

付録 1. ガウス積分の公式

定積分, $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx$, を求める為に, この二乗の値をまず考える.

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-y^2) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(x^2 + y^2)] dx dy \quad (\text{A1-1})$$

である. この二重積分を求めるために, 直交座標系の変数 (x, y) を極座標系の変数 (r, θ) に変換する. $x=r \cdot \cos\theta$, $y=r \cdot \sin\theta$ の関係にあり (図 A1-1), $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$ である. この二重積分は全 xy 平面を覆う積分であるから, $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta < 2\pi$ で, 極座標系の面積素片は $r d\theta dr$ であり, 直交座標系の面積素片との関係は $dx dy = r d\theta dr$ である. これは図 A1-1 から判るが, 付録 2 で説明する函数行列式

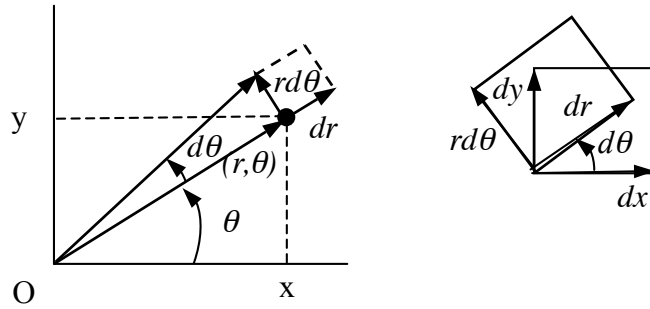


図 A1-1

(Jacobi の行列式) J を使うと, 面積素片の関係は $dx dy = |J| dr d\theta$ であり,

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \theta & -r \sin \theta \\ \sin \theta & r \cos \theta \end{vmatrix} = r(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = r, \quad |J| = r \quad (\text{A1-2})$$

となる. 故に, (1-1)は

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(x^2 + y^2)] dx dy = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \exp(-r^2) r dr d\theta \\ &= \int_{r=0}^{\infty} \exp(-r^2) r dr \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi \int_{r=0}^{\infty} \exp(-r^2) r dr. \end{aligned} \quad (\text{A1-3})$$

ここで, $r^2 = u$ と変換すると, $du/dr = 2r$ であるから,

$$I^2 = 2\pi \int_{r=0}^{\infty} \exp(-r^2) r dr = \pi \int_{u=0}^{\infty} \exp(-u) du = \pi [-e^{-u}]_0^{\infty} = \pi. \quad (\text{A1-4})$$

となる。ゆえに、

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A1-5})$$

である。 $\exp(-x^2)$ は $x=0$ に関して対称な関数であるから、 $(0, \infty)$ の積分は(A1-5)の半分で、

$$\int_0^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (\text{A1-6})$$

である。

次に、(1-6)の $\exp(-x^2)$ が、 α を正の係数として、

$$I_0 = \int_0^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) dx$$

を考える。 $u = \sqrt{\alpha} \cdot x$ と変換すると、 $du = \sqrt{\alpha} \cdot dx$ であるから、(1-6)の結果がそのまま使えて、以下のようになる：

$$I_0 = \int_0^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{A1-7})$$

次に、 $\exp(-\alpha x^2)$ と x の積の同様な定積分、 $I_1 = \int_0^{+\infty} x \cdot \exp(-\alpha x^2) dx$ 、を考える。

これには、 $u = \alpha x^2$ の変換を使う。 $du/dx = 2\alpha \cdot x$ が付随するから、

$$I_1 = \int_0^{+\infty} x \cdot \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{1}{2\alpha} \int_0^{+\infty} \exp(-u) du = \frac{1}{2\alpha} \quad (\text{A1-8})$$

となる。次は $\exp(-\alpha x^2)$ と x^2 の積の同様な積分、 $I_2 = \int_0^{+\infty} x^2 \cdot \exp(-\alpha x^2) dx$ を求め、

その次は $I_3 = \int_0^{+\infty} x^3 \cdot \exp(-\alpha x^2) dx$ 、 $I_4 = \int_0^{+\infty} x^4 \cdot \exp(-\alpha x^2) dx$ 、...と順次求めたい。これ

には漸化式の形を求めるのが良い。そこで、 n を整数として、

$$I_n = \int_0^{+\infty} x^n \cdot \exp(-\alpha x^2) dx = \int_0^{+\infty} x^n \cdot \left(-\frac{1}{2\alpha \cdot x}\right) \cdot \frac{d[\exp(-\alpha \cdot x^2)]}{dx} dx \quad (\text{A1-9})$$

であることを使う．(A1-9)は部分積分の公式を使い，

$$I_n = \left(-\frac{1}{2\alpha}\right)\{[x^{n-1} \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2)]_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} \left(\frac{dx^{n-1}}{dx}\right) \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2) dx\}$$

となる．右辺第一項は $n \geq 2$ に対して 0 であるから，

$$I_n = \left(\frac{n-1}{2\alpha}\right) \int_0^{+\infty} x^{n-2} \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2) dx = \left(\frac{n-1}{2\alpha}\right) \cdot I_{n-2} \quad (\text{A1-10})$$

であり，漸化式が得られる．(A1-7)と(A1-8)で， I_0 と I_1 を既に求めているので，

(A1-10)の $I_n = \left(\frac{n-1}{2\alpha}\right) \cdot I_{n-2}$ を使えば，次の定積分 $I_n (n \geq 2)$ の値が求められる．

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^{+\infty} e^{-\alpha \cdot x^2} dx = \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \\ I_1 &= \int_0^{+\infty} x \cdot e^{-\alpha \cdot x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \\ I_2 &= \int_0^{+\infty} x^2 \cdot e^{-\alpha \cdot x^2} dx = \frac{\pi^{1/2}}{4\alpha^{3/2}} \\ I_3 &= \int_0^{+\infty} x^3 \cdot e^{-\alpha \cdot x^2} dx = \frac{1}{2\alpha^2} \\ I_4 &= \int_0^{+\infty} x^4 \cdot e^{-\alpha \cdot x^2} dx = \frac{3\pi^{1/2}}{8\alpha^{5/2}} \\ &\cdot \\ &\cdot \end{aligned} \quad (\text{A1-11})$$

である．

付録 2. 多重積分の変数変換と函数行列式 (Jacobi の行列式)

x, y は (u, v) の 2 変数をパラメーターとする関数で,

$$x = p(u, v), \quad y = q(u, v) \quad (\text{A2-1})$$

であるとする. このような x, y の関数 $f(x, y)$ を積分する時, x, y が (A2-1) のように u, v の関数であるから, その積分は u, v についての積分に直すことが出来るはずである. その際, 旧変数での積分の面素片 $dx dy$ が新変数の素片 $du dv$ の何倍であるかを知っておく必要がある. $x = x(u)$ である一次元の積分の場合, x に関する積分は, $dx = (dx/du)du$ として, u の積分に直す. 一変数の積分における (dx/du) に当るものが, 二変数の積分ではどうなるかを考える必要がある.

(A2-1) を (u, v) について解くことができ,

$$u = p_1(x, y), \quad v = q_1(x, y) \quad (\text{A2-2})$$

であるとする. ここで, u を特定の値に固定し, v のみを変化させると, xy 平面に曲線の組が現れる. 一方, v を固定して, u のみを変化させると, 別の組の曲線の組が現れる (図 A2-1). 平面上の点の位置は, 直交座標系の (x, y) で指定出来るが, (u, v) の組でも指定出来る. 面上の点の位置が曲線群に従い (u, v) の組で指定される座標系は, **曲線座標系** と呼ばれる.

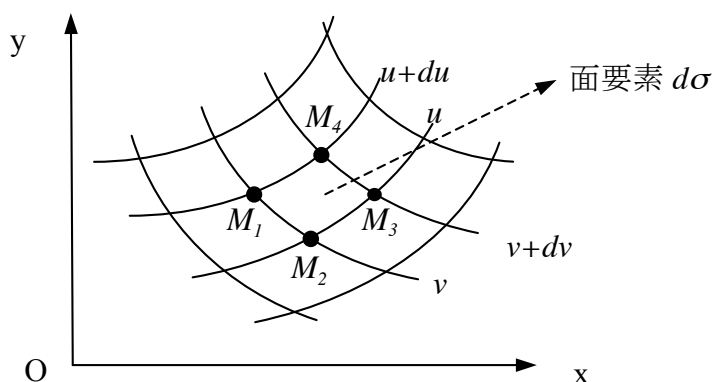


図 A2-1. (u, v) の曲線座標系

図 A2-1 に示す (u,v) の曲線座標系での面要素 $d\sigma$ について考える．これらは相互に隣接する二対の座標線で囲まれる微小面積で， M_1, M_2, M_3, M_4 の四点で囲まれている．この面要素 $d\sigma$ は，高位の無限小を無視すると， M_1, M_2, M_3, M_4 の四点で指定される平行四辺形で近似できる．各点の x, y 座標は， $p(u,v), q(u,v)$ からずれた点に対してはテーラー展開して 0 次と 1 次の項だけを残すと，以下のようなになる．

$$\begin{aligned}
 M_1 : \quad x_1 &= p(u,v), \quad y_1 = q(u,v) \\
 M_2 : \quad x_2 &= p(u+du,v) = p(u,v) + \frac{\partial p(u,v)}{\partial u} du \\
 &\quad y_2 = q(u+du,v) = q(u,v) + \frac{\partial q(u,v)}{\partial u} du \\
 M_3 : \quad x_3 &= p(u+du,v+dv) = p(u,v) + \frac{\partial p(u,v)}{\partial u} du + \frac{\partial p(u,v)}{\partial v} dv \\
 &\quad y_3 = q(u+du,v+dv) = q(u,v) + \frac{\partial q(u,v)}{\partial u} du + \frac{\partial q(u,v)}{\partial v} dv \\
 M_4 : \quad x_4 &= p(u,v+dv) = p(u,v) + \frac{\partial p(u,v)}{\partial v} dv \\
 &\quad y_4 = q(u,v+dv) = q(u,v) + \frac{\partial q(u,v)}{\partial v} dv
 \end{aligned} \tag{A 2-3}$$

以上の座標値から，平行四辺形 $M_1M_2M_3M_4$ の面積を求める．この面積は

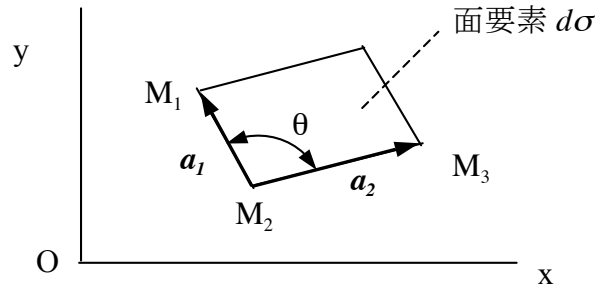


図 A2-2.

三角形 $M_1M_2M_3$ の面積の 2 倍である．図 A2-2 に示すように，「ベクトル $M_2 \rightarrow$

$M_I = \mathbf{a}_I$, 「ベクトル $M_2 \rightarrow M_3$ 」 = \mathbf{a}_2 とすると,

$$d\sigma = |\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \cdot \sin\theta| \quad (\text{A2-4})$$

である. この 2 乗を作ると,

$$(d\sigma)^2 = (\mathbf{a}_1)^2 \cdot (\mathbf{a}_2)^2 \cdot \sin^2\theta = (\mathbf{a}_1)^2 \cdot (\mathbf{a}_2)^2 - (\mathbf{a}_1)^2 \cdot (\mathbf{a}_2)^2 \cdot \cos^2\theta \quad (\text{A2-5})$$

である. 一方, 二つのベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} の内積は, $|\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}| \cdot \cos\theta = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$ と表現出来る

から, (A2-5)は次の行列式で表現出来る.

$$(d\sigma)^2 = \begin{vmatrix} (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1) & (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) \\ (\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1) & (\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2) \end{vmatrix} \quad (\text{A2-6})$$

$\mathbf{a}_1 = a_{11} \cdot \mathbf{i} + a_{21} \cdot \mathbf{j}$, $\mathbf{a}_2 = a_{12} \cdot \mathbf{i} + a_{22} \cdot \mathbf{j}$ と x, y 成分で書くと, (A2-6)は

$$\begin{aligned} (d\sigma)^2 &= \begin{vmatrix} (a_{11})^2 + (a_{21})^2 & a_{12} \cdot a_{11} + a_{22} \cdot a_{21} \\ a_{12} \cdot a_{11} + a_{22} \cdot a_{21} & (a_{12})^2 + (a_{22})^2 \end{vmatrix} \\ &= (a_{11})^2 (a_{22})^2 + (a_{21})^2 (a_{12})^2 - 2(a_{12})(a_{11})(a_{22})(a_{21}) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}^2, \end{aligned} \quad (\text{A2-7})$$

となる. 故に, 微小な面積要素は, 行列式の絶対値をとり正の値として,

$$d\sigma = \left\| \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \right\|, \quad (\text{A2-8})$$

である. 二重縦線は行列式の絶対値を意味する. 「ベクトル $M_2 \rightarrow M_I$ 」 = \mathbf{a}_I , 「ベクトル $M_2 \rightarrow M_3$ 」 = \mathbf{a}_2 と定義したから, (A2-3)を用いて次のようになる.

$$\begin{aligned} a_{11} &= x_1 - x_2 = -\frac{\partial p(u,v)}{\partial u} du, & a_{21} &= y_1 - y_2 = -\frac{\partial q(u,v)}{\partial u} du, \\ a_{12} &= x_3 - x_2 = \frac{\partial p(u,v)}{\partial v} dv, & a_{22} &= y_3 - y_2 = \frac{\partial q(u,v)}{\partial v} dv, \end{aligned}$$

これらを(2-8)に代入する. 二重縦線は行列式の絶対値であることに注意して,

$$d\sigma = \left\| \begin{vmatrix} -\frac{\partial p(u,v)}{\partial u} du & \frac{\partial p(u,v)}{\partial v} dv \\ -\frac{\partial q(u,v)}{\partial u} du & \frac{\partial q(u,v)}{\partial v} dv \end{vmatrix} \right\| = \left\| \begin{vmatrix} \frac{\partial p(u,v)}{\partial u} & \frac{\partial p(u,v)}{\partial v} \\ \frac{\partial q(u,v)}{\partial u} & \frac{\partial q(u,v)}{\partial v} \end{vmatrix} \right\| du dv \quad (\text{A2-9})$$

となる. (2-9)の $d\sigma/(du dv)$ の因子に現れる行列式は函数行列式, Jacobi の 行列式

(Jacobian determinant), または 単に Jacobian と呼ばれる. ”determinant” を省略した呼称である.

$$d\sigma = \left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right| du dv = \left\| \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial u} & \frac{\partial p}{\partial v} \\ \frac{\partial q}{\partial u} & \frac{\partial q}{\partial v} \end{pmatrix} \right\| du dv \quad (\text{A2-10})$$

(2-10)の $\left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right|$ は函数行列式の絶対値であり, 縦の二重線はこの成分を持つ行列式の絶対値を意味している. 函数行列式を単に J と書き, その絶対値を $|J|$ と書くことも多い.

(A2-10)を用いることで, 2重積分の変数変換は, 次のように表現出来ることになる.

$$\iint_{\sigma} f(x,y) d\sigma = \iint_{\sigma} F(u,v) \left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right| du dv \quad (\text{A2-11})$$

(A2-1)の $x = p(u,v)$, $y = q(u,v)$ として議論を始めたから, (2-11)に $\left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right|$ が残って

いる. これは, $\left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right| \rightarrow \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)} \right|$ と書き改めても良い. $x = x(u)$ である一次元の

積分の場合, x に関する積分は, $dx = (dx/du)du$ として, u の積分に直すが, 一変数の積分における (dx/du) に当るものが, 二変数の積分では, (A2-11)の

$$\left| \frac{\partial(p,q)}{\partial(u,v)} \right| = \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)} \right| = |J| \quad \text{である.}$$

一般に, 多変数の積分の変数変換には, 必ずこの函数行列式が現れる.

$$f = f(x,y,z,\dots), \quad g = g(x,y,z,\dots), \quad h = h(x,y,z,\dots), \dots \quad (\text{A2-12})$$

である時の積分変数の変換は

$$df dg dh \cdots = \left| \frac{\partial(f,g,h,\dots)}{\partial(x,y,z,\dots)} \right| dx dy dz \cdots \quad (\text{A2-13})$$

となる. その時の函数行列式 (Jacobi の行列式) は, (n,n) 行列式として

$$J \equiv \frac{\partial(f,g,h,\dots)}{\partial(x,y,z,\dots)} = \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) & \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) & \bullet \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right) & \left(\frac{\partial g}{\partial z}\right) & \bullet \\ \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial h}{\partial y}\right) & \left(\frac{\partial h}{\partial z}\right) & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{vmatrix} \quad (\text{A2-14})$$

である．(A2-13)の変換係数は，函数行列式（Jacobi の行列式）の絶対値である．

< 例 1 : 3 次元直交座標系の極座標系への変換 >

具体例として，(x,y,z) 直交座標系での微小体積素片 $dx dy dz$ を， (r,θ,φ) の空間極座標系で表す場合を考える．この結果は $dx dy dz = r^2 \sin\theta \cdot dr d\theta d\varphi$ であり，速度分布の議論 § 2-4-2 で既に使っている．(x,y,z)系と (r,θ,φ) 系の相互変換関係は，

$$\begin{aligned} x &= r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \\ y &= r \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi \\ z &= r \cdot \cos\theta \end{aligned} \quad (\text{A2-15})$$

である（図 A2-3）．

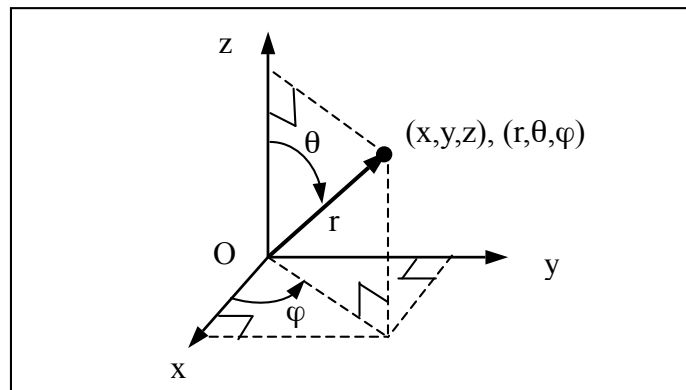


図 A2-3. 直交座標系と空間極座標系の関係

(A2-15) の変換関係から，(2-13)の函数行列式（Jacobi の 行列式）を具体的に求めると，次のようになる．

$$J = \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\varphi)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sin\theta\cos\varphi & r\cos\theta\cos\varphi & -r\sin\theta\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & r\cos\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\varphi \\ \cos\theta & -r\sin\theta & 0 \end{vmatrix}$$

$$= r^2 \cdot \sin\theta \quad (\text{A2-16})$$

従って、(A2-13)は

$$dxdydz = |J|drd\theta d\varphi = \left| \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\varphi)} \right| drd\theta d\varphi = r^2 \sin\theta \cdot drd\theta d\varphi$$

である。

<例 2：二粒子系での速度の変換>

二粒子系での速度の変換， § 4-(39-1)， の場合を考える． 実験室系の粒子速度は， 二粒子系重心の速度と二粒子間の相対速度で次のように表現される．

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot \mathbf{v} \quad \text{§ 4-(39-1)}$$

$m_2/(m_1 + m_2) = c_2$, $m_1/(m_1 + m_2) = c_1$ と書くと， $c_2 + c_1 = 1$ であり， 各成分は (39-1)より， 次のようにな変換関係にある．

$$\begin{aligned} v_{1x} &= v_{Gx} + c_2 v_x, \\ v_{1y} &= v_{Gy} + c_2 v_y, \\ v_{1z} &= v_{Gz} + c_2 v_z, \\ v_{2x} &= v_{Gx} - c_1 v_x, \\ v_{2y} &= v_{Gy} - c_1 v_y, \\ v_{2z} &= v_{Gz} - c_1 v_z, \end{aligned}$$

故に， 関数行列式 J は，

$$J = \frac{\partial(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)}{\partial(\mathbf{v}_G, \mathbf{v})} = \frac{\partial(v_{1x}, v_{1y}, v_{1z}, v_{2x}, v_{2y}, v_{2z})}{\partial(v_{Gx}, v_{Gy}, v_{Gz}, v_x, v_y, v_z)}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & c_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & c_2 \\ 1 & 0 & 0 & -c_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -c_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -c_1 \end{vmatrix} = -(c_1 + c_2)^3 = -1, \quad |J| = 1. \quad (\text{A2-17})$$

となる. 従って, 体積素片の積は,

$$d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 = |J| d^3\mathbf{v}_G d^3\mathbf{v} = d^3\mathbf{v}_G d^3\mathbf{v} \quad (\text{A2-18})$$

と変換する.

付録 3. 確率と統計分布の議論に関する数学的事項

3-1) 順列と組み合わせ

下図のように、箱の中に 1, 2, 3, ..., n と番号を付けた玉があるとする. この箱の中から 1 個ずつ玉を取り出し, 1 回目に取り出された玉を a_1 ,

箱 I

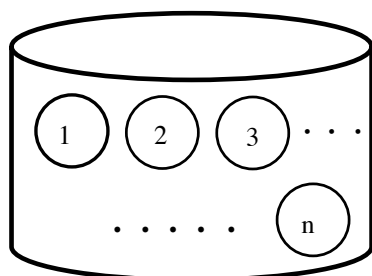


図 A3-1

2 回目に取り出された玉を a_2 ,

3 回目に取り出された玉を a_3 ,

.

.

.

r 回目に取り出された玉を a_r

とする.

この時, 取り出した玉は元に戻さないとする. 取り出す順序を区別するか否かで「場合の数」は以下のように違ってくる.

1) 取り出す順序を区別する時の「場合の数」

1 回目に取り出される異なる玉の数は n , 2 回目は $(n-1)$, ..., r 回目は $[n-(r-1)]$ の異なる玉を選ぶことができるから, 全ての「場合の数」は,

$$\begin{aligned} & n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots [n-(r-1)] \\ &= \frac{n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots [n-(r-1)] \cdot (n-r) \cdot [n-(r+1)] \cdots 2 \cdot 1}{(n-r) \cdot [n-(r+1)] \cdots 2 \cdot 1} \\ &= \frac{n!}{(n-r)!} \equiv {}_n P_r \end{aligned} \quad (\text{A3-1})$$

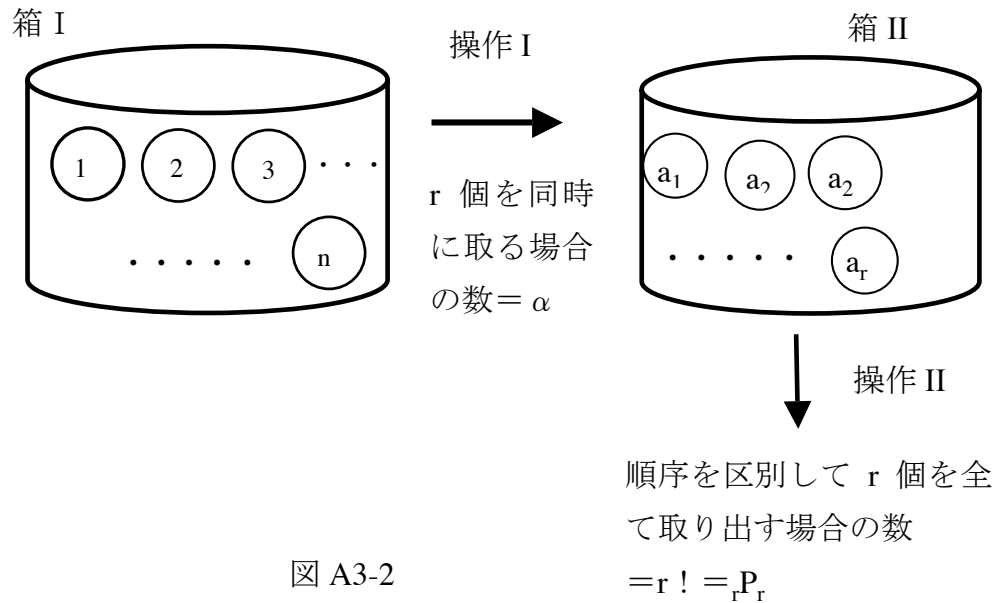
である. これは順列(permutation)である. $r=n$ と $r=0$ の場合も考えて,

$$0! \equiv 1, \quad {}_n P_0 \equiv 1 \quad (\text{A3-2})$$

と定義しておく.

2) 取り出す順序を区別しない時の「場合の数」

これは r 個の玉を同時に取り出す時の「場合の数」である. これを α とする



と, 箱 I から同時に取り出した r 個の玉を, 一旦, 箱 II に全部入れることにする (操作 I). そして箱 II から順序を区別して r 個を全て取り出す (操作 II). この操作 II だけに限れば, その「場合の数」は $r! = {}_r P_r$ である. 操作 I と操作 II を続けて行うことは, 結果的に, 異なる n 個の玉から r 個を取って, これらを順序を区別して並べることである. 異なる並べ方の数は ${}_n P_r$ に他ならない. だから,

$$\alpha \cdot r! = {}_n P_r \quad (\text{A3-3})$$

である. 故に, n 個の異なる玉から, r 個の玉を (順序を考慮せずに) 同時に取り出す「場合の数」 α は,

$$\alpha = \frac{{}_n P_r}{r!} = \frac{n!}{(n-r)!r!} = {}_n C_r \quad (\text{A3-4})$$

であり，組み合わせ(combination)の数である．

3-2) 平均値と標準偏差

ある確率変数(random variable) x の測定値が N 個あるとすると，その平均値(average, mean)は

$$\bar{x} = \langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (\text{A3-5})$$

である．標準偏差(standard deviation) σ の 2 乗は，分散(variance)とも呼ばれ，平均値からの「ずれ」の二乗和を N で割った値で与えられる．

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 = \langle (x_i - \bar{x})^2 \rangle \quad (\text{A3-6})$$

記号 $\langle \rangle$ は引数に関する平均値を求めることを意味する．

平均値は，測定値 x_j の頻度 f_j とその出現確率 p_j を用いても表現できる．測定値 x_j の頻度 f_j を用いる場合は，同じ測定値が複数回得られていることを前提にするので，異なる x_j の個数 N' は全データ数 N 以下である ($N' \leq N$)．その意味で i ではなく j を用いている．測定値 x_j の出現確率 p_j は，全測定値の個数が N であるから， $p_j = f_j / N$ である．

$$\sum_{j=1}^{N'} x_j \cdot p_j = \sum_{j=1}^{N'} x_j \cdot \frac{f_j}{N} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N'} x_j \cdot f_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = \bar{x}$$

となる．測定値 x_j とその出現確率 p_j の積の和は，通常は，期待値(expectation)と呼ばれるが，これは平均値に等しい．また，(A3-6)の分散も，測定値 x_j の出現確率 p_j を用いて，次のように表現出来る，

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N'} f_j \cdot (x_j - \bar{x})^2 = \sum_{j=1}^{N'} (x_j - \bar{x})^2 \cdot \left(\frac{f_j}{N}\right) = \sum_{j=1}^{N'} (x_j - \bar{x})^2 p_j$$

であることが判る．これは更に次のように実用上便利な表現にできる．

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \sum_{j=1}^{N'} (x_j - \bar{x})^2 p_j = \sum_{j=1}^{N'} [(x_j)^2 - 2x_j\bar{x} + \bar{x}^2] p_j \\ &= \sum_{j=1}^{N'} (x_j)^2 p_j - 2\bar{x} \sum_{j=1}^{N'} x_j p_j + (\bar{x})^2 \sum_{j=1}^{N'} p_j \\ &= \sum_{j=1}^{N'} (x_j)^2 p_j - 2(\bar{x})^2 + (\bar{x})^2 = \sum_{j=1}^{N'} (x_j)^2 p_j - (\bar{x})^2 \end{aligned}$$

このように、平均も分散も測定値 x_j の出現確率 p_j を用いて表現出来る．

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{j=1}^{N'} x_j \cdot p_j = \langle x \rangle \quad (\text{A3-7})$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{j=1}^{N'} (x_j - \bar{x})^2 p_j = \sum_{j=1}^{N'} (x_j)^2 p_j - (\bar{x})^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\text{A3-8})$$

3-3) 二項分布

一回の試行で成功する確率を p ，失敗する確率を $1-p=q$ とする時， N 回の試行を行った時に， n 回成功する確率を $P(n)$ としよう．この確率 $P(n)$ は二項分布 (binomial distribution) として良く知られており，

$$P(n) = {}_N C_n \cdot p^n q^{(N-n)} = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{(N-n)} \quad (\text{A3-9})$$

である． N 回のうち n 回が成功で， $(N-n)$ 回が失敗である場合の数は，

$${}_N C_n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

である．各場合の生起確率は，

$$p^n q^{(N-n)}$$

であるから， N 回の試行で n 回成功する確率 $P(n)$ は (A3-9) で与えられることにな

る.

一方、二項定理(binomial theorem)は、良く知られているように、

$$\begin{aligned}(a+b)^n &= \sum_{r=0}^n \frac{n!}{r!(n-r)!} a^{n-r} b^r \\ &= a^n + n \cdot a^{n-1} b + \frac{n(n-1)}{2!} a^{n-2} b^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!} a^{n-3} b^3 + \cdots + nab^{n-1} + b^n\end{aligned}$$

である. この $(a+b)$ を (A3-9) の $(p+q)$ に置き換え, $(p+q)^N$ を作ると,

$$(p+q)^N = \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{(N-n)} = \sum_{n=0}^N P(n) \quad (\text{A3-10})$$

である. $(p+q) = p + (1-p) = 1$ であるから,

$$\sum_{n=0}^N P(n) = 1 \quad (\text{A3-11})$$

であることが判る.

N 回の試行で n 回成功するとして確率 P(n) は (A3-9) で与えられるが, では, 成功の回数 n の期待値 $\langle n \rangle = \bar{n}$ はどのように表現出来るだろうか?

$$\begin{aligned}\langle n \rangle = \bar{n} &= \sum_{n=0}^N n \cdot P(n) = \sum_{n=0}^N n \cdot \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{(N-n)} \\ &= \sum_{n=1}^N \frac{N!}{(n-1)!(N-n)!} p^n q^{(N-n)} = Np \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} p^{n-1} q^{(N-n)} \\ &= Np \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(N-1)!}{n!(N-n-1)!} p^n q^{(N-n-1)} = Np(p+q)^{N-1} = Np\end{aligned} \quad (\text{A3-12})$$

成功回数 n の期待値 $\langle n \rangle = \bar{n}$ は, 試行回数 N に一回当たりの成功確率 p を掛けたものである.

成功回数 n の分散 $\sigma^2(n)$ はどうなるであろうか?

(A3-8) から, 一般に, $\sigma^2 = \sum_{j=1}^{N_i} (x_j)^2 p_j - (\bar{x})^2$ であるから,

$$\sigma^2(n) = \sum_{n=0}^N n^2 P(n) - (\langle n \rangle)^2 \quad (\text{A3-13})$$

第一項の $\sum_{n=0}^N n^2 P(n)$ から考える． $p \frac{\partial(p^n)}{\partial p} = np^n$, $p \frac{\partial}{\partial p} [p \frac{\partial(p^n)}{\partial p}] = p \frac{\partial}{\partial p} (np^n) = n^2 p^n$

の恒等式に留意すると,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N n^2 P(n) &= \sum_{n=0}^N n^2 \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{(N-n)} = \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} (n^2 \cdot p^n) q^{(N-n)} \\ &= \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} p \frac{\partial}{\partial p} [p \frac{\partial}{\partial p}] p^n q^{(N-n)} \end{aligned}$$

である．和と偏微分の順序を入れ替えて，さらに $(p+q)=1$ を使うと，

$$\begin{aligned} p \frac{\partial}{\partial p} [p \frac{\partial}{\partial p}] \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{(N-n)} &= p \frac{\partial}{\partial p} (p \frac{\partial}{\partial p}) \sum_{n=0}^N P(n) = p \frac{\partial}{\partial p} (p \frac{\partial}{\partial p}) (p+q)^N \\ &= p \frac{\partial}{\partial p} [pN(p+q)^{N-1}] = p[N(p+q)^{N-1} + pN(N-1)(p+q)^{N-2}] \\ &= p \frac{\partial}{\partial p} [pN(p+q)^{N-1}] \\ &= pN + p^2 N(N-1) \end{aligned} \tag{A3-14}$$

との結果になる．

(A3-12) の $\langle n \rangle = Np$ を使うと，分散は

$$\begin{aligned} \sigma^2(n) &= \sum_{n=0}^N n^2 P(n) - (\langle n \rangle)^2 = pN + p^2 N(N-1) - p^2 N^2 \\ &= pN - p^2 N = Np(1-p) \\ &= Npq \end{aligned} \tag{A3-15}$$

となる．

以上のように，N回の試行での成功回数 n の期待値 $\langle n \rangle = \bar{n}$ と分散 $\sigma^2(n)$ は

$$\langle n \rangle = \bar{n} = Np, \quad \sigma^2(n) = Npq = Np(1-p) \tag{A3-16}$$

である．標準偏差の期待値に対する比，相対標準偏差，は，

$$\frac{\sigma(n)}{\langle n \rangle} = \frac{\sigma(n)}{\bar{n}} = \sqrt{\frac{q}{Np}} \tag{A3-17}$$

となる． p と q は一定として N が増加すると， $\sigma(n)/\langle n \rangle$ は $1/\sqrt{N}$ に比例して減少する． N が増加することで，相対誤差は $1/\sqrt{N}$ に比例して小さくなることが判る．二項分布はガウス分布の原型であり，(A3-16), (A3-17) はガウス分布にも引き継がれている．例えば， $p=q=1/2$ として， $N=10^{20}$ とすると， $\sigma(n)/\bar{n} = 10^{-10}$ のように極端に小さい相対標準偏差となる．熱力学量の相対標準偏差にもこのような状況が実現している．その場合の N は十分に大きい粒子数 ($N \sim 10^{20}$) が該当する．

3-4) スターリングの近似式

統計力学の議論では， n の階乗 $n!$ を頻繁に使う．これは，

$$n! = 1 \times 2 \times 3 \times \dots \times n$$

と定義される数値である．この両辺の自然対数をとると，

$$\ln n! = \ln 1 + \ln 2 + \ln 3 + \dots + \ln n \quad (\text{A3-18})$$

である．この和は図 A3-3 に示すように，幅 1 の高さ $\ln x$ の長方形の面積を

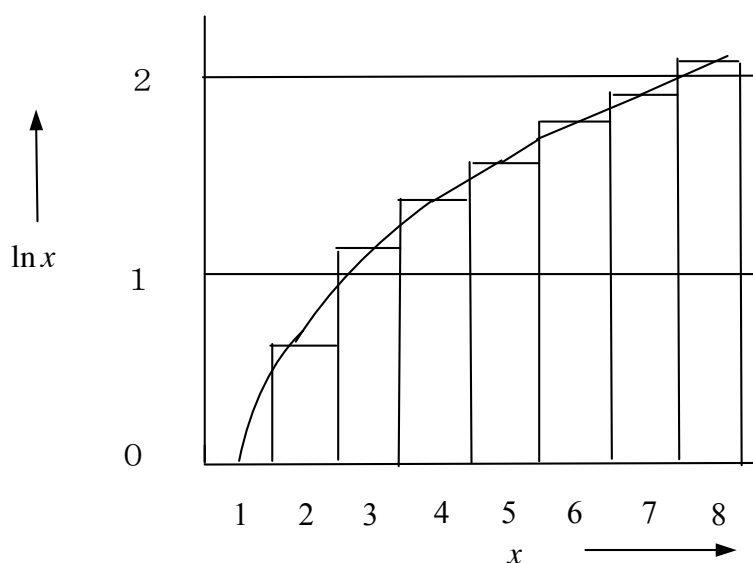


図 A3-3

を足し合わせたもので近似できることになる． n が大きくなると $y=\ln x$ の曲線の下での面積で近似できる． 故に， $n \gg 1$ の時，

$$\ln n! = \int_1^n \ln x dx = [x \ln x - x]_1^n = n \ln n - n + 1 \approx n \ln n - n \quad (\text{A3-19})$$

である． 更に精度の高い近似式は， (A3-19)に $\ln \sqrt{2\pi n}$ を加えて，

$$\ln n! = \int_1^n \ln x dx \approx n \ln n - n + \ln \sqrt{2\pi n} \quad (\text{A3-20})$$

である． これは， 正の整数に対するガンマ関数の性質， $\Gamma(n+1) = n!$ ， と x が充分大きな値の時の， $\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi x} \cdot x^x \cdot e^{-x}$ に由来する (付録 4)． (A3-19)も (A3-20)も スターリング(Stirling)の近似式と呼ばれる．

(A3-19)と(A3-20)の近似の程度を， $n=10, 50, 60$ について電卓で調べてみると，

$n=10$ の場合： $\ln 10! = 15.1044$ ，

$$10 \ln 10 - 10 = 13.025, \quad 10 \ln 10 - 10 + \ln \sqrt{2\pi \cdot 10} = 15.095,$$

$n=50$ の場合： $\ln 50! = 148.478$

$$50 \ln 50 - 50 = 145.6011, \quad 50 \ln 50 - 50 + \ln \sqrt{2\pi \cdot 50} = 148.476,$$

$n=60$ の場合： $\ln 60! = 188.628$

$$60 \ln 60 - 60 = 185.661, \quad 60 \ln 60 - 60 + \ln \sqrt{2\pi \cdot 60} = 188.627$$

となる． (A3-20)は， $n=10$ や $n=50$ の場合でも， $-0.06 \sim -0.001\%$ の相対誤差であり， 良好な近似式であることが判る． 一方， (A3-19)の方は $n=50$ で -1.9% ， $n=60$ で -1.6% の誤差がある． しかし， $n=1,000$ では -0.06% ， $n=10,000$ では -0.01% の相対誤差に低下するので， これより大きな n では問題はない． (A3-20)が正しいとして， (A3-19)と(A3-20)の差を(A3-20)で割れば，

$$\frac{(A3-19) - (A3-20)}{(A3-20)} = \frac{-\ln \sqrt{2\pi n}}{n \ln n - n + \ln \sqrt{2\pi n}} \quad (\text{A3-21})$$

として、大きな n の場合の相対誤差も推定出来る。

3-5) 正規分布 (ガウス分布)

3-3)で説明した二項分布に於いて、 N と n が大きな数になる状況 ($N \gg 1, n \gg 1$) を考えると、正規分布 (ガウス分布) が得られる。(A3-9)の二項分布の式は、

$$P(n) = {}_N C_n \cdot p^n q^{(N-n)} = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{(N-n)} \quad (\text{A3-9})$$

であるから、この両辺の自然対数を取り、 $N \gg 1, n \gg 1$ として 3-4)でのスターリングの近似を用いる。

$$\ln P(n) = \ln N! - \ln n! - \ln(N-n)! + n \ln p + (N-n) \ln(1-p) \quad (\text{A3-22})$$

スターリングの近似 (A3-19) $\ln n! \approx n \ln n - n$, また、 $(1-p) = q$ とすると、

$$\ln P(n) = N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln(N-n) + n \ln p + (N-n) \ln q \quad (\text{A3-23})$$

となる。これは ($N, n, p, q = 1-p$) の関数であるが、 $P(n)$ が最大となる n を求める為に、(A3-23)の両辺を n で偏微分すると、

$$\frac{\partial \ln P(n)}{\partial n} = -\ln n + \ln(N-n) + \ln p - \ln q = \ln \frac{(N-n) \cdot p}{n \cdot q} \quad (\text{A3-24})$$

となる。 $P(n)$ が最大となる時、 $\ln P(n)$ も最大である。その条件は

$$\frac{\partial \ln P(n)}{\partial n} = \ln \frac{(N-n) \cdot p}{n \cdot q} = 0$$

であり、これは

$$\frac{(N-n) \cdot p}{n \cdot q} = 1 \quad (\text{A3-25})$$

の時である。この条件は、 $(N-n) \cdot p = n \cdot (1-p)$ となり、結局、

$$n = N \cdot p$$

となる。これは、3-3)で説明した二項分布の(A3-12) $\bar{n} = \langle n \rangle = Np$ と全く同じこ

とである． $P(n)$ あるいは $\ln P(n)$ が最大となる n は， $\bar{n} = \langle n \rangle = Np$ のことである． ここでは， $P(n)$ あるいは $\ln P(n)$ を最大にする n を最確値と呼び，

$$\tilde{n} = \bar{n} = \langle n \rangle = Np \quad (\text{A3-26})$$

と表記しよう．そして， n を最確値とそれからの“ずれ” x で表現すると． $n = \bar{n} + x$ であるから， $P(n) = P(\bar{n} + x)$ となる． $\ln P(n) = \ln P(\bar{n} + x)$ を $\bar{n} = Np$ で x の 2 次までテーラー展開する．

$$\ln P(\bar{n} + x) = \ln P(\bar{n}) + x \left(\frac{\partial \ln P}{\partial n} \right)_{n=\bar{n}} + \frac{1}{2} x^2 \left(\frac{\partial^2 \ln P}{\partial n^2} \right)_{n=\bar{n}} + \dots \quad (\text{A3-27})$$

(A3-25) の最大値の条件を求めた際の前提があるので， $\left(\frac{\partial \ln P}{\partial n} \right)_{n=\bar{n}} = 0$ であるから， x の 1 次の項は消える． x の 2 次の項の二階の微分係数は， (A3-24) を再度 n で微分すると，

$$\frac{\partial^2 \ln P(n)}{\partial n^2} = -\frac{1}{n} - \frac{1}{(N-n)} = -\frac{N}{n(N-n)}$$

従って， n に $\bar{n} = Np$ 代入すると，

$$\left(\frac{\partial^2 \ln P}{\partial n^2} \right)_{n=\bar{n}} = -\frac{N}{Np(N-Np)} = -\frac{1}{Np(1-p)} = -\frac{1}{Npq} \quad (\text{A3-28})$$

3-3) の二項分布で $P(n)$ の分散（標準偏差 σ の 2 乗）が $Npq = Np(1-p) = \sigma^2$ となることは (A3-15) に既に述べた．従って， (A3-27) のテーラー展開の結果は，

$$\ln P(n) = \ln P(\bar{n} + x) \approx \ln P(\bar{n}) - \frac{1}{2\sigma^2} x^2 \quad (\text{A3-29})$$

となる．これは，

$$\ln P(n) = \ln P(\bar{n} + x) \approx \ln P(\bar{n}) + \ln e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2} x^2\right)} = \ln \{ P(\bar{n}) \cdot e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2} x^2\right)} \}$$

のことであるから，

$$P(n) = P(\bar{n} + x) = P(\bar{n}) \cdot e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} \quad (\text{A3-30})$$

左辺で全ての n についての和をとると 1 になる．これは(A3-11) に述べた．右辺では，全ての x での積分になるから，

$$\sum_{all\ n} P(n) = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\bar{n}) \cdot e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} dx = P(\bar{n}) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} dx$$

が成立する．即ち，

$$P(\bar{n}) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} dx = 1 \quad (\text{A3-31})$$

である．

付録 1 で議論したように，

$$I_0 = \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

であるから，ここで， $\alpha = 1/(2\sigma^2)$ とすると，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{(-\alpha x^2)} dx = 2I_0 = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} = (2\sigma^2\pi)^{1/2} = \sqrt{2\pi} \cdot \sigma$$

となる．これを(A3-31)に代入すれば，

$$P(\bar{n}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \quad (\text{A3-32})$$

であることが判る．(A3-30) に戻れば，

$$P(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{2\sigma^2}\right]} \quad (\text{A3-33})$$

となる．これが，平均値が $\bar{n} = \bar{n} = \langle n \rangle = Np$ で，分散が $\sigma^2 = Npq = Np(1-p)$ である正規分布(Normal distribution)である．ガウス分布(Gaussian distribution)とも呼ばれる．

一般に，平均値を m ，分散を σ^2 とする正規分布は $N(m, \sigma^2)$ と表記すること

が多い．N は Normal distribution の頭文字である．(A3-33)も，改めて，確率変数を x として，一般的に表記すると，

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{A3-34})$$

これは $N(m, \sigma^2)$ の正規分布（ガウス分布）である．確率分布式が連続関数になってしまったので， x が $(x, x+dx)$ の範囲に入る確率は $\varphi(x)dx$ で与えられる．

x が $a \leq x \leq b$ である確率を $\Phi(a \leq x \leq b)$ と表記すると，

$$\Phi(a \leq x \leq b) = \int_a^b \varphi(x)dx = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} dx \quad (\text{A3-35})$$

である．良く知られているように， $m - \sigma \leq x \leq m + \sigma$ である確率は 68%， $m - 2\sigma \leq x \leq m + 2\sigma$ である確率は 95.4%， $m - 3\sigma \leq x \leq m + 3\sigma$ である確率は 99.7%である（図 A3-4）．

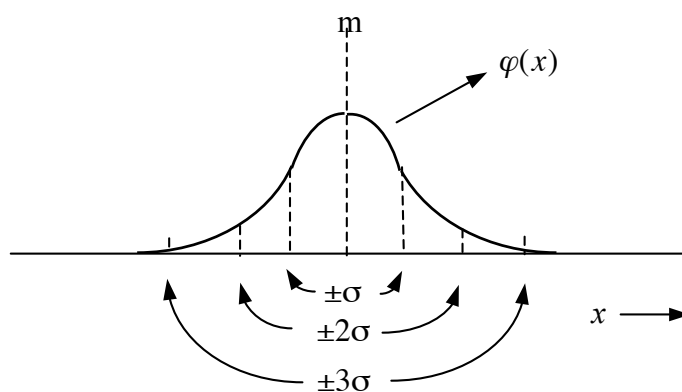


図 A3-4

任意の定数の a, b に対して，

$$\int_{m+a\sigma}^{m+b\sigma} \varphi(x)dx = \int_{m+a\sigma}^{m+b\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} dx \quad (\text{A3-36})$$

を考える．ここで，次のような一次変換

$$t = \frac{x - m}{\sigma} \quad (\text{A3-37})$$

を行うと, $dx = \sigma \cdot dt$ であるから,

$$\begin{aligned} \int_{m+a\sigma}^{m+b\sigma} \varphi(x) dx &= \int_{m+a\sigma}^{m+b\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \int_a^b e^{-\frac{t^2}{2}} \sigma \cdot dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{t^2}{2}} dt \end{aligned} \quad (\text{A3-38})$$

である. 平均値が 0, 分散 = 1 である正規分布 $N(0,1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}$ は, 標準正規分布と呼ばれる. 任意の正規分布 $N(m, \sigma^2)$ は, (A3-37)により, 標準正規分布 $N(0,1)$ に変換出来る. 通常は,

$$\int_0^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt \quad (\text{A3-39})$$

の値が数表にあるのでこれから積分した確率の値が得られる. 上記の

「 $m - \sigma \leq x \leq m + \sigma$ である確率は 68%, ...」は, 数表の値に基づいている.

$N(0,1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}$ も左右対称の偶関数であるから, (A3-39)は 0 から x までの積分値であることに注意. (A3-39)の積分は初等関数では表現出来ないので, 数表にたよるが, 数値計算の為に多項式の近似式も開発されている⁵¹⁾.

3-6) 正規分布(ガウス分布)による極大値ピークの近似

ある正の関数 $F(x)$ は、 $x = a$ で鋭い 1 つのピークを示し、 $x = a$ 以外の点では急速に 0 になるとする。このような関数 $F(x)$ を $(-\infty, +\infty)$ の範囲で積分する際に、その鋭い 1 つのピークを正規分布(ガウス分布)で近似すると便利である。これは、結合系の状態密度やエントロピーの議論で重要な意味を持つ。より滑らかな関数として扱うために、 $F(x)$ の対数を取り、 $x = a$ で級数展開する。

$$\ln F(x) \approx \ln F(a) + (x-a) \left(\frac{\partial \ln F(x)}{\partial x} \right)_{x=a} + \frac{(x-a)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \ln F(x)}{\partial x^2} \right)_{x=a} + \dots \quad (\text{A3-40})$$

となる。また、 $x = a$ で鋭い 1 つのピークを示すのであるから、

$$\left(\frac{\partial \ln F(x)}{\partial x} \right)_{x=a} = 0 \quad (\text{A3-41})$$

である。これは、

$$\left(\frac{\partial \ln F(x)}{\partial x} \right)_{x=a} = \left(\frac{\partial \ln F(x)}{\partial F(x)} \cdot \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right)_{x=a} = F'(a)/F(a) = 0 \quad (\text{A3-42})$$

となるから、 $x = a$ のピーク位置を決める条件である。次に、ピーク幅を決める

ガウス分布の分散を求める。 $x = a$ では極大値となるので、 $F''(a) < 0$ である。

$$\left(\frac{\partial^2 \ln F(x)}{\partial x^2} \right)_{x=a} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{F'(x)}{F(x)} \right] \right)_{x=a} = \left(\frac{F''(x)}{F(x)} - \frac{F'(x)}{F^2(x)} \right)_{x=a}$$

で、右辺の第二項は(A3-42)により消えるから、

$$\left(\frac{\partial^2 \ln F(x)}{\partial x^2} \right)_{x=a} = \left(\frac{F''(x)}{F(x)} \right)_{x=a} = -\frac{1}{\sigma^2(a)} \quad (\text{A3-42})$$

とすると、ガウス分布の分散を決めたことになる。このことは、(A3-42)を

(A3-40) の右辺に代入すると理解出来る。(A3-40) の右辺では、一次の項は

(A3-42) から消えるので、0 次と 2 次が残り、それ以上の高次項は無視すると、

$$\ln F(x) \approx \ln F(a) - \frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)} \quad \rightarrow \quad F(x)/F(a) \approx \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)}\right\}$$

となる． $x = a$ での極大値付近のピークの形状は，ピーク値 $F(a)$ と (A3-42) で定義した分散を持つ次のガウス型分布で近似されることになる．

$$F(x) \approx F(a) \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)}\right] \quad (\text{A3-43})$$

従って，関数 $F(x)$ を $(-\infty, +\infty)$ の範囲で積分すると，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} F(a) \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)}\right\} dx = F(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)}\right\} dx \quad (\text{A3-44})$$

である． (A3-44) 右辺最後の積分で， $x - a = t$ ， $1/2\sigma^2(a) = \alpha$ とおくと，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2(a)}\right\} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha t^2} dt = \sqrt{\pi/\alpha} \quad (\text{A3-45})$$

である．最後の等号は，付録 1 で述べたガウス積分の結果，

$$I_0 = \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \rightarrow 2I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

を使っている． (A3-45) の $\sqrt{\pi/\alpha}$ を元の表現に戻せば，

$$\sqrt{\pi/\alpha} = \sqrt{2\pi\sigma^2(a)} = \sqrt{2\pi} \cdot \sigma(a) \quad (\text{A3-46})$$

である．従って， (A3-44) の積分は，結局，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(x) dx \approx \sqrt{2\pi} \cdot \sigma(a) \cdot F(a) \quad (\text{A3-47})$$

と近似できる．

付録 4. ガンマ関数と一般次元における球の体積

4-1) ガンマ関数

ガンマ関数 $\Gamma(x)$ は次の積分で定義される,

$$\Gamma(x) = \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (\text{A4-1})$$

実数の $x=p > 1$ に対して, 部分積分 $\int u \cdot (dv/dx) dx = u \cdot v - \int v \cdot (du/dx) dx$ から

$$\begin{aligned} \Gamma(p) &= \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} t^{p-1} dt = \int_{t=0}^{\infty} (t^{p-1})(-e^{-t})' dt \\ &= \left[t^{p-1}(-e^{-t}) \right]_{t=0}^{\infty} + (p-1) \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} t^{p-2} dt \\ &= (p-1) \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} t^{p-2} dt = (p-1) \Gamma(p-1) \end{aligned} \quad (\text{A4-2})$$

となる. これより,

$$\Gamma(p) = (p-1) \Gamma(p-1) \quad (\text{A4-3})$$

また, $\Gamma(1) = \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} dt = \int_{t=0}^{\infty} (-e^{-t})' dt = \left[-e^{-t} \right]_{t=0}^{\infty} = 0 - (-1) = 1$ より,

$$\Gamma(1) = 1 \quad (\text{A4-4})$$

さらに, $\Gamma(1/2) = \int_{t=0}^{\infty} e^{-t} t^{-1/2} dt$ は $t = x^2$ とすると, 付録 1 の(A1-7)を用いて,

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} \cdot x^{-1} \cdot 2x \cdot dx = 2 \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

である. 故に,

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \quad (\text{A4-5})$$

(A4-3)と(A4-4)から,

$$\Gamma(2) = \Gamma(1), \quad \Gamma(3) = 2\Gamma(2) = 2 \cdot 1, \quad \Gamma(4) = 3 \cdot \Gamma(3) = 3!$$

となるから,

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{A4-5})$$

である.

また, (A4-3)と(A4-5)から,

$$\begin{aligned} \Gamma(3/2) &= (1/2)\Gamma(1/2) = (1/2)\sqrt{\pi} \\ \Gamma(5/2) &= (3/2)\Gamma(3/2) = (3/2) \cdot (1/2)\sqrt{\pi} \\ \Gamma(7/2) &= (5/2)\Gamma(5/2) = (5/2) \cdot (3/2) \cdot (1/2)\sqrt{\pi} \\ &\vdots \\ \Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) &= \left(\frac{2(n-1)+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2(n-1)+1}{2}\right) \\ &= \frac{(2n-1) \cdot (2n-3) \cdots 7 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 1}{2^n} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{(2n)(2n-1) \cdot (2n-2) \cdot (2n-3) \cdots 7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1}{2^n (2n)(2n-2)(2n-4) \cdots 6 \cdot 4 \cdot 2} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{(2n)!}{2^n \cdot 2^n (n)(n-1)(n-2) \cdots 3 \cdot 2 \cdot 1} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{(2n)!}{2^{2n} \cdot n!} \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (\text{A4-6})$$

である.

4-2) ガンマ関数の漸近展開とスターリングの近似式

関数の引数値が十分に大きな数であるとき成立する近似式を漸近展開と言う.

(A4-5)のガンマ関数 $\Gamma(n+1) = n!$ の漸近展開は, $n \rightarrow x$ として,

$$x! = \Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi x} \cdot x^x \cdot e^{-x} \left[1 + \frac{1}{12x} + \frac{1}{288x^2} + \cdots \right] \quad (\text{A4-7})$$

である. この導出は有馬・神部⁵³⁾ または小野寺⁵⁰⁾ を参照されたい. (A4-7)の

近似式はスターリングの近似式と呼ばれるが、通常スターリングの近似式 $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ より、遥かに精度の良い近似式である。どの程度良いかは付録 3-4 の「スターリングの近似式」の終りに記した。

4-3) 一般 n 次元における球の体積

3 次元空間の半径 R の球の体積は、 $V_{n=3}(R) = \frac{4\pi}{3} R^3$ である。一般 n 次元における半径 R の球の体積は、当然、

$$V_n(R) = a_n \cdot R^n \quad (\text{A4-8})$$

と予想される。 a_n は比例定数である。n 次元での座標値を、

$$(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \quad (\text{A4-9})$$

とすると、極座標系を想定して、座標原点からの距離を r とすると、

$$r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \dots + x_n^2 \quad (\text{A4-10})$$

である。半径 r と半径 r+dr に挟まれた球殻の体積は、(A4-8) より、

$$\frac{\partial V_n(r)}{\partial r} dr = n a_n \cdot r^{n-1} dr \quad (\text{A4-11})$$

である。一方、次の積分を考えると、

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2)} dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (\text{A4-12})$$

変数毎に積分すれば良いから、この積分は付録 1 のガウス積分より、

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2)} dx_1 \right] dx_2 \right\} \dots dx_n = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \right]^n = \pi^{n/2} \quad (\text{A4-13})$$

である。

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2)} dx_1 dx_2 \dots dx_n = \int_0^{\infty} e^{-r^2} \cdot n a_n r^{n-1} dr$$

$$= na_n \int_0^{\infty} e^{-r^2} \cdot r^{n-1} dr$$

ここで, $r^2 = t$ と変換すると,

$$\begin{aligned} I &= na_n \int_0^{\infty} e^{-r^2} \cdot r^{n-1} dr = na_n \int_0^{\infty} e^{-t} \cdot t^{(n-1)/2} (1/2) t^{-1/2} dt \\ &= (1/2) na_n \int_0^{\infty} e^{-t} \cdot t^{(n/2-1)} dt = (1/2) na_n \Gamma(n/2) \end{aligned} \quad (\text{A4-14})$$

となる. (A4-13)と(A4-14) を比べることで,

$$(1/2) na_n \Gamma(n/2) = \pi^{n/2}$$

であるから, (A4-8) の比例定数 a_n が決まる.

$$a_n = \frac{2 \cdot \pi^{n/2}}{n \Gamma(n/2)} \quad (\text{A4-15})$$

故に, 一般次元 n の球の体積は,

$$V_n(R) = \frac{2 \cdot \pi^{n/2}}{n \Gamma(n/2)} \cdot R^n \quad (\text{A4-16})$$

である. (A4-3)より, $\Gamma(n/2 + 1) = (n/2) \Gamma(n/2)$ であるので, $\Gamma(n/2) = \frac{\Gamma(n/2 + 1)}{(n/2)}$ で

ある. これを使えば, (A4-16)は

$$V_n(R) = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2 + 1)} \cdot R^n \quad (\text{A4-17})$$

と表現しても良い. こちらの方がより単純な表現である.

付録5 磁気双極子モーメントと磁性物質

1) 一様静磁場の下で正方回路電流に働く回転力（トルク）

一様な静磁場 \mathbf{B} のもとで、一定電流 I が流れている一辺の長さ a の正方回路が置かれると、アンペールの力からその正方回路に回転力が作用する(図 A5-1).

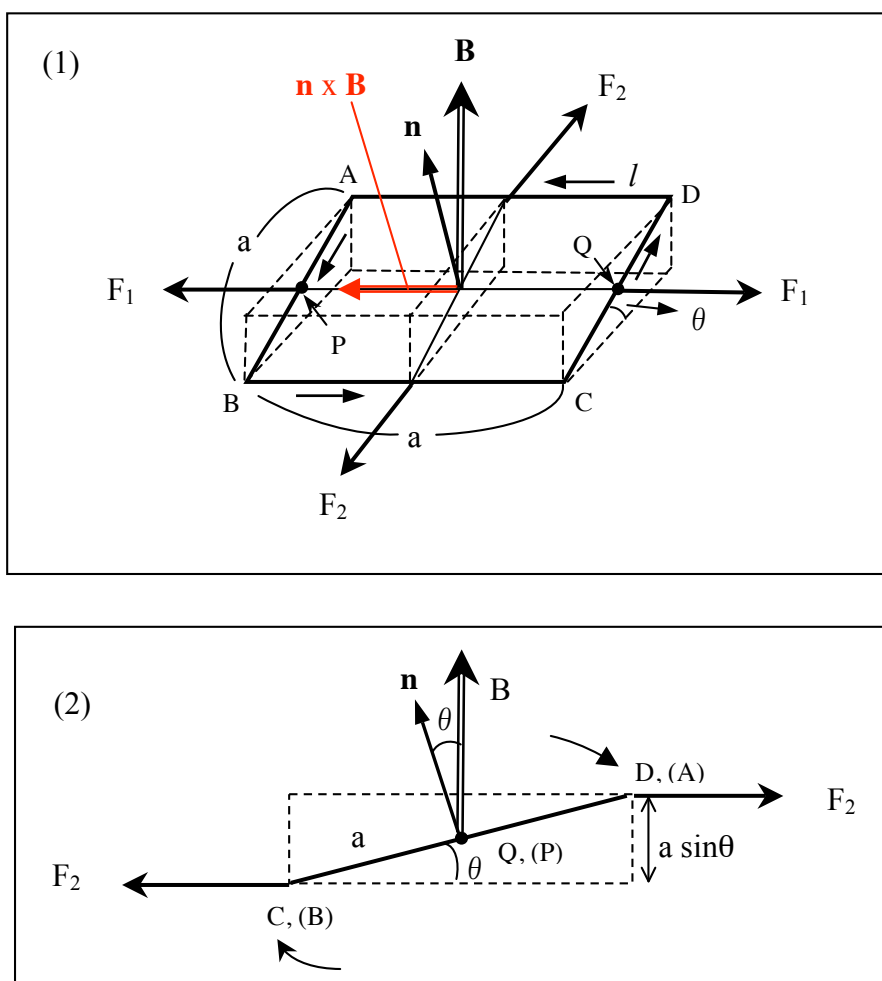


図 A5-1. 一様静磁場 \mathbf{B} の下に置かれた定常電流 I が流れる正方回路には回転力が働く. P , Q に作用する F_1 は向きが反対で、同一作用線 (PQ) 上にありつり合う(1). しかし、 DA と BC に働く F_1 は、同一作用線上ではなく(2), 偶力となり回転力を与える. 右回りで回転を考えるから、回転の軸は Q から P に向かう(2). \mathbf{n} は正方回路の面に対する単位法線ベクトル. $\mathbf{n} \times \mathbf{B}$ はモーメント (トルク) ・ベクトル (回転軸方向とその大きさ) を表現する.

AB の部分には, $F_1 = Ia \cdot B \cdot \sin(\theta + \pi/2) = Ia \cdot B \cdot \cos \theta$ の力が外向きに作用し, CD の部分に作用する力は, $Ia \cdot B \cdot \sin(\theta - \pi/2) = -Ia \cdot B \cdot \cos \theta = -F_1$ である. 同じ大きさの力 F_1 が反対方向に作用している. この二つの力は同一直線 PQ に沿っているので釣り合い, 両者の合力は 0 である. 一方, DA に働く力は $F_2 = Ia \cdot B \cdot \sin(\pi/2) = Ia \cdot B$ である. BC 部分に作用する力は, DA に働く力と同じ大きさで, 向きが反対である. $Ia \cdot B \cdot \sin(3\pi/2) = -Ia \cdot B = -F_2$. これらは, (2) に示すように, 同一作用線上にはないので, 偶力となり正方回路全体に回転力を与える. (2)の図で回転の向きは右回りであるから, この回転軸は Q から P に向かう方向となる.

この場合, 偶力が作る力のモーメント N の大きさは, $N = F_2 \cdot a \cdot \sin \theta$ であるから,

$$N = F_2 \cdot a \cdot \sin \theta = Ia^2 B \cdot \sin \theta \quad (\text{A5-1})$$

となる. 正方回路の面に対する単位法線ベクトルを \mathbf{n} とすると, 偶力が作る力のモーメント・ベクトル \mathbf{N} は, 方向も含めて, 次のベクトルの外積で表現できる.

$$\mathbf{N} = (Ia^2)\mathbf{n} \times \mathbf{B} = (IS)\mathbf{n} \times \mathbf{B} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} \quad (\text{A5-2})$$

S は正方回路の面積である. 回路の面積 S を使う第二の表現は, 任意の形をした回路でも成立する. $\mathbf{m} = (IS)\mathbf{n}$ が磁気双極子ベクトルである.

一様静磁場 \mathbf{B} の下に置かれた定常電流 I が流れる正方回路に偶力 (回転力) が働く状況は, 図 A5-2 に示す一様な電場 \mathbf{E} の下に置かれた電気双極子に作用する偶力と類似する. d の距離を隔てて $\pm q$ の電荷が分布する時, 電気双極子ベクトル \mathbf{p} の大きさは dq で, その方向は負電荷から正電荷に向かう. F の大きさは $F = \pm qE$ であるから, この偶力による力のモーメント \mathbf{N} の大きさは,

$$N = Fd \cdot \sin \theta = qEd \cdot \sin \theta = pE \cdot \sin \theta \quad (\text{A5-3})$$

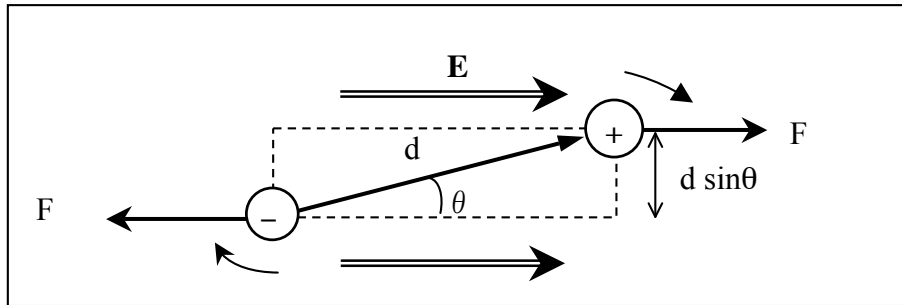


図 A5-2. 一様な電場の下に置かれた電気双極子に働く偶力.

故に, 図 A5-2 の状況で電気双極子ベクトル \mathbf{p} に働く力のモーメント・ベクトル \mathbf{N} は,

$$\mathbf{N} = \mathbf{p} \times \mathbf{E} \quad (\text{A5-4})$$

となる. (A5-4)は, 一様な静磁場 \mathbf{B} の下に置かれた定常電流 I の閉回路に作用するモーメント・ベクトル(A5-2)と類似する. 静磁場の中で“循環する電流”は, 静電場の中の電気双極子と類似の振る舞いを示す. これは静磁場の中での“循環回路電流”が“磁気双極子”と類似の性質を持つことを意味している. 以下で述べるように“循環回路電流”と磁気双極子とは同じものと考えて良い.

2) “磁荷”と電荷

電磁気学では, 電気双極子と磁気双極子のモーメント・ベクトル, 電場 (強度) と磁場 (強度), 真空の誘電率(ϵ_0)と透磁率(μ_0), 電束密度と磁束密度, の対が一对一に対応する.

$$\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{p}_m, \quad \mathbf{E} \leftrightarrow \mathbf{H}, \quad \epsilon_0 \leftrightarrow \mu_0, \quad \mathbf{D} \leftrightarrow \mathbf{B} \quad (\text{A5-5})$$

そこで, 電気双極子モーメント・ベクトル ($\mathbf{p} = q\mathbf{d}$) が正負の電荷対と両者の距離で決まるなら, 磁気双極子モーメント・ベクトル (\mathbf{p}_m)に対して, 正負の“磁

荷 $\pm q_m$ ”と両者の距離 d の積を考えることはできる．

$$\mathbf{p} = q\mathbf{d} \Leftrightarrow \mathbf{p}_m = q_m\mathbf{d} \quad (\text{A5-6})$$

$\mathbf{p}_m = q_m\mathbf{d}$ を仮定するなら， $\mathbf{E} \Leftrightarrow \mathbf{H}$ の対応関係から，

$$F = \frac{1}{4\pi\mu_0} \cdot \frac{q_m q'_m}{r^2}, \quad \mathbf{F} = q_m \mathbf{H} \quad (\text{A5-7})$$

も導出できる．これは，”磁荷のクーロン則“である．磁場の問題を”磁荷のクーロン則“から始めるテキストは今では見られない．“磁荷 $\pm q_m$ ”は実在しないからである．磁場の話が \mathbf{B} （磁束密度）から始まり， \mathbf{H} （磁場強度）はアンペールの法則の説明後となるのも，これが原因である．正負の“磁荷 $\pm q_m$ ”を考えることは許されるが，“磁荷 $\pm q_m$ ”は実在しない．実在するのは「環状（円形）電流」である．

「磁気双極子モーメント」という概念は，いわば「棒状の永久磁石」が作り出す磁場の大きさを表現するものである． S を環状電流回路の面積とすると，磁気双極子モーメントの大きさは，

$$p_m = \mu_0 I (\pi a^2) = \mu_0 I S \quad (\text{A5-8})$$

であるから，磁気双極子モーメントの次元は $[N \cdot A^{-1} \cdot m^2]$ である（しかし， μ_0 を除いた部分で磁気双極子モーメントを定義することもあるので注意が必要）．現実の永久磁石内部においても「環状電流の集合体」が存在する結果と考えた方が良い．

図 A5-3 は，環状ループに電流 I を流し，このループ面積内の網目状の微小環状ループにも同じ電流 I を流した状況を示す．内部微小ループ電流 I は隣り合う境界で相殺され，一番外の環状ループ電流 I のみが残る．故に，外側の環状ルー

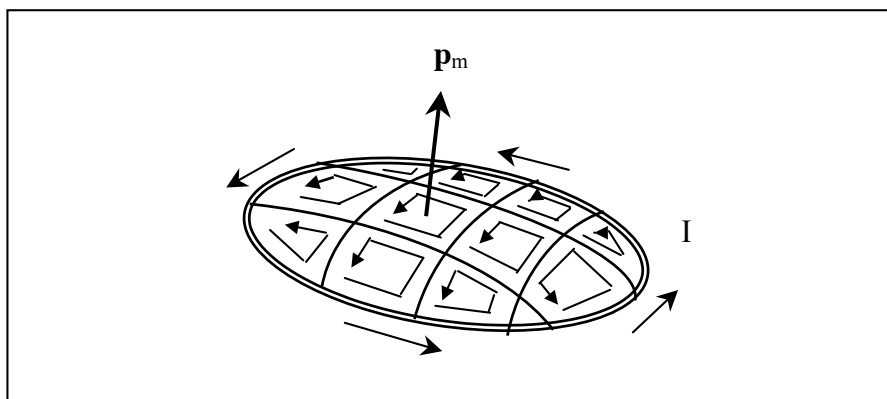


図 A5-3. 環状電流 I と、このループの面を構成する網目状の微小環状ループにも同じ電流 I を流したとする．内部の微小ループで電流 I は隣り合う境界で相殺され，一番外の環状（ループ）電流 I のみが残る．

電流 I は、このループ面積内の網目状の微小環状電流 I の集合と等価である．網目状の微小環状ループのサイズは、順次小さくして考えることが出来るから、このサイズは原子サイズまで小さくすることができるだろう．このような「環状ループ電流」が幾つも集まった物質が永久磁石と理解される．次に原子自体に「環状ループ電流」が実在することを述べる．

原子内部に存在する電子は、それ自体がスピン角運動量（“自転運動”の角運動量）もち、小磁石のような「スピン磁気モーメント」を持っている．同時に、電子は原子核の周りを運動している．これは“電子の公転運動”にあたるが、電子は電荷を持っているので、これを環状円形電流と見なすことが出来る．即ち、原子自体は、電子の持つ「スピン磁気モーメント」、電子の「軌道運動に起因する磁気モーメント」＝「微小環状ループ電流」を持っているので、そのような原子が集合した巨視的物質が磁気モーメントを示しても、それは不思議な

ことではない。しかし、電子の「スピン磁気モーメント」や「軌道運動」は原子に依り異なる。また、原子の集合状態も、巨視的物質がどのような磁気モーメントを示すかに影響する。以下にもう少し具体的な議論を記す。

2) 磁性体と静磁場

永久磁石や電磁石は Fe などの金属を強く引きつける。また、中空円筒のソレノイド・コイルの内部に Fe 金属棒を挿入すると、コイルの電流は同じであっても、発生する磁場強度 (\mathbf{H})、磁束密度 (\mathbf{B}) は著しく増大する。このような事実は、永久磁石、電磁石、ソレノイド・コイルの磁場により金属 Fe が磁化することを意味する。外部磁場により磁気双極子が誘起され磁性をおびる。物質が静電場の下に置かれた時、電気双極子が誘起されて分極する現象に似ている。

2-1) 物質の磁化：磁化電流と磁化ベクトル

Fe 金属棒を挿入したソレノイド・コイルが著しく強い磁場を生み出す事実を、アンペールは、挿入した Fe 金属棒内部の微小な円形“分子電流”(図 A5-4) から、次のように説明した。普通の状態では、Fe 金属棒内部の“分子電流”の軸は色々な方向を向いており、“分子電流”の軸を平均しても特定の方向性が出てこない。即ち、“分子電流”の巨視的平均値は 0 である。これがソレノイドに電流を流さない時の Fe の状態であると考ええる。しかし、ソレノイドに電流を流すと、Fe は軸方法の静磁場の中に置かれたことになり、“分子電流”の軸が電流磁場の方向に揃う。“分子電流”の軸が揃うと、内部で隣接する“分子電流”は相互に打ち消し、Fe の表面部分のみに電流が残る。これが「磁化電流 (I_m)」とな

る．外部から流れるソレノイドのコイル導線電流は「伝導電流 (I_c)」と呼ばれ、

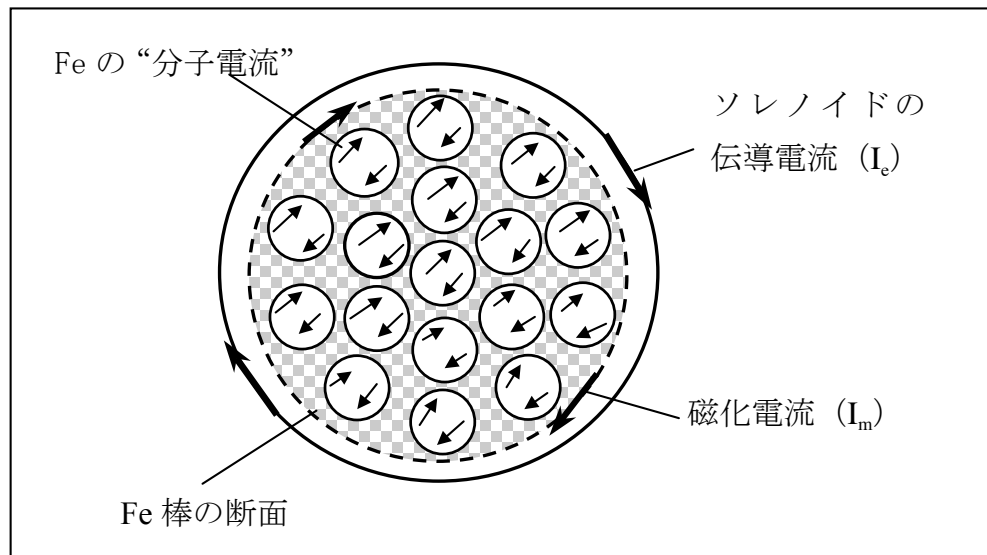


図 A5-4. ソレノイド中の Fe の“分子電流”と磁化電流.

「磁化電流 (I_m)」と区別される (図 A5-4). この二種類の電流が重なり合って強め合い、大きな磁気双極子モーメントを生み、強い磁束密度 \mathbf{B} (磁場) を与えると解釈する. 「磁化電流 (I_m)」が生じ、磁気双極子モーメントが生じることを「磁化」と言う. 磁化が起こる物質を「磁性体」を呼ぶ.

磁場の下に置かれた物質について、磁気双極子モーメントの巨視的な平均値を求め、単位体積当たりの磁気双極子モーメントの値 (磁気双極子モーメント密度) にしたものは、**磁化ベクトル**(magnetization vector) と呼ばれる. この磁化ベクトルをここでは、 $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ と表記する. 一般的には巨視的物質内の位置 \mathbf{x} の関数である. 即ち、単位体積当たり磁気双極子モーメントが n 個あり、その磁気双極子モーメント・ベクトルの平均を $\bar{\mathbf{m}} = (1/n) \sum_{k=1}^n \mathbf{m}_k$ とすると、磁化ベクトル

\mathbf{M} は

$$\mathbf{M} = n \cdot \bar{\mathbf{m}} \quad [N \cdot A^{-1} \cdot m^2 / m^3] \quad (\text{A5-9})$$

磁気双極子モーメントの次元は $[N \cdot A^{-1} \cdot m^2]$ であるから、 $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ はこれを体積で割った次元を持つ。電場 \mathbf{E} の下に置かれた誘電体の分極ベクトル $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ に対応する。

磁気双極子モーメントの定義は、真空の透磁率 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} (N \cdot A^{-2})$ を含める場合と μ_0 を含めない場合の、二通りがあるので注意が必要。ここでは μ_0 を含めた磁気双極子モーメントを用いている。しかし、 μ_0 を含めない定義を用いると、 \mathbf{M} の次元は $[A \cdot m^2 / m^3] = [A/m]$ となる。

アンペールの考え方は、図 A5-3 で述べた「環状電流の集合体」の考え方のことである。今日的理解では、“Fe の分子電流”は、Fe の電子の原子核の周りの軌道運動と、電子それ自身が持つスピン（自転運動）に由来する磁気モーメント、さらに結晶内での磁気モーメントの相互作用の結果に対応する。事実上は、電子自身が持つスピン磁気モーメントとその協力現象が重要である。しかし、“磁荷”を想定するのではなく、「原子サイズの環状電流，回転する電流」の軸が物質内で揃うとする立場は大変的を射たものである。

2-2) 常磁性，反磁性，強磁性

磁場の下に置かれた物質が示す誘起磁気双極子モーメントは、基本的には、次の二つに機構で生じると理解されている。第一は、その物質を構成している原子自体がもともと磁気モーメントを持っている場合で、具体的には、開殻電子配置の 3d 電子を持つ鉄族元素，4f 電子を持つランタニド（希土類元素），5f 電子を持つアクチニドなどの原子・イオンなどが該当する。外部磁場がない状態では、その向きは原子・イオンの熱運動によりランダムであるが、図 A5-4 の

ような状況で外部磁場のもとに置かれると、外部磁場の方向に原子・イオンの磁気モーメントが揃う傾向を示す。その結果、巨視的にも磁気双極子モーメントを示す。図 A5-4 のような状況を考えると、外部磁場を生じる伝導電流と同じ向きの磁化電流が生じる。第二の機構は、原子自体が磁気モーメントを持っていない場合でも、非常に小さな磁気双極子モーメントが誘起される機構である。コイルを外部磁場の下に置くと、電磁誘導によりコイル中に電流が流れる。磁場を打ち消すように電磁誘導による電流が生じる。これと類似する現象がミクロにも起こると考えられる。図 A5-4 のような状況では、伝導電流と反対の向きの磁化電流が生じる。個々の原子にも非常に小さいながら磁気モーメントが生じ、その向きは外部磁場と反対である。

第一の機構による誘起磁気モーメントの方が、第二の機構で誘起される磁気モーメントより遥かに大きい場合は、外部磁場と同じ向きに巨視的な誘起磁気双極子モーメントが生じる。このような磁化を示す物質は、**常磁性物質** (paramagnetic materials) と呼ばれる。開殻電子配置の 3d 電子を持つ鉄族元素、4f 電子を持つ希土類元素の原子・イオンを含む物質はこのような常磁性物質の代表である。一方、第二の機構のみにより、外部磁場とは反対の向きに、僅かな巨視的誘起磁気双極子モーメントが生じる物質は、**反磁性物質** (diamagnetic materials) と呼ばれる。4f 電子を持つ希土類元素でも、閉殻電子配置となっている Lu^{3+} イオンの化合物は反磁性物質である。4f 電子を持たないランタニド(希土類元素)の一員にされている La の 3+ イオン化合物も反磁性物質である。

図 A5-4 のような状況で、Fe や Ni は非常に大きな誘起磁気双極子モーメントを生じるが、これは上の二つの機構では説明できない。Fe や Ni は開殻電子配置

の 3d 電子が存在するので、Fe や Ni の原子は磁気モーメントを持っている。Fe や Ni 原子は結晶構造を作っているが、これらの原子位置には磁気モーメントを持つ原子が存在しているので、隣り合う原子位置の磁気モーメントの間には、強い量子力学的相互作用が働き、結果として、磁気モーメントを揃え、巨視的にも非常に大きな磁気モーメントを生じる。しかし、外部磁場がない場合は、あらゆる部分で磁気モーメントが揃っている訳ではない。磁区 (magnetic domain) と呼ばれる 10^{-5} m サイズの領域内では、磁気モーメントが揃っているが、隣接する磁区では磁気モーメントの向きが反対であるような状況が実現している。従って、巨視的な磁気モーメントの平均値 (\mathbf{M} , 磁化ベクトル) を求めると 0 となる。このような物質に外部磁場を印加すると、それぞれの磁区の磁気モーメントが一斉に同じ向きに揃う。大きな磁化ベクトルが外部磁場の向きに生じる。このような磁化を示す物質は**強磁性物質** (ferromagnetic materials) と呼ばれる。強磁性物質は、一般に、強い磁場をかけて全ての磁区の磁気モーメントを揃えた後、この外部磁場を 0 に戻しても、磁化ベクトル \mathbf{M} が 0 に戻らない。このような性質が著しい強磁性物質が**永久磁石**として利用される。

強磁性物質は非常に強い常磁性体であると言えるが、一方、非常に強い反磁性体は、水銀や鉛などの金属が極低温 (< 8 K) で示す超伝導 (superconductivity) 状態に見ることが出来る。化合物でも $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CaCu}_3\text{O}_{10}$ は、それぞれ、90, 120 K で超伝導状態になることが 1980 年代に明らかにされた。“極低温 (< 8 K)” ではないと言う意味で、“高温” 超伝導物質と呼ばれる。超伝導物質を一樣な磁場のもとに置いても、磁束線は超伝導物質のところで曲げられ、内部に入らない。これはマイスナー効果 (Meissner effect) と呼ばれる。超伝導物質内

部の磁束密度 \mathbf{B} は常に 0 であることを意味するが，外部磁場の効果を完全に打ち消してしまう完全反磁性体に特有な磁化電流に依るとされる⁴⁹⁾．

付録6 Lagrange の未定乗数法

Lagrange の未定乗数法(Lagrange's undetermined multiplier or Lagrange multiplier) は、条件付き極値問題の解法として使われるので重要である。未定係数法とも呼ばれる。解析力学の知識を前提にした統計力学の議論では、繰り返し使用されることが多い。この立場は本書ではあまり全面に出さないようにしたもの、§ 6-2-3) の「等確率の原理と Boltzmann の関係式」では用いている。ここでは、Lagrange の未定乗数法の纏めを掲げておくことにする。本来は、変分法や解析力学の基礎と並行して議論するが^{5 4)}、ここではその部分は省略されている。もし判りにくい場合は、力学や解析力学の教科書で補足されたい。

1) 拘束条件が一つである場合の極値問題

解析力学での Lagrangian, $L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$, は一般化座標とその時間微分で与えられるが、座標変数が全て独立ではない場合がある。例えば、剛体的な2原子分子では、二原子間の距離(d_0)が一定であると考えられる場合、これは座標変数に対する拘束条件である。

$$(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 = (d_0)^2 \quad (\text{A6-1})$$

変数を (q_1, q_2, \dots, q_f) として、一般の拘束条件は、変数の陰関数として以下の様に表現される。

$$g(q_1, q_2, \dots, q_f) = 0 \quad (\text{A6-2})$$

拘束条件を用いて、独立変数の数を自由度に一致するように変数を消去できる場合は簡単であるが、(A6-1)の条件のように、これが簡単には出来ない場合が圧倒的に多い。しばらくは、一個の拘束条件がある場合について考える。

一方、変数を (q_1, q_2, \dots, q_f) とするある関数 $F(q_1, q_2, \dots, q_f)$ の極値（最大値，最小値）を求める場合にも，変数に (A6-2) のような拘束条件が付随していることがある．

そのような場合，

$$F(q_1, q_2, \dots, q_f) \quad (\text{A6-3})$$

F は極値を取るのだから，変数を仮想的に微小変化させた時の関数値の変化（ここでは，これを以後「変分」と呼んでいる）は 0 と出来る．

$$\delta F(q_1, q_2, \dots, q_f) = \sum_{i=1}^f \frac{\partial F}{\partial q_i} \delta q_i = 0 \quad (\text{A6-4})$$

しかし，拘束条件 (A6-2) から， δq_i の全てが独立ではないことは，(A6-2) の変分を取れば判る．(A6-2) の右辺は元々 0 であるから，その変分も 0 であり，

$$\delta g(q_1, q_2, \dots, q_f) = \sum_{i=1}^f \frac{\partial g}{\partial q_i} \delta q_i = 0 \quad (\text{A6-5})$$

である． δq_i の (A6-5) の一次結合が常に 0 でなければならない．全ての δq_i が独立ではないことの具体的表現である．

しかし，(A6-4) と (A6-5) は常に成立している．そこで，(A6-5) 両辺に任意の定数 λ をかけても 0 は変わらないから，これと (A6-4) を一緒にしても，やはり，

$$\delta F = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \delta q_i = 0 \quad (\text{A6-6})$$

である．定数 λ が任意であるから，消去したい変数に関する部分を (A6-6) から除くことが出来る．

例えば， q_f に関する部分を除く時には，

$$\frac{\partial F}{\partial q_f} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_f} = 0 \quad (\text{A6-7})$$

となるように定数 λ を選べば良い． (A6-6) は,

$$\delta F = \sum_{i=1}^{f-1} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \delta q_i = 0 \quad (\text{A6-8})$$

となり，ここでの $(f-1)$ 個の δq_i は独立であるから，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f-1) \quad (\text{A6-9})$$

となる．この結果は，(A6-7) と同じ形式になっているから，(A6-9) は (A6-7) も含めて，全ての変数 (q_1, q_2, \dots, q_f) に対して，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (\text{A6-10})$$

となる．結局，一旦， $\lambda = -(\partial F / \partial q_f) / (\partial g / \partial q_f)$ と決めてしまうと，形式上， δq_i の全てが独立であると扱って良いとの結論になる．

以上では，拘束条件の関数 g の偏微分係数に任意係数 λ を掛けて F の変分式 (A6-8) に加えた．しかし，元々拘束条件の関数は $g=0$ であるから， g 自体に任意係数 λ を掛けて関数 F に加えても，実質は F に等しい．そこで， $f=F+\lambda g$ を作り，

$$f(q_1, q_2, \dots, q_f, \lambda) \equiv F(q_1, q_2, \dots, q_f) + \lambda \cdot g(q_1, q_2, \dots, q_f) \quad (\text{A6-11})$$

この変分を取って 0 と置くこともできるはずである．ただし，この変分関数 f の変数は， λ が加わったことにより， $(f+1)$ 個の $(q_1, q_2, \dots, q_f, \lambda)$ に増加しており，

$$\delta f = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \delta q_i + g(q_1, q_2, \dots, q_f) \delta \lambda \quad (\text{A6-12})$$

である．ここで， f 個の δq_i と $\delta \lambda$ が独立であると仮定すると，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (\text{A6-10})$$

$$g(q_1, q_2, \dots, q_f) = 0 \quad (\text{A6-2})$$

となる．この逆も成り立つ．第一式は前段の結論であり，第二式は，初めの拘束条件そのものであるから，(2)の拘束条件のもとでの極値条件は， f 個の δq_i が独立と考えた結果の (A6-10) で良いことになる．(A6-11) の考え方は，拘束条件が複数ある場合に簡単に拡張できる．

2) 拘束条件が複数存在する場合の極値条件

拘束条件が複数あり，

$$g_\mu(q_1, q_2, \dots, q_f) = 0 \quad (\mu = 1, 2, \dots, k < f) \quad (\text{A6-13})$$

のもとで，関数 $F(q_1, q_2, \dots, q_f)$ が極値を取る条件は，以下の一次結合の変分を取り，これを 0 とすれば良い．

$$f(q_1, q_2, \dots, q_f, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k) \equiv F(q_1, q_2, \dots, q_f) + \sum_{\mu=1}^k \lambda_\mu \cdot g_\mu(q_1, q_2, \dots, q_f) \quad (\text{A6-14})$$

$$\delta f = \sum_{\mu=1}^k \sum_{i=1}^f \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda_\mu \frac{\partial g_\mu}{\partial q_i} \right) \delta q_i + g_\mu(q_1, q_2, \dots, q_f) \delta \lambda_{\mu_i} \right\} \quad (\text{A6-15})$$

ここで， $(f+k)$ 個の全ての変数 $(q_1, q_2, \dots, q_f, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)$ の微小変化は独立と考えれば良いから，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \sum_{\mu=1}^k \lambda_\mu \frac{\partial g_\mu}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (\text{A6-16})$$

$$g_\mu(q_1, q_2, \dots, q_f) = 0 \quad (\mu = 1, 2, \dots, k) \quad (\text{A6-17})$$

(A6-17) は与えられた拘束条件である．一方，(A6-16) は， k 個の係数 λ_μ を含む一次方程式であり，これが f 個あることを意味する． $f > k$ であるから，この連立一次方程式を解いて， k 個の係数 λ_μ が決まる．

以上が Lagrange の未定乗数法である．

付録7 ラプラス変換と合成定理

§8-5 で議論したように、「弱い結合系(I+II)」に対する状態密度を

$\Omega_{1+2}(E = E_1 + E_2)$ とすると、これは部分系 I, II の状態密度 $\Omega_1(E_1)$, $\Omega_2(E_2)$ から次のように合成される.

$$\begin{aligned}\Omega_{1+2}(E) &= \int_0^E \Omega_1(E - E') \Omega_2(E') dE' \\ &= \int_0^E \Omega_1(E') \Omega_2(E - E') dE'.\end{aligned}\quad \text{§8-5 (40)}$$

$E = E_1 + E_2$, $E' = E_2$ の場合が第一式, $E = E_1 + E_2$, $E' = E_1$ の場合が第二式である. 何れも「弱い結合系(I+II)」の状態密度 $\Omega_{1+2}(E = E_1 + E_2)$ を与えている. ここでは $E' = E_1$ の場合を直接表現した第二式

$$\Omega_{1+2}(E) = \int_0^E \Omega_1(E_1) \Omega_2(E - E_1) dE_1 \quad (\text{A7-1})$$

を用いる. これは,

$$\Omega_{1+2}(E) = \int_0^E \Omega_2(E - E_1) \Omega_1(E_1) dE_1 \quad (\text{A7-2})$$

とも書けるが、この右辺のタイプの積分は、一般に、二つの関数 Ω_1 と Ω_2 の「合成積 (convolution)」と呼ばれ、「合成」、「相乗積」、「たたき込み」などとも呼ばれる.

一般には、区間 $t = 0$, $t < \infty$ で定義される二つの関数 $f(t)$, $g(t)$ に対して、

$$h(t) \equiv \int_0^t f(t - \tau) g(\tau) d\tau \equiv f * g \quad (\text{A7-3})$$

と定義される $h(t) = f * g$ が「合成積」と呼ばれる.

一方、カノニカル分布の分配関数(状態和) $Z(T, V, N) = Z(\beta, V, N)$ は、

$$Z = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \cdot \Omega(E) dE = \int_0^\infty e^{-\beta E} \cdot \Omega(E) dE \quad \text{§8-5 (52)}$$

である． $e^{-\beta E} \cdot \Omega(E)$ を E について 0 から ∞ まで積分したものが $\Omega(E)$ のラプラス変換で，これがカノニカル分布の分配関数（状態和） Z である． 同様にして，状態密度 $\Omega_{1+2}(E)$ についても， $e^{-E/k_B T} = e^{-\beta E}$ を掛けて E について 0 から無限大まで積分した結果，状態密度 $\Omega_{1+2}(E)$ のラプラス変換，を考えることができる．しかし， $e^{-E/k_B T} = e^{-\beta E}$ は，温度 T の「大きな熱浴」のもとに系を置く意味を持つから，考えるべき状況は，これまでの§8-5 の図 8-2 ではなくなる．図 A7-1 に示す

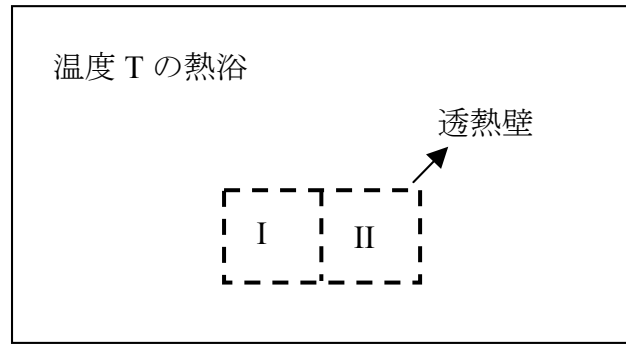


図 A7-1. 状態密度 $\Omega_{1+2}(E)$ のラプラス変換を考えることは，「弱い結合系(I+II)」を熱浴に浸すことに対応する． §8 の図 8-2 で考えた状況とは異なることに注意．

ように「弱い結合系(I+II)」全体を熱浴の下に置くことを考えねばならない．このように，状態密度 $\Omega_{1+2}(E)$ のラプラス変換を考えることは，合成系を熱浴に浸すことであり， §8-5 で考えたこれまでの状況とは全く異なることに注意されたい．このような「弱い結合系(I+II)」に対する分配関数（状態和） Z_{1+2} は次のようになる：

$$Z_{1+2} = \int_0^{\infty} e^{-\beta E} \Omega_{1+2}(E) dE = \int_0^{\infty} e^{-\beta E} \left[\int_0^E \Omega_1(E_1) \Omega_2(E - E_1) dE_1 \right] dE. \quad (\text{A7-4})$$

この右辺は 2 重積分である． (A7-4) は，まず $E_1 = 0 \rightarrow E_1 = E$ まで積分し，この

後で、 $E = 0 \rightarrow E = \infty$ と積分することを意味している。この二重積分は、図 A7-1 の(A)に示すように、まず縦棒の大きさを決めるように積分し、その積分量を横の順に加えると理解すれば良い。この二重積分の順序を交換すると、それは図 A7-1 の(B)のように積分することになる。まず横棒の大きさを決めるように積分し、これらの横棒を縦の順に加算する。この順序を交換した積分結果は、

$$Z_{1+2} = \int_0^{\infty} \left[\int_{E_1}^{\infty} e^{-\beta E} \Omega_1(E_1) \Omega_2(E - E_1) dE \right] dE_1 \quad (\text{A7-5})$$

と表現出来る。両積分は同じ結果を与えるはずである。

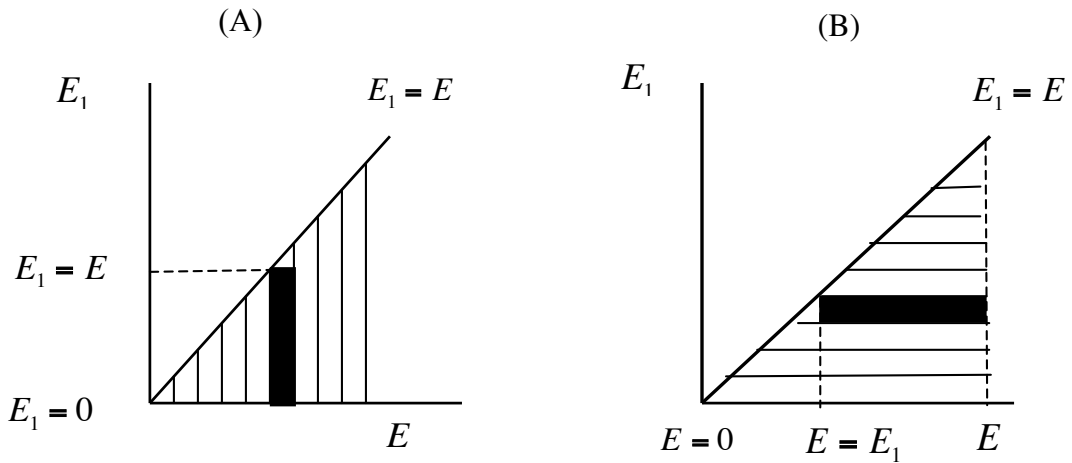


図 A7-1. 二重積分に於ける積分順序の変更。

次に、 $E = E_1 + E_2$ であるから、 $E - E_1 = E_2$ と変更し、 E_2 を変数とすると、 $E = E_1 \sim \infty$ の積分範囲は $E_2 = 0 \sim (\infty - E_1)$ の範囲に変わり、 $dE = dE_2$ だから

$$\begin{aligned} Z_{1+2} &= \int_0^{\infty} \left[\int_0^{\infty - E_1} e^{-\beta(E_1 + E_2)} \Omega_1(E_1) \Omega_2(E_2) dE_2 \right] dE_1 \\ &= \int_0^{\infty} e^{-\beta E_1} \Omega_1(E_1) \left[\int_0^{\infty - E_1} e^{-\beta E_2} \Omega_2(E_2) dE_2 \right] dE_1 \end{aligned} \quad (\text{A7-6})$$

となる。最後の式における $E_2 = 0 \sim (\infty - E_1)$ の積分は、 $E_2 = 0 \sim \infty$ の積分に置き換えることができる。その理由は、被積分関数が因子 $e^{-\beta E_2}$ を持つので、充分大

きな E_2 に対しては $e^{-\beta E_2} \rightarrow 0$ であり，両者の違いは無視できるからである．二つの積分変数は分離され，

$$(A7-6) = \int_0^{\infty} e^{-\beta E_1} \Omega_1(E_1) dE_1 \int_0^{\infty} e^{-\beta E_2} \Omega_2(E_2) dE_2 \quad (A7-7)$$

となる．即ち，

$$Z_{1+2} = \int_0^{\infty} e^{-\beta E} \Omega_{1+2}(E) dE = \int_0^{\infty} e^{-\beta E_1} \Omega_1(E_1) dE_1 \int_0^{\infty} e^{-\beta E_2} \Omega_2(E_2) dE_2 = Z_1 Z_2 \quad (A7-8)$$

である．「合成系の状態密度のラプラス変換は，合成系をなす元の二つの状態密度のラプラス変換の積に等しい」．これは，「合成積（convolution）のラプラス変換は合成積をなす二つの関数のラプラス変換の積に等しい」との「ラプラス変換の合成定理」の一例になっている．(A7-3)の $h(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau$ で述べれば，

$$\int_0^{\infty} e^{-st} h(t) dt = \left(\int_0^{\infty} e^{-sx} f(x) dx \right) \left(\int_0^{\infty} e^{-sy} g(y) dy \right) \quad (A7-9)$$

である．

$$\int_0^{\infty} e^{-st} h(t) dt = \int_0^{\infty} e^{-st} \left\{ \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau \right\} dt \quad (A7-10)$$

が(A7-9)右辺に等しいことは，上述の(A7-7)と同じように証明出来る^{5 5, 5 6, 5 7)}．

合成系が三つの部分系からなるときは，(A7-8)をもう一回繰り返せば良い．

$$Z_{1+2+3} = Z_{(1+2)+3} = (Z_1 Z_2) Z_3 = Z_1 Z_2 Z_3 \quad (A7-11)$$

となる． $N=3$ として，3つの粒子からなる系の分配関数を $Z(\beta, V, N=3)$ とする時，この系は三つの一粒子系の「弱い結合」系と考えることができれば，「弱い結合」系の分配関数 $Z(\beta, V, N=3)$ と1粒子系分配係数 $Z(\beta, V, N=1)$ との関係は，(A7-11)により，

$$Z(\beta, V, 3) = Z(\beta, V, 1) \cdot Z(\beta, V, 1) \cdot Z(\beta, V, 1) = [Z(\beta, V, 1)]^3$$

となる。従って、 N 粒子系が N 個の一粒子系の「弱い結合」系であれば、

$$Z(\beta, V, N) = [Z(\beta, V, 1)]^N \quad (\text{A7-12})$$

である。 N 粒子系の分配関数は、1 粒子系分配関数 $Z(\beta, V, N=1)$ で与えられることになるが、巨視的結晶を調和振動子の 1 粒子系分配関数から記述する場合は該当する。巨視的結晶の調和振動子は相互に区別できるからである。気体分子のような非局在系では、1 粒子系分配関数 $Z(\beta, V, N=1)$ の N 乗を粒子数 N の階乗で割る Gibbs の補正が必要である。

また、二原子分子などの分子全体のエネルギーは、一般に、並進、回転、振動、電子状態、核状態の各エネルギー成分の和として近似的に表現できる。

$$E_{\text{tot.}} = E_{\text{trans}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{elec}} + E_{\text{nuclear}} \quad (\text{A7-13})$$

このような場合、分子の分配関数は、以下のように、各成分の分配関数の積として、

$$Z_{\text{tot.}} = Z_{\text{trans}} \cdot Z_{\text{rot}} \cdot Z_{\text{vib}} \cdot Z_{\text{elec}} \cdot Z_{\text{nuclear}} \quad (\text{A7-14})$$

と表現できる。 Z_{trans} は分子全体の並進運動に関する分配関数で、これは単原子ガスの分配関数として既に既に議論したものに相当する。 Z_{trans} 以外の残りは $Z_{\text{rot}} \cdot Z_{\text{vib}} \cdot Z_{\text{elec}} \cdot Z_{\text{nuclear}}$ となるが、これは一括して「内部自由度」に対する分配関数 Z_{int} と呼ばれる。

$$Z_{\text{int}} = Z_{\text{rot}} \cdot Z_{\text{vib}} \cdot Z_{\text{elec}} \cdot Z_{\text{nuclear}} \quad (\text{A7-15})$$

内部自由度に対する分配関数は § 10 で議論する。

付録 8. 平面波，波数ベクトル，周期的境界条件

1) x 軸方向に伝播する単色平面波

一様な媒質中を， x 軸方向に位相速度 u で伝播する平面波について復習する．角周波数が ω である単色の平面波は，軸上の座標を x として，次のような式で書ける．

$$\psi(x,t) = a \cos[\omega(x/u) - t + \delta] \quad (\text{A8-1})$$

この式の意味を考えよう．

$\psi(x,t)$ は，電磁場の場合は，電場・磁場の強さであるが，水面を伝わる平面波なら $\psi(x,t)$ は基準水面からの水面の垂直変位，音波なら密度変化量，などとなる．いずれも，何らかの状態変化を指定する物理量を表す．余弦関数の引数値である $\{\omega(x/u) - t + \delta\}$ は位相と呼ばれる． δ は $t=0$ 、 $x=0$ とした時に決まる位相であるから特に初期位相と呼ばれる． a は振幅を表す定数である．

ある時刻 t_0 に，ある平面上の点が，全て等しい $\{\omega(x/u) - t_0 + \delta\}$ の値，即ち，位相，を持っているなら，その平面上では物理量 $\psi(x,t)$ は全て等しく，同一の状態となっている．このような平面を等位相面と呼ぶ．(A8-1) の場合は， t の値はどの点でも共通しているので， $x=\text{const.}$ で指定される x 軸に垂直な平面が等位相面である．(A8-1) での等位相面の条件は，

$$\omega\{(x/u) - t\} + \delta = \text{const.} \quad (\text{A8-2})$$

である．しかし， ω ， δ ， u は定数なので，

$$x = u \cdot t + \text{const.} \quad (\text{A8-3})$$

が等位相面の条件である．これは u が，等位相面の移動速度，即ち，位相速度

であることを表している。

(8-1)の余弦関数の変数は t と x であるので、波動は時間的にも、空間的にも、周期性を示す。時間の周期性から、次の条件を満たす時間間隔の定数 T が存在する。

$$\psi(x,t) = \psi(x,t+T), \quad (\text{A8-4})$$

即ち、

$$\cos[\omega\{(x/u) - t\} + \delta] = \cos[\omega\{(x/u) - (t+T)\} + \delta] \quad (\text{A8-5})$$

この条件から、 $\omega T = 2\pi$ であり、 $\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$ となる。 T は同じ状態が繰り返される最小時間間隔、すなわち周期である。 ω は角周波数、 $\nu = 1/T$ は振動数である。

空間の周期性の条件から、波動の空間的繰り返しの最小間隔の定数、波長(λ) が得られる。

$$\psi(x,t) = \psi(x+\lambda,t) \quad (\text{A8-4})$$

$$\cos[\omega\{(x/u) - t\} + \delta] = \cos[\omega\{(x+\lambda)/u - t\} + \delta] \quad (\text{A8-5})$$

この条件は、 $\omega\lambda/u = 2\pi$ であるから、 $\lambda = 2\pi \cdot u/\omega = u/\nu$ 、即ち、 $u = \lambda\nu$ で、位相速度と波長・振動数の関係が得られる。光の場合は、光の位相速度 c として、 $c = \lambda\nu$ である。

(A8-1) の $\psi(x,t) = a \cos[\omega\{(x/u) - t\} + \delta]$ は、振動数と位相速度を使えば、 $\omega = 2\pi\nu$ であるから、

$$\psi(x,t) = a \cos[(2\pi\nu)\{(x/u) - t\} + \delta] \quad (\text{A8-1}')$$

である。波長と位相速度を使えば、 $\omega = (2\pi/\lambda)u$ であるから、

$$\psi(x,t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(x - ut) + \delta]. \quad (\text{A8-1}'')$$

そこで、 $\delta = 0$ として、 $\psi(x, t = 0) = a \cos[(2\pi/\lambda)x]$ と $\psi(x, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(x - ut)]$ の二つの波形を、 t を変数ではなくパラメーターと考えて、図に描くと、図 A8-1 ようになる。 $\psi(x, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(x - ut)]$ は $\psi(x, t = 0) = a \cos[(2\pi/\lambda)x]$ を x の正方向に ut だけ平行移動したもの、即ち、元々の x に $(x - ut)$ を代入した式であることが判る。 $\psi(x, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(x - ut)]$ は、 x 方向に進む平面波だからである。

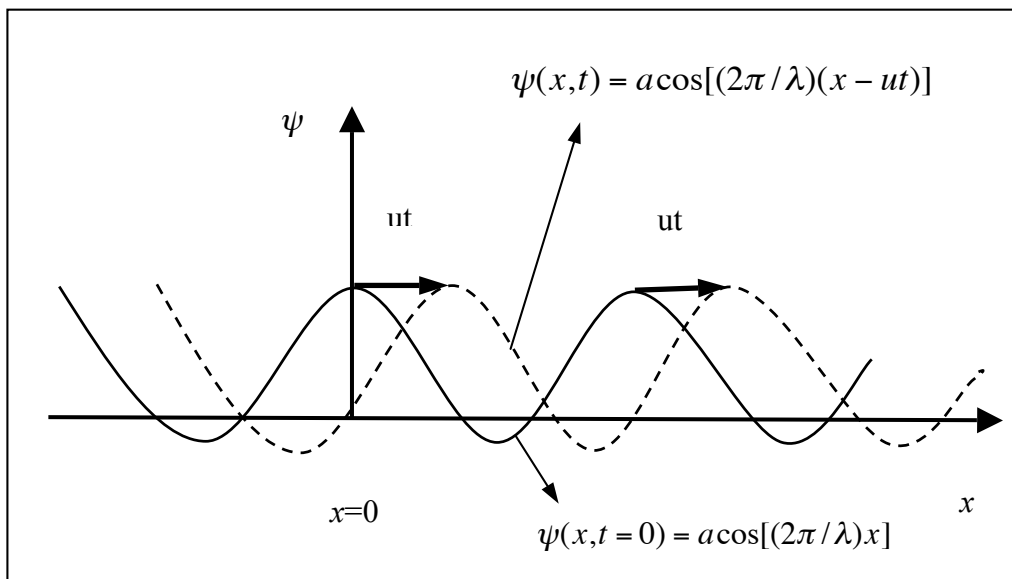


図 A8-1. 位相を異にする二つの x 方向に進行する平面波.

2) 一般の方向に伝播する単色平面波

特定の軸方向ではなく、一般の方向 (x' 軸方向) に伝播する単色平面波を、図 A 8-2 を参照して考える。 x' 軸は (A8-1) の x 軸と同等であるので、 x を x' に置き換えて考えれば良い。

$$\psi(x', t) = a \cos[\omega\{(x'/u) - t\} + \delta] \quad (\text{A8-6})$$

x' の値は、伝播方向に沿った (0→Q) の距離であり、これに垂直な等位相面 (S)

上の点は全て同一の値を与えることになる．点 P は等位相面 (S) の点を代表している． $O \rightarrow P$ の $O-Q-x'$ 軸への正射影が $O \rightarrow Q$ であるから、これは、進行方向の単位ベクトル (\vec{l}) と点 P の位置ベクトル (\vec{r}) との内積である．

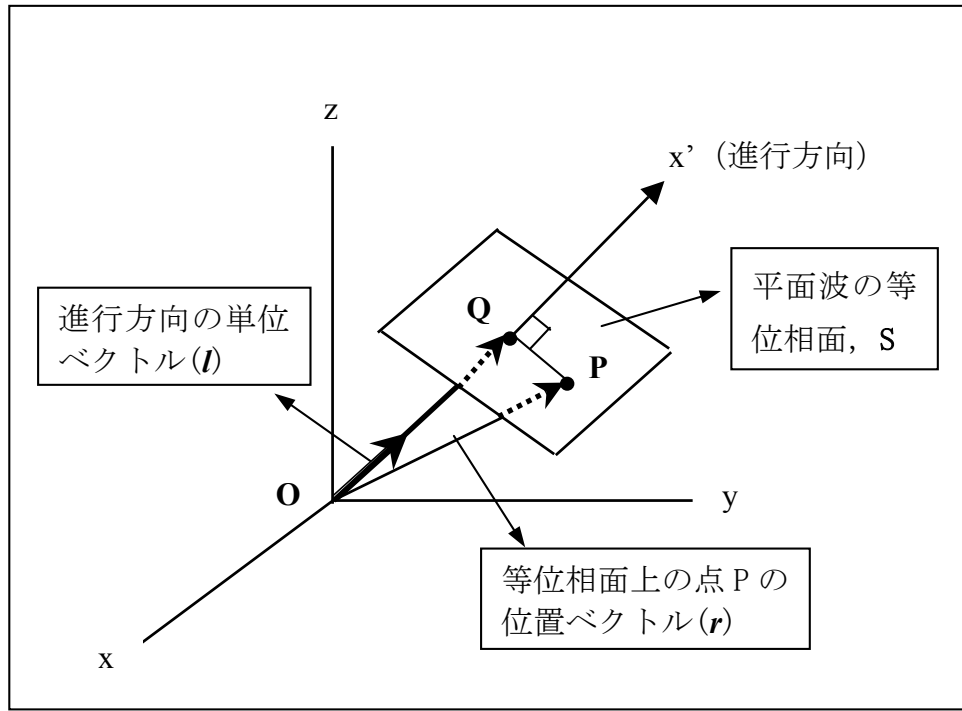


図 A8-2. 一般の方向 (x' 軸方向) に伝播する単色平面波

従って、

$$\psi(\vec{r}, t) = a \cos[\omega\{(\vec{l} \cdot \vec{r})/u - t\} + \delta] \quad (\text{A8-7})$$

と表現できる． $\omega \cdot t$ はそのままにして、 $\{\omega(\vec{l} \cdot \vec{r})/u\}$ を先ほどの、 $\lambda = 2\pi \cdot u/\omega$ から、 $\omega/u = 2\pi/\lambda$ となるので、この関係式を使って書き換えると、

$$\psi(\vec{r}, t) = a \cos[\{(\vec{l} \cdot \vec{r})\omega/u - \omega \cdot t\} + \delta] = a \cos[\{(\vec{l} \cdot \vec{r})(2\pi/\lambda) - \omega \cdot t\} + \delta] \quad (\text{A8-9})$$

となる．ここで、

$$(\vec{l} \cdot \vec{r})(2\pi/\lambda) = ((2\pi/\lambda)\vec{l} \cdot \vec{r}) = (\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{A8-10})$$

と書く、即ち、進行方向を表す単位ベクトル \vec{l} を波長 λ で割り、 2π 倍したも

のを波数ベクトル,

$$\vec{k} = (2\pi/\lambda)\vec{l} \quad (\text{A8-11})$$

と定義する. その結果、(8-9)は,

$$\psi(\vec{r}, t) = a \cos[\{(\vec{k} \cdot \vec{r}) - \omega \cdot t\} + \delta] \quad (\text{A8-12})$$

となる. 波数ベクトル (\vec{k}) の大きさは, $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ で, その向きは波動の伝播方向である. $(\vec{k} \cdot \vec{r})$ は, 座標原点 0 と等位相面との距離 ($0 \rightarrow Q$) に, 何個の波が収まっているかを表す数を 2π 倍したものである. 波の数を表すので波数ベクトルと呼ぶ. (8-11)は、複素数の表現 ($e^{ix} = \cos x + i \cdot \sin x$) に直して利用されることが多い.

$$\psi(\vec{r}, t) = ae^{i[(\vec{k} \cdot \vec{r}) - \omega t + \delta]}$$

となる. しかし, 初期位相に関する項を複素数の振幅として, $A = ae^{i\delta}$, とすれば,

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (\text{A8-12})$$

となり, 簡素な平面波の波動公式が得られる.

3) 平面波と周期的境界条件

一次元の x 軸方向への進行波に対する周期的境界条件を考える. 一次元ループの両端の座標を $x=0$ と $x=L$ とし, (A8-1), 又は, (A8-1")で考える.

$$\psi(x, t) = a \cos[\omega\{(x/u) - t\} + \delta], \quad \psi(x, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(x - ut) + \delta]$$

(A8-1")を使い, $x=0$ と $x=L$ での ψ が同一であるとの条件を課すと,

$$\psi(0, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(-ut) + \delta] = \psi(L, t) = a \cos[(2\pi/\lambda)(L - ut) + \delta]. \quad (\text{A8-13})$$

従って、

$$\cos[(2\pi/\lambda)(-ut) + \delta] = \cos[(2\pi/\lambda)(L - ut) + \delta]$$

が成立すればよい． n を 0 を除く正負の任意の整数として、

$$(2\pi/\lambda)(L - ut) + \delta = (2\pi/\lambda)(-ut) + \delta + 2n\pi$$

であるから、結局、

$$(L/\lambda) = n \quad (n \text{ は } 0 \text{ を除く正負の任意の整数}) \quad (\text{A8-14})$$

となる．許される平面波の波長で考えれば、

$$\lambda = (L/n) \quad (n \text{ は } 0 \text{ を除く正負の任意の整数})$$

となるが、波長は正でないと困るので、結局

$$\lambda = (L/n) \quad (n \text{ は } 0 \text{ を除く正の任意の整数}) \quad (\text{A8-15})$$

を満足する平面波が許される．

$$\lambda = L, (L/2), (L/3), \dots, L/n \quad (\text{A8-16})$$

許される最大の n は有限の整数と考える．これは、最小の波長 $\lambda = (L/n)$ を持つ平面波まで考慮することを意味するが、媒体物質を構成する物質の繰り返し単位より短い波長を考えても意味がないからである．従って、波長が異なる平面波の総数 N は、 n 個となる．

ループの正方向 (x 軸方向) への進行波だけではなく、負の方向にも伝播する平面波も存在できるから、

$$\psi(0,t) = a\cos[(2\pi/\lambda)(+ut) + \delta] = \psi(L,t) = a\cos[(2\pi/\lambda)(L + ut) + \delta] \quad (\text{A8-13}')$$

として、同様の結果を得る．

結局、許される波長の異なる平面波の総数 N は、 $N = 2n = 2(L/\lambda)$ 個となる．

以上の議論を光の振動数で考えれば、光の位相速度を c として、 $\lambda = c/\nu$ である

から, (8-16)は,

$$c/v = L, (L/2), (L/3), \cdots, L/n$$

である. 振動数の順番に直すと,

$$v = (c/L), (2c/L), (3c/L), \cdots, (nc/L) \quad (\text{A8-17})$$

最大の振動数を $v = (nc/L)$ とすると, 許される全ての振動数 N は, 正負の両方向の光を考えて, $2n$ 個となるから, 全ての異なる振動数の個数 N は

$$N = 2L(v/c)$$

となる.

一辺が L の立方体中を一般の方向に進む平面波に, 周期的境界条件を課する場合は, (A8-12) の $\psi(\vec{r}, t) = a \cos[\{(\vec{k} \cdot \vec{r}) - \omega \cdot t\} + \delta]$ で,

$$\vec{r} = (0, 0, 0) \text{ と } \vec{r} = (L, 0, 0) \text{ で, } \psi \text{ が同一,} \quad (\text{A8-18})$$

$$\vec{r} = (0, 0, 0) \text{ と } \vec{r} = (0, L, 0) \text{ で, } \psi \text{ が同一,} \quad (\text{A8-19})$$

$$\vec{r} = (0, 0, 0) \text{ と } \vec{r} = (0, 0, L) \text{ で, } \psi \text{ が同一,} \quad (\text{A8-20})$$

との条件を考える.

(A8-12) と (A8-18) から, $\cos[\{-\omega \cdot t\} + \delta] = \cos[\{(k_x \cdot L) - \omega \cdot t\} + \delta]$ であるから, n_x を整数として, $(k_x \cdot L) = 2\pi \cdot n_x$ が得られる. 同様の結果が (A8-19), (A8-20) から也得られる、即ち、

$$k_x = 2\pi(n_x/L), \quad k_y = 2\pi(n_y/L), \quad k_z = 2\pi(n_z/L) \quad (\text{A8-21})$$

が得られる. 波数ベクトルの大きさは, (A8-11) から, $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ であるので,

$$(\vec{k})^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = (2\pi/\lambda)^2 = (2\pi/L)^2(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

となる. 即ち,

$$(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = (L/\lambda)^2 = (Lv/c)^2 \quad (\text{A8-22})$$

この式は $m = (Lv/c)$ を半径とする球の方程式である．これを満足する整数の組 (n_x, n_y, n_z) を三次元の格子点で表した時、半径が $m = (Lv/c) = (L/\lambda)$ である球面上にある格子点が (A8-22) を満足している．整数は 0 を除く正負の整数を考える．正負は正方向と負方向の二つの波数ベクトルを考えることに対応する．下図は、これを 2 次元で見た場合を模式的に表している．

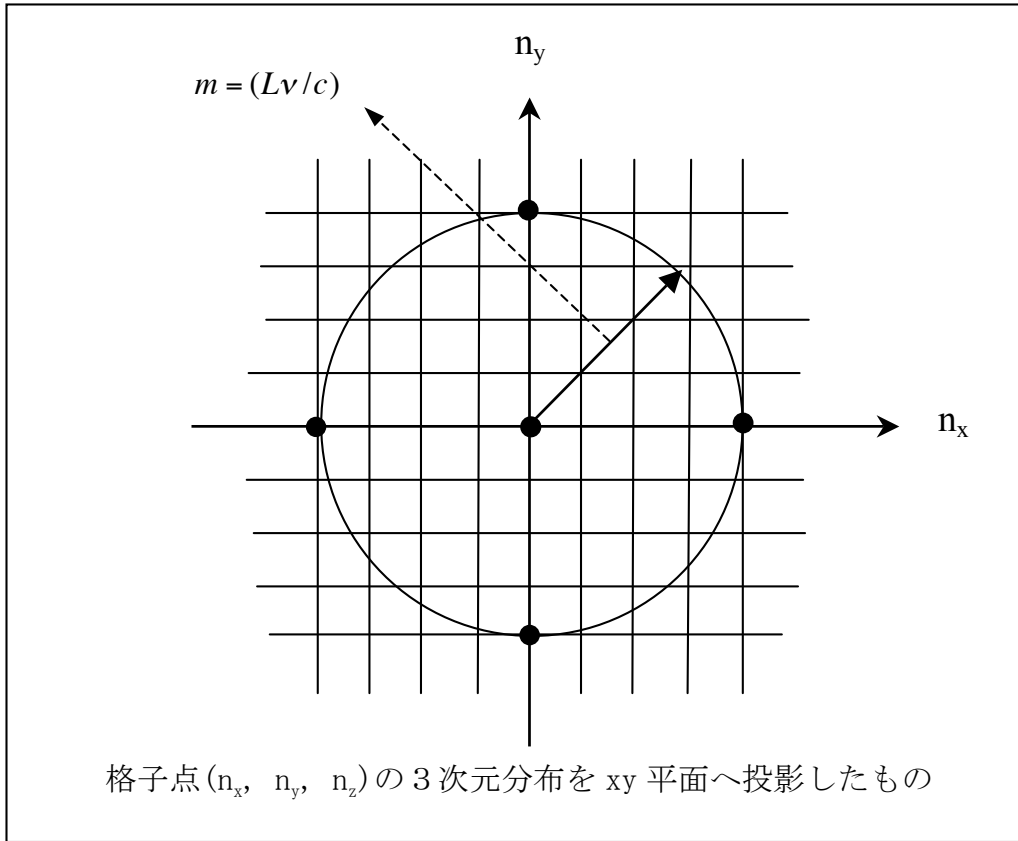


図 A8-3. $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = (L/\lambda)^2 = (Lv/c)^2$ を満足する格子点 (n_x, n_y, n_z) の 3 次元分布を xy 平面に投影して結果で見たもの．

この球の内部に位置する格子点の個数が、周期的境界条件で許されるすべての平面波の個数 N に等しいことになる．その理由は、振動数が $\nu = (c/L)m$ より

小さな振動数の平面波に対応する (n_x, n_y, n_z) の格子点は、半径が $m = (Lv/c)$ より小さな球面上にあるからである。球の半径が大きくなると、(表面積／体積) の比は急速に減少するから、許されるすべての平面波の個数 N は球の内部の格子点の数に等しいとして良い。原点の格子点は除いて考えるので、本当は、内部の格子点数から 1 を差し引かねばならないが、 N は非常に大きいから、これも無視できる。結局、図からわかるように、 (n_x, n_y, n_z) の格子点の座標は、それぞれ $(\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$ であるから、これらは、数直線上の整数座標値で、 N は $m = (Lv/c)$ を (無次元の) 半径とする球の体積に等しい。

$$N = \frac{4\pi}{3}(L/\lambda)^3 = \frac{4\pi}{3}(Lv/c)^3 = \frac{4\pi}{3}(v/c)^3 V \quad (\text{A8-23})$$

である。 $V=(L)^3$ は周期的境界条件を課した立方体の実際体積である。

$L=1\text{ cm}=1\times 10^{-2}\text{ m}$ として、立方体を考え、 $\lambda=590\text{ nm}=5.9\times 10^{-7}\text{ m}$ の黄色の光を考えると、

$$N = 4.18 \times [10^{-2} / (5.9 \times 10^{-7})]^3 = 4.18 \times (0.17 \times 10^5)^3 \approx 2 \times 10^{13}$$

となり、 N は非常に大きな値である。

平面波、波数ベクトル、平面波の周期的境界条件は、固体物性を量子論から議論する際の基礎である。ただし、量子論で $\psi(\vec{r}, t)$ が意味するものは、Schrödinger 方程式が前提とする確率波としての「波動関数」である。波動関数は境界条件に依存している。

§ 6-3-3 では、「長さ L の立方体内に存在する 1 個の自由粒子の量子状態 (微視的状态) は、 (n_x, n_y, n_z) の三つの量子数の組がこれを指定する」ことを議論した。そこでは、1 個の自由粒子が長さ L の立方体内に封じ込まれているとの境

界条件を採用した．その時に用いた図 6-6 は，ここでの図 A8-3 の第一象限に当る．実際の 3 次元では，図 6-6 の状況は図 A8-3 の場合の $(1/2)^3 = 1/8$ に当る．§ 6-3-3 で考えた問題を，波動関数を平面進行波として，周期的境界条件を用いて解くことも出来る．実は， $W(0,E)$ については同じ結果 § 6-(74-1)

$$W(0,E) = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{V}{(\pi\hbar)^3} \cdot (2mE)^{3/2} \quad \text{§ 6-(74-1)}$$

が得られる²⁾． $W(0,E)$ は，立方体内に存在する 1 個の自由粒子が取り得る離散的な量子状態について，エネルギーが E 以下である全ての量子状態（微視的状态）の数である．§ 6-3-3 にも記したように，§ 6-(74-1) の右辺の分母で $(\pi\hbar)^3 \rightarrow (2\pi\hbar)^3 = 8(\pi\hbar)^3$ と変更すると，全体の係数 $(1/8) = (1/2)^3$ は不要になるので，

$$W(0,E) = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot (2mE)^{3/2} \quad \text{§ 6-(74-2)}$$

となる．これが平面進行波の周期的境界条件から得られる直接の表現である．

§ 6-(74-1) とは同じ内容である． $2\pi\hbar = 2\pi(h/2\pi) = h$ であるから，

$$W(0,E) = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{V}{h^3} \cdot (2mE)^{3/2} \quad \text{§ 6-(74-3)}$$

とも表現できる．

希薄な自由粒子ガスに対してエネルギーが E 以下である全ての量子状態（微視的状态）の数を考える場合，「平面進行波の周期的境界条件」と「1 個の自由粒子が立方体内に封じ込まれているとの境界条件（定在波の条件）」は同じ結果を与える．しかし，どちらがより適切な境界条件であるかは，長岡のテキスト²⁾での議論を参照されたい．

付録9 総和の制限付き多重和と制限無し多重和

$x^m \cdot y^n$ を例にして、 $x^m \cdot y^n$ の多重和を取る際に、**a)** 総数 $m+n=N$ についての拘束条件はなく、 m も n も独立に和を取ることが出来る場合、**b)** 総数が $m+n=N$ と固定されている場合、を具体例で考えてみる．そして、**c)** 総和 N 固定の多重和について、さらに N に関する和を取ると、その結果は **a)** の条件無しの多重和になることを確認しよう^{1,2)}． 以上の三つの場合は以下のように表記出来る．

$$S_a = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m \cdot y^n \quad (\text{A9-1})$$

$$S_b = \sum_{\substack{m=0 \\ (m+n=N)}}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m \cdot y^n \quad (\text{A9-2})$$

$$S_c = \sum_{N=0}^{\infty} S_b = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\sum_{\substack{m=0 \\ (m+n=N)}}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m \cdot y^n \right) = S_a \quad (\text{A9-3})$$

$x^m \cdot y^n$ では、 $|x| < 1$, $|y| < 1$ であると考える． $|x| < 1$ の等比級数の公式から

$$S_m = 1 + x + x^2 + \cdots + x^m = \frac{1 - x^{m+1}}{1 - x}, \quad \sum_{m=0}^{\infty} x^m = \frac{1}{1 - x}$$

を前提とする．

まず(A9-1)は、 m と n については独立に和を取れるから、

$$S_a = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m y^n = \sum_{m=0}^{\infty} x^m \sum_{n=0}^{\infty} y^n = \frac{1}{1-x} \cdot \frac{1}{1-y} \quad (\text{A9-4})$$

である．

(A9-2)については、 N に依存するので、 $S_b(N)$ と表記すると

$$N=0 \text{ では } (m,n)=(0,0) \text{ のみで, } S_b(N=0) = 1$$

$$N=1 \text{ では } (m,n)=(1,0), (0,1) \text{ だけで, } S_b(N=1) = x + y = \frac{x^2 - y^2}{x - y}$$

N=2 では (m,n)=(2, 0),(1, 1), (0, 2)だけで,

$$S_b(N=2) = x^2 + xy + y^2 = \frac{x^3 - y^3}{x - y}$$

N=3 では (m,n)=(3, 0),(2, 1), (1,2),(0, 3)だけだから,

$$S_b(N=3) = x^3 + x^2y + xy^2 + y^3 = (x^2 + y^2)(x + y) = \frac{x^4 - y^4}{x - y}$$

従って, N=N では

$$S_b(N) = \frac{x^{N+1} - y^{N+1}}{x - y} \quad (\text{A9-5})$$

である.

(A9-3)を確認するために, (A9-5)を用いて, N についての総和をとると,

$$\begin{aligned} S_c &= \sum_{N=0}^{\infty} \left(\sum_{\substack{m=0 \\ (m+n=N)}}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m \cdot y^n \right) = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\frac{x^{N+1} - y^{N+1}}{x - y} \right) \\ &= \frac{1}{x - y} \left(x \sum_{N=0}^{\infty} x^N - y \sum_{N=0}^{\infty} y^N \right) = \frac{1}{x - y} \cdot \left(\frac{x}{1 - x} - \frac{y}{1 - y} \right) = \frac{1}{(1 - x)(1 - y)} \\ &= S_a = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} x^m \cdot y^n \end{aligned} \quad (\text{A9-6})$$

となる. このように, 確かに(A9-3)が成立する.

付録 10. 理想フェルミ気体の化学ポテンシャルとエネルギーの温度依存性

1) 化学ポテンシャルの温度依存性

§ 14-4 や § 15-2 で述べたように、体積 V の中に N 個の自由粒子があるとする
と、エネルギー範囲 $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ に含まれる 1 粒子量子状態数は、

$$\Omega(\varepsilon)d\varepsilon = g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \varepsilon^{1/2} \cdot d\varepsilon \quad \text{§ 14-4 (32)}$$

であるから、これにフェルミ粒子の平均占有数 $\bar{n}_r = \bar{n}(\varepsilon)$ を掛けた結果
 $\bar{n}(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon)d\varepsilon$ が、エネルギー範囲 $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ を占有するフェルミ粒子数になる。

フェルミ粒子の平均占有数 $\bar{n}_r = \bar{n}(\varepsilon)$ は、

$$\bar{n}_r = \frac{e^{-(\varepsilon_r - \mu)/k_B T}}{1 + e^{-(\varepsilon_r - \mu)/k_B T}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_r - \mu)/k_B T} + 1} \quad \text{§ 14-3 (24)}$$

で、ここではエネルギー ε を連続変数で考え、 $\bar{n}_r = \bar{n}(\varepsilon)$ とするので、

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1} \quad \text{§ 15-2 (5)}$$

従って、§ 15-2 で指摘したように、エネルギー ε でのフェルミ粒子の平均占有
数 $\bar{n}(\varepsilon)$ と量子状態密度 $\Omega(\varepsilon)$ との積を全エネルギー範囲 ($0 \sim \infty$) で積分した結
果が全粒子数 N である。

$$N = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} \bar{n}(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1} \cdot d\varepsilon \quad \text{§ 15-2 (6)}$$

§ 15-2 では、これが化学ポテンシャル μ を $\mu(T, V, N)$ として定める積分方程式で
あると述べた。これから直ちに $\mu(T, V, N)$ を簡単な形に変換することはできない
が、 T がフェルミ温度絶対 T_f と比べると十分に絶対 0 度に近い低温であるとの条
件を使えば、(6)の積分方程式から $\mu(T, V, N)$ についての近似式 (§ 15-2-(10)) を導
くことが出来る。この考え方は、フェルミ粒子の熱容量が温度の一次式で近似

できること、にも対応する。

§ 14-4 で議論したように、エネルギーが $0 \sim E$ の範囲に入る微視的状态数 $W(0, E)$ は,

$$W(0, E) = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{V}{(\pi\hbar)^3} \cdot (2mE)^{3/2} \quad \text{§ 6-3-3-(74-1)}$$

である。 $W(0, E)$ は状態数の積算値あり、粒子数ではないことに注意。 § 10 以前では、電子（フェルミ粒子）のスピンの縮退数（ $g = 2$ ）については、考慮していなかったので、以下では g を掛けて考える。

$$W(0, E) = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot g \cdot \frac{V}{(\pi\hbar)^3} \cdot (2mE)^{3/2} \quad (\text{A10-1})$$

状態密度と微小エネルギー範囲の積である $\Omega(E)\Delta E$ に直すと,

$$\Omega(E)\Delta E = \frac{dW(0, E)}{dE} \Delta E = g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot \Delta E \quad (\text{A10-2})$$

である。これを、 $E \rightarrow \varepsilon$, $\bar{n}(\varepsilon) = f(\varepsilon)$ として § 15-2 (6) に使うと,

$$N = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \frac{dW(0, \varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{A10-3})$$

である。この右辺を I と置くことにして、部分積分を実行すると,

$$\begin{aligned} I &= \int_{\varepsilon=0}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \frac{dW(0, \varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \\ &= [W(0, \varepsilon) \cdot f(\varepsilon)]_0^{\infty} + \int_{\varepsilon=0}^{\infty} W(0, \varepsilon) \cdot [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon \\ &= \int_{\varepsilon=0}^{\infty} W(0, \varepsilon) \cdot [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon \end{aligned} \quad (\text{A10-4})$$

第一項は、 $W(0, 0) = 0, f(\infty) = 0$ であるから、消える。また、 $-f'(\varepsilon)$ は,

$$-f'(\varepsilon) = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}}{[e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1]^2} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1}{[e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1] \cdot [e^{-(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1]} \quad (\text{A10-5})$$

である。この関数は $(\varepsilon - \mu)$ についての偶関数である。 $\varepsilon = \mu$ では $-f'(\varepsilon)_{\varepsilon=\mu} = \frac{1}{4k_B T}$

であるが, $\varepsilon \ll \mu$ 又は $\varepsilon \gg \mu$ では $-f'(\varepsilon) > 0$ で, $-f'(\varepsilon) \rightarrow 0$ である. (A10-5)

をもう一回 ε で微分すると,

$$[-f'(\varepsilon)]' = -f''(\varepsilon) = \frac{-1}{(k_B T)^2} \cdot \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} [e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} - 1]}{[e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1]^3} \quad (\text{A10-6})$$

となる. $\varepsilon = \mu$ では $-f''(\varepsilon)_{\varepsilon=\mu} = 0$ であり, $\varepsilon < \mu$ では $-f''(\varepsilon)_{\varepsilon=\mu} > 0$, $\varepsilon > \mu$ では $-f''(\varepsilon) < 0$ であるから, $-f'(\varepsilon)$ は $\varepsilon = \mu$ で正のピークを示す (図 A10-1 B).

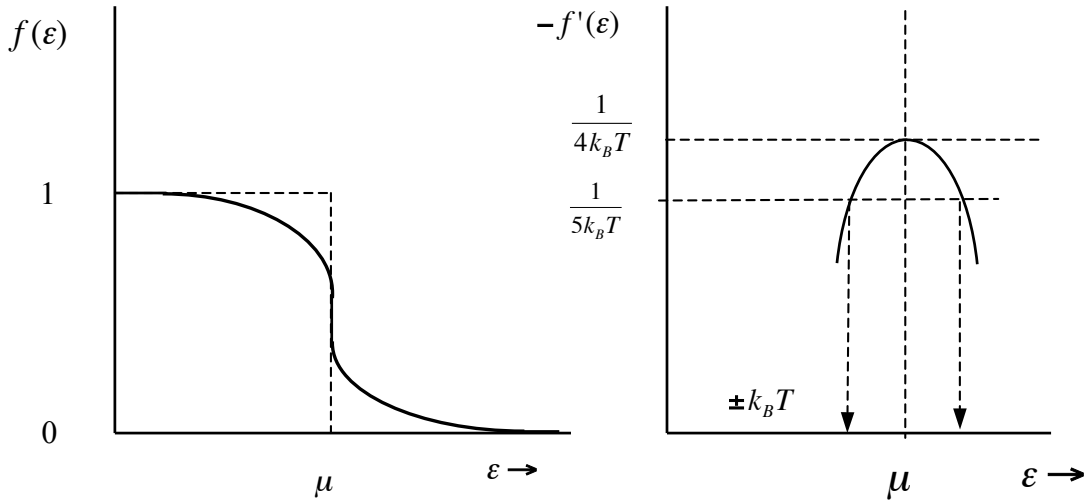


図 A10-1. A : $0 < T \ll T_f$ の温度条件におけるフェルミ分布関数 $f(\varepsilon)$.
B : フェルミ分布関数の微分に負符号を付けた $-f'(\varepsilon)$ は, $(\varepsilon - \mu)$ に関する偶関数で, $\varepsilon = \mu$ で正のピークを示す. $\varepsilon = \mu$ から $\pm k_B T$ だけ離れるとピーク値の 80% に低下し, $\pm 2(k_B T)$ では 40% まで低下する. $\varepsilon = \mu$ でのピークは鋭いピークである

(A10-4)は,

$$N = I = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} W(0, \varepsilon) \cdot [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon \quad (\text{A10-7})$$

の意味であること, さらに, $-f'(\varepsilon)$ は偶関数であり, $\varepsilon = \mu$ で鋭いピークを持つことを再確認しよう. 後者の理由から, (A10-7)の積分では $\varepsilon = \mu$ 付近の $W(0, \varepsilon)$ の

値だけが重要になるので、 $W(0, \varepsilon)$ を $\varepsilon = \mu$ で級数展開して、二次までの項を取ることにする。

$$W(0, \varepsilon) \approx W(0, \mu) + \left(\frac{\partial W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)_{\varepsilon=\mu}(\varepsilon - \mu) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2}\right)_{\varepsilon=\mu}(\varepsilon - \mu)^2 + \cdots \quad (\text{A10-8})$$

これを(A10-7)に代入するが、(A10-7)の積分では $\varepsilon = \mu$ 付近の $W(0, \varepsilon)$ の値だけが重要だから、積分の始点0は $-\infty$ に置き換えることも許される。その結果、(A10-8)の第二項は奇関数で偶関数の $-f'(\varepsilon)$ との積は奇関数であり、 $(-\infty, +\infty)$ の積分結果は0になる。だから、(A10-8)を(A10-7)に代入すると、

$$N = I = W(0, \mu) \int_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2}\right)_{\varepsilon=\mu} \int_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon \quad (\text{A10-9})$$

となる。右辺第一項については、

$$\int_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon = [-f(\varepsilon)]_{-\infty}^{+\infty} = 0 - (-1) = 1 \quad (\text{A10-10})$$

である。第二項の積分については、(A10-5)を代入して、 $x = (\varepsilon - \mu)/k_B T$ として、

$$\begin{aligned} \int_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon &= \int_{x=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 \left\{ \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1}{[e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1] \cdot [e^{-(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1]} \right\} d\varepsilon \\ &= (k_B T)^2 \int_{x=-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{(e^x + 1) \cdot (e^{-x} + 1)} dx \\ &= 2(k_B T)^2 \int_{x=0}^{\infty} \frac{x^2}{(e^x + 1) \cdot (e^{-x} + 1)} dx \end{aligned} \quad (\text{A10-11})$$

となる。最後の因子2は、偶関数の積分範囲を半分にしたことによる。ここで

の x に関する積分は、

$$\int_{x=0}^{\infty} \frac{x^2}{(e^x + 1) \cdot (e^{-x} + 1)} dx = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

ツェータ関数 $\zeta(z)$, $z=2$ に等しい^{2, 7, 24}。故に、

$$\int_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 [-f'(\varepsilon)] d\varepsilon = \frac{\pi^2}{3} \cdot (k_B T)^2 \quad (\text{A10-12})$$

(A10-10)と(A10-12)の結果を(A10-9)に戻すと,

$$N = I = W(0, \mu) + \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon = \mu} \quad (\text{A10-13})$$

となる. ところで, (A10-2) $\Omega(E)\Delta E = \frac{dW(0, E)}{dE} \Delta E$ の関係があるので,

$$\frac{\partial^2 W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} = \frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \quad (\text{A10-14})$$

である. また, 化学ポテンシャル μ を, 絶対 0 度の値 μ_0 を用いて, $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$ と表現すると,

$$W(0, \mu) = W(0, \mu_0) + \left(\frac{\partial W}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon = \mu_0} \Delta\mu = W(0, \mu_0) + \Omega(\mu_0) \Delta\mu \quad (\text{A10-15})$$

(A10-14)と(A10-15)を(A10-13)に代入し,

$$\left(\frac{\partial^2 W(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon = \mu} = \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon = \mu} \rightarrow \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon = \mu_0}$$

すると,

$$N = I = W(0, \mu_0) + \Omega(\mu_0) \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon = \mu_0} \quad (\text{A10-16})$$

である. 絶対 0 度付近の温度条件では, フェルミ粒子はフェルミ縮退により, $\varepsilon = \mu_0$ までのエネルギー準位をすべて占有していると近似的に考えて良い. 故に,

$$N \approx W(0, \mu_0) \quad (\text{A10-17})$$

従って, (A10-16)は,

$$0 = \Omega(\mu_0) \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon = \mu_0}$$

となり,

$$\Delta\mu = -\frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left[\frac{(\partial \Omega / \partial \varepsilon)_{\varepsilon = \mu_0}}{\Omega(\mu_0)} \right] \quad (\text{A10-18})$$

である. この両辺に μ_0 を加えると, 左辺は $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$ となるから,

$$\mu = \mu_0 - \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left[\frac{(\partial \Omega / \partial \varepsilon)_{\varepsilon = \mu_0}}{\Omega(\mu_0)} \right] \quad (\text{A10-19})$$

(A10-2)の $\Omega(\varepsilon)$ から,

$$\left[\frac{(\partial \Omega / \partial \varepsilon)_{\varepsilon = \mu_0}}{\Omega(\mu_0)} \right] = \frac{1}{2\mu_0} = \frac{1}{2\varepsilon_f} \quad (\text{A10-20})$$

となる．絶対0度でのフェルミ粒子の化学ポテンシャル μ_0 は，フェルミ準位 ε_f のことである．また，フェルミ準位 ε_f はフェルミ温度と， $\varepsilon_f = k_B T_f$ の関係にあるから，(A10-19)は次のように表現出来る．

$$\mu = \varepsilon_f - \frac{\pi^2}{12} \cdot \frac{(k_B T)^2}{\varepsilon_f} \quad (\text{A10-21})$$

$$\mu = \varepsilon_f \cdot \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \cdot \frac{(k_B T)^2}{(\varepsilon_f)^2} \right] = \varepsilon_f \cdot \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \cdot \left(\frac{T}{T_f} \right)^2 \right] \quad (\text{A10-21}')$$

どちらの表現でも良いが，本文では(A10-21')を用いている．

2) エネルギーと熱容量の温度依存性

フェルミ粒子系の全エネルギーを E とすると，

$$E = \int_0^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{A10-22})$$

である．一方，1)での議論の基礎であった(A10-2)と(A10-3)は，

$$W(0, \varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \Omega(\varepsilon) d\varepsilon \quad \text{又は} \quad \partial W(0, \varepsilon) / \partial \varepsilon = \Omega(\varepsilon) \quad (\text{A10-2})$$

$$N = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{\varepsilon=0}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \frac{dW(0, \varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{A10-3})$$

である．(A10-22)の場合と比べると，

$$G(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \varepsilon \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon \quad \text{又は} \quad \partial G(\varepsilon) / \partial \varepsilon = \varepsilon \cdot \Omega(\varepsilon) \quad (\text{A10-23})$$

$$E = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{A10-24})$$

と対応する．従って， 1) の結果

$$N = I = W(0, \mu_0) + \Omega(\mu_0) \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu_0} \quad (\text{A10-16})$$

で，

$$\begin{aligned} W(0, \mu_0) &\rightarrow G(\mu_0) \\ \Omega(\mu_0) &\rightarrow \left(\frac{\partial G}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu_0} \\ \left(\frac{\partial \Omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu_0} &\rightarrow \left(\frac{\partial^2 G(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\mu_0} \end{aligned} \quad (\text{A10-25})$$

と置き換えれば良い．その結果は，

$$\begin{aligned} E &= \int_0^\infty \varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= G(\mu_0) + \left(\frac{\partial G}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu_0} \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\mu_0} \end{aligned} \quad (\text{A10-26})$$

となる．(A10-23)から，

$$G(\mu_0) = E_0, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu_0} = [\varepsilon \cdot \Omega(\varepsilon)]_{\varepsilon=\mu_0}, \quad (\text{A10-27-1})$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\mu_0} = [\Omega(\varepsilon)]_{\varepsilon=\mu_0} + \left[\varepsilon \cdot \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon} \right) \right]_{\varepsilon=\mu_0} \quad (\text{A10-27-2})$$

$G(\mu_0) = E_0$ については，後に説明する．これらを(A10-26)に代入し，さらに， 1)

の結果

$$\Delta\mu = -\frac{\pi^2}{6} \cdot (k_B T)^2 \cdot \left[\frac{(\partial \Omega / \partial \varepsilon)_{\varepsilon=\mu_0}}{\Omega(\mu_0)} \right] \quad (\text{A10-18})$$

も，(A10-26)に代入すると，

$$E(T) = E_0 + \frac{\pi^2}{6} \Omega(\mu_0) (k_B T)^2 \quad (\text{A10-28})$$

となる．このように理想フェルミ気体のエネルギーは， $0 < T \ll T_f$ の温度条件で

は，絶対温度の 2 乗の比例するが，絶対0度の値は0ではない．(A10-27-1)の

$G(\mu_0) = E_0$ について考えよう．絶対 0 度のエネルギーは，

$$E_{(T=0)} = \int_0^{\infty} [\varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot \Omega(\varepsilon)]_{(T=0)} d\varepsilon \quad (\text{A10-29})$$

である． §14-4 (32) より

$$\Omega(\varepsilon) = g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \varepsilon^{1/2} \quad (\text{A10-30})$$

であり， $T=0$ では $f(\varepsilon) = 1$ ($0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_f$)， $f(\varepsilon) = 0$ ($\varepsilon_f < \varepsilon$) であるから，

$$\begin{aligned} E_{(T=0)} &= \int_0^{\varepsilon_f} g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{2}{5} \cdot (\varepsilon_f)^{5/2} \\ &= g \cdot \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{2}{5} \cdot (\varepsilon_f)^{3/2} \cdot \varepsilon_f \\ &= \frac{3}{5} N \varepsilon_f = E_0 \end{aligned} \quad (\text{A10-31})$$

絶対 0 度の理想フェルミ気体のエネルギーは正の値である． §15-1(8)より， フェルミ準位のエネルギー値は

$$\varepsilon_f = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \cdot \left(\frac{6\pi^2 N}{g \cdot V}\right)^{2/3} \quad \text{§15-1(8)}$$

である． (A10-31)の最後の等式ではこれを用いている．

理想フェルミ気体の定積熱容量は， (A10-28) を温度で微分し， (A10-30)と §15-1(8)を用いて，

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{\pi^2}{3} \Omega(\mu_0) (k_B)^2 T = \frac{\pi^2}{2} N \frac{(k_B)^2 T}{\varepsilon_f} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \left(\frac{T}{T_f}\right) \quad (\text{A10-32})$$

である． 極低温では理想フェルミ気体の熱容量は温度の一次式で， ボルツマン粒子での $C_V = (3/2)k_B N$ と比べると， 因子 (T/T_f) だけ小さい． 通常金属の自由電子では $T_f \approx (1-10) \times 10^4 K$ だから， 低温-常温での金属の熱容量に対する自由電子の寄与は大変小さく， 金属の熱容量の殆どは原子の格子振動による．

付録 11. 真空電磁場ベクトル・ポテンシャルの平面波展開

1) 真空電磁場のベクトル・ポテンシャル (A)

電磁気学によれば、電場の強さ \mathbf{E} は、スカラー・ポテンシャル φ とベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の両方が関与し、

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\text{grad}\varphi(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (\text{A11-1})$$

で与えられる。磁束密度 \mathbf{B} はベクトル・ポテンシャル (A) の回転である。

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \quad (\text{A11-2})$$

スカラー・ポテンシャル $\varphi(\mathbf{x}, t)$ とベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ を合わせて、**電磁ポテンシャル** と言う。電荷も電流もない真空中の電磁場 (\mathbf{E} , \mathbf{B}) の問題は、ベクトル・ポテンシャル (A) に対するクーロン条件、

$$\text{div} \mathbf{A} = 0 \quad (\text{A11-3})$$

を採用し、電荷も電流も無いことは

$$\rho_e = 0, \quad \mathbf{i} = 0 \quad (\text{A11-4})$$

として、Maxwell 方程式を考えれば良い。その結果、

$$\varphi = 0, \quad \text{div} \mathbf{A} = 0 \quad (\text{A11-5})$$

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (\text{A11-6})$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (\text{A11-7})$$

$$(\nabla^2 - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}) \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (\text{A11-8})$$

の連立方程式が得られる。これらから、 \mathbf{A} を消去する形で、真空電磁場の (\mathbf{E} , \mathbf{B}) の波動方程式を導き、その解を得ることも出来る。しかし、 \mathbf{A} に関する波動方程式 (A11-8) の解を、周期的境界条件を課して、直接定めることもできる。この

立場からは、ベクトル・ポテンシャル (**A**) の平面波展開した結果 (フーリエ展開) を用い真空電磁場を記述出来るとの結論になる。

即ち、ベクトル・ポテンシャル (**A**) は、色々に異なる無数の波数ベクトル(**k**) の平面進行波の重ね合わせで表現出来る。各平面進行波は横波としての振動方向 (偏光成分) も区別されるが、これらは何れも波動方程式を満足しており、力学的には「調和振動子」とみなすことができる。従って、真空電磁場は無数の「力学的調和振動子の集合」と等価であると言える(**Jeans の定理**)。真空電磁場の全エネルギー (**H**) は力学的調和振動子と同じ形式で表現され、ハミルトンの正準形式を満たす。これより真空電磁場の**正準量子化**が可能となる^{9,26,76)}。その結果、古典的な波動 (光, 電磁波) は、「粒子」としても理解できることになり、Planck の空洞輻射の式を導くこともできる。ここでは、真空電磁場ベクトル・ポテンシャル (**A**) の平面波展開^{9,26,76)} について簡単に記す。

2) 立方体の周期的境界条件と **A** に関する波動方程式の解

一辺の長さが **L** である立方体内の電磁場を考える。境界に依存しない状況を考える為に、立方体の形状に対応する **A** についての周期的境界条件を考える。この条件は、

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(x,y,z,t) &= \mathbf{A}(x+L,y,z,t) \\ &= \mathbf{A}(x,y+L,z,t) \\ &= \mathbf{A}(x,y,z+L,t)\end{aligned}\tag{A11-9}$$

である。上述の **A** に関する波動方程式は、 $1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} = c = 2.998 \times 10^8 (m/s)$ として、

$$(\nabla^2 - \epsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2})\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = c^2\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{x},t) \tag{A11-10}$$

である． (A11-11)右辺は， $\mathbf{a}_\mathbf{k}$ を振幅ベクトルとする波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ の平面波進行波（ $\mathbf{a}_\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_\mathbf{k} t)}$ ）であるが，これは(A11-9)の周期的境界条件を満たし，かつ，(A11-10)の波動方程式も満たすので，特別の付帯条件を伴う．

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{a}_\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega_\mathbf{k} t}, \quad (\text{A11-11})$$

この事情は，(A11-11)右辺を(A11-9)と(A11-10)に代入して確認出来る．特別の条件とは，この平面進行波の波数ベクトルの成分は

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z), \quad (\text{A11-12-1})$$

$$k_x = \frac{2\pi \cdot n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi \cdot n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi \cdot n_z}{L}, \quad (\text{A11-12-2})$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (\text{A11-12-3})$$

であるとの条件が付いている．さらに，この平面進行波の角周波数は，

$$\omega_\mathbf{k} = c \cdot |\mathbf{k}| = ck, \quad (\text{A11-12-4})$$

でなければならない．以下，これらの条件が付随する理由を確認しよう．

(A11-9)の $\mathbf{A}(x, y, z, t) = \mathbf{A}(x + L, y, z, t)$ に，(A11-11)右辺の平面進行波を代入する．

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x, y, z, t) &= \mathbf{A}(x + L, y, z, t) \\ \mathbf{a}_\mathbf{k} e^{-i\omega_\mathbf{k} t} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} &= \mathbf{a}_\mathbf{k} e^{-i\omega_\mathbf{k} t} e^{i[k_x(x+L) + k_y y + k_z z]} \\ e^{i k_x x} &= e^{i k_x (x+L)} \rightarrow 1 = e^{i k_x L} \end{aligned} \quad (\text{A11-13})$$

最後の等式より，

$$k_x = \frac{2\pi \cdot n_x}{L}, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

であれば $\mathbf{A}(x, y, z, t) = \mathbf{A}(x + L, y, z, t)$ の境界条件は満足される．同様にして，y, zに関する境界条件から，(A11-12-2)と(A11-12-3)の条件となる．

(A11-11)右辺の平面進行波を(A11-10)の波動方程式に代入すると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\mathbf{a}_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}) &= c^2 \nabla^2 (\mathbf{a}_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}) \\ (-i\omega_k)^2 (\mathbf{a}_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}) &= c^2 \mathbf{a}_k e^{-i\omega_k t} \nabla^2 (e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)})\end{aligned}\tag{A11-14}$$

となる．左辺での時間微分は $e^{-i\omega_k t}$ のみに作用する．右辺側のラプラス演算子

$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ は，位置変数のスカラー関数に作用するので，関係するのは $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$ だけである．振幅を表す定ベクトル \mathbf{a}_k と $e^{-i\omega_k t}$ には作用しない．ラプラス演算子が関与する部分は，

$$\begin{aligned}\nabla^2 (e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}) &= [(ik_x)^2 + (ik_y)^2 + (ik_z)^2] (e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}) \\ &= -[(k_x)^2 + (k_y)^2 + (k_z)^2] (e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)})\end{aligned}$$

となる．従って，元に戻すと

$$-(\omega_k)^2 (\mathbf{a}_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}) = -[(k_x)^2 + (k_y)^2 + (k_z)^2] c^2 \mathbf{a}_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}\tag{A11-15}$$

となるので，結局，

$$(\omega_k)^2 = [(k_x)^2 + (k_y)^2 + (k_z)^2] c^2 = \mathbf{k}^2 c^2$$

となり，(A11-12-4)の条件に帰着する．

以上のように，(A11-11)右辺に示す \mathbf{a}_k を振幅ベクトルとする波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ の平面波進行波 ($\mathbf{a}_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega_k t)}$) が (A11-12-1)~(A-11-12-4) の条件を備えていれば，その平面進行波は，(A11-9) の周期的境界条件を満たし，かつ，(A11-10) の波動方程式も満足する． $\mathbf{a}_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega_k t)}$ は (A11-12-1)~(A-11-12-4) の条件を満たす一つの平面進行波である．従って，このような平面進行波の重ね合わせ（一次結合）も全く同様な性質を持つので，一般解としては，

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n_x=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{+\infty} \{ \mathbf{a}_k(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + c.c. \}$$

$$= \sum_{n_x=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{+\infty} \{ \mathbf{a}(n_x, n_y, n_z, t) \exp[i \cdot \frac{2\pi}{L} (n_x \cdot x + n_y \cdot y + n_z \cdot z)] + c.c. \} \quad (\text{A11-16})$$

とできる．ただし， $\mathbf{a}_k e^{-i\omega_k t} \rightarrow \mathbf{a}_k(t) = \mathbf{a}(n_x, n_y, n_z, t)$ と表記している．また， $c.c.$ は，初めの項に対する複素共役項(complex conjugate)を意味する． a, b を実数とする時，複素数 $z=a+bi$ の共役複素数は， $z^*=a-bi$ であり，初めの項で $i \rightarrow (-i)$ としたものになる．初めの項が解ならその複素共役項も自動的に解となっている（これは各自確認されたい）．しかし，問題にしている物理量は，常に実ベクトルであるから，最終的には，初めの項に対する複素共役との和を作ることによって $(z+z^*=2a)$ 虚数部を消去し，実数部を残したものを解とする．和を2で割れば a となるが，振幅の大きさは任意だから，2で割っても割らなくても良い．和をとることは，平面進行波を複素形式で表現したことに対する必要な最終手続きである．

(A11-16) は，周期的境界条件を満たすベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(x, y, z, t)$ はフーリエ級数に展開出来ることを表す．即ち，周期的境界条件の下での $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(x, y, z, t)$ の波動方程式の一般解は，「平面進行波の重ね合わせ」で表現できる．

3) クーロン条件 ($\text{div} \mathbf{A} = 0$) との関連

以上の議論では，真空電磁場のクーロン条件($\text{div} \mathbf{A} = 0$)のことを考えていないので，ここで考えよう．(A-7)の「平面進行波の重ね合わせ」解を $\text{div} \mathbf{A} = 0$ に代入してみる．(62)右辺の「平面進行波の重ね合わせ」解を次のように略記する．

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n_x=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{+\infty} \{ \mathbf{a}_k(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + c.c. \} \rightarrow \sum_k \{ \mathbf{a}_k(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + c.c. \} \quad (\text{A11-16})$$

$\text{div}\mathbf{A}=0$ は, $\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} = 0$ の意味である. (A11-16)を代入する場合, x 成

分について考えると, $[\mathbf{a}_k(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}]_x = [\mathbf{a}_k(t)]_x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ だから,

$$\frac{\partial}{\partial x} [\mathbf{a}_k(t)]_x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = [\mathbf{a}_k(t)]_x \frac{\partial}{\partial x} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) = [\mathbf{a}_k(t)]_x \cdot (ik_x) \cdot (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}})$$

である. y, z 成分についても同様な結果になるので,

$$\begin{aligned} \text{div} \left[\sum_k \{ \mathbf{a}_k(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + c.c. \} \right] &= \sum_k \{ i(\mathbf{a}_{k_x} \cdot k_x + \mathbf{a}_{k_y} \cdot k_y + \mathbf{a}_{k_z} \cdot k_z) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) + c.c. \} \\ &= \sum_k \{ i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_k (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) + c.c. \} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A11-17})$$

である. これが常に成立する為には,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_k = 0 \quad (\text{A11-18})$$

でなければならない. 即ち, ベクトル・ポテンシャルの振幅ベクトル \mathbf{a}_k は, 波数ベクトル \mathbf{k} と直交している. 波数ベクトル \mathbf{k} に垂直な面内に, ベクトル・ポテンシャルの振幅ベクトル \mathbf{a}_k があれば良い. \mathbf{a}_k は横波である. この波数ベクトル \mathbf{k} に垂直な面内には, 直交する二つの方向を指定出来る. その方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ とすると,

$$\mathbf{a}_k = (\mathbf{a}_k)_1 \mathbf{e}_1 + (\mathbf{a}_k)_2 \mathbf{e}_2 = \sum_{\sigma=1,2} (\mathbf{a}_k)_\sigma \mathbf{e}_\sigma \quad (\text{A11-19})$$

と表現できる. これを(A11-16)に代入すれば,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \{ [\sum_{\sigma=1,2} \mathbf{a}_{k\sigma}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \mathbf{e}_\sigma] + c.c. \} \quad (\text{A11-20})$$

である. 波数ベクトル \mathbf{k} に垂直な面内での \mathbf{a}_k の偏り(偏光)を考慮した表現になる.

(A11-20)で, $\mathbf{a}_k(t) = \mathbf{a}(n_x, n_y, n_z, t) \rightarrow \mathbf{a}_k e^{-i\omega_k t}$ と元の形に戻せば,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \{ [\sum_{\sigma=1,2} \mathbf{a}_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega_k t} \mathbf{e}_\sigma] + c.c. \}$$

$\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ を波数ベクトルが \mathbf{k} である時の σ の偏り方向の単位ベクトルとすれば,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \{ |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} + c.c. \} \quad (\text{A11-21})$$

と表現できる. また再度,

$$|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (\text{A11-22})$$

と表現すれば, (A11-21)の複素表現は,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-23})$$

とも表現出来る. 最終的には(A11-21)も(A11-23)も実ベクトルとして考えるので,

実表現としては,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (\text{A11-24})$$

と書いても良い.

(A11-24)は, 様々に異なる波数ベクトル \mathbf{k} と σ の偏り方向 ($\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ の方向) の振幅の大きさ $|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}|$, 対応する初期位相 $\phi_{\mathbf{k}\sigma}$ を与えれば, 平面進行波の重ね合わせ (単振動の重ね合わせ) としてベクトル・ポテンシャル (\mathbf{A}) は表現出来ることを示している.

4) ベクトル・ポテンシャル (\mathbf{A}) から求める \mathbf{E} , \mathbf{B}

ベクトル・ポテンシャル (\mathbf{A}) を用いて, (A11-6)と(A11-7)から (\mathbf{E} , \mathbf{B}) の表現が得られる. (A11-24)の実ベクトル表現を使うと,

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \right\} \\ &= -\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \end{aligned}$$

$$= \sum_k \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot (-\omega_k) \cdot \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$$

$\cos(\alpha+\varphi) = \cos\alpha \cos\varphi - \sin\alpha \sin\varphi \rightarrow \varphi=\pi/2$ で $\cos(\alpha+\pi/2) = -\sin\alpha$ より

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \sum_k \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot (\omega_k) \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \quad (\text{A11-25})$$

である． \mathbf{E} は， \mathbf{A} と同じ単位ベクトル $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ で記述されるので，両者には振幅の大きさ，位相差（ $\pi/2$ ）の違いはあるが，偏光特性も含めて同じような「波動ベクトル」と考えれば良い．

ベクトル・ポテンシャル（ \mathbf{A} ）(A11-24)の複素表現を使えば，

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_k \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \right\} \\ &= -\sum_k \sum_{\sigma=1,2} \left[\frac{\partial \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)}{\partial t} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)}{\partial t} \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &= i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} \omega_k [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \end{aligned} \quad (\text{A11-26})$$

となる．

一方，磁束密度の方は，(A11-24)の実表現を使うと，

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \text{rot} \left\{ \sum_k \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \right\} \\ &= \text{rot} \left\{ \sum_k \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A11-27})$$

となる．rot と Σ は順序を変更できる．また，rot は，

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{C} = \nabla \times \mathbf{C} &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix} \\ &= \left(\frac{\partial C_z}{\partial y} - \frac{\partial C_y}{\partial z} \right) \cdot \mathbf{i} - \left(\frac{\partial C_z}{\partial x} - \frac{\partial C_x}{\partial z} \right) \cdot \mathbf{j} + \left(\frac{\partial C_y}{\partial x} - \frac{\partial C_x}{\partial y} \right) \cdot \mathbf{k} \end{aligned} \quad (\text{A11-28})$$

であるから、 $\mathbf{C} = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$ と置いてみる。各成分は

$$C_x = [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_x \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$$

$$C_y = [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$$

$$C_z = [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$$

だから、 $\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) = \cos[(k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z) - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}]$ に注意して、

その x 成分を考えると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_z}{\partial y} - \frac{\partial C_y}{\partial z}\right) &= [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \cdot \frac{\partial}{\partial y} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \\ &\quad - [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y \cdot \frac{\partial}{\partial z} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \\ &= [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \cdot (-k_y) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \\ &\quad - [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y \cdot (-k_z) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \end{aligned}$$

演算子は定ベクトル成分には作用しない。また、 $\cos(\alpha + \pi/2) = -\sin \alpha$ より

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_z}{\partial y} - \frac{\partial C_y}{\partial z}\right) &= [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \cdot (k_y) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \\ &\quad - [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y \cdot (k_z) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \end{aligned} \quad (\text{A11-29})$$

となる。C の y, z 成分も同様に考えれば良いから、

$$\mathbf{C} = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (\text{A11-30})$$

とすると、

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{C} = \nabla \times \mathbf{C} &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ k_x & k_y & k_z \\ [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_x & [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y & [|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \end{vmatrix} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \\ &= \mathbf{k} \times \mathbf{C}' \end{aligned} \quad (\text{A11-31})$$

ただし、 \mathbf{C}' と \mathbf{C} は位相差（ $\pi/2$ ）のみ異なり、

$$\mathbf{C}' = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \quad (\text{A11-32})$$

である．故に、ベクトル・ポテンシャルの実表現(A11-24)

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma})$$

を使うと、

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \mathbf{k} \times |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \quad (\text{A11-33})$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}| \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot (\omega_{\mathbf{k}}) \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi_{\mathbf{k}\sigma} + \pi/2) \quad (\text{A11-34})$$

である． \mathbf{B} と \mathbf{E} を比べれば、各進行波の波数ベクトル \mathbf{k} ，偏光成分 σ が指定すベクトル・ポテンシャル成分（ $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ ）が与えられた時、これに対応する電場と磁場成分の間には位相差はない．ベクトルの外積 $\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ の定義と $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0$ の横波

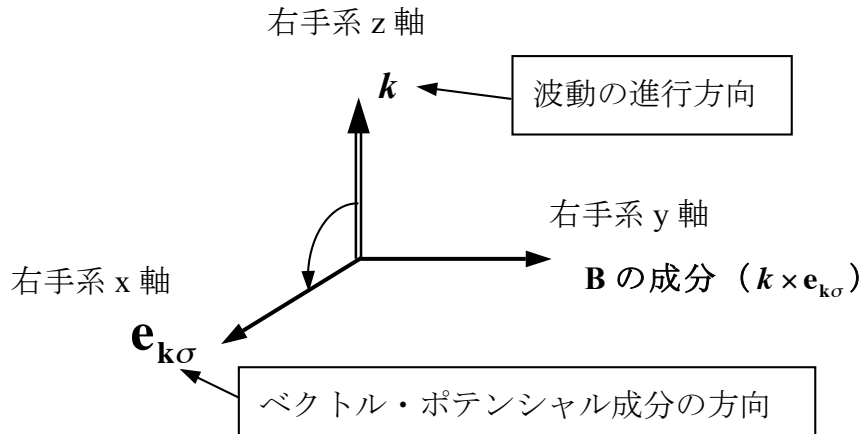


図 A11-1. 波数ベクトル \mathbf{k} の方向とベクトル・ポテンシャル成分，磁場成分の方向の関係

の条件から、波数ベクトル \mathbf{k} とベクトル・ポテンシャル成分の方向 $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ の外積（ $\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ ）が、 \mathbf{B} の各成分の方向を指定する(図 A11-1)．両者は、図 A11-1 に示

すように、 \mathbf{k} は「右手系 z 軸」、 \mathbf{B} の各成分は「右手系 y 軸」に対応し、両者は相互に直交している。 \mathbf{A} 、 \mathbf{E} の各成分の方向 $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ は「右手系 x 軸」の方向にあるので、三者は相互に直交している。

ベクトル・ポテンシャルの複素表現(A11-24),

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}]$$

を使う場合は,

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \text{rot} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \right\} \quad (\text{A11-35})$$

である。各成分について、実数表現の場合と同じように考えれば良い。演算子は $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ と $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ の項のみに作用する。

$$\begin{aligned} \text{rot} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ i \cdot k_x & i \cdot k_y & i \cdot k_z \\ [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_x & [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y & [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \end{vmatrix} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ \text{rot} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] &= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ -i \cdot k_x & -i \cdot k_y & -i \cdot k_z \\ [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_x & [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_y & [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}]_z \end{vmatrix} \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \end{aligned}$$

である。これより,

$$\begin{aligned} \text{rot} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \\ = i [\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \end{aligned}$$

となる。従って、(A11-35)は,

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = i \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-36})$$

である。 \mathbf{B} のこの複素表現は、 \mathbf{E} の複素表現

$$\mathbf{E} = i \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \omega_{\mathbf{k}} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-26})$$

と共に、電磁場のエネルギーを表現する為に以下で利用できる。もちろん、(A11-26),(A11-27)の \mathbf{E}, \mathbf{B} の実表現を使っても良い。

5) 電磁場のエネルギー

電磁気学によれば、体積 $V(=L^3)$ の真空電磁場の全エネルギーを H とすると、

$$H = \int_V u_{e.m.} dV \quad (\text{A11-37})$$

である。 $u_{e.m.}$ は単位の体積当たりの電磁場のエネルギーで、

$$u_{e.m.}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} [\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)]$$

となる。これは、

$$u_{e.m.}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \epsilon_0 \mathbf{E}^2(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{B}^2(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \epsilon_0 [\mathbf{E}^2(\mathbf{x}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{x}, t)] \quad (\text{A11-38})$$

となるので、電磁場の全エネルギーは、

$$H = \frac{1}{2} \epsilon_0 \int_V [\mathbf{E}^2(\mathbf{x}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{x}, t)] dV \quad (\text{A11-39})$$

である。

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} [k \times \mathbf{a}_{k\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - k \times \mathbf{a}_{k\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-40})$$

$$\mathbf{E} = i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} \omega_k [\mathbf{a}_{k\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{k\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-41})$$

を、(A11-39) $H = (1/2) \epsilon_0 \int_V (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) dV$ に代入して、その表現を求めよう。

\mathbf{E}^2 から調べると、

$$\mathbf{E}^2 = [i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} \omega_k (\mathbf{a}_{k\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{k\sigma}^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}})] \cdot [i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} \omega_k (\mathbf{a}_{k\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{k\sigma}^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}})]$$

(以後は, $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t), \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \rightarrow \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*$, $\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}, \sigma}$ と表記する)

$$= [i \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \omega_{\mathbf{k}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}})] \cdot [i \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \omega_{\mathbf{k}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}})]$$

(この積は4種類の和になるから)

$$= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'} [(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}) e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \\ - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^*) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} + (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^*) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-42})$$

である. \mathbf{E}^2 の各項を体積積分するが, 関係するのは, $e^{\pm i(\mathbf{k} \pm \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}$ だけであり, $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}$ の定ベクトルは無関係である. $e^{\pm i(\mathbf{k} \pm \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}$ のうちの $e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}$ の積分を以下で考える.

$$I(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \equiv \int_V e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = \int_V e^{i[(\mathbf{k}+\mathbf{k}')_x \cdot x + (\mathbf{k}+\mathbf{k}')_y \cdot y + (\mathbf{k}+\mathbf{k}')_z \cdot z]} dx dy dz \\ = \int_0^L e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')_z \cdot z} \int_0^L e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')_y \cdot y} \left\{ \int_0^L e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')_x \cdot x} dx \right\} dy dz \quad (\text{A11-43})$$

となるから, まず{ }内の x についての積分を考えると

$$(k_x + k'_x) = 0 \rightarrow \int_0^L e^{i(k_x + k'_x) \cdot x} dx = L; \quad (k_x + k'_x) \neq 0 \rightarrow \int_0^L e^{i(k_x + k'_x) \cdot x} dx = 0 \quad (\text{A11-44})$$

である. $(k_x + k'_x) = 0$ の場合は説明を要しない. しかし, $(k_x + k'_x) \neq 0$ の場合は,

$k_x = 2\pi \cdot n_x / L$, $k'_x = 2\pi \cdot n'_x / L$ ($n_x, n'_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) の条件により

$$\int_0^L e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')_x \cdot x} dx = \frac{-1}{(k_x + k'_x)} \left| \sin(k_x + k'_x)x \right|_0^L + i \cdot \frac{1}{(k_x + k'_x)} \left| \cos(k_x + k'_x)x \right|_0^L = 0$$

である. (A11-43)の y での積分, z での積分に於いても(A11-44)と同じような結果となるので, (A11-43)の積分全体は,

$$(\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \equiv \int_V e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = L^3 = V \quad (\text{A11-45-1})$$

$$(\mathbf{k} + \mathbf{k}' \neq \mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \equiv \int_V e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = 0 \quad (\text{A11-45-2})$$

となる.

(A11-42)の四項のうち, 残りの二つの $e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}$, 一つの $e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}$ の体積積分について, (A11-45-1)と(A11-45-2)と同様の結果が得られる.

$$(\mathbf{k}-\mathbf{k}'=\mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \equiv \int_V e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = L^3 = V \quad (\text{A11-46-1})$$

$$(\mathbf{k}-\mathbf{k}'\neq\mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \equiv \int_V e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = 0 \quad (\text{A11-46-2})$$

$e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}$ については, (A11-45-1)と(A11-45-1)を次のように改めればよい,

$$(\mathbf{k}+\mathbf{k}'=\mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \equiv \int_V e^{\pm i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = L^3 = V \quad (\text{A11-47-1})$$

$$(\mathbf{k}+\mathbf{k}'\neq\mathbf{0}) \rightarrow I(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \equiv \int_V e^{\pm i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}^3 = 0 \quad (\text{A11-47-2})$$

以上の体積積分では, (A11-46-1)と(A11-46-2)では $\mathbf{k}-\mathbf{k}'=\mathbf{0}$ の場合, 即ち, $\mathbf{k}'=\mathbf{k}$, $\omega_{\mathbf{k}'}=\omega_{\mathbf{k}}$ の場合のみが残る. (A11-47-1)と(A11-47-2)では $\mathbf{k}'=-\mathbf{k}$ の場合が残るので, この場合も $\omega_{\mathbf{k}'}=\omega_{-\mathbf{k}}=\omega_{\mathbf{k}}$ であることに注意. 従って, (A11-42)の積分全体は

$$\int_V \mathbf{E}^2 d\mathbf{x}^3 = V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} (\omega_{\mathbf{k}})^2 [-(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'})] \quad (\text{A11-48})$$

である. 右辺側の和 $(\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'})$ は, $\mathbf{k}'=\mathbf{k}$ と $\mathbf{k}'=-\mathbf{k}$ だけが残ることになった

たので, \mathbf{k}' を落としている. 元々は $\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}, \sigma}$ との表記による. $\mathbf{k}'=\mathbf{k}$ と

$\mathbf{k}'=-\mathbf{k}$ だけが残ることも考慮すると,

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=1,2} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'}$$

と, \mathbf{k}' を落とした和となる:

$$\int_V \mathbf{E}^2 d\mathbf{x}^3 = V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (\omega_{\mathbf{k}})^2 [-(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'})] \quad (\text{A11-49})$$

である.

磁場のエネルギーも同様に表現出来る.

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-40})$$

を用いて, $\int_V \mathbf{B}^2 d\mathbf{x}^3$ を求めれば良い.

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^2 &= \{i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}]\} \cdot \\ &\quad \{i \sum_k \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}]\} \\ &\quad (\text{再度 } \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t), \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \rightarrow \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \text{ と } t \text{ を省略する}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^2 &= (-1) \sum_{k,\sigma} \sum_{k',\sigma'} [(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \\ &\quad - (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^*) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \\ &\quad - (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \\ &\quad + (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^*) e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}] \quad (\text{A11-50}) \end{aligned}$$

これを体積積分すれば, (A11-46-1), (A11-46-2), (A11-47-1), (A11-47-2) のように,
第一と第四項は $(\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{0})$ のみが残る, 第二項と第三項は $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{0})$ のみが残る.
何れの項も体積積分は V となる. 即ち,

$$\begin{aligned} \int_V \mathbf{B}^2 d\mathbf{x}^3 &= (-1)V \sum_{k,\sigma} \sum_{k',\sigma'} [(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (-\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}^*) \\ &\quad - (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) + (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (-\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}^*)] \\ &= V \sum_{k,\sigma} \sum_{\sigma'} [(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) \\ &\quad + (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}^*)] \quad (\text{A11-51}) \end{aligned}$$

ここには $(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'})$ のような「ベクトル外積の内積」が現れるが, これらにはベクトル解析の公式,

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \quad (\text{A11-52})$$

を使う．この公式が成立することは，外積と内積の定義，

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}, \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x \cdot B_x + A_y \cdot B_y + A_z \cdot B_z$$

を使い，x, y, z 成分に戻って考えれば確認出来る．

$$(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k})(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{k})$$

となる．しかし，右辺の第二の項は，波数ベクトルとベクトル・ポテンシャルが直交していることから [(A11-18)の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}} = 0$]，消えるので，結局，

$$(\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k})(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) = k^2 \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) \quad (\text{A11-53})$$

となる．他の場合も同様な結果が得られる．従って，(A11-51)は

$$\int_V \mathbf{B}^2 d\mathbf{x}^3 = V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (k^2) [(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) + (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}^*)] \quad (\text{A11-54})$$

である．

電磁場の全エネルギーは，

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int_V [\mathbf{E}^2(\mathbf{x}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{x}, t)] dV \quad (\text{A11-39})$$

であるから，

$$\int_V \mathbf{E}^2 d\mathbf{x}^3 = V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (\omega_{\mathbf{k}})^2 [-(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}^*)] \quad (\text{A11-49})$$

と(A11-54)を使えば良いが，

$$(\omega_{\mathbf{k}})^2 = c^2 k^2 = \frac{k^2}{\varepsilon_0 \cdot \mu_0} \quad (\text{A11-55})$$

の関係があったことにも留意すると，

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int_V [\mathbf{E}^2(\mathbf{x}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{x}, t)] dV$$

$$= \frac{1}{2} V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (\varepsilon_0) (\omega_{\mathbf{k}})^2 [-(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) - (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}^*) \\ (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}) + 2(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) + (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\sigma'}^*)]$$

となり，中央の項のみが残り，結果は次のように簡素なものとなる．

$$H = 2V \cdot \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (\omega_{\mathbf{k}})^2 (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma'}) \\ = 2V \cdot \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\sigma'} (\omega_{\mathbf{k}})^2 (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma})^2 \cdot \delta_{\sigma, \sigma'} = 2V \cdot \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1,2} (\omega_{\mathbf{k}})^2 (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma})^2 \quad (\text{A11-56})$$

$\delta_{\sigma, \sigma'}$ は，偏光成分が同じならば 1，異なれば両者は直交するよう選んであるから 0 である．これは偏光成分の振幅の二乗和と同じことである．電磁場の全エネルギーは簡単な表現で与えられる．この(A11-56)は，力学的調和振動子のエネルギーと同じ形式になっている．これを次ぎに確認しよう．

6) 電磁場の全エネルギーと調和振動子のエネルギーの対応

$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^* \rightarrow \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t), \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)$ と表記を元に戻す．以下のように，実表現に対応する新変数を定義する．

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \equiv (V\varepsilon_0)^{1/2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)] \quad (\text{A11-56-1})$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \equiv \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}\sigma}(t) = -i\omega_{\mathbf{k}}(V\varepsilon_0)^{1/2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)] \quad (\text{A11-56-2})$$

この変数（一般化座標と一般化運動量）を使って，以下の量を求めると，

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)] = 2V\varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\omega_{\mathbf{k}})^2 \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) = H \quad (\text{A11-57})$$

となり，電磁場の全エネルギーに等しい．(A11-56-2)から，(A11-57)は，

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)] = 2V\varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\omega_{\mathbf{k}})^2 \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) = H$$

とも表現できる．

次に、 $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ と $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ は、ハミルトンの正準方程式を満たすことを確認しよう。
(A11-56-1)と(A11-56-2)より、両者の時間微分は、

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) &= (V\varepsilon_0)^{1/2}[\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) + \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k},\sigma}^*(t)] = -i\omega_{\mathbf{k}}(V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}(t) - \mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}^*(t)] \\ &= \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\end{aligned}\quad (\text{A11-58})$$

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{P}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) &\equiv \ddot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = -i\omega_{\mathbf{k}}(V\varepsilon_0)^{1/2}[\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) - \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k},\sigma}^*(t)] \\ &= -(\omega_{\mathbf{k}})^2(V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}(t) + \mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}^*(t)] = -(\omega_{\mathbf{k}})^2\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\end{aligned}\quad (\text{A11-59})$$

である。さらに、(A11-57)の H （電磁場の全エネルギー：Hamiltonian）は、

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}^2(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}^2(t)] \quad (\text{A11-57})$$

だから、以下のハミルトンの正準方程式

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}} = \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t), \quad -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}} = \dot{\mathbf{P}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \quad (\text{A11-60})$$

が成立することを確認できる。(A11-57)の H を $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ と $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ でそれぞれ偏微分すると、

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}} = \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t), \quad -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}} = -(\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \dot{\mathbf{P}}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$$

それぞれの第一の等式となる。しかし、(A11-58)の $\dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ と(A11-59)

の $\dot{\mathbf{P}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \equiv \ddot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = -(\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ を使うと、それぞれの第二の等式が成立する。

これは(A11-60)のハミルトンの正準方程式である。このように、 $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ と

$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ は、ハミルトンの正準方程式を満たす正準共役な「座標」と「運動量」で

ある。真空電磁場（輻射場）を正準量子化する際に必要なステップでもある。

一方、良く知られているように、質量 m 、バネ定数 K の調和振動子の運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega^2 x, \quad \omega = \sqrt{K/m}$$

である．この方程式に， $x = q \cdot \cos(\omega t + \alpha)$ を代入すると，これが解であることが判る．この調和振動子の全エネルギー（Hamiltonian）を H_0 とすると，

$$H_0 = \frac{1}{2} m (\dot{x})^2 + \frac{1}{2} K x^2 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \quad (\text{A11-61})$$

である．(A11-61)で，

$$Q \equiv \sqrt{m} x, \quad P \equiv \frac{1}{\sqrt{m}} p \quad (\text{A11-62})$$

の変換を行う．

$$P \equiv \frac{1}{\sqrt{m}} p = \frac{1}{\sqrt{m}} (m \dot{x}) = \sqrt{m} \dot{x} = \dot{Q} \quad (\text{A11-63})$$

を意味している．従って，(A11-61)は次のように表現出来る：

$$H_0 = \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \cdot Q^2 \quad (\text{A11-64})$$

故に，調和振動子の (Q, P) は

$$\frac{\partial H_0}{\partial P} = \dot{Q}, \quad -\frac{\partial H_0}{\partial Q} = \dot{P} \quad (\text{A11-65})$$

のハミルトンの正準方程式を満たす．調和振動子の (Q, P) は

$$Q \leftrightarrow \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t), \quad P \leftrightarrow \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \quad (\text{A11-66})$$

と電磁場の $(\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t), \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t))$ に対応する．

真空電磁場ベクトル・ポテンシャルの平面進行波偏光成分に対する $(\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}, \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma})$ は，調和振動子の (Q, P) と同じように，ハミルトンの正準方程式を満たす正準共役な「座標」と「運動量」である．この正準方程式のレベルで，ベクトル・ポテンシャル波動成分と力学的調和振動子は相互に対応している．真空電磁場のベクトル・ポテンシャルの平面波展開から，真空電磁場は「無数の

調和振動子の集合」と等価であるとの結論になる．これは「Jeans の定理」と呼ばれる．

真空電磁場の正準量子化は，調和振動子に対する手続き § 6-2-1)に従えば良い．