left(V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \right) + k_B T \ln N! \quad (32.4)$$

を得る。ここで、 N が極めて大きい量であるので、近似公式

$$\ln N! \approx N \ln \frac{N}{e} \quad (32.5)$$

を用いよう。こうして、ヘルムホルツの自由エネルギー F は

$$F = -Nk_B T \ln \left(\frac{eV}{N} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (32.6)$$

と得られる。上式を体積 V を含む項を分離し

$$F = -Nk_B T \ln \frac{eV}{N} + Nf(T) \quad (32.7)$$

と書いておこう。 $f(T)$ の定義は両式を比較することで直ちに得られる。(30.23) より、

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{Nk_B T}{V} \quad (32.8)$$

が得られる。整理して、

$$PV = Nk_B T \quad (32.9)$$

となる。これを理想気体の状態方程式と呼ぶ。

(30.49) から、定積熱容量と定圧熱容量の差の表式を得た。理想気体の場合、 $V = \frac{Nk_B T}{P}$ より $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{Nk_B}{P}$ 、 $\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -\frac{Nk_B T}{P^2}$ が得られるので、

$$C_P - C_V = Nk_B \quad (32.10)$$

と得られることがわかる。

さらに $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P = \frac{P}{Nk_B} = \frac{T}{V}$ も容易に得られるので、理想気体の場合には (30.66) から断熱変化では

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{\text{断熱}} = -(\gamma - 1)\frac{T}{V} \quad (32.11)$$

となり、積分すると $\ln T = \ln V^{-(\gamma-1)} + (\text{定数})$ となるので、

$$TV^{\gamma-1} = (\text{一定}), \quad \text{または} \quad PV^\gamma = (\text{一定}) \quad (32.12)$$

が得られる。第 2 式で再び理想気体の状態方程式を用いた。

§ 32.2 理想気体の状態方程式の力学的把握と非理想気体の状態方程式

この小節では、理想気体の状態方程式の力学的な把握を試みておこう。まず、気体の圧力 P は単位面積当たり働く力であるので、力を F 、面積を A として

$$P = \frac{F}{A}$$

である。気体を箱に閉じ込めたと考え、気体分子が箱の壁に及ぼす力の平均を考えよう。ある方向 (x 方向とする) のみを考える。単位時間中に一つの壁に当たる分子数 n' は

$$n' = \frac{n}{2}v_x A$$

となるであろう。ここで、 n は、単位体積あたりの分子数であり、その内の半数が x の正方向にある一つの壁にむかっている。また、 v_x は分子の x 方向の速度、 A は壁の面積であり、 $v_x A$ は、単位時間に壁に当たる分子が含まれている体積を示している。分子は壁に当たり、その運動量を変化させる。完全に跳ね返されるとし、分子の質量を m とすると、初めの運動量 mv_x が壁との衝突後、 $-mv_x$ に変化する。運動量変化が壁に及ぼす力 f に等しいので

$$f = mv_x - (-mv_x) = 2mv_x$$

である。よって、壁にあたる全分子の寄与を足し合わせると、気体分子が一つの壁に及ぼす力 F は

$$F = n' f = 2mv_x \cdot \frac{n'}{2} v_x A$$

となるので、圧力 P は

$$P = \frac{F}{A} = nmv_x^2$$

となる。分子はすべて同じ速さを持っているわけではないので、 v_x^2 をその平均で置き換えよう。平均量を $\langle \dots \rangle$ で表す。さらに、 x 、 y 、 z 方向の速度の平均は等しいはずなので、

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle .$$

である。ここで、 $\langle v^2 \rangle$ は速度の大きさの 2 乗の平均値 ($v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$) である。以上より、圧力 P は

$$P = nm \langle v_x^2 \rangle = \frac{2}{3} n \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle \quad (32.13)$$

と求まる。さらに、両辺に箱の体積 V をかけ、体積 V 中に含まれる分子数を $N = nV$ と書くと、

$$PV = N \frac{2}{3} \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle \quad (32.14)$$

となる。

さて、箱を2つの部分、1、2に分け、動く壁で仕切ったとしよう。平衡では仕切りの壁は動かず、すなわち両部分系で圧力 P は等しいはずなので、(32.12) から

$$n_1 \left\langle \frac{1}{2} m v_1^2 \right\rangle = n_2 \left\langle \frac{1}{2} m v_2^2 \right\rangle .$$

が成り立っているはずである。ところが、もし、 $v_1 \gg v_2$ 、 $n_1 \ll n_2$ でこの式が成り立っていたとすると、 v_1 の分子が (n_1 が小さいので) 時々仕切り壁に当たりそれを大きく動かして2の分子に運動エネルギーを与えて2の分子は速くなり、それによって1の分子自身は遅くなるのが考えられる。時間が経てば結局 $\langle v_1^2 \rangle \sim \langle v_2^2 \rangle$ となるであろう。よって、平衡では $n_1 \sim n_2$ であり、かつ

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_1^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m v_2^2 \right\rangle$$

が成り立つと考えられる。こうして、平衡状態で等しい量として、「温度 (T)」を導入することにしよう。

$$\left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T . \quad (32.15)$$

ここで、比例定数 k_B を導入した。エネルギーと温度の換算として、定数 k_B は

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} .$$

という値を持ち、ボルツマン定数に他ならない。平均として $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle$ であるので、一方向あたり $\frac{1}{2} k_B T$ ($\langle \frac{1}{2} m v_x^2 \rangle = \langle \frac{1}{2} m v_y^2 \rangle = \langle \frac{1}{2} m v_z^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$) となる。この事実はマクスウェルの速度分布の節で導出されたエネルギー等分配の法則に他ならない。

以上から、理想気体の状態方程式は、(32.13) 式と (32.14) 式から、

$$PV = N k_B T$$

と導かれる。

さて、理想気体の状態方程式から、すべての理想気体は、同じ温度 (T)、同じ圧力 (P)、同じ体積 (V) のもとで、同数の分子 (N) を含んでいることがわかる。この事実をアボガドロの法則と呼ぶ。また、理想気体の内部エネルギー E は

$$E = N \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{3}{2} N k_B T$$

となるので、単位温度上げるのに必要なエネルギー C は

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} N k_B$$

と求まってしまう。また、気体分子の運動エネルギーの平均が温度 T であったので、温度は負の値をとることはできない。すなわち、絶対零度が存在することがわかる。[†]

[†]温度の単位として、水の3重点の温度の $1/273.16$ を 1K (ケルビン) と定義する。通常使う摂氏温度 (t_c °C) とは、

$$T = t_c + 273.15$$

の関係がある。

実在の気体を扱う際には、分子に大きさがあること、及び分子間引力を考慮しなければならないかもしれない。分子が動ける体積 V' は、箱の体積 V から分子自身が占める体積 Nb (b が分子 1 個の体積の目安) を引いたものであろう。こうして、理想気体の状態方程式は変更を受け、体積 V の代わりに $V - Nb$ を代入した

$$P(V - Nb) = Nk_B T$$

となることが予想される。すなわち、

$$P = \frac{Nk_B T}{V - Nb}$$

と書き直される。次に分子間引力を考慮しよう。箱の十分内部では、注目する分子は周りの分子から等しく引力を受けるので、その効果は打ち消される。しかしながら、箱の表面にある分子では注目している分子に分子間引力を及ぼす分子は箱の内側にしか存在しないので、箱の壁の反対側からだけ分子間引力を受けることになり、箱の壁に及ぼす圧力は減少するであろう。箱の壁際(表面)にある分子数は、粒子数密度 $\frac{N}{V}$ に比例するはずである。また、注目している分子に分子間引力を及ぼす(箱の内側の)分子数も、粒子数密度に比例するであろう。こうして、 a を分子間引力を表すある定数として、圧力 P は $a(N/V)^2$ だけ減少しているとみなせる。よって、状態方程式は、上式からさらに変更されて

$$P = \frac{Nk_B T}{V - Nb} - a \left(\frac{N}{V} \right)^2$$

と圧力が減少する。整理して

$$\left(P + a \left(\frac{N}{V} \right)^2 \right) (V - Nb) = Nk_B T$$

が得られる。この状態方程式は次節で導くファン・デル・ワールズ方程式である。

§ 32.3 非理想気体の状態方程式—Van der Waals 方程式—

理想気体の状態方程式を導いた際には、粒子間の相互作用を無視した。今度は、相互作用を考慮しよう。質量 m の質点と見なされる粒子 N 個が互いに相互作用をしている場合を考察しよう。粒子のエネルギーは

$$H(q, p) = E(p) + U = \sum_{a=1}^N \frac{p_a^2}{2m} + U \quad (32.16)$$

と書ける。ここで、 $p_a^2 = p_{ax}^2 + p_{ay}^2 + p_{az}^2$ であり、 U が各粒子間の相互作用エネルギーである。分配関数(29.3)から、相互作用以外の部分は(31.18)で与えたように、運動量積分は理想気体と同様に実行し、体積 V^N の部分は相互作用ポテンシャルの為に座標積分が実行されずに残ることを考慮すると

$$Z = Z_{\text{id}} \cdot \frac{1}{V^N} \int \cdots \int e^{-\frac{U}{k_B T}} dV_1 dV_2 \cdots dV_N, \\ Z_{\text{id}} = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3N}{2}} \quad (32.17)$$

と計算される。ここで、 Z_{id} は理想気体の場合の分配関数 (32.3) である。ヘルムホルツの自由エネルギー F は (30.36) より

$$\begin{aligned}
 F &= -k_B T \ln Z \\
 &= -k_B T \ln Z_{\text{id}} - k_B T \ln \frac{1}{V^N} \int \cdots \int e^{-\frac{U}{k_B T}} dV_1 dV_2 \cdots dV_N \\
 &= F_{\text{id}} - k_B T \ln \frac{1}{V^N} \int \cdots \int e^{-\frac{U}{k_B T}} dV_1 dV_2 \cdots dV_N, \\
 F_{\text{id}} &= -N k_B T \ln \left(V \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) + k_B T \ln N!
 \end{aligned} \tag{32.18}$$

を得る。ここで、 F_{id} は (32.4) の理想気体の場合のヘルムホルツ自由エネルギーである。(32.18) 第 2 項を考えよう。被積分関数から 1 を引いて足しておき、相互作用は 2 粒子間であり、どの 2 粒子間でも同じであることを考慮する。 N 個の粒子から 2 つ選ぶ組み合わせは $\frac{N(N-1)}{2}$ であるので、粒子 1 と 2 に相互作用を代表させると、 $U \rightarrow U_{12}$ より

$$\begin{aligned}
 ((32.18) \text{ 第 2 項}) &= -k_B T \ln \left[\frac{1}{V^N} \int \cdots \int \left(e^{-\frac{U}{k_B T}} - 1 \right) dV_1 dV_2 \cdots dV_N + 1 \right] \\
 &= -k_B T \ln \left[\frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{V^2} \int \int \left(e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}} - 1 \right) dV_1 dV_2 + 1 \right]
 \end{aligned}$$

となる。続いて、2 粒子間の相互作用は粒子間の相対座標にのみ依存するので、1 と 2 の粒子の座標を相対座標 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ と、重心座標 $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$ にわけ、重心座標についての積分を実行すると、 $\int d^3 \mathbf{R} = V$ より、 $d^3 \mathbf{r} \equiv dV$ と書いて

$$((32.18) \text{ 第 2 項}) = -k_B T \ln \left[\frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{V} \int \int \left(e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}} - 1 \right) dV + 1 \right]$$

と書ける。ここで、 N は大きい数であるので、 $N(N-1) \approx N^2$ とし、相互作用 U_{12} が小さいときには被積分関数は 1 に比べて十分小さいので、対数の近似式 $\ln(1+x) \approx x$ を用いると、上式から

$$\begin{aligned}
 F &\approx F_{\text{id}} + \frac{N^2 k_B T B(T)}{V}, \\
 B(T) &\equiv \frac{1}{2} \int \int \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}} \right) dV
 \end{aligned} \tag{32.19}$$

が得られる。こうして、 $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ と、理想気体の $P_{\text{id}} = -\left(\frac{\partial F_{\text{id}}}{\partial V}\right)_T = N \frac{k_B T}{V}$ より

$$P = \frac{N k_B T}{V} \left(1 + \frac{N B(T)}{V} \right) \tag{32.20}$$

が得られる。これがここで考えている近似の範囲内での非理想気体の状態方程式である。

分子間力は近距離では斥力であり、遠距離で弱い引力である。ポテンシャルエネルギーは近距離では r^{-12} 、遠方では $-r^{-6}$ の依存性を持つ。そこで、 $r = 2r_0$ までは斥力、 $r > 2r_0$ では引力と仮定しよう。ここで、 r_0 はおよそその分子の半径と見なされる。(32.19) の相互作用に起因した項 $B(T)$ を考える。積分を $0 < r < 2r_0$ と $r > 2r_0$ の 2 つに分け、 $dV = 4\pi r^2 dr$ より

$$B(T) = 2\pi \int_0^{2r_0} \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}} \right) r^2 dr + 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}} \right) r^2 dr$$

と書けるが、右辺第1項では強い斥力であり、 U_{12} が正で大きいと考えられるので、 $e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}$ は1に比べ十分小さいとして近似的に0としてしまおう。一方、第2項は弱い引力であり、 $\left|-\frac{U_{12}}{k_B T}\right| \ll 1$ より、指数関数を展開する。こうして、上式から $B(T)$ は

$$\begin{aligned} B(T) &\approx 2\pi \int_0^{2r_0} r^2 dr + 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} \frac{U_{12}}{k_B T} r^2 dr \\ &= b - \frac{a}{k_B T}, \\ b &= \frac{16}{3}\pi r_0^3, \quad a = 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} |U_{12}| r^2 dr \end{aligned} \quad (32.21)$$

と表される。ここで、 b は粒子の体積 (の4倍) と見なされるものであり、 a は相互作用に依存した量であり、 $r > 2r_0$ では $U_{12} < 0$ であることを考慮して正の量 ($a > 0$) として定義した。こうして、非理想気体の状態方程式 (32.20) は

$$P = \frac{Nk_B T}{V} \left(1 + \frac{N}{V} \left(b - \frac{a}{k_B T} \right) \right)$$

と書ける。ここで、系は希薄であり、分子間引力が小さい、すなわち体積 V が Nb より十分大きいとき、右辺は $\frac{1}{V - Nb} = \frac{1}{V} \cdot \frac{1}{1 - \frac{Nb}{V}} \approx \frac{1}{V} \cdot \left(1 + \frac{Nb}{V} \right)$ と近似されるので、上式は

$$\begin{aligned} P &= Nk_B T \left(\frac{1}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N}{V^2} \frac{a}{k_B T} \right) \\ &\approx Nk_B T \frac{1}{V - Nb} - \frac{N^2 a}{V^2} \end{aligned} \quad (32.22)$$

が得られる。整理すると

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2} \right) (V - Nb) = Nk_B T \quad (32.23)$$

となる。これは前節で (直感的に) 導いた非理想気体の状態方程式であるファン・デル・ワールズ方程式である。*

*非理想気体の自由エネルギー (32.19) は

$$F = F_{\text{id}} + \frac{N^2}{V} (k_B T b - a)$$

となる。ここで F_{id} は理想気体の自由エネルギー (32.7) であるので、代入して整理すると

$$F = Nf(T) - Nk_B T \ln \frac{e}{N} - Nk_B T \left(\ln V - \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V}$$

となるが、系は希薄であり、分子間引力が小さい、すなわち体積 V が Nb より十分大きいとき、右辺第3項は $\ln(V - Nb) = \ln \left(V \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \right) = \ln V + \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \approx \ln V - \frac{Nb}{V}$ と近似される。こうして、上式は

$$\begin{aligned} F &\approx Nf(T) - Nk_B T \ln \frac{e}{N} - Nk_B T \ln(V - Nb) - \frac{N^2 a}{V} \\ &= Nf(T) - Nk_B T \ln \frac{e}{N} - Nk_B T \ln \left(V \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \right) - \frac{N^2 a}{V} \\ &= F_{\text{id}} - Nk_B T \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V} \end{aligned}$$

となる。状態方程式は、 $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ より、ファン・デル・ワールズ方程式が再び得られる。

33章 いくつかの応用

§ 33.1 ジュール・トムソン過程

圧力 P_1 の気体（または液体）が、圧力 P_2 の気体（または液体）の容器に、それぞれの圧力を変化することなく、定常的に移る過程を考えよう。圧力 P_1 の側に仕事が行われ、体積が V_1 変化したとする。この気体が圧力 P_2 の側に移り、体積を V_2 膨張させた。圧力 P_1 の気体が行った仕事は $P_1 V_1$ であり、圧力 P_2 の気体が行った仕事は $P_2 V_2$ である。熱の出入りはなく、断熱的 ($dQ = 0$) に気体は移ったとしよう。このとき、熱力学第1法則より

$$E_1 + P_1 V_1 = E_2 + P_2 V_2 \quad (33.1)$$

であるので、エンタルピー $H = E + PV$ が一定に保たれる。

次に、圧力の変化による温度変化を見ておこう。(30.2) より $TdS = dH - VdP$ であるが、エンタルピー一定であるので $dH = 0$ である。ここで、エントロピー S を温度 T と圧力 P の関数とすると

$$T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T dP + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P dT \right] = -VdP$$

となるので、(30.46) のマクスウェルの関係式 $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T$ を使い、定圧熱容量 $C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P$ を用いると

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H = \frac{1}{C_P} \left[T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P - V \right] \quad (33.2)$$

が得られる。これはジュール・トムソン係数と呼ばれる。 $\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H > 0$ のとき、すなわちジュール・トムソン係数が正の時には圧力の低い側に気体を噴出させると温度が下がることを意味する。

また (30.2) で $dH = 0$ であることから $TdS = -VdP$ であるので、

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_H = -\frac{V}{T} < 0 \quad (33.3)$$

である。すなわち、ジュール・トムソン過程では、気体が圧力の低い側へ移行するときに、必ず系のエントロピーは増大することがわかる。

§ 33.2 ジュールの実験

次に、体積変化に伴う系の温度変化を考えよう。連結された2個の容器を考え、初めに片方にのみ気体が封入されているとする。この気体を、真空である他方の容器に膨張させる。熱の移動は無く、また真空中への膨張なので仕事はしない。熱力学第1法則 $TdS = dE + PdV$ より $dE = 0$ から、エントロピー S を温度 T と体積 V の関数とみて

$$T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T dV + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V dT \right] = PdV$$

が得られるが、(30.46) のマクスウェルの関係式 $\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$ と、定積熱容量 $C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$ を用いると

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_E = \frac{1}{C_V} \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right] \quad (33.4)$$

が得られる。これは体積膨張による温度変化を表している。また、 $dE = 0$ より熱力学第1法則は $TdS = PdV$ であるので、

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E = \frac{P}{T} > 0 \quad (33.5)$$

となる。すなわち、体積膨張するときには必ずエントロピー S は増大することがわかる。

§ 33.3 混合によるエントロピーの増加

2種類の理想気体を等温、等圧下で混合しよう。圧力一定であるので、定圧熱容量 $C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P$ の両辺を積分しよう。こうして

$$S = \int^T \frac{C_P}{T} dT + f(P)$$

が得られる。等温条件で両辺 P で微分すると、

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = \frac{df(P)}{dP}$$

となるが、マクスウェルの関係式 (30.46)、 $\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$ を用いると

$$\frac{df(P)}{dP} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\frac{Nk_B}{P}$$

が得られる。ここで、理想気体の状態方程式 $PV = Nk_B T$ を用いて中辺の微分を実行した。これを P で積分して

$$f(P) = -Nk_B \ln P + (\text{定数})$$

と得られる。こうして、エントロピー S は、温度 $T = T_0$ かつ圧力 $P = P_0$ のときに $S = S_0$ であるように積分定数をとると

$$S = S_0 + \int_{T_0}^T \frac{C_P}{T} dT - Nk_B \ln \frac{P}{P_0} \quad (33.6)$$

と得られる。

理想気体の混合に戻ろう。容器の左側に圧力 P で1の気体が、右側に圧力 P で2の気体が存在していたものが、容器全体に混合したとする。このとき、それぞれの理想気体は、互いに相手がいないものとして容器全体に膨張したと考える。1、2の気体の分子数をそれぞれ N_1 、 N_2 とすると、混合後のそれぞれの気体の分圧 P_1 、 P_2 は

$$P_1 = P \frac{N_1}{N_1 + N_2}, \quad P_2 = P \frac{N_2}{N_1 + N_2}, \quad (P = P_1 + P_2)$$

となる。こうして、混合によるエントロピーの増加 ΔS は

$$\begin{aligned} \Delta S &= S_{\text{混合後}} - S_{\text{混合前}} \\ &= \left(-N_1 k_B \ln \frac{P_1}{P_0} - N_2 k_B \ln \frac{P_2}{P_0}\right) - \left(-N_1 k_B \ln \frac{P}{P_0} - N_2 k_B \ln \frac{P}{P_0}\right) \\ &= -N_1 k_B \ln \frac{P_1}{P} - N_2 k_B \ln \frac{P_2}{P} \\ &= -k_B \left(N_1 \ln \frac{N_1}{N_1 + N_2} + N_2 \ln \frac{N_2}{N_1 + N_2}\right) > 0 \end{aligned} \quad (33.7)$$

となる。こうして、2種の気体の混合ではエントロピーが必ず増大することがわかる。

§ 33.4 理想常磁性体

磁性体の磁化を M とする。外部磁場 \mathcal{H} のもとで、磁性体のエネルギー U は

$$U = -M\mathcal{H} \quad (33.8)$$

と書かれる。従って、磁場を $d\mathcal{H}$ だけ変化させたときに系が為される仕事 $d'W$ は

$$d'W = -Md\mathcal{H} \quad (33.9)$$

である。熱力学第 1 法則は

$$TdS = dE - d'W = -\mathcal{H}dM \quad (33.10)$$

となる。よって、

$$\mathcal{H} = -T \frac{\partial S}{\partial M} \quad (33.11)$$

が得られる。

今、平衡に近い状況を考えよう。エントロピー S は磁化 M で展開できたとして、

$$S = S_0 - \frac{1}{2c} M^2 + \dots$$

と表される。ここで、 $c > 0$ はある正定数であり、常磁性体では $M = 0$ で平衡で、エントロピーが最大である。このとき、(33.11) より、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{T}{c} M, \\ \text{すなわち} \quad M &= \chi \mathcal{H}, \quad \chi = \frac{c}{T} \end{aligned} \quad (33.12)$$

が得られる。ここで、 χ は磁化率であり、常磁性体では磁化率は温度の逆数に比例することがわかる。これをキュリー則と呼ぶ。

さて、内部エネルギーの変化 dE は、 $dE = TdS + d'W$ である。内部エネルギーは系全体のポテンシャルエネルギーの変化を含めないで、系全体のポテンシャルエネルギーの変化 $d(-M\mathcal{H})$ を取り除いておこう。そうすると、

$$\begin{aligned} dE &= TdS + d'W - d(-M\mathcal{H}) = TdS - Md\mathcal{H} - (-Md\mathcal{H} - \mathcal{H}dM) \\ &= TdS + \mathcal{H}dM \end{aligned} \quad (33.13)$$

となる。こうして、気体の時の (28.37) と比較して、

$$P \longleftrightarrow -\mathcal{H}, \quad V \longleftrightarrow M$$

の対応関係があることがわかる。よって、ギブスの自由エネルギー (30.12) は

$$\begin{aligned} G &= E - \mathcal{H}M - TS \\ dG &= -SdT - Md\mathcal{H} \end{aligned} \quad (33.14)$$

となる。よって、

$$M = - \left(\frac{\partial G}{\partial \mathcal{H}} \right)_T, \quad S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_\mathcal{H} \quad (33.15)$$

となり、両者を T または \mathcal{H} で微分することで、マクスウェルの関係式

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{H}}\right)_T &= \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_\mathcal{H} \\ &= -\frac{c\mathcal{H}}{T^2} \end{aligned} \quad (33.16)$$

が得られる。第2の等式では (33.12) を用いた。

今、エントロピー S を、温度 T と磁場 \mathcal{H} の関数とみると、

$$\begin{aligned} TdS &= T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\mathcal{H} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{H}}\right)_T d\mathcal{H} \right] \\ &= C_\mathcal{H} dT - \frac{c\mathcal{H}}{T} d\mathcal{H}, \\ C_\mathcal{H} &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\mathcal{H} \left(= \left(\frac{dQ}{dT}\right)_\mathcal{H} \right) \end{aligned} \quad (33.17)$$

となる。ここで、磁場一定のもとでの熱容量 $C_\mathcal{H}$ を導入し、また (33.12) を用いた。上式より断熱過程 ($dS = 0$) では

$$dT = \frac{c\mathcal{H}}{C_\mathcal{H}T} d\mathcal{H} \quad (33.18)$$

が得られる。右辺の係数 $\frac{c}{C_\mathcal{H}T}$ は正であるので、正の磁場 \mathcal{H} を断熱的に小さく ($d\mathcal{H} < 0$) していくと、温度が下がる ($dT < 0$) ことを意味している。このようにして低温を実現する方法は、断熱消磁と呼ばれる。

§ 33.5 熱電子放出

金属を熱すると電子が放出される。ボルツマン分布を記述した小節の結果を利用し、放出される電子数を見積もってみよう。平衡状態では、金属から飛び出す電子数と、金属に戻る電子数は等しい。そこで、金属に戻る電子数を考える。金属中で一つの電子が占める体積を V_a としよう。金属中で単位体積当たりの電子数が $\frac{1}{V_a}$ 個であるということである。放出（または金属に戻）される単位体積当たりの電子数を n としよう。また、通常、電子は金属に束縛されており、金属から電子を引き離すのに必要なエネルギーを W とする。電子の電荷を q_e とし、仕事函数（ポテンシャルエネルギーの電荷を除いた部分）を ϕ として $W = q_e\phi$ である。電子のエネルギーを E_2 とすると、ボルツマン分布から電子の分布は

$$n \propto e^{-\frac{E_2}{k_B T}}, \quad \frac{1}{V_a} \propto e^{-\frac{E_2 - W}{k_B T}} \quad (33.19)$$

と得られる。[†] ここで、金属中では束縛エネルギー W だけ、電子のエネルギーが低いことを用いた。両者の比をとると

$$nV_a = e^{-\frac{W}{k_B T}} \quad (33.20)$$

が得られる。ここで、 $W \rightarrow 0$ の時には金属中の電子も自由電子も区別が無いことから、右辺の係数は 1 となる。これが温度 T の時に金属から放出される電子数密度となる。こうして、単位面積を通して流れる電流 I は、

$$I = q_e n v = \frac{q_e v}{V_a} e^{-\frac{q_e \phi}{k_B T}} \quad (33.21)$$

と書ける。ここで、 v は電子の平均速度である。

[†]記号 \propto は“比例する”という意味である。

§ 33.6 熱電離

高温の気体では原子はイオンと電子に分かれる。この状態をプラズマ状態と呼ぶ。単位体積当たりの中性原子の数を n_a 、単位体積当たりのイオンの数を n_i 、単位体積当たりの電子の数を n_e としよう。ある温度で、中性原子からどれだけ電子が束縛から離れる（電離する）かを考えよう。原子から電子を引き離すのに必要なエネルギーを W としよう。これはイオン化エネルギーと呼ばれる。平衡状態では電離していく電子数と、イオンに再結合する電子数は等しい。ギブス分布関数から

$$n_a = c_a e^{-\frac{E_a}{k_B T}}, \quad n_i = c_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}, \quad n_e = c_e e^{-\frac{E_e}{k_B T}}$$

と書ける。ここで、 c_a 、 c_i 、 c_e はある係数であり、 E_a 、 E_i 、 E_e はそれぞれ中性原子、イオン、電離した電子のエネルギーである。辺々比をとることで、

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = c e^{-\frac{E_i + E_e - E_a}{k_B T}}$$

が得られる。係数を c でまとめた。ここで、電子のエネルギーは中性原子やイオンのエネルギーに比べて小さいとして無視し、中性原子のエネルギー E_a はイオンのエネルギー E_i よりイオン化エネルギー分だけ低いこと、すなわち

$$E_a = E_i - W$$

であることを用いると

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = c e^{-\frac{W}{k_B T}} \quad (33.22)$$

が得られる。これはサハの電離式と呼ばれている。[‡]

さて、今、体積 V 中に N 個の原子核があり、その内 f の割合で電離しているとしよう。電離した電子数とイオンの数は等しい。

$$n_e = n_i$$

また、 f の割合で電離していることから

$$n_i = n_e = f \frac{N}{V}, \quad n_a = (1-f) \frac{N}{V} \quad \left(n_a + n_i = \frac{N}{V} = \text{一定} \right)$$

となる。これらをサハの電離式 (33.22) に代入すると

$$\frac{f^2}{1-f} \cdot \frac{N}{V} = c e^{-\frac{W}{k_B T}} \quad (33.23)$$

を得る。一般に、温度が低い ($T \rightarrow$ 小) では右辺は小さい量となり、(33.22) から見て電離しにくい ($f \approx 0$) ことがわかる。すなわち、 n_i 、 n_e が中性原子数密度 n_a に比べて十分小さいと考えられる。しかし、(33.23) から、低温でも十分に密度 $\frac{N}{V}$ が小さいと、 f は大きくなり得る。こうして、温度の低い宇宙空間でも、物質密度が小さいことから電離したプラズマ状態になっていることが理解される。

[‡]中性原子として水素をとると、係数 c を含めて、

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{W}{k_B T}}$$

となる。ここで、 m_e は電子の質量である。

34章 量子統計

§ 34.1 フェルミ分布関数

粒子数の変わりうるグランドカノニカル分布 (30.44) において、量子力学に従う粒子の場合を考えよう。ある量子状態 i のエネルギーを ϵ_i 、その量子状態に存在する粒子数を n_i とすると、量子状態 i にある粒子の全エネルギー E_{iN} は $E_{iN} = \epsilon_i n_i$ となる。今、量子状態 i にある粒子集団を考えると、大きなポテンシャル Ω_i は

$$\Omega_i = -k_B T \ln \left(\sum_{n_i} \left(e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} \right)^{n_i} \right) \quad (34.1)$$

と得られる。もちろん $\Omega = \sum_i \Omega_i$ となる。量子力学の章で、粒子の同一性から見たように、一つの量子状態に一つの粒子のみが存在できるフェルミ粒子の場合を考えよう。この場合には $n_i = 0$ または $n_i = 1$ しかとることができないので、(34.1) の n_i についての和は簡単に取れて、

$$\Omega_i = -k_B T \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} \right) \quad (34.2)$$

となる。こうして、量子状態 i に存在するフェルミ粒子の粒子数密度は

$$n_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (34.3)$$

と得られる。これをフェルミ分布関数と呼び、フェルミ粒子に従う粒子分布を与える。

§ 34.2 ボーズ分布関数

次に、一つの量子状態に存在しうる粒子数に制限のないボーズ粒子の場合を考えよう。この場合には $n_i = 0, 1, \dots, \infty$ となるので、(34.1) は、

$$\Omega_i = -k_B T \ln \left(\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} \right)^{n_i} \right) \quad (34.4)$$

となる。ここに現れた無限級数 $\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} \right)^{n_i}$ が収束するのは $e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} < 1$ 、すなわち $\mu < \epsilon_i$ のときのみである。全ての ϵ_i について、収束条件が成り立たねばならないので、特に自由ボーズ粒子の最低エネルギー、 $\epsilon_i = 0$ を考えると

$$\mu < 0 \quad (34.5)$$

でなければならないことがわかる。こうして、無限集数の和をとると、[§]

$$\Omega_i = k_B T \ln \left(1 - e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{k_B T}} \right) \quad (34.6)$$

が得られる。したがって量子状態 i に存在するボーズ粒子の粒子数密度は

$$n_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (34.7)$$

と得られる。これをボーズ分布関数と呼び、ボーズ粒子に従う粒子分布を与える。

§

$$\sum_{i=0}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x}$$

§ 34.3 自由フェルミ気体、自由ボーズ気体

(34.3)、(34.7) からフェルミ分布関数、ボーズ分布関数は

$$n_i = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}} \pm 1} \quad (34.8)$$

と纏めて記すことにしよう。複号上がフェルミ分布関数、複号下がボーズ分布関数である。

今、質量 m の自由粒子について考える。エネルギーは

$$\epsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{p^2}{2m} \quad (34.9)$$

である。位相空間中の粒子の状態数は (28.16) から

$$g \frac{dp_x dp_y dp_z dV}{(2\pi\hbar)^3} \quad (34.10)$$

となる。ここで、 dV は配位空間の体積 ($dV = dx dy dz$) であり、 g は粒子のスピンによる縮重度を示した。よって、粒子数は状態数に分布関数をかけて

$$\begin{aligned} dN_p &= g \cdot \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1} \cdot \frac{dp_x dp_y dp_z dV}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= \frac{gV p^2 dp}{2\pi^2 \hbar^3 (e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1)} \end{aligned} \quad (34.11)$$

と得られる。2行目へは $dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp$ を使い、配位空間の体積を $V (= \int dx dy dz)$ とした。(34.9) から変数変換によりエネルギーの分布に移ると、 $d\epsilon = \frac{p}{m} dp$ より

$$dN_\epsilon = \frac{gV m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1} \quad (34.12)$$

が得られる。全粒子数は

$$N = \int dN_\epsilon = \frac{gV m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1} \quad (34.13)$$

となる。こうして粒子数密度 $n = \frac{N}{V}$ は

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{g m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1} \\ &= \frac{g(m k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{e^{z - \frac{\mu}{k_B T}} \pm 1} \end{aligned} \quad (34.14)$$

と表される。ここで、2行目へは $z = \frac{\epsilon}{k_B T}$ の置き換えをおこなった。

(34.2)、(34.6) から $\Omega = \sum_i \Omega_i$ で得られる大きなポテンシャル Ω についても、和 \sum_i を積分 (34.10) で置き換えることにより、

$$\begin{aligned} \Omega &= \mp \frac{gV k_B T m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \ln(1 \pm e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}}) \sqrt{\epsilon} d\epsilon \\ &= -\frac{2}{3} \cdot \frac{gV m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \pm 1} \end{aligned} \quad (34.15)$$

が得られる。一方、全エネルギー E は

$$E = \int_0^\infty \epsilon dN_\epsilon = \frac{gVm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{\frac{3}{2}} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{k_B T}} \pm 1} \quad (34.16)$$

となるので、(34.15)と比較して $\Omega = -\frac{2}{3}E$ となることがわかる。さらに、大きなポテンシャルは気体の圧力 P と体積 V とから $\Omega = -PV$ として導入された ((30.30)) ので、フェルミ粒子、ボーズ粒子ともに

$$PV = \frac{2}{3}E \quad (34.17)$$

という関係が得られる。[¶]

§ 34.4 縮退したフェルミ気体

絶対零度においては、フェルミ粒子は低いエネルギー準位から、パウリの排他律に従い、一つずつエネルギー準位を占有する。この状況を完全に縮退した状態と呼ぼう。 \hbar を単位としてスピンの $1/2$ のフェルミ粒子は 2 重に縮退しているので、(34.10) で $g = 2$ となる。こうして、(34.10) は

$$g \frac{dp_x dp_y dp_z dV}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow V \frac{p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} \quad (34.18)$$

と置き換えればよい。ここで、配位空間の積分は実行し、 $\int dV = V$ とした。また、運動量空間は極座標表示をとり、 $dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp$ を用いた。今、温度 $T = 0$ を考えているので、フェルミ分布関数 (34.3) または (34.8) の複号上は、

$$n_i = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}} + 1} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(\mu - \epsilon) = \begin{cases} 1 & \text{for } \epsilon < \mu \\ 0 & \text{for } \epsilon > \mu \end{cases} \quad (34.19)$$

となる。こうして、運動量には最大の運動量 p_F が存在し、それは

$$\epsilon_F = \mu = \frac{p_F^2}{2m}, \quad \text{すなわち} \quad p_F = \sqrt{2m\epsilon_F} = \sqrt{2m\mu} \quad (34.20)$$

で与えられる。ここで導入した最大のエネルギー ϵ_F をフェルミエネルギー、 p_F をフェルミ運動量と呼ぶ。絶対零度ではフェルミエネルギーは化学ポテンシャルに一致する。こうして、粒子数は、運動量積分の上端が p_F で切られ、

$$N = \int dN_p = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{p_F} p^2 dp = \frac{V p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (34.21)$$

と得られる。従って、フェルミ運動量、フェルミエネルギーともに、粒子数密度 $\frac{N}{V}$ で表すことが出来て、それぞれ

$$p_F = (3\pi^2)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \hbar, \quad \epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (34.22)$$

となる。

[¶]古典的にはマクスウェル分布から、単原子気体では (29.7) から 1 粒子当たり $E = \frac{3}{2}k_B T$ であったので、上式に代入して粒子が N 個あることを考慮すると、 $PV = Nk_B T$ という理想気体の状態方程式が再び得られる。

自由フェルミ気体のエネルギーは、同様にして

$$\begin{aligned} E &= \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} \cdot p^2 dp \\ &= \frac{V p_F^5}{10 m \pi^2 \hbar^3} \\ &= \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} N \end{aligned} \quad (34.23)$$

と得られる。ここで、2行目から3行目へはフェルミ運動量(34.22)を代入した。こうして、一般的に成り立っていた(34.17)式を用いると、自由フェルミ気体の状態方程式として

$$\begin{aligned} PV &= \frac{2}{3} \cdot \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} N \\ \text{すなわち} \quad P &= \frac{1}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{5}{3}} \end{aligned} \quad (34.24)$$

が得られる。

§ 34.5 縮退したボーズ気体

与えられた密度 $\frac{N}{V}$ と温度 T のもとで、(34.14)式から、化学ポテンシャル μ の値は決定される。しかしながら、ボーズ粒子の場合には化学ポテンシャル μ は(34.5)に示した通り、負の値を持たねばならない。(34.14)から見て取れるように、一定の密度(左辺一定)のもとで温度 T を減少していくと、積分値を大きくしなければならぬので、 μ は常に負であることに注意すると、 μ の絶対値は小さくなっていかねばならないことがわかる。温度を下げていくと、あるところで μ は零になるであろう。このときの温度を T_0 とすると、(34.14)から

$$\frac{N}{V} = \frac{g(mk_B T_0)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{e^z - 1} \quad (34.25)$$

が満たされる。ここで右辺の積分は $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)$ を与え、よって、

$$\begin{aligned} k_B T_0 &= \left(\frac{\sqrt{2\pi^2}}{g \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \\ &= \frac{3.313}{g^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \end{aligned} \quad (34.26)$$

が得られる。|| ここで、 $T < T_0$ では(34.25)は正の化学ポテンシャルを与える解を持たない。すなわち $T < T_0$ ではエネルギーが $\epsilon = 0$ の状態に粒子が多数入り、(34.25)の被積分関数に \sqrt{z} ($= \sqrt{\frac{\epsilon}{k_B T}}$)として現れていることから $\epsilon = 0$ の状態は寄与していないからである。 $\epsilon > 0$ の状態にある粒子は $\mu = 0$ としたボーズ分布に従っているので、温度 T で $\epsilon > 0$ である粒子数 $N_{\epsilon > 0}$ は

$$\begin{aligned} N_{\epsilon > 0} &= V \cdot \frac{g(mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{e^z - 1} \\ &= N \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (34.27)$$

|| ガンマ関数 $\Gamma(x)$ 、及びゼータ関数 $\zeta(x)$ は以下のように定義される。

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-z} z^{x-1} dz, \quad \zeta(x) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^x} \quad (\text{次頁へ})$$

と得られる。ここで、(34.25)を用いた。残りの粒子は $\epsilon = 0$ の状態に入っており、その数 $N_{\epsilon=0}$ は

$$N_{\epsilon=0} = N - N_{\epsilon>0} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (34.28)$$

となる。このように、 $T < T_0$ で粒子がエネルギー最低の $\epsilon = 0$ の状態に凝集する現象を、ボーズ・アインシュタイン凝縮と呼ぶ。

こうして、

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^{x-1}}{e^z - 1} dz &= \int_0^\infty z^{x-1} e^{-z} \frac{1}{1 - e^{-z}} dz = \int_0^\infty z^{x-1} e^{-z} \sum_{n=0}^\infty e^{-nz} dz = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty z^{x-1} e^{-(n+1)z} dz \\ &= \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty \frac{u^{x-1}}{(n+1)^{x-1}} e^{-u} \frac{du}{n+1} = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^x} \int_0^\infty u^{x-1} e^{-u} du \\ &= \zeta(x) \Gamma(x) \end{aligned}$$

ここで、1行目から2行目へは $(n+1)x = u$ の変換を行い、2行目では $n=0$ からの和を $n=1$ からに書き直した。ガンマ関数、ゼータ関数の値は知られており、たとえば

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \quad \zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1.341$$

などである。同様に

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^{x-1}}{e^z + 1} dz &= \int_0^\infty z^{x-1} e^{-z} \frac{1}{1 + e^{-z}} dz = \int_0^\infty z^{x-1} e^{-z} \sum_{n=0}^\infty (-1)^n e^{-nz} dz = \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \int_0^\infty z^{x-1} e^{-(n+1)z} dz \\ &= \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \int_0^\infty \frac{u^{x-1}}{(n+1)^{x-1}} e^{-u} \frac{du}{n+1} = \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n+1} \frac{1}{n^x} \int_0^\infty u^{x-1} e^{-u} du \\ &= (1 - 2^{1-x}) \zeta(x) \Gamma(x) \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n+1} \frac{1}{n^x} &= \frac{1}{1^x} - \frac{1}{2^x} + \frac{1}{3^x} - \frac{1}{4^x} + \dots \\ &= \frac{1}{1^x} + \frac{1}{2^x} + \frac{1}{3^x} + \frac{1}{4^x} + \dots - 2 \left(\frac{1}{2^x} + \frac{1}{4^x} + \dots \right) = \zeta(x) - \frac{2}{2^x} \left(\frac{1}{1^x} + \frac{1}{2^x} + \dots \right) \\ &= \zeta(x) - 2^{1-x} \zeta(x) = (1 - 2^{1-x}) \zeta(x) \end{aligned}$$

であることを用いた。

第VII部 リー代数と素粒子

35章 リー代数とクォーク

§35.1 root (ルート) と weight (ウェイト)

§§10.1.2においてリー代数の導入を行った。また、§§20.3.1で角運動量代数を扱ったが、角運動量代数は $su(2)$ リー代数そのものである。ここでは、コンパクト群に対するリー代数に限って、やや一般的に記述しておこう。常に角運動量代数を思い出しながら見ていくことにする。

特定のリー代数を規定するのは、リー代数の生成子 $\{X_a\}_{a=1,2,\dots,n}$ の間の交換関係

$$[X_a, X_b] = if_{abc}X_c$$

であった。ここで、繰り返す添え字（ここでは c ）については生成子の個数 n まで和を取るものとする。交換関係に現われる f_{abc} は構造定数とよばれ、リー代数を規定する。角運動量 ($su(2)$) 代数では $f_{abc} = \epsilon_{abc}$ の完全反対称テンソルであった。

$su(N)$ と呼ばれるリー代数を考え、生成子を $\{X_a\}$ と書く**。同時に対角化できる（対角行列で表示できる）生成子をできるだけ沢山作り、それらを H_i と記す。

$$\vec{H} = (H_1, H_2, \dots, H_m)$$

$su(2)$ の時には $\vec{H} = (\hat{J}_3)$ の一つであり、 $\hat{J}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ と対角形で書けていたことを思い出そう。 \vec{H} の固有ベクトルを $|\mu\rangle$ と書こう。このとき

$$H_i|\mu\rangle = \mu_i|\mu\rangle \quad (i = 1, 2, \dots, m)$$

または、まとめて

$$\vec{H}|\mu\rangle = \vec{\mu}|\mu\rangle \quad (i = 1, 2, \dots, m)$$

と書く。この $\vec{\mu}$ を **weight (ウェイト)** と呼ぶ††。

さて、 $\{H_i\}$ は同時に対角化されているので互いに交換し、

$$[H_i, H_j] = 0$$

である。残りの生成子から

$$[H_i, E_\alpha] = \alpha^i E_\alpha$$

となるような E_α を、対角的でない $\{X_a\}$ の線形結合で作る。両辺のエルミート共役をとると

$$[H_i, E_\alpha^\dagger] = -\alpha^i E_\alpha^\dagger$$

が得られることは容易にわかる。よって、

$$E_\alpha^\dagger = E_{-\alpha}$$

となる‡‡。

**角運動量の時には $su(2)$ 代数であり、 $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3$ の3つが生成子であった。

†† $su(2)$ のときには $\hat{J}_3|jm\rangle = m|jm\rangle$ であった。よって、weight は角運動量の z 成分 m であった。角運動量 j が与えられているとき、 m により状態が指定されたことを思い出そう。weight は状態を指定する。

‡‡ $su(2)$ では $E_1 = \hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2, E_{-1} = \hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2$ であり、 $H = \hat{J}_3$ であることから $[\hat{J}_3, \hat{J}_+] = 1 \cdot \hat{J}_+, [\hat{J}_3, \hat{J}_-] = -1 \cdot \hat{J}_-$ であった。

今、上の交換関係を $|\mu\rangle$ に作用させる。

$$[H_i, E_{\pm\alpha}]|\mu\rangle = \pm\alpha^i E_{\pm\alpha}|\mu\rangle$$

左辺は

$$\begin{aligned} [H_i, E_{\pm\alpha}]|\mu\rangle &= H_i E_{\pm\alpha}|\mu\rangle - E_{\pm\alpha} H_i|\mu\rangle \\ &= H_i E_{\pm\alpha}|\mu\rangle - \mu_i E_{\pm\alpha}|\mu\rangle \end{aligned}$$

となる。ここで、 $|\mu\rangle$ が H_i の固有ベクトルであることを用いた。こうして、

$$H_i E_{\pm\alpha}|\mu\rangle = (\mu_i \pm \alpha^i) E_{\pm\alpha}|\mu\rangle$$

まとめて

$$\vec{H} E_{\pm\alpha}|\mu\rangle = (\vec{\mu} \pm \vec{\alpha}) E_{\pm\alpha}|\mu\rangle$$

が得られる。すなわち、 $E_{\pm\alpha}$ は weight $\vec{\mu}$ を $\vec{\mu} \pm \vec{\alpha}$ に変えた状態を作る昇降演算子となっていることがわかる。この $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-m})$ を **root(ルート)** と呼ぶ。

このとき、状態 $|\mu\rangle$ からすべての状態を構成することができる。昇降演算子を繰り返し用いて

$$0 \leftarrow |\mu - q\alpha\rangle \leftarrow \dots \leftarrow |\mu - \alpha\rangle \leftarrow |\mu\rangle \rightarrow |\mu + \alpha\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |\mu + p\alpha\rangle \rightarrow 0$$

ここで、 $|\mu\rangle$ から左へは $E_{-\alpha}$ を繰り返し作用させ、右へは E_{α} を繰り返し作用させる。今、コンパクト群を考えているので、表現を作る状態は有限であり、左へ q 回、右へ p 回それぞれ $E_{-\alpha}$ 、 E_{α} を作用させると終わるものとした。こうして、一つの閉じた状態のセットが得られる。こうした表現を**既約表現**と呼ぼう。

さて、 $E_{\pm\alpha}|\mu\rangle$ は $|\mu \pm \alpha\rangle$ に比例することはわかったので、規格化因子 $N_{\pm\alpha, \mu}$ を求めておこう。すなわち $E_{\pm\alpha}|\mu\rangle = N_{\pm\alpha, \mu}|\mu \pm \alpha\rangle$ とする。ここで、次の交換関係が成り立つことに注意する*。

$$[E_{\alpha}, E_{\beta}] = \begin{cases} \vec{\alpha} \cdot \vec{H} & (\vec{\alpha} + \vec{\beta} = 0) \\ k_{\alpha+\beta} E_{\alpha+\beta} & (\vec{\alpha} + \vec{\beta} \text{ がまた root になる}) \\ 0 & (\vec{\alpha} + \vec{\beta} \text{ が root でない}) \end{cases}$$

ここで、 $\beta = -\alpha$ として $|\mu\rangle$ で挟むと

$$\langle \mu | [E_{\alpha}, E_{-\alpha}] | \mu \rangle = \langle \mu | \vec{\alpha} \cdot \vec{H} | \mu \rangle = \vec{\alpha} \cdot \vec{\mu}$$

*証明は以下の通りである。ヤコビ恒等式 $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ に注意しよう。ヤコビ恒等式から、

$$[H_i, [E_{\alpha}, E_{\beta}]] = [E_{\alpha}, [H_i, E_{\beta}]] + [[H_i, E_{\alpha}], E_{\beta}] = (\alpha^i + \beta^i)[E_{\alpha}, E_{\beta}]$$

となる。 $\alpha^i + \beta^i$ がまた root ならば、上式は $[E_{\alpha}, E_{\beta}]$ が root $\alpha^i + \beta^i$ をもつ昇降演算子になっていることを意味する。よって、

$$[E_{\alpha}, E_{\beta}] = k_{\alpha+\beta} E_{\alpha+\beta}, \quad (k_{\alpha+\beta} : \text{ある定数})$$

ここで、 $\alpha^i + \beta^i$ が root でなければ零以外に成り立たないので、 $[E_{\alpha}, E_{\beta}] = 0$ となる。 $\vec{\beta} = -\vec{\alpha}$ のときには $[H_i, [E_{\alpha}, E_{-\alpha}]] = (\alpha^i - \alpha^i)[E_{\alpha}, E_{-\alpha}] = 0$ となるので、 $[E_{\alpha}, E_{-\alpha}]$ は H_i と可換であり $\sum_j x_j H_j$ と H_i の線形結合で表されるはずである。すなわち、 $[E_{\alpha}, E_{-\alpha}] = \sum_j x_j H_j$ と表される。今、規格化として $\text{Tr}(H_i H_j) = \lambda \delta_{ij}$ 、 $\text{Tr}(E_{-\alpha} E_{\beta}) = \lambda \delta_{\alpha\beta}$ と規格化因子を共通に取っておく。式 $[E_{\alpha}, E_{-\alpha}] = \sum_j x_j H_j$ の両辺に H_i をかけてからトレースをとると (左辺) $= \text{Tr}(H_i [E_{\alpha}, E_{-\alpha}]) = \text{Tr}([H_i, E_{\alpha}] E_{-\alpha}) = \text{Tr}(\alpha^i E_{\alpha} E_{-\alpha}) = \lambda \alpha^i$ および (右辺) $= \text{Tr}(H_i \sum_j x_j H_j) = \lambda x_i$ となるので、 $\vec{x} = \vec{\alpha}$ である。こうして、

$$[E_{\alpha}, E_{-\alpha}] = \sum_j \alpha^j H_j$$

が得られる。一方、左辺の交換子をばらし、 $E_{\pm\alpha}|\mu\rangle = N_{\pm\alpha,\mu}|\mu \pm \alpha\rangle$ を用いると

$$\langle\mu|[E_{\alpha}, E_{-\alpha}]|\mu\rangle = \langle\mu|E_{\alpha}E_{-\alpha}|\mu\rangle - \langle\mu|E_{-\alpha}E_{\alpha}|\mu\rangle = |N_{-\alpha,\mu}|^2 - |N_{\alpha,\mu}|^2$$

となる。両者は等しいので

$$|N_{-\alpha,\mu}|^2 - |N_{\alpha,\mu}|^2 = \vec{\alpha} \cdot \vec{\mu}$$

であるが、

$$N_{-\alpha,\mu} = \langle\mu - \alpha|E_{-\alpha}|\mu\rangle = \langle\mu - \alpha|E_{\alpha}^{\dagger}|\mu\rangle = \langle\mu|E_{\alpha}|\mu - \alpha\rangle^* = N_{\alpha,\mu - \alpha}^*$$

と計算されるので、一つ前の式は

$$|N_{\alpha,\mu - \alpha}|^2 - |N_{\alpha,\mu}|^2 = \vec{\alpha} \cdot \vec{\mu} \quad (35.29)$$

と書き直せる。一方、 $E_{\alpha}|\mu + p\alpha\rangle = 0$ 、及び $E_{-\alpha}|\mu - q\alpha\rangle = 0$ であったので、ただちに

$$N_{\alpha,\mu + p\alpha} = 0, \quad N_{-\alpha,\mu - q\alpha} = N_{\alpha,\mu - (q+1)\alpha}^* = 0$$

が言える。こうして、(35.29) を用いると

$$\begin{aligned} |N_{\alpha,\mu+(p-1)\alpha}|^2 - |N_{\alpha,\mu+p\alpha}|^2 &= \vec{\alpha} \cdot (\vec{\mu} + p\vec{\alpha}) \quad \rightarrow \quad |N_{\alpha,\mu+(p-1)\alpha}|^2 = \vec{\alpha} \cdot (\vec{\mu} + p\vec{\alpha}) \\ |N_{\alpha,\mu+(p-2)\alpha}|^2 - |N_{\alpha,\mu+(p-1)\alpha}|^2 &= \vec{\alpha} \cdot (\vec{\mu} + (p-1)\vec{\alpha}) \quad \rightarrow \quad |N_{\alpha,\mu+(p-2)\alpha}|^2 = \vec{\alpha} \cdot (2\vec{\mu} + (2p-1)\vec{\alpha}) \\ \dots & \\ |N_{\alpha,\mu-q\alpha}|^2 - |N_{\alpha,\mu-(q-1)\alpha}|^2 &= \vec{\alpha} \cdot (\vec{\mu} - (q-1)\vec{\alpha}) \\ 0 - |N_{\alpha,\mu-q\alpha}|^2 &= \vec{\alpha} \cdot (\vec{\mu} - q\vec{\alpha}) \end{aligned} \quad (35.30)$$

として、次々に規格化因子 $N_{\pm\alpha,\mu}$ を求めることができる。これは、§§20.3.1 の角運動量のときに規格化因子 N_m を求めた場合と同じである。

さて、(35.30) の左の部分を全て足していくと

$$\begin{aligned} 0 &= (p+q+1)\vec{\alpha} \cdot \vec{\mu} + \alpha^2 \left(\frac{p(p+1)}{2} - \frac{q(q+1)}{2} \right) \\ \text{すなわち} \quad \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\mu}}{|\vec{\alpha}|^2} &= -\frac{1}{2}(p-q) \end{aligned} \quad (35.31)$$

という関係式が得られることに注意しよう。ここで、 p は $|\mu\rangle$ から E_{α} で p 回上げられ、 q は $|\mu\rangle$ から $E_{-\alpha}$ で q 回下げられる (0 を含む) 自然数であったことに注意しておこう。

§ 35.2 いくつかの言葉の定義

positive root とは、ルートベクトルの最初の零でない成分が正の値を取るものとして定義される。

$$\begin{aligned} \vec{\alpha} &= (\alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^m) = (0, 0, \dots, 0, a, \dots) \\ a &> 0 \end{aligned}$$

simple root とは、他の positive root から正係数の和で表せないルートベクトルのことを言う。

ルート・ベクトルは複数あるので、添え字 i で区別しよう。任意の simple root $\bar{\alpha}^i$ に対して、 $E_{\alpha^i}|\mu\rangle = 0$ をみたす状態 $|\mu\rangle$ のことを **highest weight state** と呼ぶ。このとき、対応する weight vector (ウェイト・ベクトル) $\bar{\mu}$ を、**highest weight** と呼ぶ。 $\bar{\mu}$ が highest weight のとき、状態 $|\mu\rangle$ は昇降演算子 E_α でさらに高い weight にすることはできない ($E_{\alpha^i}|\mu\rangle = 0$) ので、§26.1 で導入した p は $p = 0$ である。よって、(35.32) から

$$\frac{\bar{\alpha}^i \cdot \bar{\mu}}{|\bar{\alpha}^i|^2} = \frac{1}{2}q^i$$

となる。simple root $\bar{\alpha}^i$ はわかっているので、simple root $\bar{\alpha}^i$ に対して highest weight $\bar{\mu}$ を与えれば q^i は上式から決まる。逆に、simple root $\bar{\alpha}^i$ がわかっているので、 q^i を与えれば highest weight $\bar{\mu}$ が決まることになる。ここで、 (q^1, q^2, \dots, q^m) の組を **Dynkin label** (ディンキン・ラベル) と呼ぶ。

fundamental weight(基本ウェイト) とは、

$$\frac{2\bar{\alpha}^i \cdot \bar{\mu}^j}{|\bar{\alpha}^i|^2} = \delta^{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (35.32)$$

をみたすウェイトのことを言う。Dynkin label $(1, 0, 0, \dots, 0)$ に対する highest weight を $\bar{\mu}^1$ 、Dynkin label $(0, 1, 0, \dots, 0)$ に対する highest weight を $\bar{\mu}^2$ などと書くことにしよう。

ルート・ベクトルから作られる次の行列

$$A_{ji} = \frac{2\bar{\alpha}^i \cdot \bar{\alpha}^j}{|\bar{\alpha}^i|^2} \quad (35.33)$$

を、**Cartan matrix** (カルタン行列) と呼ぶ。よって、simple root $\bar{\alpha}^j$ の Dynkin label は、カルタン行列の成分を用いて $(A_{j1}, A_{j2}, \dots, A_{jm})$ と表される。

§35.3 具体例： $su(3)$ の場合

今までの一般論から、具体例として物理学で良く現れる $su(3)$ の場合を取り上げよう。 $su(3)$ の生成子 $\{T_a\}$ は 8 個 ($= 3^2 - 1$) あり、交換関係、構造定数 f_{abc} は

$$[T_a, T_b] = i \sum_{c=1}^8 f_{abc} T_c$$

$$f_{123} = 1, \quad f_{147} = \frac{1}{2}, \quad f_{156} = -\frac{1}{2}, \quad f_{246} = \frac{1}{2}, \quad f_{257} = \frac{1}{2}$$

$$f_{345} = \frac{1}{2}, \quad f_{367} = -\frac{1}{2}, \quad f_{458} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

添え字の巡回について完全反対称

$$f_{ijk} = 0 \text{ (上記以外)}$$

生成子は $T_a = \frac{\lambda_a}{2}$ と書いて、行列表示で上の交換関係を満たすものとして

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

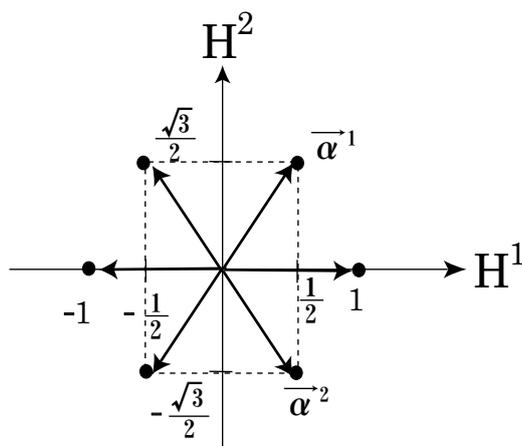


図 91:

と採ることができる。この行列は **Gell-Mann** (ゲルマン) 行列と呼ばれる。

ゲルマン行列からわかるように、 $su(3)$ の生成子で対角的なものは 2 つあり、

$$H_1 \equiv T_3 \left(= \frac{\lambda_3}{2} \right), \quad H_2 \equiv T_8 \left(= \frac{\lambda_8}{2} \right)$$

である。昇降演算子は残りの生成子から

$$E_{(\pm 1, 0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_1 \pm iT_2), \quad \vec{\alpha} = (\pm 1, 0)$$

$$E_{\pm(1/2, \sqrt{3}/2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_4 \pm iT_5), \quad \vec{\alpha} = \pm \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

$$E_{\pm(1/2, -\sqrt{3}/2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_6 \pm iT_7), \quad \vec{\alpha} = \pm \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

と導入される。ルートベクトルをあわせて記した。ルートベクトルを図示すると、図 91 のようになる。ルート図 91 からわかるように、positive root は

$$\vec{\alpha} = (1, 0), \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

の 3 つである。このうち、 $(1, 0)$ は他の 2 つの positive root の正係数の和 (係数はともに 1) で表されるので、simple root ではない。残りの 2 つは他の 2 つのルートベクトルの正係数の和で書けないので simple root である。よって、simple root は

$$\vec{\alpha}^1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \vec{\alpha}^2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

の 2 つである。

次に、 H_1 、 H_2 の固有ベクトルを

$$|\mu_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\mu_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\mu_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

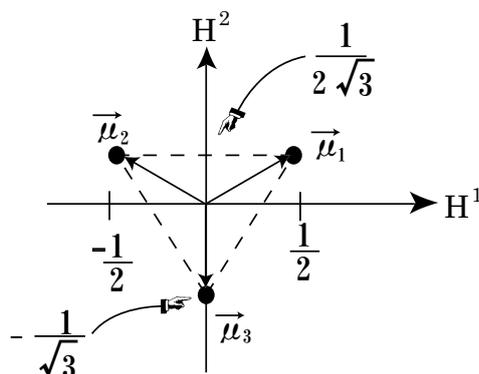


図 92:

ととると、簡単な計算

$$H_1|\mu_1\rangle = \frac{1}{2}|\mu_1\rangle, \quad H_2|\mu_1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}}|\mu_1\rangle$$

などから、weight vector $\vec{\mu}_1 = (1/2, 1/(2\sqrt{3}))$ などと得られる。

$$\vec{\mu}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right), \quad \vec{\mu}_2 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right), \quad \vec{\mu}_3 = \left(0, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

図示すると、図 92 のようになる。この 3 つの状態から構成される $su(3)$ の表現を基本表現と呼ぶ。

次に、fundamental weight $\vec{\mu}^j$ を求めよう。添え字の位置に注意せよ。simple root が 2 つあったので、fundamental weight も 2 つある。fundamental weight は (35.32) を満たす weight であった。simple root がわかっているから、簡単な計算により

$$\vec{\mu}^1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right), \quad \vec{\mu}^2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$$

と得られる。

Cartan matrix は (35.33) より、

$$A_{ji} = \frac{2\vec{\alpha}^i \cdot \vec{\alpha}^j}{|\vec{\alpha}^i|^2} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

となる。よって、 $\vec{\alpha}^1$ の Dynkin label は $(A_{11}, A_{12}) = (2, -1)$ 、 $\vec{\alpha}^2$ の Dynkin label は $(A_{21}, A_{22}) = (-1, 2)$ となる。

さて、 $su(3)$ の場合、Dynkin label は (q^1, q^2) と 2 つの成分を持っている。ここで、 $E_{-\alpha^i}|\mu\rangle = N_{-\alpha^i, \mu}|\mu - \alpha^i\rangle$ のように weight $\vec{\mu}$ を simple root $\vec{\alpha}^i$ で下げることになっている。Dynkin label の成分 q^i は simple root $\vec{\alpha}^i$ で q^i 回下げられることを意味していたので、 $(\vec{\mu} - \vec{\alpha}^i \text{ の Dynkin label}) = (\vec{\mu} \text{ の Dynkin label}) - (\vec{\alpha}^i \text{ の Dynkin label})$ となる。

色々な規約表現での weight 図を描こう。Dynkin label (q^1, q^2) では、highest weight が $\sum_{i=1}^2 q^i \vec{\mu}^i$ であることを意味する。

(i) Dynkin label $(1, 0)$

このときには、 $\vec{\mu}^1$ が highest weight である。 $E_{-\alpha^i}$ を作用させて状態を構成していく。 $\vec{\mu}^1$ の Dynkin label は

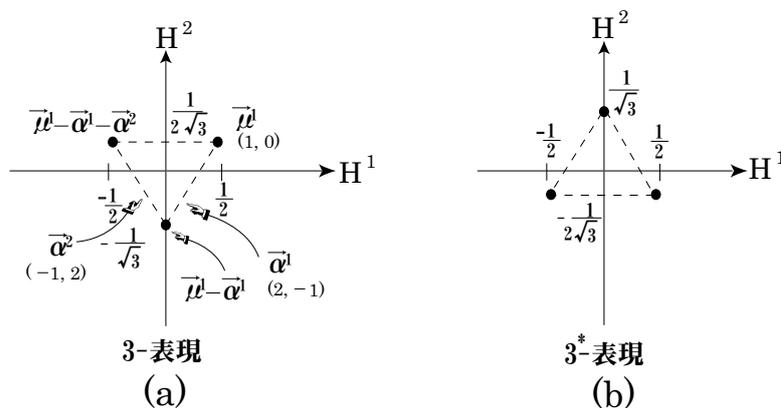


図 93:

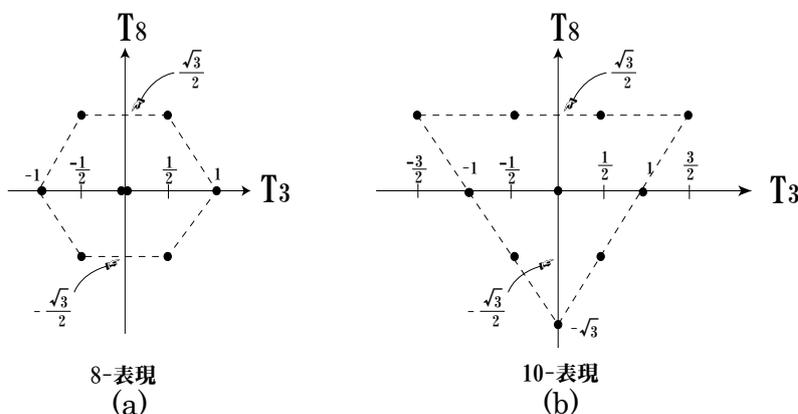


図 94:

(1, 0)なので、simple root α^1 で1回下げられる。そのとき weight は $\bar{\mu}^1 - \alpha^1$ となる。この weight をもつ新たな状態 $|\mu^1 - \alpha^1\rangle$ の Dynkin label は $\bar{\mu}$ の Dynkin label から α^1 の Dynkin label を引き、 $(1, 0) - (2, -1) = (-1, 1)$ となる。負数は意味が無いので、今度は $E_{-\alpha^2}$ で1回下げられることを意味する。 $E_{-\alpha^2}|\mu^1 - \alpha^1\rangle$ 。よって、新たに $(\bar{\mu}^1 - \alpha^1) - \alpha^2$ を weight とする状態が得られる。この weight の Dynkin label は $((1, 0) - (2, -1)) - (-1, 2) = (-1, 1) - (-1, 2) = (0, -1)$ となり、これ以上、状態を下げられず、規約表現の状態がすべて求まったことになる。すなわち、highest weight state $|\bar{\mu}^1\rangle$ と $|\bar{\mu}^1 - \alpha^1\rangle$ 、 $|\bar{\mu}^1 - \alpha^1 - \alpha^2\rangle$ の3つの状態が存在する。weight vector を図示しよう (図 93 (a))。ベクトルの先端 (矢の先) を黒丸で示した。状態は3つあるので、3-表現と呼ばれる。

(ii) Dynkin label (0, 1)

このときには、 $\bar{\mu}^2$ が highest weight である。(i) のときと同様にして、weight は3つ得られる (図 93 (b))。この表現は 3^* -表現と呼ばれる。

(iii) Dynkin label (1, 1)

このときには、 $\bar{\mu} = \bar{\mu}^1 + \bar{\mu}^2$ が highest weight である。今度は weight は8つ得られる (図 94 (a))。weight vector を $\vec{0}$ とする状態が2つあるが、この2つの状態は線形独立である。highest weight state から同じ状態へ2通りの下降の仕方があった場合、(たとえば weight 図の原点へは $|A\rangle = E_{-\alpha^1} E_{-\alpha^2} |\bar{\mu}\rangle$ と $|B\rangle = E_{-\alpha^1} E_{-\alpha^2} |\bar{\mu}\rangle$)

の2通りの方法で下降できる)、状態 $|A\rangle$ 、 $|B\rangle$ が線形独立かそうでないかは、

$$\det \begin{vmatrix} \langle A|A\rangle & \langle A|B\rangle \\ \langle B|A\rangle & \langle B|B\rangle \end{vmatrix} = \begin{cases} \neq 0 & (\text{線形独立である}) \\ = 0 & (\text{線形独立でない}) \end{cases}$$

で判定される。weight 図の原点に対応する2つの状態は線形独立となっている。この表現を8-表現と呼ぶ。

(iv) Dynkin label (3, 0)

このときには、 $\vec{\mu} = 3\vec{\mu}^1$ が highest weight である。今度は weight は10個得られる(図94(b))。2通りの下降の仕方得られる状態が複数存在するが、すべて線形従属であり、各 weight vector に対して独立な状態は各々1つずつとなっている。この表現を10-表現と呼ぶ。

そのほかにも、Dynkin label を指定することにより、様々な表現が得られる。

§ 35.4 ヤング図

角運動量を思い出そう。これは $su(2)$ 代数を構成する。角運動量の大きさが $j = 1/2$ のとき、 z -射影は $m = \pm 1/2$ である。この m は1成分の weight vector である。状態数は $2j + 1 = 2$ であり、2次元表現である。状態(波動関数)の対称性を box(箱) \square で表わす。すなわち、box を状態のように扱って、2つのスピン $1/2$ の状態を合成しよう。このとき

$$\square \otimes \square = \square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad (35.34)$$

の様に記す。左辺は2つのスピン $1/2$ の状態の直積であり、2つのスピンの合成を考え、右辺はそれを異なるスピンの大きさの状態に規約分解していることを意味する。横に並んだ箱 $\square \square$ は状態(波動関数)を対称化したものであり、この場合はスピン1の状態に対応する。箱を縦に並べた場合 $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$ は状態は反対称に組み、今の場合はスピン0の状態に対応する。すなわち、(35.34) は波動関数の言葉で表わせば

$$\psi_1 \otimes \psi_2 = \frac{1}{2}(\psi_1 \psi_2 + \psi_2 \psi_1) \oplus \frac{1}{2}(\psi_1 \psi_2 - \psi_2 \psi_1)$$

のことである。合成する際には、上の段の横の並びは決して下の段より短くはならない。

3つのスピン $1/2$ を合成してみよう。分配則が成り立っていて、

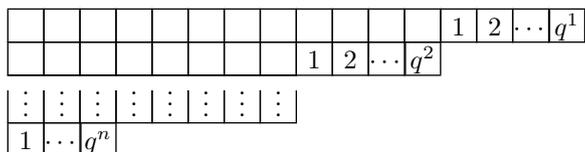
$$\begin{aligned} \square \otimes \square \otimes \square &= \left(\square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \otimes \square \\ &= \square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \end{aligned} \quad (35.35)$$

と表わされるが、 $su(2)$ のスピンの場合には、 $m = \pm 1/2$ で状態は2つしか無く、3つの状態を反対称に組むとそのうちの2つは必ず同じ状態(同じ m を持つ)になるので、反対称化できず、零になる。よって、縦に3つ箱の並んだものは現われない。こうして、 $su(2)$ の場合には

$$\square \otimes \square \otimes \square = \square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

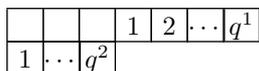
となる。縦に2つ箱が並ぶとスピンは零に組んでいて、回転に対して変換性を示さない。よって  は右端の箱1つが変換性を示し、スピン 1/2 である。横に3つ並んだものは3つの状態を完全対称化しているの、スピン 3/2 を表わす。こうして、状態数は $2j + 1$ であったので、状態数は $2 \times 2 \times 2 = 4 + 2 + 2$ となり整合している。

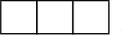
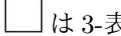
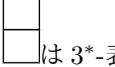
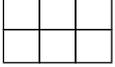
一般に、 $su(N)$ 代数で Dynkin label が $(q^1, q^2, \dots, q^{N-1} (= q^n))$ のとき、既約表現は

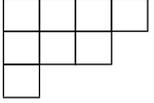
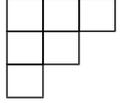


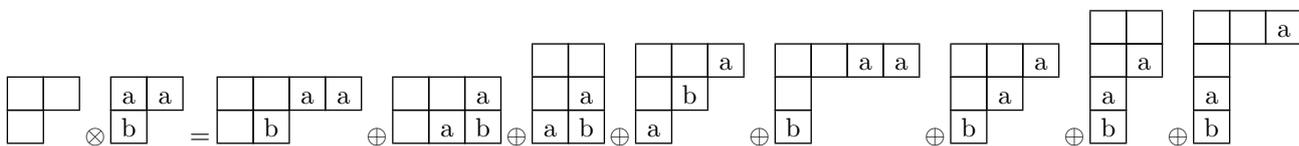
のように表わす。これを **Young tableau (ヤング図)** と呼ぶ。(箱の中の数字は、例えば1行目では、飛び出している箱が q^1 個あることを意味しており、箱の中に具体的に数字が入っているということでは無い。)

$su(3)$ のときには Dynkin label が (q^1, q^2) であれば

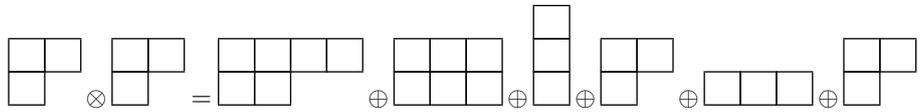


で表わされる。縦に3つ並んだ  は完全反対称で、 $su(3)$ の変換性を示さない。縦に3つまで並ぶので、互いに相補的な  と  や、 と  は、複素共役の関係にあり、複素共役表現に * を付けて表わす。例えば、 は 3-表現であり、 は 3*-表現、 は 10-表現、 は 10*-表現といった具合である。ここで、数字は表現の次元 (状態の個数) を表わす。

ここで、2つの表現の積の既約分解の方法をまとめておこう。 \otimes  のような積を既約分解する。まず、(1) 掛けるヤング図の1行目に a, a, \dots と入れていく。2行目には b, b, \dots といった具合である。次に (2) まず1行目の a 達を掛けられるヤング図の違った列に付けていく。次に2行目の b 達を同様に違った列に付けていく。(3) できた図を、右から左へ、次に上から下へ読んだとき、 a の数の和 $\geq b$ の数の和 $\geq \dots$ となっている図だけ残す。これで既約分解は完成する。例として、 $su(3)$ の 8-表現同士の直積の既約分解を実行してみよう。



といったようになるが、右辺最後の2つは縦に箱が4つ並んでおり、 $su(3)$ では基本表現の次元が3なので、4つの状態を完全反対称に組むことはできず、この2つは現われない。また、第3、4、5、6項目の縦に3つ並んだ部分は、 $su(3)$ の変換で変換性を示さず (1重項と呼ぶ)、 $su(3)$ で変換しない部分であるので省いて書いておこう。そうすると、 a や b は消して、簡単に

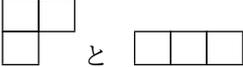


となる。次元はすぐ後で計算法を与えるが、 $8 \times 8 = 27 + 10^* + 1 + 8 + 10 + 8$ となっている。

ヤング図を使って表現の次元を計算する簡便な方法を述べておこう。一般に、**Factor over Hook rule**と呼ばれる。以下では $su(N)$ の場合に限ろう。このとき、表現の次元は、ヤング図の1番左上、すなわち最左列、最上行に N を入れ、最上行は右の箱に行くにつれ $N+1$ 、 $N+2$ といったように一つずつ数を増やしたものをに入れていく。下の段は、すぐ上の箱の数字より1小さい数字を入れていく。ヤング図の箱の中の数をすべて掛ける。この積を分子に置く。これを Factor と呼び、 F としよう。次に同じヤング図で今度は特定の箱を考え、その箱を含んで右にある箱の数と下にある箱の数の和を書き入れる。これをすべての箱に施し、やはり全ての数の積をとり、分母に置く。これを Hook と呼び、 H と書こう。表現の次元は F/H で得られる。たとえば $N=4$ として、下のようなヤング図で表わされる表現の次元は

$$(\text{次元}) = \frac{F}{H} = \frac{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 4 & 5 & 6 & 7 \\ \hline 3 & 4 & & \\ \hline 2 & & & \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 6 & 4 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 1 & & \\ \hline 1 & & & \\ \hline \end{array}} = \frac{4 \times 5 \times 6 \times 7 \times 3 \times 4 \times 2}{6 \times 4 \times 2 \times 1 \times 3 \times 1 \times 1}$$

の様にして得られる。

$su(3)$ の2つの場合、 と  の場合に計算してみよう。

$$(\text{次元}) = \frac{F}{H} = \frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array}} = \frac{3 \times 4 \times 2}{3 \times 1 \times 1} = 8$$

$$(\text{次元}) = \frac{F}{H} = \frac{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 4 & 5 \\ \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}} = \frac{3 \times 4 \times 5}{3 \times 2 \times 1} = 10$$

となり、8-表現と10-表現となっている。

$su(3)$ で3つの状態の合成を考えよう。スピン $su(2)$ の場合と異なり、3つの状態の完全反対称な状態は可能であるので、箱は縦に3つまで並ぶ。箱  は基本表現であり、次元は3である。このとき

$$\begin{array}{c} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \\ \text{状態数} \quad 3 \times 3 \times 3 = \quad 10 + \quad 8 + \quad 8 + \quad 1 \end{array} \quad (35.36)$$

となっている。

§ 35.5 動的対称性

物理学への応用として、時空や内部対称性ではないがハミルトニアンが持ち得る動的対称性の例として、水素原子と3次元調和振動子に付いて見ておこう。

§§35.5.1 水素原子—Runge-Lenz-Pauli ベクトル—

§7.4 では、古典力学において、逆 2 乗力の働く下での質点の運動—ケプラー問題—を、その大きさが離心率を表わすベクトルを導入して解いた。量子力学の世界では、水素原子の問題がそれに相当する。ここでは、水素原子の問題に関して、リー代数を用いてエネルギー固有値を求めてみよう。

ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

である。角運動量演算子は $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ であった。ここで、次の Runge-Lenz-Pauli ベクトルを導入する：

$$\hat{\mathbf{B}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

このとき、

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{B}}] = 0$$

となることは直接の計算により確かめられる。また、1、2、3 を x 、 y 、 z として、繰り返す添え字は和を取るものとして

$$\begin{aligned} [\hat{L}_a, \hat{L}_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c \\ [\hat{B}_a, \hat{B}_b] &= -\frac{2i\hbar}{m}\epsilon_{abc}\hat{L}_c\hat{H} \\ [\hat{L}_a, \hat{B}_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}\hat{B}_c \end{aligned} \quad (35.37)$$

が得られる。今、束縛状態を考えるとエネルギー固有値 E は負値をとるので

$$\hat{A}_a = \sqrt{-\frac{m}{2E}}\hat{B}_a$$

として、 $\hat{\mathbf{A}}$ を定義する。このとき、先の交換関係は

$$\begin{aligned} [\hat{L}_a, \hat{L}_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c \\ [\hat{L}_a, \hat{A}_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}\hat{A}_c \\ [\hat{A}_a, \hat{A}_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c \end{aligned} \quad (35.38)$$

と書き換えられる。さらに

$$\hat{M}_a = \frac{1}{2\hbar} (\hat{L}_a + \hat{A}_a), \quad \hat{N}_a = \frac{1}{2\hbar} (\hat{L}_a - \hat{A}_a)$$

を定義すると、

$$\begin{aligned} [\hat{M}_a, \hat{M}_b] &= i\epsilon_{abc}\hat{M}_c \\ [\hat{N}_a, \hat{N}_b] &= i\epsilon_{abc}\hat{N}_c \\ [\hat{M}_a, \hat{N}_b] &= 0 \end{aligned} \quad (35.39)$$

となる。これは $\{\hat{\mathbf{M}}\}$ と $\{\hat{\mathbf{N}}\}$ の 2 つの独立な $su(2)$ 代数が成り立っていることを意味する。すなわち、水素原子の問題は $su(2) \times su(2)$ リー代数で表わすことができる。

$su(2)$ 代数であった角運動量代数の知識を用いると、固有値はただちに

$$\begin{aligned}\hat{M}^2 &\longrightarrow \Lambda(\Lambda+1) & (\Lambda = 0, 1/2, 1, \dots) \\ \hat{M}_3 &\longrightarrow \lambda & (\lambda = -\Lambda, -\Lambda+1, \dots, \Lambda-1, \Lambda) \\ \hat{N}^2 &\longrightarrow \Sigma(\Sigma+1) & (\Sigma = 0, 1/2, 1, \dots) \\ \hat{N}_3 &\longrightarrow \sigma & (\sigma = -\Sigma, -\Sigma+1, \dots, \Sigma-1, \Sigma)\end{aligned}$$

となるのがわかる。また、 $\hat{B} \cdot \hat{L} = \hat{L} \cdot \hat{B} = 0$ より

$$\hat{M}^2 = \hat{N}^2 = \frac{1}{4\hbar^2} (\hat{L}^2 + \hat{A}^2)$$

となるので、 \hat{M}^2 と \hat{N}^2 の固有値は等しく

$$\Lambda = \Sigma$$

が得られる。ここで、 \hat{A} を \hat{B} に戻し、さらに \hat{B} の定義を用いると、直接の計算から

$$\frac{1}{4\hbar^2} (\hat{L}^2 + \hat{A}^2) = -\frac{1}{4\hbar^2} \left(\hbar^2 + \frac{m}{2E} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \right)$$

となるが、左辺は \hat{M}^2 そのものなので、この固有値は $\Lambda(\Lambda+1)$ となる。上式の左辺を固有値で置き換えて E について解くと、

$$E = -\frac{m}{2\hbar^2(2\Lambda+1)^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

となる。ここで、自然数を n とすると、 $\Lambda = 0, 1/2, 1, \dots$ より

$$2\Lambda + 1 = n = 1, 2, \dots$$

となるのがわかるので、自然数 n で置き換える。また、 $\hat{L} = \hbar(\hat{M} + \hat{N})$ より、右辺を2つの $su(2)$ スピンの合成と考え、 \hat{L}^2 の固有値 $\hbar^2 l(l+1)$ は

$$|\Lambda - \Sigma| \leq l \leq \Lambda + \Sigma$$

となるのがわかる。ここで $\Lambda = \Sigma$ であるので、以上まとめると、

$$\begin{aligned}E &= -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, & n = 1, 2, \dots \\ l &= 0, 1, \dots, n-1\end{aligned}$$

が得られる。これは、量子力学のシュレーディンガー方程式を解いて得られた水素原子のエネルギー固有値に他ならない。 n は主量子数で、角運動量の大きさ l は 0 から $n-1$ までの整数値を取る。

§§35.5.2 3次元調和振動子

§19.4.3 で行ったように、3次元調和振動子を生成消滅演算子で記述しよう。 x, y, z 方向の独立な3成分があるのでハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H_0 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \mathbf{r}^2 \\ &= \hbar\omega \sum_{i=x,y,z} \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$r_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a_i + a_i^\dagger), \quad p_i = (-i)\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a_i - a_i^\dagger), \quad (i = 1, 2, 3 \leftrightarrow x, y, z)$$

と定義されている。交換関係は

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$$

である。今、

$$\mathcal{A}_{ij} = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_j + a_j a_i^\dagger)$$

を考えると、 \mathcal{A}_{ij} から得られる交換関係

$$[\mathcal{A}_{ij}, \mathcal{A}_{kl}] = \mathcal{A}_{il}\delta_{jk} - \mathcal{A}_{kj}\delta_{il}$$

は $u(3)$ の交換関係であり、 \mathcal{A}_{ij} が作る代数は $u(3)$ 代数となる。ここで、ハミルトニアンは

$$H_0 = \hbar\omega \sum_i \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i + a_i a_i^\dagger) = \hbar\omega \sum_i \mathcal{A}_{ii}$$

となり、これは $U(3)$ の部分群 $U(1)$ 群となり、 $u(3)$ から $u(1)$ 部分を除いた $su(3)$ の変換の下で不変である。実際、

$$[H_0, \mathcal{A}_{ij}] = 0$$

を満たす。こうして、3次元調和振動子は $su(3)$ 対称性を持つ。

実際、 $su(3)$ の生成子 T_a ($a = 1, 2, \dots, 8$) を用いて

$$\mathcal{O}_a = a_k^\dagger (T_a)_{kl} a_l$$

という演算子を導入すると、 \mathcal{O}_a は $su(3)$ 代数を満たす。

今、多粒子系の場合も視野に入れて、粒子の区別を α で行い、 $\mathcal{A}_{ij} = \sum_{\alpha=\text{粒子}} \mathcal{A}_{ij}(\alpha)$ の意味であると考えよう。さて、 $a_x^\dagger, a_y^\dagger, a_z^\dagger$ は3次元ベクトルを構成するので、角運動量としては大きさ1を持つと考えられる。したがって、複合演算子 $a_i^\dagger a_j$ は2つの角運動量1の合成と数学的には同じであるので、角運動量の大きさ $J = 0, 1, 2$ と既約分解できる。 $J = 0$ がハミルトニアンであった。 $J = 1$ に対応するものを L_q 、 $J = 2$ に対応するものを Q_q と書くと、変換行列は零でない要素のみ書くと、得られる結果は

	Q_1	Q_{-1}	$\sqrt{3}L_1$	$\sqrt{3}L_{-1}$	$\sqrt{3}L_0$	Q_2	Q_{-2}	$\sqrt{2}H_0$	Q_0
$\sqrt{6}\mathcal{A}_{xz}$	-1/2	1/2	1/2	1/2					
$\sqrt{6}\mathcal{A}_{zx}$	-1/2	1/2	-1/2	-1/2					
$i\sqrt{6}\mathcal{A}_{yz}$	-1/2	-1/2	1/2	-1/2					
$i\sqrt{6}\mathcal{A}_{zy}$	-1/2	-1/2	-1/2	1/2					
$i\sqrt{6}\mathcal{A}_{yx}$					$\sqrt{1/2}$	1/2	-1/2		
$i\sqrt{6}\mathcal{A}_{xy}$					$-\sqrt{1/2}$	1/2	-1/2		
$\sqrt{6}\mathcal{A}_{xx}$						1/2	1/2	$\sqrt{1/3}$	$-\sqrt{1/6}$
$\sqrt{6}\mathcal{A}_{yy}$						-1/2	-1/2	$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/6}$
$\sqrt{6}\mathcal{A}_{zz}$								$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{2/3}$

となっている。このとき、

$$L_q = \sum_{\alpha} l_q(\alpha), \quad l_q(\alpha) = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_q$$

$$Q_q = \sum_{\alpha} \tilde{Q}_q(\alpha), \quad \tilde{Q}_q(\alpha) = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \left(m\omega r^2 Y_{2q}(\theta_r, \phi_r) + \frac{p^2 Y_{2q}(\theta_p, \phi_p)}{m\omega} \right)$$

である。 θ_r, ϕ_r は空間座標 \mathbf{r} の極座標表示、 θ_p, ϕ_p は運動量 \mathbf{p} の極座標表示であり、 Y_{2q} は球面調和関数である。

さて、ある代数のすべての生成子と可換な演算子を、その代数のカシミア演算子と呼ぶ*。3次元調和振動子ではカシミア演算子 \tilde{C}_2 は

$$\begin{aligned} \tilde{C}_2 &= 6 \sum_{ij} \mathcal{A}_{ij} \mathcal{A}_{ji} + (2\mathcal{A}_{zz} - \mathcal{A}_{xx} - \mathcal{A}_{yy})^2 + 3(\mathcal{A}_{xx} - \mathcal{A}_{yy})^2 \\ &= \sum_{q=-2}^2 Q_q Q_q + 3 \sum_{q=-1}^1 L_q L_q = Q \cdot Q + 3L \cdot L \end{aligned}$$

となることが知られている。ハミルトニアン H_0 は $su(3)$ 不変であり、またハミルトニアンにカシミア演算子が加えられても対称性は変わらず、一つの既約表現に属する状態のエネルギーは縮退している。そこで、動的 $su(3)$ 対称性を壊し、縮退が解ける場合を考えてみよう。演算子 Q_q は角運動量 2 を持つ 4 重極演算子である。原子核のような多粒子系で 4 重極変形が起きると、現象論的ではあるが $Q \cdot Q$ に比例した相互作用が生じると考えられる。この相互作用 $Q \cdot Q$ は $su(3)$ 対称性を壊す。そこで、もとのハミルトニアン H_0 に $Q \cdot Q$ 相互作用を加えてみよう†。すなわち、適当な定数を b として、

$$\begin{aligned} H &= H_0 - b(Q \cdot Q) \\ &= H_0 - b(\tilde{C}_2 - 3(L \cdot L)) \end{aligned}$$

となる。ここで、カシミア演算子の関係を用いた。カシミア演算子を加えても既約表現の状態のエネルギーを全体として変えるだけであり、定数として扱ってよいので落としてしまおう。また、演算子 $L \cdot L$ の固有値は

*例えば、角運動量 $su(2)$ 代数のときには $J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ がカシミア演算子である。

†そもそも調和振動子は粒子間に $|\mathbf{r}(\alpha) - \mathbf{r}(\beta)|^2$ のポテンシャルが存在することにより生じていた。粒子間の 2 体相互作用の次の次数は $|\mathbf{r}(\alpha) - \mathbf{r}(\beta)|^4 \equiv r_{\alpha\beta}^4$ だとして。この相互作用からポテンシャル

$$\begin{aligned} V^{(2)} &\propto \sum_{\alpha < \beta} r_{\alpha\beta}^4 \\ &= \sum_{\alpha < \beta} (r_{\alpha}^4 + r_{\beta}^4 + \frac{8}{3} r_{\alpha}^2 r_{\beta}^2 + \frac{4}{3} r_{\alpha}^2 r_{\beta}^2 P_2(\cos \theta_{\alpha\beta}) - 4(r_{\alpha}^2 + r_{\beta}^2) r_{\alpha} r_{\beta} \cos \theta_{\alpha\beta}) \end{aligned}$$

が生じるが、右辺最後の項は状態がパリティの良い固有状態であればその期待値は零となる。第 1 から 3 項までは $su(3)$ 対称性を破らない。よって $su(3)$ 対称性を壊すのは第 4 項である。ここで、 $P_2(\cos \theta)$ はルジャンドル多項式であり、

$$r_{\alpha}^2 r_{\beta}^2 P_2(\cos \theta_{\alpha\beta}) = \sum_q r_{\alpha}^2 Y_{2q}(\theta_{\alpha} \phi_{\alpha}) \cdot r_{\beta}^2 Y_{2q}(\theta_{\beta} \phi_{\beta})$$

かつ、

$$r_{\alpha}^2 Y_{2q}(\theta_{\alpha} \phi_{\alpha}) = \frac{1}{4m\omega} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \tilde{Q}_q(\alpha)$$

である。こうして、距離の 4 乗に比例した粒子間相互作用から、 $su(3)$ 対称性を壊す相互作用として

$$V^{(2)} \propto \sum_{q=-2}^2 Q_q Q_q$$

が考えられる。

$L(L+1)$ ($L=0,1,2,\dots$)であることを知っている。こうして、エネルギーは

$$H = H_0 + aL(L+1)$$

となる ($a=3b$)。こうして、 $Q \cdot Q$ 相互作用が存在すると、回転スペクトル $L(L+1)$ が現れることがわかる[‡]。

§ 35.6 クォークモデル

§§35.6.1 量子数の導入

加速器の発達と共に、1940年代から次々に“素粒子”が発見され、1960年頃までには100を超える素粒子が知られるようになった。このなかで、強い相互作用をする素粒子をハドロンと呼ぶ。ここではハドロンに注目しよう。強い相互作用をする粒子は、種々の反応で生成され、崩壊する。反応の前後で変わらない量（量子数）が幾つか知られており、また素粒子反応を分析することにより新たに発見されもした。たとえば、質量が近いよく似たハドロンをひとまとめにして考えよう。質量とエネルギーの等価性から、質量をエネルギーで表わすのが便利である。ここで、

$$1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

という単位を用いる。また、 $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$ である。陽子 (p)、中性子 (n) は質量がほぼ同じであり、1つのグループとする。陽子の電荷は $+e$ であり、中性子は 0 である。また、パイ中間子 ($\pi^{\pm,0}$) は電荷の異なる3種の質量がほぼ近く、 π^+ と π^- は同じ質量を持つので、これらも1つのグループとする。肩の $\pm, 0$ は素電荷 e を単位にした電荷 $Q = \pm 1$ または $Q = 0$ を表わす。

$$\begin{aligned} p, n : \text{質量} &\sim 940 \text{ MeV}/c^2 \\ \pi^+, \pi^0, \pi^- : \text{質量} &\sim 140 \text{ MeV}/c^2 \\ &\text{etc.} \end{aligned}$$

似たグループの電荷の平均を \bar{Q} とすると、

$$\begin{aligned} p, n \dots \bar{Q} &= \frac{1+0}{2} = \frac{1}{2} \\ \pi^+, \pi^0, \pi^- \dots \bar{Q} &= \frac{1+0+(-1)}{3} = 0 \\ &\text{etc.} \end{aligned}$$

となる。ここで、“アイソスピンの第3(z)成分 I_3 ”を、次のように導入する。

$$I_3 = Q - \bar{Q}$$

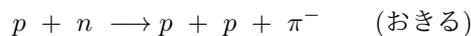
このとき、

$$\begin{cases} p : I_3 = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \\ n : I_3 = 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \\ \pi^+ : I_3 = 1 - 0 = 1 \\ \pi^0 : I_3 = 0 - 0 = 0 \\ \pi^- : I_3 = -1 - 0 = -1 \end{cases}$$

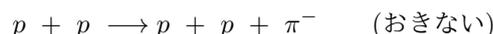
[‡]この考え方は原子核の回転スペクトルの説明に用いられ、Elliott モデルとして知られている。

となることがわかる。アイソスピンの大きさはスピンを真似て、陽子、中性子は第3成分が $\pm 1/2$ であるので、大きさ $I = 1/2$ と決める。同様にパイ中間子は $I = 1$ となる。

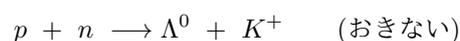
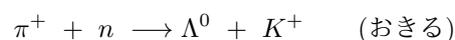
十分なエネルギーを与えれば、次の2つの素粒子反応は実際に起きる。



どちらも、反応の前後で、電荷もアイソスピンの z 成分も保存している。ところが、



という反応は起きない。これは明らかに反応の前後で電荷が保存していないからである。ところが、電荷の保存は成り立っていても、以下の様に



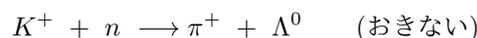
と、起きる反応と起きない反応が存在する。そこで、新たな保存量としてバリオン数と呼ばれる量子数 B を導入する。たとえば、次のように割り振っておく。

$$n, p, \Lambda^0 \cdots B = 1$$

$$\pi^0, \pi^+, \pi^-, K^+ \cdots B = 0$$

そうすると、上の反応で電荷保存則は成り立っているのに起きないものは、バリオン数が反応の前後で保存していないことがわかる。

しかしながら、電荷保存則もバリオン数の保存も成り立っているが、起きない反応の存在に気づかれた。



そこで、今度も新しい量子数としてストレンジネス S が導入される。

$$K^+ \cdots S = 1$$

$$p, n, \pi^0, \pi^\pm \cdots S = 0$$

$$\Lambda^0, K^- \cdots S = -1$$

こうして、素粒子反応から幾つかの量子数が導入され、ハドロンが分類された。

§§35.6.2 ハドロンの分類

ハドロンの持つ電荷を素電荷 e を単位にして、 Qe とする。アイソスピンの大きさを I 、アイソスピンの第3成分を I_3 ($I_3 = -I, -I+1, \dots, I$)としよう。また、先に導入したバリオン数を B 、ストレンジネスを S としよう。以下の便宜のため、バリオン数とストレンジネスから、ハイパーチャージ Y を定義しておこう。

$$Y = S + B$$

強い相互作用では、 I, I_3, B, S (または Y) が別々に保存する。バリオン数が1のハドロンをバリオン、0のハドロンをメソンと呼ぶ。

強い相互作用する素粒子であるハドロンを、質量が近く、スピン J が等しいものにまとめておこう。

	バリオン ($B = 1$)	質量 (MeV/c^2)	I	I_3	Y
$J = 1/2 :$	p	938.3	1/2	1/2	1
	n	939.6	1/2	-1/2	1
	Λ	1115.6	0	0	0
	Σ^+	1189.4	1	1	0
	Σ^0	1192.6	1	0	0
	Σ^-	1197.4	1	-1	0
	Ξ^0	1315	1/2	1/2	-1
	Ξ^-	1321	1/2	-1/2	-1
$J = 3/2 :$	Δ^{++}	~ 1230	3/2	3/2	1
	Δ^+	~ 1230	3/2	1/2	1
	Δ^0	~ 1230	3/2	-1/2	1
	Δ^-	~ 1230	3/2	-3/2	1
	Σ^{*+}	1383	1	1	0
	Σ^{*0}	1384	1	0	0
	Σ^{*-}	1387	1	-1	0
	Ξ^{*0}	1532	1/2	1/2	-1
	Ξ^{*-}	1535	1/2	-1/2	-1
	Ω^-	1672	0	0	-2

それぞれのグループに対し、横軸に I_3 、縦軸に Y をとって図示しよう (図 95)。

次にメソンについても同様にまとめておこう。

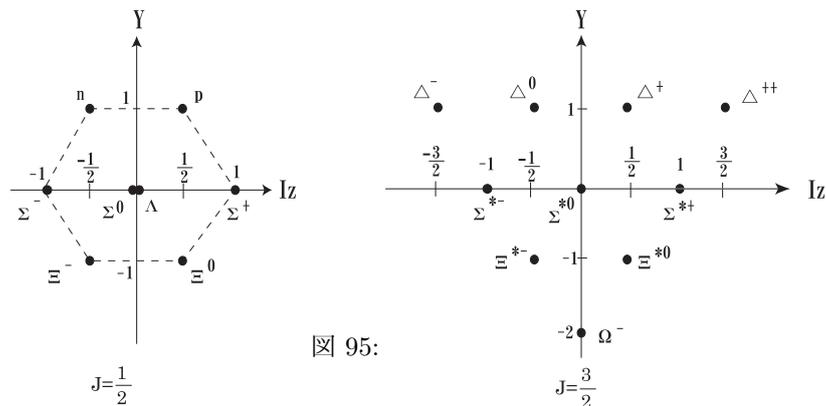


図 95:

	メソン ($B = 0$)	質量 (MeV/c^2)	I	I_3	Y
$J = 0 :$	π^+	139.6	1	1	0
	π^0	135.0	1	0	0
	π^-	139.6	1	-1	0
	K^+	494	1/2	1/2	1
	K^0	498	1/2	-1/2	1
	\bar{K}^0	498	1/2	1/2	-1
	K^-	494	1/2	-1/2	-1
	η	548.8	0	0	0
	η'	957.5	0	0	0
$J = 1 :$	ρ^+	~ 770	1	1	0
	ρ^0	~ 770	1	0	0
	ρ^-	~ 770	1	-1	0
	K^{*+}	892	1/2	1/2	1
	K^{*0}	896	1/2	-1/2	1
	\bar{K}^{*0}	896	1/2	1/2	-1
	K^{*-}	892	1/2	-1/2	-1
	ω	782	0	0	0
	ϕ	1019	0	0	0

やはり、それぞれのグループに対し、横軸に I_3 、縦軸に Y をとって図示しておく (図 96)。メソンの場合には、 η (エータメソン) と η' (エータプライムメソン) は量子力学的に η_0 と η_8 というメソンが混合を起こして良い固有状態になっていると考えられている。 ω (オメガメソン) と ϕ (ファイメソン) も同様であるが、実際には混合している (図 96)。

バリオン、メソンの図からただちに読み取れることは

$$Q = I_3 + \frac{Y}{2} \quad (35.40)$$

という関係が常に成り立っていることである。これを中野・西島・Gell-Mann の法則と呼ぶ。

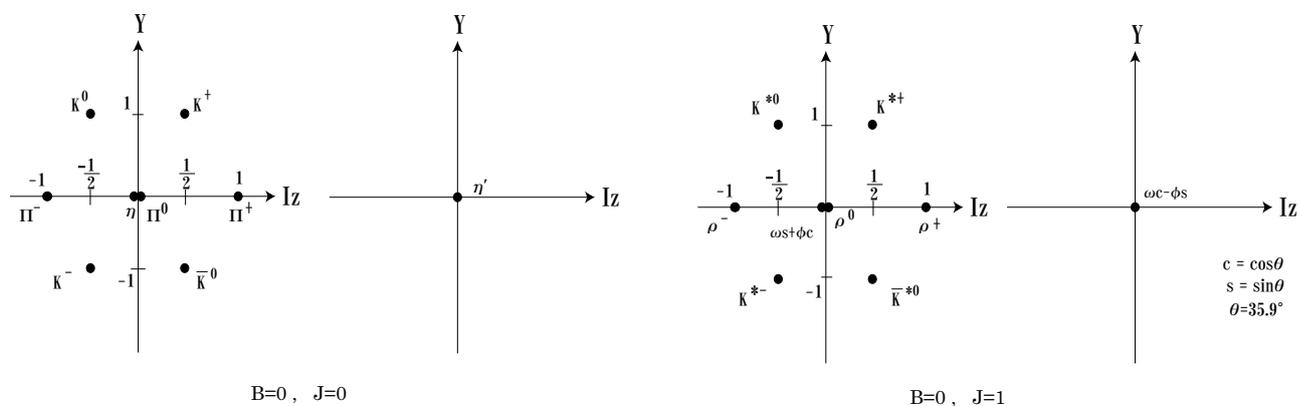


図 96:

また、ハドロンを I_3 と Y で描いた図は、 $su(3)$ の weight 図と同じ形をしていることに気づかれる。バリオンでは 8-表現と 10-表現が、メソンでは 8-表現と 1-表現が現われているように見える。実際、

$$\begin{aligned} I_3 &= H_1 (= T_3) \\ \frac{\sqrt{3}}{2} Y &= H_2 (= T_8) \end{aligned} \quad (35.41)$$

とすれば完全に一致する。リー代数の表現で学んだことは、 $su(3)$ の変換の下で、各表現に属する異なる weight を持つ状態は互いに移りあうことができることであった*。これは、強い相互作用をする素粒子には $su(3)$ 対称性が存在することを意味する。こうして、強い相互作用をする素粒子には $su(3)$ 対称性が存在し、 $su(3)$ の既約表現でハドロンを分類することが可能であるという考えに導かれる。この $su(3)$ 対称性をフレーバー $su(3)$ と呼ぶ

§§35.6.3 クォークモデル

ハドロンをまとめた図は、対応 (35.41) を通して $su(3)$ 代数の weight 図と一致した。しかしながら、8次元表現、10次元表現、1次元表現は表れたが、最も基本的な3次元の基本表現やそれに複素共役な 3^* 表現が現れない。そこで、基本表現に対応する基本粒子として、クォークを導入しよう。3つの状態に対応して、 u -、 d -、 s -クォークと名付ける。対応 (35.41) に基づき、 $su(3)$ の weight 図から、アイソスピンの第3成分 I_3 とハイパーチャージ Y を与えて図示しよう (図 97)。左が基本 3 -表現、右が 3^* -表現であり、 3^* -表現は基本表現の複素共役表現であるので、物理的には基本表現に属する粒子の反粒子を意味する。反クォークを \bar{u} 、 \bar{d} 、 \bar{s} と書こう。

クォークの持つ電荷は、中野・西島・Gell-Mann の法則 (35.40) から決定される。クォークの電荷は素電荷 e を単位にして、分数になることが理解される。クォークについて量子数をまとめると、表のようになる。

導入したクォークは基本表現 (3次元表現) に属している。したがって、クォークはヤング図 \square で表される。バリオンは 8-表現と 10-表現が表れていた。基本表現のクォークから 8-表現や 10-表現を構成するには、(35.36)

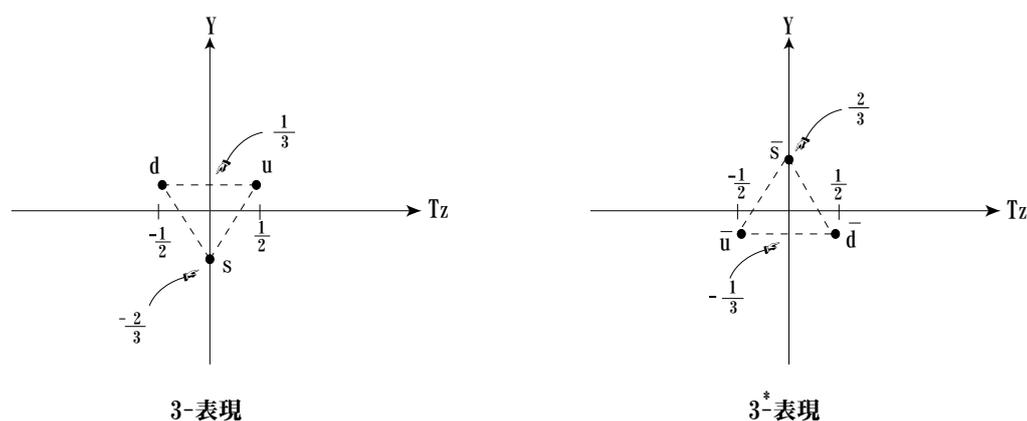


図 97:

*昇降演算子を用いる。

表 2:

クォーク	電荷 Q	Y	I	I_3	B	S
u	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0
d	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0
s	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	-1

反クォーク	電荷 Q	Y	I	I_3	B	S
\bar{u}	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{3}$	0
\bar{d}	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{3}$	0
\bar{s}	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	0	$-\frac{1}{3}$	1

で見たように、少なくとも 3 つの基本表現の状態の積を考える必要がある。再掲しておこう。

$$\begin{array}{c}
 \square \otimes \square \otimes \square = \square \square \square \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \\
 \text{状態数} \quad 3 \times 3 \times 3 = \quad 10 + 8 + 8 + 1
 \end{array} \tag{35.42}$$

余分の 8-表現と 1-表現が現れてしまうが、確かに 10-表現と 8-表現は構成される。メソンについては 8-表現と 1-表現が現れなければならない。このためには、3-表現と 3^* -表現の状態の直積を取ればよい。

$$\begin{array}{c}
 \square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \\
 \text{状態数} \quad 3 \times 3 = 8 + 1
 \end{array} \tag{35.43}$$

もう一組 8-表現と 1-表現が必要であるが、これは次節で見ていこう。

バリオンはクォーク 3 個から、メソンはクォークと反クォークから構成されると考えると、分類された現実のハドロンを生み出すことができるという考えに導かれる。したがって、ハドロンはクォークや反クォークから構成される複合粒子であると考えよう。weight の対応から、ハドロンのクォークの構成が得られる。結果を表にしておこう。量子数が正しく生じていることは簡単に確認できるであろう。

バリオン				
$J = 1/2 :$	p	uud	$J = 3/2 :$	Δ^{++} uuu
	n	udd		Δ^+ uud
	Λ	uds		Δ^0 udd
	Σ^+	uus		Δ^- ddd
	Σ^0	uds		Σ^{*+} uus
	Σ^-	dds		Σ^{+0} uds
	Ξ^0	uss		Σ^{*-} dds
	Ξ^-	dss		Ξ^{*0} uss
				Ξ^{*-} dss
				Ω^- sss

メソン					
$J = 0 :$	π^+	$u\bar{d}$	$J = 1 :$	ρ^+	$u\bar{d}$
	π^0	$u\bar{u}-d\bar{d}$		ρ^0	$u\bar{u}-d\bar{d}$
	π^-	$d\bar{u}$		ρ^-	$d\bar{u}$
	K^+	$u\bar{s}$		K^{*+}	$u\bar{s}$
	K^0	$d\bar{s}$		K^{*0}	$d\bar{s}$
	\bar{K}^0	$s\bar{d}$		\bar{K}^{*0}	$s\bar{d}$
	K^-	$s\bar{u}$		K^{*-}	$s\bar{u}$
	η	$u\bar{u}+d\bar{d}-2s\bar{s}$		ω	$u\bar{u}+d\bar{d}$
	η'	$u\bar{u}+d\bar{d}+s\bar{s}$		ϕ	$s\bar{s}$

§§35.6.4 フレーバー・スピン $su(6)$

バリオンでは 8 次元表現と 10 次元表現だけが現実の粒子に対応しており、クォーク 3 つから作ったときに、余分に 8 次元表現と 1 次元表現が出てしまった。またメソンでは、クォークと反クォークから 8 次元表現と 1 次元表現が出たが、現実にはもう 1 組、8 次元表現と 1 次元表現に属する粒子がある。

そこで、フレーバーの $su(3)$ 対称性に加えて、空間回転対称性であるスピン $su(2)$ 対称性も同時に考慮してみよう。 $su(3) \times su(2)$ で、 $su(6)$ 対称性を考えることにする。フレーバー $su(3)$ の状態を u 、 d 、 s で、またクォークはスピン 1/2 を持つので、スピン $su(2)$ の状態を上向きスピン \uparrow 、下向きスピン \downarrow で示すと、 $su(6)$ の状態を

$$\begin{pmatrix} u \\ d \\ s \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^\uparrow \\ u^\downarrow \\ d^\uparrow \\ d^\downarrow \\ s^\uparrow \\ s^\downarrow \end{pmatrix} = q^I \sim \square$$

と書いておこう。

$su(6)$ の基本表現は 6 次元になるので、クォーク 3 つからは、表現の次元の勘定に注意して*

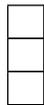
$$\begin{array}{c} \square \otimes \square \otimes \square = \square \oplus \square \oplus \square \\ \text{状態数} \quad 6 \times 6 \times 6 = 56 + 70 + 70 + 20 \end{array} \quad (35.44)$$

ここで、状態の入れ替えに対して完全対称な 56 次元表現 \square だけ考えよう。これは $su(6)$ で書いた状態であるので、 $su(3)$ のフレーバー状態と $su(2)$ のスピン状態の内訳を見ておこう。次式の右辺の括弧の内、左

*Factor over Hook 則で計算できる。

がフレーバー $su(3)$ の状態を表し、右はスピン $su(2)$ の状態を表している。こうして

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} = \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right) \oplus \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \right) \oplus \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right)$$

となるように思えるが、右辺第3項のスピン $su(2)$ の状態は、2つの状態しかないので完全反対称な状態は  であり、3つの状態を完全反対称にはできない。したがって、 $su(2)$ では  は存在せず、右辺第3項は現れない。こうして正しくは、

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} = \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right) \oplus \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \right)$$

$$\left(10, J = \frac{3}{2} \right) \quad \left(8, J = \frac{1}{2} \right)$$

$$56 = 10 \times \left(2 \cdot \frac{3}{2} + 1 \right) + 8 \times \left(2 \cdot \frac{1}{2} + 1 \right)$$

となる。2行目に $su(3)$ の次元とスピン角運動量の大きさ J を記した。また、3行目は状態数を与えた[†]。こうして、 $su(6)$ 対称性を考え、完全対称な 56 次元表現をとると、バリオンの組がスピンまで含めて過不足なく現れることがわかる[‡]。

次に、クォークと反クォークからできているメソンを考えよう。 $su(6)$ の状態ではクォークは 6-表現、反クォークは 6*-表現に属することになるので、クォーク・反クォーク対は

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$$

状態数 $6 \times 6 = 35 + 1$ (35.45)

[†] $su(2)$ ではスピン J のとき状態数は $2J + 1$ であった。
[‡]70 次元表現などは、クォーク間の軌道角運動量が 0 でない励起状態として理解されている。

と規約分解される。フレーバー $su(3)$ とスピン $su(2)$ の内訳を見ておこう。

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \otimes \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \\
 = & \left[\begin{array}{c} \square \\ \square \otimes \square \\ \square \end{array} \right] \otimes \left[\begin{array}{c} \square \\ \square \otimes \square \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \square \square \\ \square \square \\ \square \end{array} \otimes \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \end{array} \right] \otimes \left[\begin{array}{c} \square \square \\ \square \end{array} \otimes \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} \right] \\
 & \quad [su(3)] \quad [su(2)] \quad [su(3)] \quad [su(2)] \\
 = & \left\{ \left(\begin{array}{c} \square \square \\ \square \square \end{array}, \begin{array}{c} \square \square \end{array} \right) \oplus \left(\begin{array}{c} \square \square \\ \square \end{array}, \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} \right) \oplus \left(\begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \end{array}, \begin{array}{c} \square \square \end{array} \right) \right\} \oplus \left(\begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \end{array}, \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} \right) \\
 & \quad (8, J=1) \quad (8, J=0) \quad (1, J=1) \quad (1, J=0)
 \end{aligned}$$

ここで、2行目では $su(3)$ と $su(2)$ の状態それぞれで先に直積をとり、3行目では分配則を用いて、 $su(3)$ と $su(2)$ の組み合わせを示した。バリオンと同じく、今度もメソンが過不足無く現れることがわかる。また、 $su(6)$ で見たときの完全反対称状態である 1-表現は、フレーバーとスピンともに完全反対称に組まれた3行目の右辺最後の項であるフレーバー 1-表現、スピン 0 の状態に対応している。それ以外は 35-表現に属している。 $J=1$ のメソンは 35 次元表現の中に一緒に入っており、 $J=0$ のメソンは、 $su(6)$ の 35 次元表現に入るフレーバー $su(3)$ の 8 次元表現と、1 次元表現 (η' メソン) に分かれて出てくることがわかる。

§§35.6.5 カラー自由度

以上見てきたように、強い相互作用する素粒子であるハドロンの分類から、それらを構成する基本粒子であるクォークの存在が予想された。クォークと反クォークを考えると、ハドロンは過不足無く現れる様に見える。しかしながら、なぜ強い相互作用するハドロンはクォーク 3 つの (qqq) やクォーク・反クォークの ($\bar{q}q$) という状態でしか現れないのかは説明できていない。また、導入されたクォークはスピン 1/2 を持つフェルミ粒子であり、当然パウリの排他律に従うはずである。したがって、複数のクォークからなる状態は、完全反対称に組まれていなければならない。メソンの場合にはクォークと反クォークであったのでパウリ排他律から免れていたが、バリオンはクォーク 3 つから構成されているので、波動関数は完全反対称に組まれるべきである。然るに、我々はフレーバー・スピン $su(6)$ 対称性を考えた際に、完全対称な状態を用いることでバリオンを過不足なく説明した。これはクォークがフェルミオンであるという統計性に反する。

そこで、新たな自由度としてカラー自由度を導入しよう[§]。カラー自由度は $su(3)_c$ 対称性を持つ[¶]。すなわちカラーの入れ替えに対して理論は不変であるとしよう。状態 (波動関数) はフレーバー、スピンに加えてカラーも指定される。

$$q^{(i,\alpha)a}, \quad i = u, d, s : \text{flavor}, \quad \alpha = \pm 1/2 : \text{spin}, \quad a = 1, 2, 3 : \text{color}$$

[§] “カラー” というのは名称であり、現実の可視光とは無関係である。

[¶] $su(3)_c$ の添え字 c は対称性がカラーであることを明確に示すためのものである。そこで、フレーバー $su(3)$ を $su(3)_f$ と書いたりする。

ここで重要な仮定をおく。ハドロンはカラー 1 重項 (1-表現) しか現れない。これをカラー (色) の閉じ込めと呼ぶ。したがって、カラー $su(3)_c$ では完全反対称なものしか現れないことになる。クォークはカラー \square を持ち、反クォークは反カラー $\bar{\square}$ をもつ。これらのものからカラー 1 次元表現 (カラー 1 重項) を構成する最も簡単な組み合わせはクォーク 3 つ $\square \otimes \square \otimes \square$ か、クォーク・反クォーク対 $\square \otimes \bar{\square}$ である。こうしてバリオンは (qqq) 、メソンは $(\bar{q}q)$ で現れることが理解される。

バリオンを考えよう。バリオンのカラー自由度は完全反対称 $\bar{\square}_c$ に組まれている。クォークはフェルミ粒子なので、3 つのクォークからなる系の状態はその 3 つの状態に対して完全反対称に組まれていなければならない。しかし、カラー自由度で既にクォークの入れ替えに対して完全反対称であるので、残りのスピン・フレーバーの自由度に対しては入れ替えに対して完全対称でなければならない。こうして、スピン・フレーバー $su(6)$ 波動関数 (状態) に対しては完全対称な 56-表現をとらなければならなかったのである。

§§35.6.6 応用例

$su(3)_f$ の破れと質量

たとえばバリオンの表を見てみよう。フレーバー $su(3)$ 対称性があるといっても、それぞれのバリオンの質量は少しずつ異なっている。これは $su(3)_f$ 対称性は完全に成り立っているのではなく、近似的に成り立っているからであると考えられる。そこで、対称性のあからさまな破れを考え、質量差を取り上げてみよう。

フェルミ粒子であるクォークの質量項は、クォークの場を q とすると $m\bar{q}q$ の形を持つはずである (§25)。ここで、 $\bar{q}q$ は反クォーク・クォークの変換性を持つとして、 $\bar{q}q$ は 8-表現、または 1-表現に属すると考えられる。ここで、1-表現では $su(3)$ 変換では変換しないので、8-表現であるとしよう。また、この項はクォークのフレーバー u 、 d 、 s について対角的であるので、 $T_8 (= H_2)$ に比例するとしよう。ここで、 H_2 は物理的にはハイパーチャージ Y に対応していたことを思い出そう ((35.41) 式)。質量差を ΔM で表しておく。10-表現に属するバ

リオンのある状態を $\left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right\rangle$ と表しておく。 $\bar{q}q$ が 8-表現 $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \end{array}$ の変換性を示すことから、質量差は

$$\begin{aligned} \Delta M &= \left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \left| \Delta M \times \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \end{array} \right| \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right\rangle \\ &= \Delta M \left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \left| \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right\rangle \\ &= \langle 10 | 8 \oplus 10 \oplus 27 \oplus 35 \rangle \Delta M \\ &= \langle 10 | 10 \rangle \Delta M \end{aligned}$$

一方、 $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \end{array}$ は H_2 に比例しているとし、 H_2 の固有値はハイパーチャージ Y に比例していたので、比例定数を a' としておく

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \left| a' H_2 \right| \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \right\rangle = a' \frac{\sqrt{3}}{2} Y = aY$$

のようになる。新たに定数 a を定義した。こうして、両者を等値して

$$\Delta M = aY$$

が得られる。すなわち、10-表現に属するバリオンは、フレーバー $su(3)$ 対称性のあらわな破れにより、ハイパーチャージに比例した質量差を持つと結論される。定数 a があからさまに現れないようにして比較すると、例えば Ω^- 粒子の質量を M_{Ω^-} などと書くことにして、

$$M_{\Omega^-} - M_{\Xi^*} = M_{\Xi^*} - M_{\Sigma^*} = M_{\Sigma^*} - M_{\Delta}$$

が成り立っているはずである。実験値と比較してみればよい。

崩壊比

10-表現に属するバリオンが、8-表現に属するバリオンとメソンに崩壊する過程を考えてみよう。フレーバーが変化するので、ここではフレーバーの部分のみあからさまに記し、スピン、カラーの量子数は省略する。例えば (ijk) の3つのクォークを“作る”演算子を D_{ijk}^\dagger などと表わすことにしよう。また、クォークの存在しない真空を $|0\rangle$ 、3つのクォーク状態を $|ijk\rangle$ などと記す。ここで、 $i, j, k = u, d, s$ のいずれかである。フレーバー $su(3)$ で10-表現に属するバリオンはフレーバーの入れ替えに対して完全対称 $\square\square\square$ であったので、 i, j, k を対称化する演算子を $S(ijk)$ と記すと、

$$\begin{aligned} D_{ijk}^\dagger|0\rangle &= S(ijk)|ijk\rangle \\ &= \frac{1}{6}(|ijk\rangle + |jik\rangle + |jki\rangle + |kji\rangle + |kij\rangle + |ikj\rangle) \end{aligned}$$

のようになる。規格化因子まで考慮して、10-次元バリオンを記述すると

$$\begin{aligned} D_{uuu}^\dagger|0\rangle &= |uuu\rangle = |\Delta^{++}\rangle \\ D_{uud}^\dagger|0\rangle &= D_{udu}^\dagger|0\rangle = D_{duu}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{3}(|uud\rangle + |udu\rangle + |duu\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}|\Delta^+\rangle \\ D_{udd}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Delta^0\rangle \\ D_{ddd}^\dagger|0\rangle &= |ddd\rangle = |\Delta^-\rangle \\ D_{uus}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Sigma^{*+}\rangle \\ D_{usd}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{6}}|\Sigma^{*0}\rangle \\ D_{sdd}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Sigma^{*-}\rangle \\ D_{ssu}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Xi^{*0}\rangle \\ D_{ssd}^\dagger|0\rangle &= \dots = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Xi^{*-}\rangle \\ D_{sss}^\dagger|0\rangle &= |sss\rangle = |\Omega^-\rangle \end{aligned}$$

と得られる。次に、8-表現に属するメソンを考えよう。メソンはクォークと反クォークからなり、それぞれの

波動関数を $\chi_i, \bar{\chi}^j$ と記すと ($i, j, k = u, d, s$)、8-表現のメソンの波動関数 χ_i^j は

$$\chi_i^j = \bar{\chi}^j \chi_i - \frac{1}{3} \delta_i^j \sum_{k=1}^3 \bar{\chi}^k \chi_k$$

と書かれる。ここで、右辺第2項は χ_i^j のトレース（対角成分の和）が零になるための項であり、こうして、メソンは独立な 8 (= 3 × 3 - 1 (トレースレス)) 成分を持ち得る。数式で表わすには、 i フレーバーのクォーク

$\chi_i \sim \begin{smallmatrix} \square \\ |i\rangle \end{smallmatrix}$ 、 j フレーバーの反クォーク $\bar{\chi}^j \sim \begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix} = \epsilon^{jkl} |kl\rangle$ から、8重項のメソン M は、メソンを作る演算子を $M_i^{j\dagger}$ として

$$M_i^{j\dagger} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\epsilon^{jkl} |ikl\rangle - \frac{1}{3} \delta_i^j \epsilon^{mkl} |mkl\rangle \right)$$

と表わされる。8重項のバリオン B も同様に、 B を作る演算子を $B_i^{j\dagger}$ として M と同様の表式で書ける。こうして、

$$M_i^{j\dagger} = \begin{pmatrix} \frac{\pi^0}{\sqrt{2}} + \frac{\eta}{\sqrt{6}} & \pi^+ & K^+ \\ \pi^- & -\frac{\pi^0}{\sqrt{2}} + \frac{\eta}{\sqrt{6}} & K^0 \\ K^- & \bar{K}^0 & -\frac{2}{\sqrt{6}}\eta \end{pmatrix}^\dagger$$

と書ける。ここで、右辺の行列の肩の † は、ハドロンを生成する演算子であることを意味している。同様に、バリオン 8重項は

$$B_i^{j\dagger} = \begin{pmatrix} \frac{\Sigma^0}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}} & \Sigma^+ & p \\ \Sigma^- & -\frac{\Sigma^0}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}} & n \\ \Xi^- & \Xi^0 & -\frac{2}{\sqrt{6}}\Lambda \end{pmatrix}^\dagger$$

と書ける。

さて、10重項のバリオン D が 8重項のメソン M とバリオン B に崩壊するとしよう。この素粒子反応のハミルトニアンを対称性から書き下そう。ハミルトニアンはフレーバー $su(3)$ の変換で変換されてはいけない。すなわち、1-表現 (1重項) の形を持たなければならない。そのためにはメソン 8-表現とバリオン 8-表現から

10-表現の複素共役表現である 10*-表現 $\begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{smallmatrix}$ を作り、これとバリオン 10-表現 $\begin{smallmatrix} \square & \square & \square \end{smallmatrix}$ を反対称化し

て 1-表現 $\begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{smallmatrix} \sim \begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}$ を構成する。こうして、相互作用ハミルトニアン H_{int} は

$$H_{int} = g \left[\epsilon_{klm} M_i^{l\dagger} B_j^{m\dagger} D^{ijk} + \epsilon^{klm} D_{ijk}^\dagger B_i^j M_m^j \right] \tag{35.46}$$

と表わされる。ここで、† のつかないものはハドロンの消滅演算子であり、第1項は D が消滅して B, M が生成される 10次元バリオンの崩壊過程を、第2項は第1項にエルミート共役な部分で、 B と M から D が生成される逆過程を表わしている。相互作用の強さを g とした。

準備が整ったので、崩壊比の1例として Δ^{++} 粒子が π^+ と p に崩壊する割合と、 Σ^{*+} 粒子が π^+ と Σ^0 に崩

壊する割合の比を求めてみよう。(35.46) でこれらの反応を表わす部分だけ抜き出してみよう。

$$\begin{aligned}
 H_{int} &= g(\cdots \\
 &\quad -B_1^{3\dagger} M_1^{2\dagger} D^{111} \quad \Leftrightarrow \quad -p^\dagger (\pi^+)^\dagger \Delta^{++} \\
 &\quad +B_1^{1\dagger} M_1^{2\dagger} D^{113} \quad \Leftrightarrow \quad +\left(\frac{\Sigma^0}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}}\right)^\dagger (\pi^+)^\dagger \frac{\Sigma^{*+}}{\sqrt{3}} \\
 &\quad -B_1^{2\dagger} M_1^{1\dagger} D^{113} \quad \Leftrightarrow \quad -(\Sigma^+)^\dagger \left(\frac{\pi^0}{\sqrt{2}} + \frac{\eta}{\sqrt{6}}\right)^\dagger \frac{\Sigma^{*+}}{\sqrt{3}} \\
 &\quad +\cdots)
 \end{aligned}$$

したがって、

$$\langle p\pi^+ | H_{int} | \Delta^{++} \rangle = -g, \quad \langle \pi^+ \Sigma^0 | H_{int} | \Sigma^{*+} \rangle = \frac{g}{\sqrt{6}}$$

が得られる。よって、崩壊比は振幅の絶対値の2乗を比較して

$$\frac{|\langle p\pi^+ | H_{int} | \Delta^{++} \rangle|^2}{|\langle \pi^+ \Sigma^0 | H_{int} | \Sigma^{*+} \rangle|^2} = 6$$

と得られる。

(問) $\pi^0 p \rightarrow \Delta^+$ と $K^- p \rightarrow \Sigma^{*0}$ の反応比を求めよ。

§ 35.7 ゲージ理論

前節で、クォークには“色”の自由度があることがわかった。実際にはこの色の自由度の間に相互作用が働く。この相互作用は強い相互作用と呼ばれており、 $su(3)$ 対称性を持つ。従って、この対称性を頼りにクォークの力学を構成すればよい。

§11.3 では非相対論的ではあったが、電磁場中の粒子の力学を構成し、また電磁場自身の力学も“ゲージ変換”に対する不変性を課すことで得た。理論にゲージ変換に対する不変性を要求することをゲージ原理と呼び、物理法則の基礎原理の一つである。また、ゲージ原理に基づいて構成された理論をゲージ理論と呼ぶ。ここでは、ゲージ対称性を基礎において、再度ゲージ場の力学を構成しよう*

§§35.7.1 $u(1)$ ゲージ理論—電磁場の場合—

簡単のために非相対論的な量子力学で見よう。途中で得られる手続きは相対論の場合にも有効である。まず、波動関数 $\psi(x)$ を考えよう。ここで $x = (t, \mathbf{x})$ を意味する。シュレーディンガー方程式は†

$$\psi(x) \longrightarrow e^{i\theta} \psi(x)$$

と位相変換しても不変である。しかしながら、全時空間で同じ位相だけ回転させたときだけ理論は不変であることを要請するには対称性として強すぎると考えられる。そこで、各時空点で独立に位相変換を施す。

$$\psi(x) \longrightarrow e^{i\tilde{\theta}(x)} \psi(x) = e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x)$$

*本節では $c=1$ の単位系を取る。ここで、 c は光速である。

†相対論的には $\psi(x)$ をクライン・ゴルドン方程式を満たすもの、あるいはディラック方程式を満たすものと考えればよい。以下の議論でほとんど変更は生じない。

ここで、 q というパラメータと \hbar をあらかじめ含ませておいた。この変換のもとでシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(x)$$

は明らかに不変ではない。実際、変換後、右辺第 2 項は変わらないが、微分項では

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x) \right) = e^{iq\theta(x)/\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} - q \frac{\partial \theta(x)}{\partial t} \psi(x) \right) \\ (\text{右辺の運動量の作用}) &= \hat{\mathbf{p}} \left(e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x) \right) = e^{iq\theta(x)/\hbar} (\hat{\mathbf{p}}\psi + q\nabla\theta(x)) \psi(x) \end{aligned}$$

のように余分が生じ、シュレーディンガー方程式は不変にならない。そこで、余分なものが消えるように別の場 $(\phi(x), \mathbf{A}(x))$ が存在し、その場も変換 $\psi(x) \rightarrow e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x)$ に伴って変換を受けるとしよう。時間微分から生じる余分を打ち消すように、場 ϕ をシュレーディンガー方程式の右辺に q を乗じて加え、場 $\phi(x)$ は

$$\phi(x) \rightarrow \phi(x) - \frac{\partial \theta(x)}{\partial t}$$

と変換するとする。場 ϕ を加えることは、時間微分を

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi(x)$$

と置き換えることに対応する。このとき、確かに

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi(x) \right) \psi(x) &\rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q \left(\phi(x) - \frac{\partial \theta(x)}{\partial t} \right) \right) (e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x)) \\ &= e^{iq\theta(x)/\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} - q\phi(x) \psi(x) \right) \end{aligned} \quad (35.47)$$

となり、元に戻る。

一方、運動量演算子の作用による空間微分から生じる余分を消すように、運動量演算子を場 $\mathbf{A}(x)$ に q を乗じたものだけずらし、場 $\mathbf{A}(x)$ は

$$\mathbf{A}(x) \rightarrow \mathbf{A}(x) + \nabla\theta(x)$$

と変換するものとする。このとき

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(x)) \psi(x) &\rightarrow (\hat{\mathbf{p}} - q(\mathbf{A}(x) + \nabla\theta(x))) e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x) \\ &= e^{iq\theta(x)/\hbar} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(x)) \psi(x) \end{aligned}$$

のようにして、元に戻る。もう一度 $\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(x)$ を作用させても同じである。

整理しておく

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow e^{iq\theta(x)/\hbar} \psi(x) && \text{と変換したとき} \\ \left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x) \\ \hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(x))^2 + V(\mathbf{x}) + q\phi(x) \end{array} \right. \end{aligned}$$

は、不変である。ただし

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi(x) \rightarrow \phi(x) - \frac{\partial \theta(x)}{\partial t} \\ \mathbf{A}(x) \rightarrow \mathbf{A}(x) + \nabla\theta(x) \end{array} \right.$$

場 $A^\mu(x) = (\phi(x), \mathbf{A}(x))$ の変換は 4 元形式で

$$A_\mu(x) \longrightarrow A_\mu(x) - \partial_\mu \theta(x)$$

と簡潔に表わされる。ここで得られたハミルトニアンは §11.3 で得られたものと同じである。場 $(\phi(x), \mathbf{A}(x))$ は電磁場を表わしており、場 $\psi(x)$ 及び $(\phi(x), \mathbf{A}(x))$ の変換をゲージ変換と呼ぶ。理論はゲージ変換の下で不変である。電磁場の場合、 $\psi(x)$ の変換は $e^{i\hat{\theta}(x)}$ による位相変換であり、この変換は $U(1)$ 群を成す。したがって、電磁気学は $U(1)$ 変換に対して不変であり、 $u(1)$ -ゲージ理論である。電磁場自身の運動方程式が必要であるが、これは次の $su(N)$ -ゲージ理論でより一般的に構成することしよう[‡]。

§§35.7.2 非可換ゲージ理論— $su(N)$ ゲージ対称性を持つ場合—

物質場 $\psi_i(x)$ が群 G のもとで変換

$$\psi'_i(x) = \sum_j U_i^j(x) \psi_j(x) = [\exp(ig\theta^a(x)T_a)]_i^j \psi_j(x) \quad (35.48)$$

という変換を受けるとしよう。ここで、繰り返す添え字については和を取る。ここで、 T_a は群 G に対応するリー代数の生成子である。また、 a は群の次元まで和をとる。 i, j は群の表現空間の次元まで和をとる。群 G は $SU(N)$ 群としよう。例えば、 $SU(3)$ 群の時には $a = 1, 2, \dots, 8$ であり、物質場が基本表現 (3 次元表現) に属していれば $i, j = 1, 2, 3$ となる。このゲージ変換に対して理論は不変であることを要請しよう。この要請はゲージ原理と呼ばれる。前節で見たように、局所変換[§] の場合にはゲージ場 $A_\mu^a(x)$ の導入が不可欠である。そこで、 $x \rightarrow x + dx$ の“平行移動”により、 $\psi_i(x)$ は $\psi_{\parallel i}(x + dx)$ になるとしよう。一般相対論を構成したときと同様に、 dx は微小なので平行移動後の場と元の場との差は dx に比例しているとして良からう。また、場の大きさ自身にも比例する。こうして、

$$\psi_{\parallel i}(x + dx) = \psi_i(x) + igA_{\mu i}^j(x)\psi_j(x)dx^\mu \quad (35.49)$$

と書けるであろう。ここで、行列 $(A_\mu)_i^j$ が[‡]、点 x^μ から $x^\mu + dx^\mu$ へ移動したときの“内部空間” $\{j\}$ の“回転”を指定している。 A_μ がゲージ場であり、一般相対論のところで見られた接続 Γ に対応している。 $A_\mu(x)$ は群 G に対応するリー代数 \mathcal{G} の生成子の線形結合で書けることが期待されるので、

$$[A_\mu(x)]_i^j = \sum_{a=1}^{\dim G} A_\mu^a(x) [T_a]_i^j$$

と表わされる。こうして、ゲージ場 $A_\mu^a(x)$ は群 G の次元だけの成分を持つことが理解される[¶]。

さて、行列表記を取っていると考えると、場 $\psi_i(x)$ の添え字 i 等を省略しよう。今、 $x + dx$ にある場の差

$$\begin{aligned} \psi(x + dx) - \psi_{\parallel}(x + dx) &= (\partial_\mu \psi(x) - igA_\mu(x)\psi(x))dx^\mu \\ &= D_\mu \psi(x)dx^\mu \end{aligned}$$

を考えよう。1 行目右辺へは $\psi_{\parallel}(x)$ を代入して dx^μ が微小として展開の 1 次までとった。また、 D_μ を定義している。左辺は $x + dx$ での量なので $U(x + dx)$ で変換される。変換後の量に ' (プライム) を付けて表わすと^{||}上の式は

$$U(x + dx)(\psi(x + dx) - \psi_{\parallel}(x + dx)) = U(x + dx)(D_\mu \psi(x)dx^\mu)$$

[‡] $N = 1$ のときが $u(1)$ ゲージ理論になる。

[§]変換のパラメータ $\theta(x)$ が時空座標 x に依存している場合をいう。

[¶] $U(1)$ の場合には $a = 1$ のみであり、これが電磁場 $A_\mu(x) = (\phi(x), \mathbf{A}(x))$ であった。

^{||} $U(x)\psi(x) = \psi'(x)$ などとするということ。

となるが、左辺は

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \psi'(x+dx) - \psi'_{\parallel}(x+dx) = (\partial_{\mu}\psi'(x) - igA'_{\mu}(x)\psi'(x))dx^{\mu} \\ &= (D_{\mu}\psi)'(x)dx^{\mu} = D'_{\mu}(x)\psi'(x)dx^{\mu} = D'_{\mu}(x)U(x)\psi(x)dx^{\mu} \end{aligned}$$

となり、右辺は $U(x+dx)$ を x について展開し、 dx の 1 次までとると

$$(\text{右辺}) = U(x+dx)D_{\mu}\psi(x)dx^{\mu} = U(x)D_{\mu}\psi(x)dx^{\mu}$$

となる。両辺等値すると、 $D_{\mu}(x)$ の変換が得られる。

$$\begin{aligned} D_{\mu}(x) &= \partial_{\mu} - igA_{\mu}(x) \\ D'_{\mu}(x) &= U(x)D_{\mu}(x)U(x)^{-1} \end{aligned} \quad (35.50)$$

ここで、 $U(x) = e^{ig\theta^a(x)T_a}$ 、 $A_{\mu}(x) = A_{\mu}^a(x)T_a$ であった。この $D_{\mu}(x)$ を共変微分と呼ぶ。こうして、 $D_{\mu}(x)$ の変換から、ゲージ場 $A_{\mu}(x)$ のゲージ変換が導かれる。

$$A_{\mu}(x) \longrightarrow A'_{\mu}(x) = U(x)A_{\mu}(x)U^{-1}(x) + \frac{i}{g}U(x)\partial_{\mu}U^{-1}(x) \quad (35.51)$$

次に、 $x \rightarrow x+dx+dy$ への平行移動を、(1) $x \rightarrow x+dx \rightarrow x+dx+dy$ (2) $x \rightarrow x+dy \rightarrow x+dx+dy$ の 2 通りの方法で考えよう。平行移動を繰り返すと、

(1) $x \rightarrow x+dx$

$$\psi_{\parallel}(x+dx) = \psi(x+dx) - D_{\mu}(x)\psi(x)dx^{\mu}$$

$x+dx \rightarrow x+dx+dy$

$$\begin{aligned} \psi_{\parallel}^{\parallel}(x+dx+dy) &= \psi_{\parallel}(x+dx+dy) - D_{\nu}(x+dx)\psi_{\parallel}(x+dx)dy^{\nu} \\ &= \psi(x+dx+dy) - D_{\mu}(x+dy)\psi(x+dy)dx^{\mu} \\ &\quad - D_{\nu}(x+dx)\psi(x+dx)dy^{\nu} + D_{\nu}(x+dx)D_{\mu}(x)\psi(x)dx^{\mu}dy^{\nu} \end{aligned}$$

(2) $x \rightarrow x+dy$

$$\psi_{\parallel}(x+dy) = \psi(x+dy) - D_{\nu}(x)\psi(x)dy^{\nu}$$

$x+dy \rightarrow x+dx+dy$

$$\begin{aligned} \psi_{\parallel}^{\parallel}(x+dx+dy) &= \psi_{\parallel}(x+dx+dy) - D_{\mu}(x+dy)\psi_{\parallel}(x+dy)dx^{\mu} \\ &= \psi(x+dx+dy) - D_{\nu}(x+dx)\psi(x+dx)dy^{\nu} \\ &\quad - D_{\mu}(x+dy)\psi(x+dy)dx^{\mu} + D_{\mu}(x+dy)D_{\nu}(x)\psi(x)dx^{\mu}dy^{\nu} \end{aligned}$$

辺々差をとると、 $dx dy$ の次数までで

$$\Delta\psi(x) = \psi_{\parallel}^{\parallel}(x+dx+dy) - \psi_{\parallel}^{\parallel}(x) = [D_{\mu}(x), D_{\nu}(x)]\psi(x)dx^{\mu}dy^{\nu}$$

が得られる。両辺 $U(x+dx+dy)$ で変換するが、 $dx dy$ の次数までで $(\Delta\psi)'(x) = U(x+dx+dy)\Delta\psi(x) = U(x)\Delta\psi(x)$ となるので、上式と比較して、

$$\begin{aligned} (\Delta\psi)'(x) &= U(x)\Delta\psi(x) = U(x)[D_{\mu}(x), D_{\nu}(x)]\psi(x)dx^{\mu}dy^{\nu} \\ &= U(x)[D_{\mu}(x), D_{\nu}(x)]U^{-1}(x) \cdot U(x)\psi(x)dx^{\mu}dy^{\nu} \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{i}{g} [D_\mu(x), D_\nu(x)] \\ &= \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) - ig [A_\mu(x), A_\nu(x)] \end{aligned} \quad (35.52)$$

を導入しよう。\$F_{\mu\nu}\$ の変換性は \$D_\mu\$ の変換性 (35.50) より

$$F'_{\mu\nu}(x) = U(x)F_{\mu\nu}(x)U^{-1}(x) \quad (35.53)$$

となることがわかる。こうして、先の式は

$$\begin{aligned} \Delta\psi(x) &= -igF_{\mu\nu}\psi(x)dx^\mu dy^\nu \\ (\Delta\psi)'(x) &= -igF'_{\mu\nu}\psi'(x)dx^\mu dy^\nu \end{aligned}$$

となる。

ところで、\$F_{\mu\nu}\$ は \$A_\mu\$ で書けているので、リー代数 \$\mathcal{G}\$ の生成子 \$\{T_a\}\$ の線型結合で表わされる。

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}(x) &= \sum_{a=1}^{\dim G} F_{\mu\nu}^a(x)T_a \\ F_{\mu\nu}^a(x) &= \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) + gf_{abc}A_\mu^b(x)A_\nu^c(x) \end{aligned} \quad (35.54)$$

ここで、2行目は (35.52) から交換関係を計算し直接得られる。ここで、\$f_{abc}\$ はリー代数 \$\mathcal{G}\$ の構造定数である。この \$F_{\mu\nu}(x)\$、または \$F_{\mu\nu}^a(x)\$ を場の強さ (**field strength**) と呼ぶ。

以上の準備より、ゲージ不変なラグランジアン密度を構成することができる。物質場のゲージ変換性は (35.48)、共変微分のゲージ変換性は (35.50)、場の強さの変換性は (35.53) となることがわかっている。これらをもとに、ゲージ場が無いときには §25.1 で得られた相対論的粒子の運動方程式がオイラー・ラグランジュ方程式として導かれるラグランジアン密度を与えればよい。ゲージ不変性に注意すると、物質場を複素スカラー場 \$\varphi\$、またはディラック場 \$\psi\$ として、物質場及び物質場とゲージ場との相互作用項を含むラグランジアン密度の部分を \$\mathcal{L}_{\text{matter}}\$ とし、ゲージ場自身のラグランジアン密度を \$\mathcal{L}_{\text{gauge}}\$ と記すと

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \mathcal{L}_{\text{matter}} + \mathcal{L}_{\text{gauge}} \quad (35.55) \\ \mathcal{L}_{\text{matter}} &= \begin{cases} (D^\mu\varphi)^\dagger(D_\mu\varphi) - V(\varphi^\dagger\varphi) & (\text{複素スカラー場}) \\ \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi & (\text{ディラック場}) \end{cases} \\ \mathcal{L}_{\text{gauge}} &= -\frac{1}{4} \cdot \frac{1}{N} \text{Tr} (F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}) \\ &= -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} \end{aligned}$$

となる。トレースはゲージ群 \$G\$ の行列添え字について取る。ゲージ変換性 (35.48)、(35.50)、(35.53) に注意すると、上記のラグランジアン密度のゲージ不変性は明らかである。また、共変微分 \$D_\mu\$、場の強さ \$F_{\mu\nu}\$ または \$F_{\mu\nu}^a\$ は (35.50)、(35.52)、(35.54) で定義されている。特に、ゲージ場を \$u(1)\$ ゲージ場、物質場をディラック場を取ったものが量子電気力学 (QED) と呼ばれる。また、ゲージ場をカラー \$su(3)_c\$ ゲージ場、物質場を \$su(3)_c\$ の基本表現に属するディラック場にとったものを量子色力学 (QCD) と呼ぶ。QCD ではゲージ場は \$su(3)\$ の次元の数、8 個有り、この場をグルオン場と呼ぶ。ゲージ変換性 (35.50) から、グルオン場は \$su(3)_c\$ の随伴表現に従うことがわかる。基本表現のディラック場はクォークを記述する。

このように、ゲージ原理に基づき、電磁相互作用、強い相互作用は記述される。相互作用を伝えるのがゲージ場の粒子であるゲージ粒子である。電磁相互作用を伝えるゲージ粒子は光子、強い相互作用を伝えるゲージ

粒子はグルオンである。また、弱い相互作用は電磁相互作用と統一され、 $su(2) \times u(1)$ ゲージ理論としての電弱理論として理解されている。弱い相互作用を伝えるゲージ粒子は W^\pm 、 Z^0 と書かれる**。

**ゲージ理論の構成法を見ると、一般相対論を構築したときに似ていることに気づかれる。一般座標変換では上付き添え字で示される反変成分と、下付き添え字で示される共変成分の変換は

$$A'^{\mu} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\nu}} A^{\nu}, \quad A'_{\mu} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} A_{\nu}$$

であった (§§12.2.2)。ここで、繰り返す添え字については 0 から 3 までの時空成分について和を取る。ここで、“ゲージ場” $(A_{\mu})^b_a$ を考え、 a 、 b の“内部空間”の添え字が、実は時空の一般座標変換により変換される量だと考えてみよう。今、“平行移動”(35.49)で $ig = -1$ としておく。このとき、共変成分、反変成分の変換則に注意して、ゲージ変換 (35.51) は、

$$(A_{\mu})^b_a = \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} (A_{\mu'})^q_p \frac{\partial x^p}{\partial x'^a} + \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} (\partial_{\mu'} \delta^q_p) \frac{\partial x^p}{\partial x'^a}$$

と書けるであろう。ところが、一般座標変換では、場 A_{μ} や微分 ∂_{μ} の共変添え字で表わされる部分も変換を受ける。右辺第 2 項の $\partial_{\mu'}$ はしたがって、 x'^{μ} の微分を意味し、第 1 項の $A_{\mu'}$ は共変成分についての一般座標変換を施して、 A_{μ} で書き表さねばならない。こうして、

$$\begin{aligned} (A_{\mu})^b_a &= \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x'^{\mu}} (A_{\alpha})^q_p \frac{\partial x^p}{\partial x'^a} + \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} \frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x^q}{\partial x'^a} \\ &= \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} \frac{\partial x^p}{\partial x'^a} (A_{\alpha})^q_p + \frac{\partial x'^b}{\partial x^q} \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^{\mu} \partial x'^a} \end{aligned} \quad (35.56)$$

と変換されるべきであることがわかる。ここで、2 行目で少し整理した。今、内部空間と思っていた添え字 a 、 b も時空添え字であるので、 $(A_{\mu})^b_a \rightarrow \Gamma_{\mu a}^b$ と記した上で $a \rightarrow \nu$ 、 $b \rightarrow \rho$ とし、右辺の繰り返す和の記号を $p \rightarrow \gamma$ 、 $q \rightarrow \beta$ と書き直すと、先の“ゲージ変換”は

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}(x') = \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial x'^{\rho}}{\partial x^{\beta}} \frac{\partial x^{\gamma}}{\partial x'^{\nu}} \Gamma_{\alpha\gamma}^{\beta}(x) + \frac{\partial x'^{\rho}}{\partial x^{\beta}} \frac{\partial^2 x^{\beta}}{\partial x'^{\mu} \partial x'^{\nu}}$$

となる。これは、一般相対論で得られた接続 $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$ の変換則 (14.5) に他ならない。(35.49) で $ig = -1$ としてゲージ変換を考えたので、この“ゲージ接続”では場 V^{μ} の“平行移動”を

$$V_{\parallel}^{\mu}(x+dx) = V^{\mu}(x) - \Gamma_{\rho\sigma}^{\mu} V^{\rho}(x) dx^{\sigma}$$

としたことに対応しており、一般相対論を構築する際に §§12.2.3 で一般座標変換の下での平行移動を定義したものと完全に一致している。こうして、接続 $\Gamma_{\mu\nu}^{\sigma}$ の変換はゲージ変換であり、一般相対性理論はゲージ理論の一種であると言える。このように、自然界の 4 つの相互作用、電磁相互作用、強い相互作用、弱い相互作用、重力相互作用はともにゲージ理論として理解される。

索引

- アイソスピン, 359
- アインシュタインの特殊相対性原理, 125
- アインシュタイン・ド-ブroyの関係, 43
- 圧力, 310
- アボガドロの法則, 329
- α 崩壊, 259
- アンペア, 176
- イオン化エネルギー, 337
- 異常ゼーマン効果, 266
- 位相空間, 40
- 一次相転移, 325
- 一般化運動量, 15, 34
- 一般化座標, 7
- 一般化速度, 7
- 井戸型ポテンシャル, 203, 205
- ウェイト, 345
- 動く慣性系の時間の遅れ, 128
- 宇宙定数, 158
- 運動エネルギー, 18
- 運動量, 15
- 運動量演算子, 45, 201
- 運動量保存則, 15, 19
- 永年方程式, 265
- sp 混成軌道, 254
- エネルギー等分配則, 312, 329
- エネルギー・運動量テンソル, 158
- LCR 回路, 190
- エルミート演算子, 48
- エルミート多項式, 213
- 演算子, 45
- 遠心力, 65, 119
- 遠心力ポテンシャル, 65, 222
- 円錐曲線, 66
- エンタルピー, 313
- エントロピー, 307
- エントロピー増大の法則, 308
- エーレンフェストの定理, 51
- オイラー角, 103
- オイラーの運動方程式, 111
- オイラーの定理, 102
- オイラー・ラグランジュ方程式, 8
- 大きなポテンシャル, 316
- 音, 87
- 音波, 88
- オームの法則, 185, 186
- 回転, 168
- (回転の)² 値表現, 102
- 化学ポテンシャル, 316
- 角運動量, 17
- 角運動量演算子, 220
- 角運動量代数, 231
- 角運動量保存則, 17, 20
- 角振動数, 73, 86
- 角速度, 104
- 確率の流れの密度, 49
- 過減衰, 75
- 重ね合わせの原理, 46
- カシミヤ演算子, 358
- 形に依らない近似, 286
- カノニカル分布, 311
- カラー自由度, 367
- カルタン行列, 348
- カルノーサイクル, 322
- 換算質量, 68
- 慣性系, 8
- 慣性質量, 10, 145
- 慣性主軸系, 106
- 慣性抵抗, 60, 61
- 慣性の法則, 9
- 慣性モーメントテンソル, 106
- 簡約化された作用, 36
- ガウスの定理, 169
- ガウスの法則, 173
- ガリレイの相対性原理, 9
- ガリレイ変換, 32
- ガンマ関数, 280
- 規格直交性, 198
- 基準座標, 82
- 基準振動, 82
- 軌道角運動量, 219

- 基本表現, 350
- 既約表現, 346
- 球面調和関数, 225
- キュリー則, 335
- 境界条件, 203
- 共振, 190
- 強制振動, 76
- 共変導関数, 149
- 共変微分, 149, 374
- 共変ベクトル, 132
- 共鳴, 77
- 極座標, 30
- ギブスの自由エネルギー, 314
- ギブス分布, 311
- ギブス・デュエムの式, 326
- 空間回転対称性, 220
- 空間の一様性, 15, 218
- 空間の等方性, 16, 220
- 空間並進対称性, 218
- クォーク, 172, 177, 363, 375
- クライン・ゴールドン方程式, 289, 297
- クラウジウス・クラペイロンの式, 325
- クリストッフエル記号, 149
- クレブシュ・ゴールドン係数, 235
- クロネッカーのデルタ, 27
- クーロン, 177
- クーロンゲージ, 189
- クーロンの法則, 173
- 偶奇性, 212
- グラスマン数, 298
- グランドカノニカル分布, 318
- グランドカノニカルポテンシアル, 318
- グルオン, 376
- グルオン場, 375
- 群, 93, 94
- 群の表現, 94
- 計量テンソル, 132, 146
- 径路積分, 294, 295
- ケットベクトル, 197
- 結合性軌道, 252
- ケプラーの第1法則, 66
- ケプラーの第3法則, 22, 66
- ケプラーの第2法則, 64
- ケプラー問題, 65
- ケルビン, 329
- ゲルマン行列, 349
- 原子の周期律, 246
- 減衰振動, 75
- ゲージ原理, 142, 371, 373
- ゲージ対称性, 371
- ゲージ場, 373
- ゲージ変換, 142, 373
- ゲージ粒子, 375
- ゲージ理論, 371
- 交換関係, 201
- 交換子, 96, 201
- 光学定理, 280
- 光子, 375
- 光速, 172, 176, 191
- 拘束条件, 11
- 光速度不変の原理, 125
- 構造定数, 96, 345
- 恒等変換, 30
- 勾配, 167
- 固定端, 84
- 固有関数, 46
- 固有振動数, 81
- 固有時, 136
- 固有状態, 201
- 固有値, 46
- コリオリ力, 119
- ころがり, 111
- コンデンサ, 182
- 剛体, 104
- 歳差運動, 110, 114
- 最小作用の原理, 6, 7
- 逆立ちコマ, 116
- サハの電離式, 337
- 作用・反作用の法則, 12
- 三重点, 323
- 散乱位相差, 274
- 散乱角, 69
- 散乱振幅, 278
- 散乱長, 285
- 質点, 7
- 質量とエネルギーの等価性, 131

- 周期, 86
- 終端速度, 61
- 主慣性モーメント, 106
- 縮退度, 241
- シュタルク効果, 267
- シュバルツシルト解, 163
- シュレーディンガー方程式, 45, 197, 200
- 昇降演算子, 346
- 衝突径数, 69
- 章動, 114
- 初期条件, 59
- 真空, 300
- 真空の透磁率, 144, 172, 176
- 真空の誘電率, 144, 172, 176
- 振動数, 86
- 振動定理, 205, 213
- 振幅, 73
- シンプルルート, 347
- 磁化率, 179, 335
- 時間の一様性, 17
- 磁気双極子, 178
- 磁気モーメント, 292
- 磁気量子数, 222
- 自己インダクタンス, 189
- 自己誘導, 189
- 磁束密度, 140, 172
- 磁場, 144, 172
- 重心座標, 68, 271
- 重力, 58
- 重力加速度, 55, 58
- 重力質量, 10, 145
- 重力半径, 163
- 重力場の方程式, 158
- 循環, 170
- ジュール熱, 186
- ジュールの実験, 333
- ジュール・トムソン過程, 333
- ジュール・トムソン係数, 333
- 自由回転, 112
- 自由端, 84
- 自由落下, 55, 59
- 常磁性体, 335
- 状態, 45
- 状態ベクトル, 197
- 水素原子, 238, 355
- スカラー曲率, 152
- スカラーポテンシャル, 139, 180
- ストレンジネス, 360
- ストークスの定理, 170
- スピノール表現, 101
- スピン, 232
- スピン角運動量, 232
- スピンと統計, 245
- スピン波動関数, 233
- すべり, 111
- スレーター行列式, 246
- 随伴表現, 98
- ずれ粘性率, 91
- 静止エネルギー, 131
- 正準交換関係, 296
- 正準分布, 311
- 正準変換, 27
- 正準変換の母関数, 29
- 正準方程式, 25
- 正準量子化, 296
- 生成消滅演算子, 217, 301
- 静電場, 180
- 世界間隔, 128
- 摂動論, 261
- 潜熱, 324
- 絶対温度, 308
- 絶対零度, 329
- 零点振動, 212, 258
- 全断面積, 70
- ゼーマン効果, 232, 266
- 相, 323
- 相空間, 40
- 相互インダクタンス, 189
- 相互誘導, 189
- 相対座標, 68, 271
- 相転移, 323
- 相平衡, 323
- 測地線, 153
- 速度の合成則, 130
- 素電荷, 139, 172, 177
- ソレノイド, 187, 189

- 対称コマ, 110, 112
 体積粘性率, 91
 体積膨張率, 320
 縦波, 88
 単磁荷, 173
 楕円関数, 38
 楕円積分, 38
 WKB 近似, 254
 弾性率, 82
 断熱過程, 309
 断熱消磁, 336
 断熱変化, 87, 328
 力のモーメント, 108
 中心力, 63
 調和振動子, 211
 直交変換, 93
 強い相互作用, 359, 371
 定圧熱容量, 313
 抵抗率, 186
 抵抗力, 60, 74
 定積熱容量, 313
 テンソル, 133
 点変換, 30
 ディラック行列, 290
 ディラックスピノール, 290
 ディラックのデルタ関数, 47
 ディラック方程式, 290, 298
 ディンキン・ラベル, 348
 デカルト座標, 19
 電位, 180
 電荷, 139, 172
 電荷密度, 172
 電気感受率, 177
 電気抵抗, 185, 186
 電気伝導度, 185
 電気分極, 177
 電気分極ベクトル, 177
 電気容量, 184
 電磁波, 191
 電磁場テンソル, 141
 電弱理論, 376
 電束密度, 144, 172
 電場, 140, 172
 電流, 172, 174, 175
 電流密度, 172, 175
 等温圧縮率, 320
 透過係数, 210
 等価原理, 145
 等加速度運動, 55, 59
 透磁率, 144, 179
 閉じ込め, 368
 トンネル効果, 211, 258
 同種粒子, 244
 同時刻の相対性, 126
 導体, 180
 動的対称性, 354
 内部エネルギー, 310
 中野・西島・ゲルマンの法則, 362
 ナビエ・ストークス方程式, 91
 二次相転移, 325
 ニュートンの第 1 法則, 9
 ニュートンの第 3 法則, 12
 ニュートンの第 2 法則, 11
 ニュートン方程式, 11
 熱, 310
 熱効率, 322
 熱電子放出, 336
 熱電離, 337
 熱容量, 313, 319
 熱浴, 311
 熱力学第 1 法則, 310
 熱力学第 3 法則, 307
 熱力学第 2 法則, 308
 熱力学ポテンシャル, 316
 粘性抵抗, 60, 61
 ネーターの定理, 19
 ノイマン関数, 283
 ハイエストウェイト, 348
 ハイエストウェイトステイト, 348
 ハイパーチャージ, 360
 波数, 86
 波長, 86
 発散, 168
 波動関数, 45, 197
 波動関数の確率解釈, 47
 波動関数の規格直交性, 48

- 波動方程式, 86
- ハドロオン, 359
- ハミルトニアン, 45
- ハミルトニアン密度, 300
- ハミルトン関数, 25
- ハミルトン方程式, 25
- ハミルトン・ヤコビ方程式, 36
- 反クォーク, 363
- 反結合性軌道, 252
- 反交換関係, 299
- 半古典近似, 52, 254
- 反射係数, 210
- 半通径, 66
- 反変ベクトル, 132
- 反粒子, 290
- 場の量子化, 301
- 場の量子論, 297
- バリオン, 360
- バリオン数, 360
- 万有引力, 58
- 万有引力定数, 161
- 万有引力の法則, 161
- パウリ行列, 100, 232
- パウリの排他律, 246
- パラメータ共鳴, 80
- パリティ, 212
- 光, 191
- 非慣性系, 118
- 非周期的減衰, 75
- 比透磁率, 179
- 比誘電率, 178
- 表現空間, 94
- 表示, 198
- 非理想気体の状態方程式, 331
- ビオ・サバールの法則, 188
- 微分断面積, 70, 278
- ビリアル定理, 23
- ファインマンの径路積分, 6
- ファクターオーバーフック則, 354
- ファラデーの電磁誘導の法則, 175
- ファンダメンタルウェイト, 348
- ファン・デル・ワールズ方程式, 330, 332
- フェルミ運動量, 340
- フェルミエネルギー, 340
- フェルミオン, 245
- フェルミ気体, 340
- フェルミ分布関数, 338
- フェルミ粒子, 245, 338
- フェルミ・ディラック統計, 245
- フォノン, 217
- 不確定性関係, 202
- 不確定性原理, 202
- フックの法則, 74, 82
- 沸点, 323
- 振り子の等時性, 22, 60
- フレーバー, 363
- 物理量, 45
- 物理量の期待値, 48
- 部分波展開, 277
- ブラケット, 197
- ブラックホール, 163
- ブラベクトル, 197
- 分極電荷密度, 177
- 分配関数, 311
- プラズマ状態, 337
- プランク定数, 43
- 平衡状態, 308
- ヘルムホルツの自由エネルギー, 313
- 変分法, 248
- ベクトルポテンシャル, 139
- ベッセル関数, 273, 280, 281
- ベルヌイの定理, 91
- 方向量子化, 223
- 法線ベクトル, 169
- 飽和蒸気圧, 323
- 本義ローレンツ変換, 134
- ボソン, 245
- ボルツマン定数, 307
- ボルツマン分布, 312
- ボルン近似, 287
- ボーア磁子, 236
- ボーア半径, 241
- ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件, 256
- ボーズ気体, 341
- ボーズ分布関数, 338
- ボーズ粒子, 245, 338

- ボーズ・アインシュタイン凝縮, 342
- ボーズ・アインシュタイン統計, 245
- ポアソン括弧, 26
- ポインティングベクトル, 193
- ポジティブルート, 347
- ポテンシャルエネルギー, 18
- マクスウェルの関係式, 318
- マクスウェル分布, 312
- マクスウェル方程式, 144, 172, 179
- マクスウェル・アンペールの法則, 174
- マシュー方程式, 78
- 見かけの力, 118
- 無限小回転, 98
- マクスウェルの規則, 326
- メソン, 360
- 面積速度一定の法則, 64
- ヤコビ恒等式, 27
- ヤング関, 353
- ヤング率, 82
- 有効距離, 286
- 融点, 323
- 誘電率, 144, 178
- 誘導磁化, 178
- 横波, 89
- 弱い相互作用, 376
- 4元電流, 143
- 4元ベクトル, 132
- 落体の法則, 21
- ラグランジアン密度, 297
- ラグランジュ関数 (ラグランジアン), 7
- ラゲール多項式, 242
- ラゲール陪多項式, 242
- ラザフォード散乱, 71, 288
- ランダウ準位, 237
- 力学的エネルギー, 18
- 力学的エネルギー保存則, 18, 20
- 力学的相似則, 21
- 離心率, 66
- 理想気体の状態方程式, 327, 329
- リッチテンソル, 152
- 粒子数演算子, 300
- 粒子と波動の二重性, 3, 301
- リュードベリ定数, 250
- リュービル-フォン・ノイマン方程式, 306
- リュービルの定理, 39, 41, 305
- 量子色力学, 375
- 量子数, 205
- 量子電気力学, 375
- 臨界減衰, 75
- リー群, 94, 95
- リー代数, 94, 95, 345
- リー代数の生成子, 95
- リーマンの曲率テンソル, 152
- ルジャンドル多項式, 225
- ルジャンドル陪多項式, 224, 225
- ルンゲ・レンツ・パウリベクトル, 355
- ルート, 346
- レイノルズ数, 60
- 連続の方程式, 174
- レンツの法則, 175
- ローレンツ群, 136
- ローレンツ収縮, 129
- ローレンツスカラー, 133
- ローレンツブースト, 133
- ローレンツ変換, 127, 131
- ローレンツ力, 140, 172

参考文献

引き続き読み進めると良いと思われる最小限の参考文献を挙げておこう。

・力学・解析力学

- (1) ランダウ・リフシッツ理論物理学教程「力学」(東京図書)
- (2) ゴールドスタイン「古典力学」吉岡書店

・相対性理論

- (3) ランダウ・リフシッツ理論物理学教程「場の古典論」(東京図書)
- (4) 内山龍雄「一般相対性理論」(裳華房)

・電磁気学

- (5) (3) に同じ
- (6) 砂川重信「理論電磁気学」(紀伊國屋書店)

・量子力学

- (7) ランダウ・リフシッツ理論物理学教程「量子力学 I, II」(東京図書)
- (8) 朝永振一郎「量子力学 I,II」(みすず書房)

・熱・統計力学

- (9) ランダウ・リフシッツ理論物理学教程「統計物理学上, 下」(岩波書店)
- (10) 田崎晴明「熱力学」(培風館)
- (11) 田崎晴明「統計力学 I, II」(培風館)