

付録 A : X 線散乱・回折と物質の構造

気体、液体、ガラスのような非結晶質固体の X 線散乱や、結晶による X 線回折のデータから、物質内部の電子密度分布（原子配列の平均構造）を知る方法について簡単に記す^{51, 52, 55}。その基礎は電磁気学の Thomson 散乱である。

1) 散乱ベクトルと構造因子

座標原点から \mathbf{r} の位置にある物質の体積素片 dV を考え（図 A-1）、そこでの電子密度を $\rho(\mathbf{r})$ とすると、その体積素片中の電子数は $\rho(\mathbf{r})dV$ である。これらの電子と座標原点の電子による散乱波の位相差を考える。入射波と散乱波の波数ベクトルを \mathbf{k}_0 と \mathbf{k} とすると、これらの方向の単位ベクトルは、それぞれ、 $\mathbf{k}_0/|\mathbf{k}_0|, \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ である。弾性散乱であるから入射波と散乱波の波長は λ に等しいの

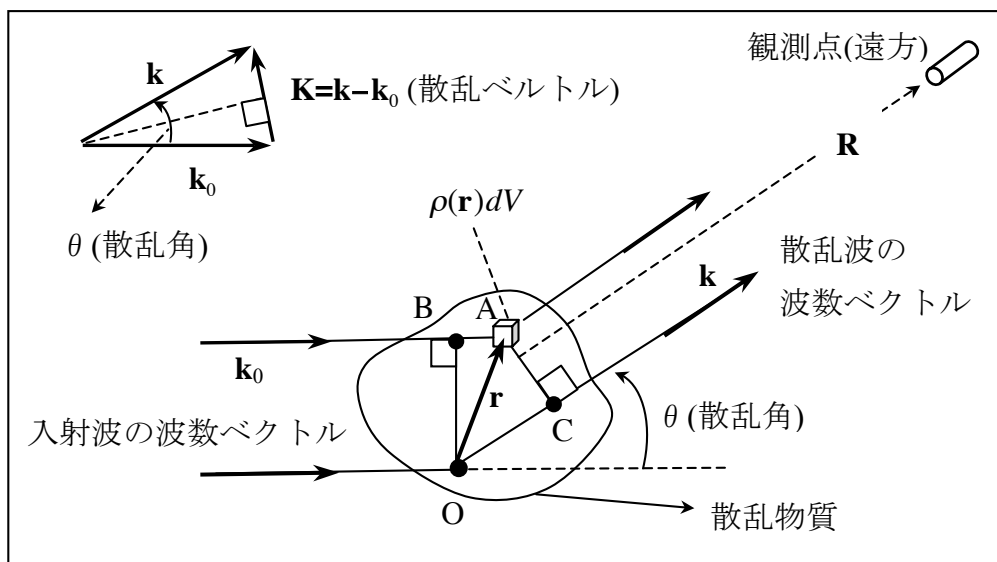


図 A-1. 座標原点の電子による散乱波と \mathbf{r} の位置での電子 $\rho(\mathbf{r})dV$ による散乱波。

で、入射波と散乱波の波数ベクトルの大きさは等しい。

$$|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda \quad (\text{A-1})$$

が成立する.

散乱前の B と O での位置では入射波に位相差はない. また, A 点と O 点での散乱では同じ位相差 (π) が生じるが [§ 26-(59)], これは, 散乱直後の A 点からの波と原点 O での散乱波を C の位置で考えて両者の位相差を求めれば, 正味の位相差の値には影響しない. 結局, BA と OC の距離から両者の光路差を考えれば良い. 図 A-1 で, 入射波と散乱波の進行方向の各単位ベクトルと O に対する A の位置ベクトル \mathbf{r} の内積を考えて,

$$BA = \left(\frac{\mathbf{k}_0}{|\mathbf{k}_0|}\right) \cdot \mathbf{r}, \quad OC = \left(\frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}\right) \cdot \mathbf{r}$$

となる. 原点 O での散乱波の C での位相を基準にすると, 点 A での散乱波との光路差は (BA-OC) である. この光路差 (BA-OC) を波長 λ で割り 2π を掛けたものが, その位相差で, 光路差に波数ベクトルの大きさを掛けたものである.

$$(BA - OC) \cdot \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) = (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}. \quad (\text{A-2})$$

$\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ は散乱ベクトルと呼ばれる. 図 A-1 の左上の図から判るように, 散乱角の半分の角度 ($\theta/2$) は, § 26-5 の図 26-11 に示した Bragg 反射の説明で用いた入射角と反射角の値 θ' に等しい. 図 A-1 の散乱角 $\theta = 2\theta'$ は, Bragg 反射の議論では回折角と呼ばれる. 反射角の値 θ' を用いれば, 散乱ベクトルの大きさは,

$$|\mathbf{K}| = 2|\mathbf{k}| \sin\theta' = 4\pi \cdot \frac{\sin\theta'}{\lambda} \quad (\text{A-3})$$

である.

図 A-1 で考える入射波の電場振幅を

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t} \quad (\text{A-4-1})$$

とすると, 原点 O の一個の電子からの散乱波は, (§ 26-59) から, 入射波電場と

符号が変わる．これを位相差 π として，

$$\mathbf{E}_O = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi)} \quad (\text{A-4-2})$$

である．もし点 A に一個の電子が存在すると，その散乱波は，原点 O のからの散乱波との位相差を α として，

$$\mathbf{E}_A = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi + \alpha)} \quad (\text{A-4-3})$$

である．位相差 α は，上述の通り， $\alpha = (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}$ であるから，二つの散乱波 $\mathbf{E}_O = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi)}$ と $\mathbf{E}_A = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi + \alpha)}$ の重ね合わせは，

$$\mathbf{E}_S = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi)} [1 + e^{i\alpha}] = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi)} [1 + e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{A-5})$$

となる． $[1 + e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}]$ が位相差による因子である．しかし，図 A-1 では，点 A 付近には $\rho(\mathbf{r})dV$ 個の電子が存在すると考えているので，ここでは $\rho(\mathbf{r})dV$ 倍して考えねばならない．

$$\mathbf{E}_S = \mathbf{E}'_0 e^{i(\omega t + \pi)} \{1 + [\rho(\mathbf{r})dV]e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}\} \quad (\text{A-6})$$

この括弧 $\{ \}$ の値が，位相差による合成散乱波の振幅を決める因子である．括弧 $\{ \}$ の 1 は，原点 O に考えた一個の電子による散乱波によるものであるから， \mathbf{r} に考える $\rho(\mathbf{r})dV$ 個の電子による寄与は，原点 O に考えた一個の電子の寄与に対し，

$$\rho(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV$$

倍になっている．この因子を散乱体の全体積で積分した結果，

$$\int_V \rho(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \equiv A(\mathbf{K}) \quad (\text{A-7})$$

が実際は意味を持ち， $A(\mathbf{K})$ は散乱物質の構造因子(structural factor)と呼ばれる．

これは，散乱体の複数の電子からの散乱波を位相差も考慮して重ね合わせるこ

とことから生じる因子で，原点の電子一個の散乱の寄与に対する相対量である．
 § 26-(59')で $E_s = (-P_r)$ とした議論を思い出し，また，(A-4-2)で既に位相差を π と
 して負符号を中に入れておくことに注意すると， $A(\mathbf{K})$ に P_r を掛けたものが，基
 本的には，空間分布する電子による合成散乱波の電場振幅に比例する．一方，
 観測量に対応している散乱波強度 I で考えると，合成散乱波の電場振幅の 2 乗が
 これに比例するから， (§ 26-71) のトムソン散乱の式を用い，偏光因子 P も考慮
 して，

$$I = I_0 \cdot P \cdot \frac{(r_e)^2}{R^2} \cdot |A(\mathbf{K})|^2 \quad (\text{A-8})$$

が，観測される散乱波の強度 I と考えれば良い．ただし，ここでの R は散乱物
 質から散乱強度観測点（検出器）までの距離である（図 A-1）．

2) 原子散乱因子

一個の原子は原子番号 Z の数だけの電子を持っている．図 A-1 で散乱物質と
 したものを一個の原子と考えると，散乱物質の構造因子 $A(\mathbf{K})$ の定義式での体積
 積分は，一個の原子に属する全ての電子の分布領域についての体積積分となる．
 通常，この結果は f と表記され，

$$f(\mathbf{K}) = \int_{V(\text{atom})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \quad (\text{A-9})$$

原子散乱因子（atomic scattering factor）と呼ばれる．前述のように，原子核に
 よる散乱は無視出来るので，原子散乱因子は一個の原子に含まれる全電子によ
 る散乱波を考え，電子の分布位置の違いによる位相差を考慮して合成し，その
 振幅を，原点に置いた電子一個に対する散乱波振幅の相対値として表現したも

のである。

§ 26-5)-4 で定義した微分散乱断面積,

$$d\sigma \equiv \frac{I_s r^2 d\Omega}{I_0} \quad (\text{§ 26-76})$$

で $r \rightarrow R$ とし, また, 原子一個が散乱体であるとして(A-8)の $I = I_0 \cdot P \cdot \frac{(r_e)^2}{R^2} \cdot |A(\mathbf{K})|^2$

で $A(\mathbf{K}) \rightarrow f(\mathbf{K})$ とする. $I_s = I$ であるから, 微分断面積と原子散乱因子は,

$$d\sigma = P \cdot (r_e)^2 \cdot |f(\mathbf{K})|^2 \cdot d\Omega \quad (\text{A-10})$$

の関係になる。

原子散乱因子の定義式 (A-9)で, $\rho(\mathbf{r})$ を球対称としてこれを具体的に求めてみる. § 26-5)-3 で偏光因子を考えた際の図 26-8 では, 散乱波の進行方向を極座標系 (r, θ, φ) の動径 r 方向に取り, 散乱面内で散乱波が入射波となす角度を θ とし, 入射波の偏光方向と散乱面のなす角度を φ とした. これを参照して(A-9)右辺の体積積分を行う. その結果は

$$\begin{aligned} f(K) &= \int_{V(\text{atom})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \\ &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r) \cdot \exp(-iKr \cos\theta) \cdot r^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dr \\ &= \int_0^\infty 4\pi r^2 \cdot \rho(r) \cdot \frac{\sin(Kr)}{Kr} \cdot dr \end{aligned} \quad (\text{A-11})$$

となる. 極座標系での体積素片は $dV = dr \cdot (r \sin\theta \cdot d\theta) \cdot (r d\varphi) = (r^2 \sin\theta) \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dr$ である. 二行目の三重積分で φ に関する積分を先に済ますと,

$$2\pi \int_0^\infty \rho(r) \cdot r^2 \left[\int_0^\pi \exp(-iKr \cos\theta) \sin\theta \cdot d\theta \right] dr$$

である. []内の θ に関する積分を $\cos\theta = x$ と置いて考えると,

$$\int_0^\pi \exp(-iKr \cos \theta) \sin \theta \cdot d\theta = - \int_1^{-1} \exp(-iKr \cdot x) dx = \int_{-1}^{+1} \exp(-iKr \cdot x) dx$$

$$= \frac{1}{(-iKr)} [\exp(-iKr) - \exp(+iKr)] = \frac{2 \sin(Kr)}{Kr}$$

となる. $\cos \theta = x$ とすることで, $\sin \theta$ は消えて, (A-11)の結果となる.

図 A-1 の散乱角 $\theta = 2\theta'$ は Bragg 反射では回折角で, θ' は反射角である. この反射角 θ' を用いると, 散乱ベクトルの大きさ $|\mathbf{K}| = K$ は, (A-3)の関係になる.

$$|\mathbf{K}| = K = 4\pi \cdot \frac{\sin \theta'}{\lambda} \quad (\text{A-3})$$

これを(A-11)の結果に代入して考えれば, 原子散乱因子 f は, r に関する積分を実行した結果であるから r は残らず, K のみが残る, (A-3)の関係より, $(\sin \theta' / \lambda)$ の関数 y となる.

$$f(K) = \int_0^\infty 4\pi r^2 \cdot \rho(r) \cdot \frac{\sin(Kr)}{Kr} \cdot dr = y\left(\frac{\sin \theta'}{\lambda}\right) \quad (\text{A-12})$$

もちろん, y は $\sin(\theta/2)/\lambda$ の関数と言っても良いが, 割り算は1回の方が単純であるから $(\sin \theta' / \lambda)$ の方が好まれる.

球対称とした原子における電子密度分布 $\rho(\mathbf{r})$ は, 量子力学の Hartree-Fock 法などによる計算からその値が知られているので, (A-12)から原子散乱因子も計算できる. 各原子の原子散乱因子は, その計算値が $(\sin \theta' / \lambda)$ の関数として表になって与えられており (International Table for X-ray Crystallography, vol. I-IV), また各原子の f を $(\sin \theta' / \lambda)$ にプロットしたグラフや, 近似関数も与えられている^{5,2)}.

散乱角が0で $K=0$ の場合の原子散乱因子 $f(0)$ は,

$$f(0) = \int_{atom} \rho(\mathbf{r}) dV = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) dr = Z \quad (\text{A-13})$$

であり, 原子番号に等しい電子数である. (A-11)右辺で考える時は,

$$\frac{\sin(Kr)}{Kr} = \frac{\sin x}{x} = \frac{1}{x} \cdot \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots \right) = 1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} -$$

に注意すれば、 $K=0$ の時は1であり、(A-13)の二番目の等式となる。各原子の f の値は、 $f(0)$ が最大値であり、 $(\sin\theta'/\lambda)$ が増大するに従い、即ち、散乱角 $\theta = 2\theta'$ が増大するに従い、比較的単調に低下する。原子内部の電子分布により、それぞれの原子で特徴的な変化パターンとなっている。

3) 電子密度分布で決まる構造因子

散乱体物質を構成している j 番目原子の中心の位置ベクトルを \mathbf{r}_j 、その原子のに伴う電子密度分布を $\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ とすると、観測される散乱波に關与する電子密度は、全原子数を n とすると、

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_j^n \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-14})$$

となる。(A-7)の散乱物質の構造因子 $A(\mathbf{K})$ にこれを代入すると、

$$A(\mathbf{K}) = \sum_{j=1}^n \int_V \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) dV \quad (\text{A-15})$$

となる。ここで、 $\mathbf{r} - \mathbf{r}_j = \mathbf{r}'$ と置くと、 $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{r}_j$ である。 \mathbf{r}' は j 番目原子の中心位置(\mathbf{r}_j)から少しずれて分布するその原子に歸属する電子の相対位置をあらわす。

$$\begin{aligned} A(\mathbf{K}) &= \sum_{j=1}^n \int_V \rho(\mathbf{r}') \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{r}_j)] dV \\ &= \sum_{j=1}^n \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \int_{V(\text{atom})} \rho(\mathbf{r}') \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'] dV \end{aligned}$$

\mathbf{r}' に関する積分は各原子の中心からの位置ベクトルに関する積分であり、(A-9)で定義される原子の原子散乱因子 f_j である。原子が異なれば原子散乱因子もちがうので j 番目の原子の原子散乱因子と言う意味で j をつける。故に、

$$A(\mathbf{K}) = \sum_{j=1}^n f_j \cdot \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-16})$$

となる。

この結果は、結晶はもとより気体、液体、非結晶質固体の全ての物質にあてはまる。一個の原子 j の位置ベクトル \mathbf{r}_j と散乱ベクトル \mathbf{K} から決まる位相差の因子にその原子 j の原子散乱因子 f_j を掛けて、全ての原子についての和をもとめたものが構造因子 $A(\mathbf{K})$ である。 $|A(\mathbf{K})|^2$ が測定される散乱波強度に比例する。

気体、液体では原子は運動しており、散乱波強度測定値 $|A(\mathbf{K})|^2$ には測定時間内の原子の平均位置が反映する。ガラスなどの非結晶質固体や結晶では、各原子はそれぞれの平均位置で熱運動をしている。しかし、その平均位置が時間と共に変化することはないので、原子の平均位置が $|A(\mathbf{K})|^2$ を決める。気体、液体、ガラスの物質では $|A(\mathbf{K})|^2$ を用いて、原子の平均的な相互配置の状況、即ち、ある一個の原子の中心を原点とする半径 r の球を考えたとき、その球の中にどれだけの原子が存在するか、などを推定できる。

図 A-1 の散乱体が結晶固体の時は、散乱体が並進対称性を持つ結晶格子をなし、原子はその格子の単位セル内の特定の位置にある。全体の結晶はこのような単位セルの三次元の周期的繰り返しである。従って、図 A-1 の座標原点 O を基準にした時、結晶内の各原子の位置ベクトルは次の二つのベクトルの和である：1) 原点 O から各単位セルの座標原点に引いたベクトル。これは単位セルの位置ベクトルで、結晶格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ を整数倍したものの一次結合である。2) 各単位セルの座標原点に対する原子の相対位置を表すベクトル (原子座標)。この事情から、(A-16)の $A(\mathbf{K})$ はもう少し異なった式で表現で

きる. 1) からは $|A(\mathbf{K})|^2$ での Laue 関数, 2) のセル内での原子の相対位置座標と散乱ベクトルからは, $A(\mathbf{K})$ での結晶構造因子 $F(\mathbf{K})$ が更に定義できる.

(A-16)の $A(\mathbf{K})$ から議論する非晶質物質の場合を次ぎに記し, 結晶の場合はその後に記す.

4) 非晶質物質 (液体) の X 線散乱データ

(A-16)の $A(\mathbf{K})$ を用いて, 液体の X 線散乱データがどのような形で解析されるか見てみよう^{51, 52, 53}. 観測量である散乱波強度 I は, (A-8)から,

$$I = I_0 \cdot P \cdot \frac{(r_e)^2}{R^2} \cdot |A(\mathbf{K})|^2 = I_e \cdot |A(\mathbf{K})|^2 \quad (\text{A-17})$$

である. $|A(\mathbf{K})|^2$ の係数全体が電子一個による散乱強度を意味するから,

$$I_e = I_0 \cdot P \cdot \frac{(r_e)^2}{R^2} \quad (\text{A-18})$$

としている. (A-16)に(A-17)を代入して,

$$\begin{aligned} I &= I_e \cdot \left| \sum_{j=1}^n f_j \cdot \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \right|^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n f_j \cdot f_i \cdot \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \\ &= I_e \left\{ \sum_{j=1}^n f_j^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} f_j \cdot f_i \cdot \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \right\} \quad (\text{A-20}) \end{aligned}$$

括弧内第一項は $i=j$ の同一原子の組み合わせであるから位相因子は伴わない. 第二項は $i \neq j$ の異なる原子の対であるから位相差が伴う. この位相差を等方的な平均値で置き換える. 即ち, $\exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)]$ を全立体角に関して平均した値 $\langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \rangle$ で置換する. この $(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ の向きについて平均を求めるには 図 A-2 での (θ, φ) を使う.

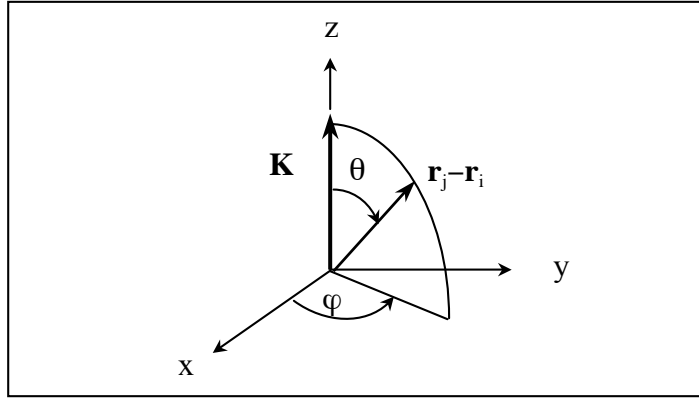


図 A-2. $\exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)]$ を全立体角に関して平均する場合， $(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ の方向を指定する天頂角 θ と方位角 φ .

$$\begin{aligned} \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \rangle &= \frac{1}{4\pi} \cdot \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \exp[-i(K \cdot r_{ji} \cdot \cos\theta)] \cdot \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{\sin(K \cdot r_{ji})}{K \cdot r_{ji}} \end{aligned} \quad (\text{A-21})$$

となる．この積分は(A-11)で既に議論した．

従って，(A-20)の散乱強度 I は，

$$\begin{aligned} I &= I_e \left\{ \sum_{j=1}^n f_j^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} f_j \cdot f_i \cdot \frac{\sin(K \cdot r_{ji})}{K \cdot r_{ji}} \right\} \\ &= I_e \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n f_j \cdot f_i \cdot \frac{\sin(K \cdot r_{ji})}{K \cdot r_{ji}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

となる．散乱角を θ とすれば，反射角はその半分であり，(A-3)の関係

$$|\mathbf{K}| = K = 4\pi \cdot \frac{\sin(\theta/2)}{\lambda} = 4\pi \cdot \frac{\sin\theta'}{\lambda} \quad (\text{A-3})$$

から，散乱強度 I は散乱角の関数として理解される． I の散乱角依存性から，原子の相対距離 $|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| = r_{ji}$ の情報が得られる．

原子位置の違いによる位相差を，等方的な平均値で置き換えた結果が(A-22)

であるから、得られるのは等方性の枠内での原子配列の構造情報である。例えば、隣接する原子の平均距離、一つの原子の中心から距離 r の球面上に何個の原子が平均的に存在するかなどの配位状態のパラメーターなどである。

単原子物質の液体の散乱強度 I データがどのように解釈されるか以下で簡単に見ておこう。単原子物質だから、(A-22)第一式の第二項は、(A-21)の $\langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \rangle$ を用いて、

$$\sum_i^n \sum_{j \neq i}^n f_j \cdot f_i \cdot \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] = n \cdot \sum_j^{(0)} f^2 \cdot \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] \rangle$$

で置き換える。和記号の(0)は、 i 番目の原子の位置を固定していることを示す。

故に、散乱強度 I は、

$$I = I_e \left\{ n f^2 + n \cdot f^2 \sum_j^{(0)} \frac{\sin(K \cdot r_{ji})}{K \cdot r_{ji}} \right\} \quad (\text{A-23})$$

となる。第二項の和の(0)は、 i 番目の原子の位置を座標原点に固定していることを示すが、原子は有限の大きさを持つので、この原点位置に他の原子は接近できない状況がある。今、原点の i 番目原子の中心から距離 r の位置での単位体積中の原子数を $\rho_A(r)$ とする。 r が小さいところでは、原子間の配置相関から $\rho_A(r)$ はその物質に固有の変化を示すが、 r が大きくなり、遠方になると $\rho_A(r)$ は巨視的測定量となる一定の平均密度 ρ_{A0} となるにちがいない。半径が $(r, r + dr)$ の範囲の球殻 $4\pi r^2 dr$ に含まれる原子数は、 $\rho_A(r)$ を用いて、

$$\rho_A \cdot 4\pi r^2 dr = \rho_{A0} \cdot g(r) \cdot 4\pi r^2 dr \quad (\text{A-24})$$

である。ここで用いた関数 $g(r)$ は、

$$g(r) \equiv \rho_A(r) / \rho_{A0} \quad (\text{A-25})$$

で定義され、その液体における原子の**二体分布関数**とよばれる。 $r \rightarrow \infty$ で

$g(r) \rightarrow 1$ である。また,

$$RDF = 4\pi r^2 \rho_A(r) = 4\pi r^2 \rho_{A0} \cdot g(r) \quad (\text{A-26})$$

が動径分布関数(RDF: radial distribution function)である。

(A-23)に現れた原子 j に関する和を, 等方性を仮定して,

$$\sum_j^{(0)} \frac{\sin(K \cdot r_{ji})}{K \cdot r_{ji}} = \int_{r=0}^{r_m} 4\pi r^2 \rho_A(r) \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr \quad (\text{A-27})$$

と, 積分で置き換える。積分の上限 r_m は測定試料の大きさで決まる。(A-27)は

$$\int_{r=0}^{r_m} 4\pi r^2 [\rho_A(r) - \rho_{A0}] \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr + \int_{r=0}^{r_m} 4\pi r^2 \rho_{A0} \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr$$

と形式的に書き直すことが出来る。ここで, 差し引いて後で加えた積分,

$$\rho_{A0} \int_{r=0}^{r_m} 4\pi r^2 \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr$$

は, 試料の形に依存するものの, 波長に比べて十分に大きな r_m に対しては, 第一項に対して事実上無視して良いことが知られている⁵⁴⁾。従って,

$$I = I_e \cdot n f^2 \left\{ 1 + \int_{r=0}^{\infty} 4\pi r^2 [\rho_A(r) - \rho_{A0}] \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr \right\} \quad (\text{A-28})$$

となる。大きな r_m に対して $\rho_A(r) \rightarrow \rho_{A0}$ で発散はないから, r_m を ∞ に置き換えている。もし, (A-27)の右辺で $r_m \rightarrow \infty$ とするとこの積分は発散することに注意。この発散の為に, (A-27)を書き直して(A-28)のようにして使う。

$I_e \cdot n f^2$ で規格化した I は, 干渉関数 $S(K)$ と呼ばれる。

$$\begin{aligned} S(K) &\equiv \frac{I(K)}{I_e \cdot n f^2} = 1 + \int_{r=0}^{\infty} 4\pi r^2 [\rho_A(r) - \rho_{A0}] \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr \\ &= 1 + 4\pi \rho_{A0} \int_{r=0}^{\infty} r^2 [g(r) - 1] \frac{\sin(K \cdot r)}{K \cdot r} dr \end{aligned} \quad (\text{A-29})$$

干渉関数 $S(K)$ は, その液体における原子の二体分布関数 $g(r)$ に結びつき, (A-26)

から動径分布関数に繋がる。(A-29)を更に変形すると,

$$\frac{1}{4\pi K}[S(K)-1] = \int_{r=0}^{\infty} r[\rho_A(r) - \rho_{A0}] \sin(K \cdot r) dr$$

であり，この逆フーリエ変換は，

$$r[\rho_A(r) - \rho_{A0}] = \frac{1}{2\pi^2} \int_{K=0}^{\infty} K \cdot [S(K) - 1] \sin(K \cdot r) dK$$

となる．故に，

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 r \rho_{A0}} \int_{K=0}^{\infty} K \cdot [S(K) - 1] \sin(K \cdot r) dK \quad (\text{A-30})$$

が得られる^{51, 52, 53}．二体分布関数 $g(r)$ は原点の原子から r の位置に存在する原子の割合を表現し，動径分布関数 $RDF = 4\pi r^2 \rho_A(r) = 4\pi r^2 \rho_{A0} \cdot g(r)$ は，原点の原子から半径 r 距離の球面に分布する原子数を表す．これらの関数 $S(K)$ ， $g(r)$ ， RDF が，X 線の散乱強度データから得られる液体構造パラメータで，液体における原子の集合状態を記述する⁵⁶．

5) 結晶における X 線の散乱と結晶構造因子

1. 結晶構造因子

散乱物質が結晶質固体であるなら，原子やその集合が三次元的に周期的に配列し結晶格子を作っている．従って，電子分布 $\rho(\mathbf{r})$ も同一の三次元的な周期的配列を持つ．結晶格子の基本並進ベクトルを $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ とし， (p, q, r) を各結晶格子単位セルの位置を指定する整数組とする．そして，結晶格子のある単位セルを考え，そのセルの隅をセル内に分布する原子の相対位置を記述する為のセル座標原点とする．座標系原点 \mathbf{O} を基準したその隅の位置ベクトルは $(p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c})$ となる．その単位セル内の一点に対する座標原点 \mathbf{O} からの位置ベクトルを \mathbf{r} ，その結晶格子単位セルの原点からその点までの位置ベクトルを \mathbf{r}'

とすると、 \mathbf{r} と \mathbf{r}' の関係は

$$\mathbf{r} = (p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c}) + \mathbf{r}' \quad (\text{A-31})$$

であり、

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}') \quad (\text{A-32})$$

が成立する。 $\rho(\mathbf{r}')$ は単位セルの原点を基準にした時の \mathbf{r}' の位置での電子密度を意味する。三次元的な周期的配列では、どの単位セルで \mathbf{r}' を考えてもこの値は同じである。従って、構造因子 $A(\mathbf{K})$ を定義する際の散乱体の体積に関する積分は、結晶の場合は、

$$\begin{aligned} A(\mathbf{K}) &= \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV = \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c} + \mathbf{r}')} dV \\ &= \sum_p \sum_q \sum_r \exp[-i\mathbf{K} \cdot (p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c})] \cdot \int_{V(\text{Unit Cell})} \rho(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} dV \quad (\text{A-33}) \end{aligned}$$

となり、全格子点について位相因子について和を取り、これに、一つに単位セルについての散乱因子の体積積分を掛けた結果が、結晶物質全体に対する構造因子 $A(\mathbf{K})$ となる。これは、各格子点に

$$F(\mathbf{K}) = \int_{V(\text{Unit Cell})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \quad (\text{A-34})$$

である散乱体(原子)が存在することと同じである。 $F(\mathbf{K})$ は結晶構造因子(crystal structure factor)と呼ばれる。

改めて、単位セル原点に対する単位セル内 j 番目原子の中心の位置ベクトルを \mathbf{r}_j 、その原子の原子に伴う電子密度分布を $\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ とする。この \mathbf{r} も単位セルの原点に対する位置座標を表す。単位セル内の電子密度分布は、

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_j \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-35})$$

となる. (A-34)の結晶構造因子 $F(\mathbf{K})$ にこれを代入すると,

$$F(\mathbf{K}) = \sum_j \int_{\text{Unit cell}} \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) dV \quad (\text{A-36})$$

となる. ここで, $\mathbf{r} - \mathbf{r}_j = \mathbf{r}'$ と置くと, $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{r}_j$ である. \mathbf{r}' は単位セルで j 番目原子の中心位置から少しずれて分布するその原子に帰属する電子の相対位置を表現している.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{K}) &= \sum_j \int_{\text{Unit cell}} \rho(\mathbf{r}') \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{r}_j)] dV \\ &= \sum_j \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \int_{V(\text{atom})} \rho(\mathbf{r}') \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'] dV \end{aligned}$$

\mathbf{r}' に関する積分は j 番目原子の中心から測った位置ベクトルに関する積分であり, (A-9)で定義されるその原子の原子散乱因子 f に対応する. 各単位セルには異なる種類の原子も存在するとして, j 番目の原子の原子散乱因子という意味で, f_j と記す. 故に,

$$F(\mathbf{K}) = \sum_j^{(\text{cell})} f_j \cdot \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-37})$$

となる. 結晶構造因子 $F(\mathbf{K})$ は, 単位セル内の各原子の原子散乱因子を, 原子の座標 \mathbf{r}_j と散乱ベクトル \mathbf{K} から位相差が生じることを考慮して加えた結果である.

これを(A-33)に代入して, 結晶に対する構造因子は

$$A(\mathbf{K}) = \sum_p \sum_q \sum_r \exp[-i\mathbf{K} \cdot (p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c})] \cdot \sum_j^{(\text{cell})} f_j \cdot \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-38})$$

となる.

一方, 格子和から生じる位相因子を

$$\mathbf{G}(\mathbf{K}) \equiv \sum_p \sum_q \sum_r \exp[-i\mathbf{K} \cdot (p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c})] \quad (\text{A-39})$$

と表記すると, 結晶に対する構造因子は

$$\mathbf{A}(\mathbf{K}) = G(\mathbf{K}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{K}) \quad (\text{A-40})$$

と格子和の因子と結晶構造因子の積となる．測定値の散乱強度 I は、(A-8)の

$$I = I_e \cdot |\mathbf{A}(\mathbf{K})|^2 \quad \text{から、}$$

$$I = I_e |\mathbf{A}(\mathbf{K})|^2 = I_e |G(\mathbf{K})|^2 \cdot |\mathbf{F}(\mathbf{K})|^2 \quad (\text{A-41})$$

となる． $|G(\mathbf{K})|^2$ は結晶質物質に固有の因子で、次に説明する Laue 関数である．

2. Laue 関数

結晶格子の基本並進ベクトルを $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ で、 (p, q, r) は各結晶格子単位セルの位置を指定する整数組である．現実結晶の格子は、 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ が、それぞれ、 N_a, N_b, N_c 回繰り返されて出来ているとすると、 (p, q, r) の範囲は、

$$(p, q, r) = (0, 0, 0) \rightarrow (N_a - 1, N_b - 1, N_c - 1) \quad (\text{A-42})$$

とすることができる．故に、(A-39)は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{K}) &= \sum_p \sum_q \sum_r \exp[-i\mathbf{K} \cdot (p \cdot \mathbf{a} + q \cdot \mathbf{b} + r \cdot \mathbf{c})] \\ &= \sum_{p=0}^{N_a-1} \exp[-i \cdot p(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] \cdot \sum_{q=0}^{N_b-1} \exp[-i \cdot q(\mathbf{K} \cdot \mathbf{b})] \cdot \sum_{r=0}^{N_c-1} \exp[-i \cdot r(\mathbf{K} \cdot \mathbf{c})] \quad (\text{A-43}) \end{aligned}$$

である．それぞれの和、例えば、第一和では公比が $\exp[-i \cdot (\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})]$ である等比級数の和であるから、

$$\sum_{p=0}^{N_a-1} \exp[-i \cdot p(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] = \frac{1 - \exp[-i \cdot N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})]}{1 - \exp[-i \cdot (\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})]}$$

である．また、分母の $1 - \exp[-i \cdot (\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})]$ は、 $(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}) \equiv \theta$ とすると、

$$\begin{aligned} 1 - \exp[-i \cdot (\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] &= 1 - \cos \theta + i \cdot \sin \theta = 2 \sin^2(\theta/2) + i \cdot 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \\ &= 2 \sin(\theta/2) [\sin(\theta/2) + i \cdot \cos(\theta/2)] \\ &= 2 \sin(\theta/2) [\cos(\theta/2 - \pi/2) + i \cdot \sin(\theta/2 - \pi/2)] \end{aligned}$$

$$= 2\sin(\theta/2)\{\exp[i(\theta/2 - \pi/2)] = 2\sin(\theta/2) \cdot e^{i(\theta/2)} \cdot e^{-i\pi/2}$$

となる。同様に分母についても、

$$1 - \exp[-i \cdot N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] = 2\sin(N_a\theta/2) \cdot e^{i \cdot N_a\theta/2} \cdot e^{-i\pi/2}$$

となるから、

$$\sum_{p=0}^{N_a-1} \exp[-i \cdot p(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] = e^{i(N_a-1)(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2} \cdot \frac{\sin[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]}{\sin[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]} \quad (44)$$

故に、

$$\left| \sum_{p=0}^{N_a-1} \exp[-i \cdot p(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] \right|^2 = \frac{\sin^2[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]}{\sin^2[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]} \quad (45)$$

である。同様の等式は(A-43)の \mathbf{b} , \mathbf{c} に関する和でも成立するから、

$$|G(\mathbf{K})|^2 = \frac{\sin^2[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]}{\sin^2[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]} \cdot \frac{\sin^2[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{b})/2]}{\sin^2[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{b})/2]} \cdot \frac{\sin^2[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{c})/2]}{\sin^2[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{c})/2]} \quad (46)$$

である。この右辺がラウエ関数(Laue function)と呼ばれる。各項の値を、 $(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2$

を例に考えよう。分子も分母も 2π の周期関数であるから、 $(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2 = x$ として、

0 に近い小さな x の値を考えれば良い。

$$\frac{\sin^2[N_a(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]}{\sin^2[(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a})/2]} = \frac{\sin^2(N_a x)}{\sin^2 x} \approx \frac{[N_a x - (1/3!)(N_a x)^3 + \dots]^2}{[x - (1/3!)x^3 + \dots]^2} \approx N_a^2$$

となる。現実結晶で N_a, N_b, N_c は大きな整数であるから、ラウエ関数の値は、

(h, k, l) を 0 又は正負の整数として

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{a} = 2\pi h, \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{b} = 2\pi k, \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = 2\pi l \quad (A-47)$$

である時、鋭い極大値を示し、この条件から少しずれた場合は極めて小さな値

にしかない。(A-47)の条件が成立する場合は、

$$|G(\mathbf{K})|^2 = (N_a N_b N_c)^2 = N^2 \quad (A-48)$$

となる。N は結晶に含まれる単位セルの総数である。(A-47)は回折におけるラ

ウエの条件と呼ばれる。

3. Laue の条件と逆格子ベクトル

< 結晶面指数 (h, k, l) と面間隔 d_{hkl} >

ラウエの回折条件(A-47)を満足する整数の組 (h, k, l) は、結晶格子の格子面を指定する面指数 (Miller の面指数とも呼ばれる) に対応している。これを説明しよう。図 A-3 に示すように、互いに平行な格子面 1, 2, 3, ... を考える。

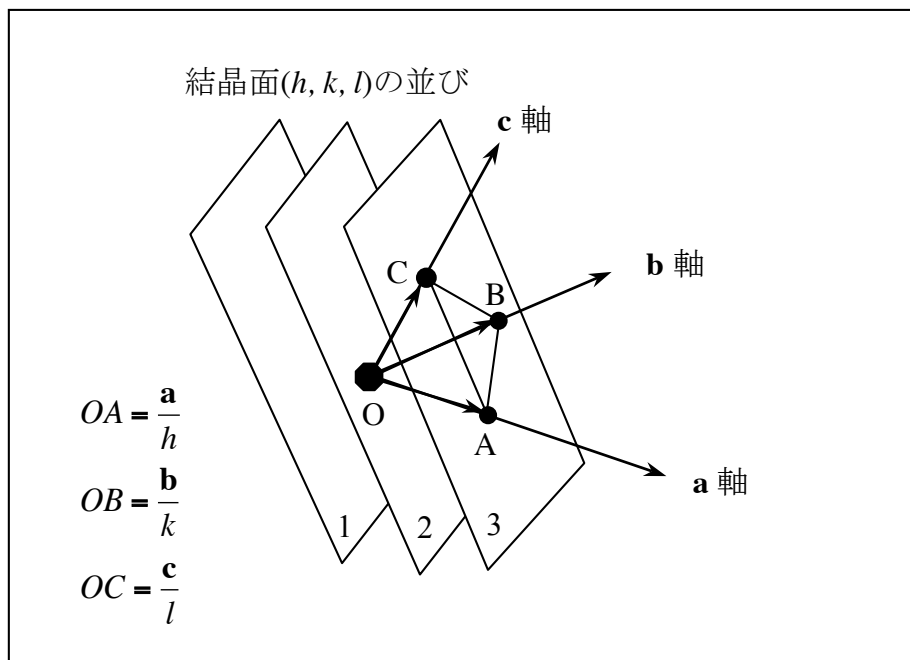


図 A-3. 格子面の面指数 (h, k, l) とこの面指数 (Miller 指数) で指定される結晶面 (h, k, l) の並び. 座標原点 O は面 2 にあり, 面 3 は面 2 に最も近い平行な格子面で, 各結晶軸は面 3 上の点 A, B, C で交差する。

これら平行な格子面は同等な結晶面である。格子面 2 に結晶軸の原点 O を置き, そこから伸ばした結晶軸 a, b, c が, 格子面 2 に最も近い同等な格子面 3 と点 $A,$

B, C で交差する時, これら平行で同等な格子面に対する整数の組(h, k, l)を考え, 面指数(h, k, l)と呼び, 各整数を

$$h = \frac{1}{OA/a}, \quad k = \frac{1}{OB/b}, \quad l = \frac{1}{OC/c} \quad (\text{A-49})$$

と定義する. $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ は, それぞれ, 結晶格子の各結晶軸 a, b, c 方向の基本並進ベクトルである. 例えば, もし, その格子面が a 軸と平行なら, 距離 OA は無限大となるから, $h=0$ となる. また, OA が $(1/2)\mathbf{a}$ であれば, $h=2$ である. このようにして結晶面を指定する面指数(h, k, l)が定義される.

次に, これら面指数(h, k, l)を持つ結晶面間の最小の面間隔 d_{hkl} を考えよう.

図 A-3 からすると, これらの面の法線は, 格子面 3 上の二つのベクトル AB, BC と直交するから, 両ベクトルの外積で決まるベクトルがこの法線に平行である.

$$(AB) \times (BC) = \left(\frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h}\right) \times \left(\frac{\mathbf{c}}{l} - \frac{\mathbf{b}}{k}\right) = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{kl} + \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{lh} + \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{hk}$$

この両辺に, 単位セル体積を V_c として, $2\pi \cdot hkl \cdot V_c$ を掛けたものを \mathbf{g} とおくと,

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= 2\pi h \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V_c} + 2\pi k \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V_c} + 2\pi l \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V_c} \\ &= 2\pi h \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} + 2\pi k \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} + 2\pi l \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})} \end{aligned} \quad (\text{A-50})$$

となる. \mathbf{g} が何を意味するかはここでは留保し, 後で説明する. 二番目の等号は格子の基本ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ のスカラー三重積,

$$V_c = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

が単位セル体積 V_c であることを使っている.

< 面間隔 d_{hkl} と逆格子 >

(A-50)の右辺に現れた三つのベクトルは逆格子(reciprocal lattice)の基本並進ベクトルと呼ばれる。

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})}, \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})} \quad (\text{A-51})$$

問題としている面指数(h, k, l)を持つ結晶面の最小の面間隔 d_{hkl} を考えることで、逆格子の意味も理解出来る。この最小の面間隔 d_{hkl} は、図 A-3 では、距離 OA の格子面の法線への正射影である。 $\mathbf{g}/|\mathbf{g}|$ は法線方向の単位ベクトルであるから、面間隔 d_{hkl} は、

$$d_{hkl} = OA \cdot (\mathbf{g}/|\mathbf{g}|) = \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{g}/|\mathbf{g}|)}{h} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}|} \cdot \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{V_c} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}|} \quad (\text{A-52})$$

である。(A-50)の \mathbf{g} を右辺に代入すると、 \mathbf{a} は $(\mathbf{c} \times \mathbf{a})$, $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ と直交するので、(A-50)右辺の第2, 3項は0となり(A-52)右辺に残らない。距離 OB, OC の同様な正射影も d_{hkl} であるが、これらを考えても(A-52)と同一の結果となる。即ち、面間隔 d_{hkl} は 2π を \mathbf{g} の絶対値で割った値である。これは、 \mathbf{g} が何であることを明確にしている。 \mathbf{g} は、方向が面指数(h, k, l)の結晶面に垂直で、(A-52)から、その大きさは 2π に面間隔の逆数を掛けた

$$|\mathbf{g}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad (\text{A-53})$$

である。(A-50), (A-51)から \mathbf{g} は、

$$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \quad (\text{A-54})$$

である。向きは面指数(h, k, l)の結晶面に垂直で、大きさが $|\mathbf{g}| = 2\pi/d_{hkl}$ であるベクトル \mathbf{g} は、逆格子ベクトルと呼ばれる。結晶面(h, k, l)を、その面に垂直で原点から \mathbf{g} だけ離れた一点として表現している。この点は(A-54)に従い格子を

作るが、この格子間隔は距離の逆数の次元を持つので、**逆格子**と呼ばれる。 \mathbf{g} の各点は逆格子点と呼ばれ、(A-54)のように**逆格子の基本並進ベクトル**と (h, k, l) で表現される。**逆格子ベクトル** \mathbf{g} は、逆格子の格子点を指定するベクトルである。

ステレオ投影で面を表現するとき、その面の法線が単位球面と交差する点を用いて面を代表させる。即ち、面を「単位球面上の点」として扱う。ここでは、 (h, k, l) 面の法線に大きさ $2\pi/d_{hkl}$ を与えて、ベクトルとしたものが**逆格子ベクトル** \mathbf{g} であり、このような点の集合が逆格子をなすと考えれば良い。実格子の格子点が結晶格子の基本並進ベクトルを $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ と (p, q, r) の整数の組で指定されるのと同様に、逆格子の格子点は、基本並進ベクトル $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ と面指数の整数組 (h, k, l) で指定される。

実格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ と逆格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ の間には、次のような重要な直交関係がある。

$$\begin{aligned} \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \rightarrow \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^* \rightarrow \mathbf{a}^*_1, \mathbf{a}^*_2, \mathbf{a}^*_3 \quad \text{と書けば,} \\ \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}^*_j = 2\pi \quad (\mathbf{i} = \mathbf{j}) \\ = 0 \quad (\mathbf{i} \neq \mathbf{j}) \end{aligned} \tag{A-55}$$

である。これは(A-50)または(A-51)から確認出来る。

ラウエの回折条件(A-47)に戻る。この条件は、 (h, k, l) を0又は正負の整数として

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{a} = 2\pi h, \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{b} = 2\pi k, \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = 2\pi l \tag{A-47}$$

が成立することであった。(A-54)の $\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ と(A-55)の直交関係から、

$$\begin{aligned}\mathbf{g} \cdot \mathbf{a} &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot \mathbf{a} = 2\pi h, \\ \mathbf{g} \cdot \mathbf{b} &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot \mathbf{b} = 2\pi k, \\ \mathbf{g} \cdot \mathbf{c} &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot \mathbf{c} = 2\pi l,\end{aligned}$$

となることが判る。故に、

$$\mathbf{K} = \mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \quad (\text{A-56})$$

である。結晶では、散乱ベクトル $\mathbf{K}(=\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)$ が逆格子ベクトル \mathbf{g} に一致した場合にのみ強い散乱、即ち、回折が起こることを意味する。Bragg 反射の法則の一般的表現である。(A-48) と (A-56) から (A-41) の散乱強度は、

$$I = I_e N^2 \cdot |\mathbf{F}(\mathbf{g})|^2 \quad (\text{A-57})$$

である。このように、結晶による X 線の回折強度データは、 $\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ の (h, k, l) に対応付けられた離散的な強度データ $I(hkl)$ の集合である。これら多数の回折強度データから、結晶構造因子を逆に求め、単位セル内の原子位置を決定することができる。その概略を以下に述べる。

< 単位セル内の電子密度分布：原子位置 >

結晶構造因子 $F(\mathbf{K})$ は、

$$F(\mathbf{K}) = \int_{V(\text{Unit Cell})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \quad (\text{A-34})$$

であるが、(A-56) の $\mathbf{K}=\mathbf{g}$ の条件から、

$$F(\mathbf{g}) = \int_{V(\text{Unit Cell})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} dV \quad (\text{A-58})$$

である。また、単位セル内の原子を識別して、

$$F(\mathbf{K}) = \sum_j^{(\text{cell})} f_j \cdot \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (\text{A-37})$$

であったから、単位セル内の原子位置を $\mathbf{r}_j = x_j \cdot \mathbf{a} + y_j \cdot \mathbf{b} + z_j \cdot \mathbf{c}$, $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$

すると、(A-56)の $\mathbf{K} = \mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ から、

$$F(\mathbf{g}) = \sum_j^{(cell)} f_j \cdot \exp(-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j) = \sum_j^{(cell)} f_j \cdot \exp[-2\pi i \cdot (hx_j + ky_j + lz_j)] \quad (\text{A-59})$$

となる。原子散乱因子は知られているから、原子座標が判れば、この右辺は計算できる。

そこで、(A-58)に関連して、次のような単位セル内の位置ベクトル \mathbf{r} の関数 $R(\mathbf{r})$ を考える。

$$R(\mathbf{r}) = \sum_{h,k,l} F(\mathbf{g}) \cdot e^{i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j)} = \sum_{\mathbf{g}} F(\mathbf{g}) \cdot e^{i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j)} \quad (\text{A-60})$$

この式の右辺で、 $\mathbf{r} \rightarrow (\mathbf{r} + \mathbf{a})$ とした場合の値を考えると、(A-55)の直交関係から

$$\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{g} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + h\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + 2\pi h$$

である。 $\mathbf{r} \rightarrow (\mathbf{r} + \mathbf{b})$, $\mathbf{r} \rightarrow (\mathbf{r} + \mathbf{c})$ と変えた場合も、

$$\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{b}) = \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + 2\pi k, \quad \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{c}) = \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + 2\pi l$$

となるので、関数 $R(\mathbf{r})$ はこの結晶と同じ3次元の周期性を持つことが判る。そ

こでさらに、(A-60)の両辺に $e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})}$ を掛けて単位セル体積で積分する：

$$\begin{aligned} \int_{unit\ cell} R(\mathbf{r}) \cdot e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})} dV &= \int_{unit\ cell} e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})} \cdot \left[\sum_{h,k,l} F(\mathbf{g}) \cdot e^{i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j)} \right] dV \\ &= \sum_{\mathbf{g}'} F(\mathbf{g}') \cdot \int_{unit\ cell} e^{-i[(\mathbf{g}-\mathbf{g}') \cdot \mathbf{r}]} dV \end{aligned} \quad (\text{A-61})$$

となる。新たに掛けた $e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})}$ の \mathbf{g} と元々の \mathbf{g} とを区別する為に、元々の \mathbf{g} にダッシュを付け、 $\mathbf{g}'(h',k',l')$ とした。 $\mathbf{r} = x \cdot \mathbf{a} + y \cdot \mathbf{b} + z \cdot \mathbf{c}$ ($0 \leq x, y, z \leq 1$) として代入する。単位セルに関する体積積分の素片 dV は $dx dy dz$ に比例すると考える。(A-55)の直交関係から、

$$\int_{unit\ cell} e^{-i[(\mathbf{g}-\mathbf{g}') \cdot \mathbf{r}]} dV \propto \int_0^1 e^{-i2\pi(h-h')x} dx \cdot \int_0^1 e^{-i2\pi(k-k')y} dy \cdot \int_0^1 e^{-i2\pi(l-l')z} dz$$

$$= \delta_{h,h'} \cdot \delta_{k,k'} \cdot \delta_{l,l'} = \delta_{\mathbf{g},\mathbf{g}'}$$

となる。 $\mathbf{g}' = \mathbf{g}$ である時のみ積分は0ではないので、左辺の積分値は

$$\int_{\text{unit cell}} e^{-i(\mathbf{g}-\mathbf{g}') \cdot \mathbf{r}_j} dV = \int_{\text{unit cell}} dV = V_c$$

と単位セル体積 V_c になる。(A-61)右辺の $F(\mathbf{g}')$ の \mathbf{g}' に関する和においても、

$\mathbf{g}' = \mathbf{g}$ だけが残る。従って、(A-61)は

$$\int_{\text{unit cell}} R(\mathbf{r}) \cdot e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})} dV = V_c \cdot F(\mathbf{g}) \quad (\text{A-62})$$

である。これは次のようにも書ける。

$$F(\mathbf{g}) = \frac{1}{V_c} \cdot \int_{\text{unit cell}} R(\mathbf{r}) \cdot e^{-i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})} dV \quad (\text{A-63})$$

一方、(A-58)は

$$F(\mathbf{g}) = \int_{V(\text{Unit Cell})} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} dV$$

であるから、(A-58)と(A-63)の両者を比べれば、 $\rho(\mathbf{r}) = (1/V_c) \cdot R(\mathbf{r})$ であることが判る。故に、(A-60)の $R(\mathbf{r})$ の定義にもどれば、

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_c} \cdot \sum_{h,k,l} F(\mathbf{g}) \cdot e^{i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j)} \quad (\text{A-64})$$

である。(A-64)は、結晶構造因子のフーリエ変換が単位セル内の電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ を与えることを意味する。これから原子の配列状況、即ち、その結晶の構造が判ることとなる。

(A-58)自体は、 $F(\mathbf{g})$ が電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ のフーリエ変換であることを意味している。そして、(A-61)から(A-64)に至る議論は、その逆フーリエ変換を求める過程に当る⁵³⁾。液体の散乱データの場合もそうであったように、構造因子は電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ のフーリエ変換であるから、その逆変換が電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ であり、原子の

空間分布情報を与えるのは当然と言うことになる。

ところで、観測量は(A-57)の $I = I_0 N^2 \cdot |\mathbf{F}(\mathbf{g})|^2$ である。 $|\mathbf{F}(\mathbf{g})|^2$ を知ることは出来るが、 $\mathbf{F}(\mathbf{g})$ 自体は測定値ではない。 $\mathbf{F}(\mathbf{g})$ の振幅は測定できるが、 $\mathbf{F}(\mathbf{g})$ の位相は判らない (位相問題)。これには別途の対処が必要となる。また、結晶中で原子は常に熱振動しているので、実際は原子散乱因子に温度因子あるいは Debye-Waller 因子を掛けて考える。測定強度 I のデータを取り扱う場合には、結晶の対称性による消滅則などの問題も考えねばならない。これらの問題など、さらに詳しい具体的解析手法については成書^{51, 52, 54, 55)}を参照して頂くことにしよう。

多数の無機物質、DNA やタンパク質などの生体物質の X 線散乱・回折データから、これらの構造解析が行われており、物質内の原子配置状況が明らかにされている。その構造解析の基礎は Thomson 散乱の式であり、電磁気学の散乱理論が様々な物質の構造研究を支えていることを再度確認し、この項の議論終了とする。

付録 B：一般的なローレンツ変換

慣性系 S (t, x, y, z) の x 軸方向に V の速度で運動する慣性系を S' (t', x', y', z') とする時、4元座標のローレンツ変換は、§ 28-1) で述べたように、

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & (-V/c)\gamma & 0 & 0 \\ (-V/c)\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \quad (\text{§ 28-2})$$

である。行列を使わずに書けば、

$$ct' = \gamma \cdot ct - (V/c)\gamma \cdot x, \quad x' = -(V/c)\gamma \cdot ct + \gamma \cdot x, \quad y' = y, \quad z' = z \quad (\text{§ 28-3})$$

である。ここでは、

$$(ct, x, y, z) = (x^0, x^1, x^2, x^3), \quad (ct', x', y', z') = (x^{0'}, x^{1'}, x^{2'}, x^{3'}) \quad (\text{B-1})$$

と記す。また、

$$\beta = \frac{V}{c}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(V/c)^2}} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (\text{B-2})$$

と書くことにする。(§ 28-2)は次のようになる。

$$\begin{pmatrix} x^{0'} \\ x^{1'} \\ x^{2'} \\ x^{3'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (\text{B-3})$$

また(§ 28-3)も次のようになる。

$$x^{0'} = \gamma(x^0 - \beta \cdot x^1), \quad x^{1'} = \gamma(x^1 - \beta \cdot x^0), \quad x^{2'} = x^2, \quad x^{3'} = x^3 \quad (\text{B-4})$$

以上の x 軸方向に V の速度で運動する場合の結果を利用して、任意の方向へ速度 V で運動する慣性系 S' に対するローレンツ変換を求める。時間原点では、二つの空間座標系は完全に一致していることが前提となる。

(B-4)の等式はベクトルの成分に関する等式である。時間成分はそのままにし

て、空間成分については、成分ではなく、ベクトルそのもので表現してみよう。

その為に、(B-2)の $\beta = V/c$ をベクトルで表現しておこう。

$$\vec{\beta} = \frac{\mathbf{V}}{c} = (V_x/c, V_y/c, V_z/c) \quad (\text{B-5})$$

とりあえず、 $V_x \neq 0, V_y = V_z = 0$ として、これを用いると(B-4)は次のようになる。

$$x^{0'} = \gamma(x^0 - \vec{\beta} \cdot \vec{x}^1), \quad \vec{x}^{1'} = \gamma(\vec{x}^1 - \vec{\beta} \cdot x^0), \quad \vec{x}^{2'} = \vec{x}^2, \quad \vec{x}^{3'} = \vec{x}^3 \quad (\text{B-6})$$

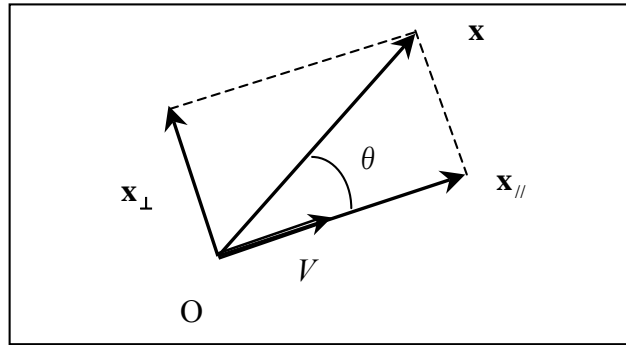
こうした上で、 \vec{x}^1 を速度 \mathbf{V} に平行なベクトル $\mathbf{x}_{//}$ と考え、 $\vec{x}^{2'} = \vec{x}^2, \vec{x}^{3'} = \vec{x}^3$ を速度 \mathbf{V} に垂直なベクトル \mathbf{x}_{\perp} で表現すると、(B-6)は

$$x^{0'} = \gamma(x^0 - \vec{\beta} \cdot \mathbf{x}_{//}), \quad \mathbf{x}_{//}' = \gamma(\mathbf{x}_{//} - \vec{\beta} \cdot x^0), \quad \mathbf{x}_{\perp}' = \mathbf{x}_{\perp} \quad (\text{B-7})$$

となる。これは位置ベクトル \mathbf{x} を \mathbf{V} に平行なベクトル $\mathbf{x}_{//}$ と速度 \mathbf{V} に垂直なベクトル \mathbf{x}_{\perp} に分解して考えたことになるので(図B-1),

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{//} + \mathbf{x}_{\perp} \quad (\text{B-8})$$

が成立している。



図B-1. 任意の位置ベクトル \mathbf{x} を、座標系 S' の速度 \mathbf{V} に平行なベクトル $\mathbf{x}_{//}$ と垂直なベクトル \mathbf{x}_{\perp} に分解して考える。

速度 \mathbf{V} の方向の単位ベクトルを \mathbf{e} とすると、

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{V}}{|\mathbf{V}|} = \frac{\mathbf{V}/c}{|\mathbf{V}/c|} = \frac{\vec{\beta}}{|\vec{\beta}|} \quad (\text{B-9})$$

である。従って、 \mathbf{V} に平行なベクトル $\mathbf{x}_{//}$ は、図 B-1 を参照して、

$$\mathbf{x}_{//} = (|\mathbf{x}|\cos\theta) \cdot \mathbf{e} = \frac{1}{|\vec{\beta}|} (\vec{\beta} \cdot \mathbf{x}) \cdot \mathbf{e} = \frac{1}{|\vec{\beta}|^2} (\vec{\beta} \cdot \mathbf{x}) \vec{\beta} \quad (\text{B-10})$$

となる。(B-8)と(B-10)から、 \mathbf{V} に垂直なベクトル \mathbf{x}_{\perp} は、

$$\mathbf{x}_{\perp} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_{//} = \mathbf{x} - \frac{1}{|\vec{\beta}|^2} (\vec{\beta} \cdot \mathbf{x}) \vec{\beta} \quad (\text{B-11})$$

である。このように $\mathbf{x}_{//}$ と \mathbf{x}_{\perp} は \mathbf{x} と $\vec{\beta}$ で表現出来るので、(B-10)、(B-11)、(B-7)を用いて、次の結果を得る。

$$x^{0'} = \gamma(x^0 - \vec{\beta} \cdot \mathbf{x}), \quad (\text{B-12})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' &= \mathbf{x}_{//} + \mathbf{x}_{\perp} = \gamma(\mathbf{x}_{//} - \vec{\beta} \cdot x^0) + \mathbf{x}_{\perp} \\ &= \mathbf{x} + (\gamma - 1) \frac{1}{\beta^2} (\vec{\beta} \cdot \mathbf{x}) \vec{\beta} - \gamma \cdot \vec{\beta} \cdot x^0 \end{aligned} \quad (\text{B-13})$$

(B-12)と(B-13)は $(x^0, \mathbf{x}) \rightarrow (x^{0'}, \mathbf{x}')$ の変換式を与えている。これは Herglotz 表示と呼ばれる。この結果を行列で表現すると、以下のようなになる。

$$\begin{pmatrix} x^{0'} \\ x^{1'} \\ x^{2'} \\ x^{3'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta_1\gamma & -\beta_2\gamma & -\beta_3\gamma \\ -\beta_1\gamma & 1 + (\gamma - 1)\beta_1^2/\beta^2 & (\gamma - 1)\beta_2\beta_1/\beta^2 & (\gamma - 1)\beta_3\beta_1/\beta^2 \\ -\beta_2\gamma & (\gamma - 1)\beta_1\beta_2/\beta^2 & 1 + (\gamma - 1)\beta_2^2/\beta^2 & (\gamma - 1)\beta_3\beta_2/\beta^2 \\ -\beta_3\gamma & (\gamma - 1)\beta_1\beta_3/\beta^2 & (\gamma - 1)\beta_2\beta_3/\beta^2 & 1 + (\gamma - 1)\beta_3^2/\beta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (\text{B-14})$$

(B-12)と(B-13)は、時間原点で慣性系 $S(x, y, z)$ と $S'(x', y', z')$ の空間座標軸が完全に一致しており、 $S'(x', y', z')$ が任意の方向に速度 $\mathbf{V} (= c\vec{\beta})$ で運動している場合のローレンツ変換を表す。 x 軸方向へ運動する場合の(B-3)は、任意の方向へ運動する場合の(B-14)に一般化された。

時間原点で二つの慣性系の空間座標原点のみが一致し、座標軸が一致していない場合は、§ 28-1)で述べたように、3次元空間座標系の回転を三つのオイラー角で考えれば良い。ここでは省略する。

付録 C : 電磁場のローレンツ変換

慣性系 S (ct, x, y, z) の x 軸方向に V の速度で運動する慣性系を S' (ct', x', y', z') とする時, 4 元座標のローレンツ変換は, 付録 B の(B-3)である. この場合の電磁場のローレンツ変換を, 反対称二階共変テンソル $f_{\mu\nu}$

$$(f_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} f_{00} & f_{01} & f_{02} & f_{03} \\ f_{10} & f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{20} & f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{30} & f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & B_z & -B_y \\ E_y/c & -B_z & 0 & B_x \\ E_z/c & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\S 28-111)$$

と, 二階共変テンソルのローレンツ変換における変換則,

$$C_{\mu\nu}'(x') = \frac{\partial x^\rho}{\partial x^{\mu'}} \frac{\partial x^\sigma}{\partial x^{\nu'}} C_{\rho\sigma}(x) \quad (\S 28-79-2)$$

を用いて具体的に求めてみる. その結果には, § 27 で議論した電磁場の (E_y, B_z) と (E_z, B_y) についてのローレンツ変換が含まれることを確認しよう.

変換則の $C_{\mu\nu}'$, $C_{\rho\sigma}$ を $f_{\mu\nu}'$, $f_{\rho\sigma}$ で置き換える.

$$f_{\mu\nu}'(x') = \frac{\partial x^\rho}{\partial x^{\mu'}} \frac{\partial x^\sigma}{\partial x^{\nu'}} f_{\rho\sigma}(x) \quad (C-1)$$

また, 変換係数は, 共変テンソルであるから, 4 元座標のローレンツ変換の逆変換の係数を用いて,

$$\frac{\partial x^\rho}{\partial x^{\mu'}} \frac{\partial x^\sigma}{\partial x^{\nu'}} = \beta_\mu^\rho \cdot \beta_\nu^\sigma \quad (C-2)$$

である. 4 元座標のローレンツ変換は,

$$\begin{pmatrix} x^{0'} \\ x^{1'} \\ x^{2'} \\ x^{3'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (B-3)$$

であるから, 4 元座標の逆変換は, 座標変数の組を左右で入れ替えて, $V \rightarrow -V$

とすれば得られる.

$$\begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \beta\gamma & 0 & 0 \\ \beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{0'} \\ x^{1'} \\ x^{2'} \\ x^{3'} \end{pmatrix} \quad (\text{C-3})$$

即ち,

$$(\beta_\nu^\mu) = \begin{pmatrix} \beta_0^0 & \beta_1^0 & \beta_2^0 & \beta_3^0 \\ \beta_0^1 & \beta_1^1 & \beta_2^1 & \beta_3^1 \\ \beta_0^2 & \beta_1^2 & \beta_2^2 & \beta_3^2 \\ \beta_0^3 & \beta_1^3 & \beta_2^3 & \beta_3^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \beta\gamma & 0 & 0 \\ \beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{C-4})$$

$\beta = V/c$, $\gamma = 1/\sqrt{1-(V/c)^2} = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ である. 故に, (C-1)の変換式は, (C-2)と(C-4)を用いて,

$$f_{\mu\nu}' = \beta_\mu^\rho \cdot \beta_\nu^\sigma f_{\rho\sigma} \quad (\text{C-5})$$

となる.

(C-5) の変換式と (§ 28-111), (C-4)を参照して, **E** と **B** の成分の変換式を各成分毎に求める. (C-4)から判るように (β_ν^μ) には0の要素が多数あり, $f_{\mu\nu}$ の対角成分も0であるので, それぞれの場合, 以下に記すように, (C-5)右辺で最終的に残る項は1ないし2項しかない.

$$\begin{aligned} \cdot E_x'/c = f_{10}' &= \beta_1^\rho \cdot \beta_0^\sigma f_{\rho\sigma} \\ &= \beta_1^0 \cdot (\beta_0^0 f_{00}) + \beta_1^1 \cdot (\beta_0^0 f_{10}) + \beta_1^2 \cdot (\beta_0^0 f_{20}) + \beta_1^3 \cdot (\beta_0^0 f_{30}) \\ &= \beta_1^0 \cdot (\beta_0^0 f_{00}) + \beta_1^1 \cdot (\beta_0^0 f_{10}) \\ &= \beta_1^0 \cdot \beta_0^1 f_{01} + \beta_1^1 \cdot \beta_0^0 f_{10} \\ &= (\beta\gamma)^2 (-E_x/c) + \gamma^2 (E_x/c) = (1-\beta^2)\gamma^2 (E_x/c) = (E_x/c) \end{aligned}$$

これより,

$$E_x' = E_x \quad (\text{C-6})$$

$$\begin{aligned}
\bullet \quad E_y'/c = f_{20}' &= \beta_2^0 \cdot \beta_0^\sigma f_{\rho\sigma} \\
&= \beta_2^0 \cdot (\beta_0^\sigma f_{0\sigma}) + \beta_2^1 \cdot (\beta_0^\sigma f_{1\sigma}) + \beta_2^2 \cdot (\beta_0^\sigma f_{2\sigma}) + \beta_2^3 \cdot (\beta_0^\sigma f_{3\sigma}) \\
&= \beta_2^2 \cdot (\beta_0^\sigma f_{2\sigma}) \\
&= \beta_2^2 \cdot \beta_0^0 f_{20} + \beta_2^2 \cdot \beta_0^1 f_{21} \\
&= 1 \cdot \gamma \cdot E_y/c + 1 \cdot \beta\gamma(-B_z) = \gamma \cdot E_y/c - \beta\gamma B_z
\end{aligned}$$

これより, $\beta = V/c$ であるから,

$$E_y' = \gamma(E_y - VB_z) \quad (\text{C-7})$$

$$\begin{aligned}
\bullet \quad E_z'/c = f_{30}' &= \beta_3^0 \cdot \beta_0^\sigma f_{\rho\sigma} \\
&= \beta_3^0 \cdot (\beta_0^\sigma f_{0\sigma}) + \beta_3^1 \cdot (\beta_0^\sigma f_{1\sigma}) + \beta_3^2 \cdot (\beta_0^\sigma f_{2\sigma}) + \beta_3^3 \cdot (\beta_0^\sigma f_{3\sigma}) \\
&= \beta_3^3 \cdot (\beta_0^\sigma f_{3\sigma}) \\
&= \beta_3^3 \cdot (\beta_0^0 f_{30} + \beta_0^1 f_{31} + \beta_0^2 f_{32} + \beta_0^3 f_{33}) = \beta_3^3 \cdot \beta_0^0 f_{30} + \beta_3^3 \cdot \beta_0^1 f_{31} \\
&= 1 \cdot \gamma \cdot E_z/c + 1 \cdot \beta\gamma(B_y) = \gamma \cdot E_z/c + \beta\gamma B_y
\end{aligned}$$

従って,

$$E_z' = \gamma(E_z + VB_y) \quad (\text{C-8})$$

$$\begin{aligned}
\bullet \quad B_x' = f_{23}' &= \beta_2^0 \cdot \beta_3^\sigma f_{\rho\sigma} \\
&= \beta_2^0 \cdot \beta_3^0 f_{0\sigma} + \beta_2^1 \cdot \beta_3^0 f_{1\sigma} + \beta_2^2 \cdot \beta_3^0 f_{2\sigma} + \beta_2^3 \cdot \beta_3^0 f_{3\sigma} \\
&= \beta_2^2 \cdot \beta_3^0 f_{2\sigma} = \beta_2^2 \cdot (\beta_3^0 f_{20} + \beta_3^1 f_{21} + \beta_3^2 f_{22} + \beta_3^3 f_{23}) \\
&= \beta_2^2 \cdot \beta_3^3 f_{23} = \beta_2^2 \cdot \beta_3^3 f_{23} = B_x
\end{aligned}$$

故に,

$$B_x' = B_x \quad (\text{C-9})$$

$$\begin{aligned}
\bullet \quad B_y' = f_{31}' &= \beta_3^0 \cdot \beta_1^\sigma f_{\rho\sigma} \\
&= \beta_3^0 \cdot \beta_1^0 f_{0\sigma} + \beta_3^1 \cdot \beta_1^0 f_{1\sigma} + \beta_3^2 \cdot \beta_1^0 f_{2\sigma} + \beta_3^3 \cdot \beta_1^0 f_{3\sigma}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \beta_3^3 \cdot \beta_1^\sigma f_{3\sigma} = \beta_3^3 \cdot (\beta_1^0 f_{30} + \beta_1^1 f_{31} + \beta_1^2 f_{32} + \beta_1^3 f_{33}) \\
&= \beta_3^3 \cdot (\beta_1^0 f_{30} + \beta_1^1 f_{31}) = \beta_1^0 f_{30} + \beta_1^1 f_{31} \\
&= \beta\gamma E_z / c + \gamma B_y = \gamma[B_y + (\beta/c)E_z]
\end{aligned}$$

故に,

$$B_y' = \gamma[B_y + (\beta/c)E_z] \quad (\text{C-10})$$

$$\begin{aligned}
\bullet \quad B_z' = f_{12}' &= \beta_1^\rho \cdot \beta_2^\sigma f_{\rho\sigma} \\
&= \beta_1^0 \cdot \beta_2^\sigma f_{0\sigma} + \beta_1^1 \cdot \beta_2^\sigma f_{1\sigma} + \beta_1^2 \cdot \beta_2^\sigma f_{2\sigma} + \beta_1^3 \cdot \beta_2^\sigma f_{3\sigma} \\
&= \beta_1^0 \cdot \beta_2^\sigma f_{0\sigma} + \beta_1^1 \cdot \beta_2^\sigma f_{1\sigma} \\
&= \beta_1^0 \cdot (\beta_2^0 f_{00} + \beta_2^1 f_{01} + \beta_2^2 f_{02} + \beta_2^3 f_{03}) + \beta_1^1 \cdot (\beta_2^0 f_{10} + \beta_2^1 f_{11} + \beta_2^2 f_{12} + \beta_2^3 f_{13}) \\
&= \beta_1^0 \cdot \beta_2^2 f_{02} + \beta_1^1 \cdot \beta_2^2 f_{12} \\
&= \beta\gamma(-E_y / c) + \gamma B_z = \gamma[B_z - (\beta/c)E_y]
\end{aligned}$$

故に,

$$B_z' = \gamma[B_z - (\beta/c)E_y] \quad (\text{C-11})$$

以上の(C-6)-(C-11)の結果を, $(\beta/c) = (V/c^2)$ を使って, まとめると以下のようになる.

$$E_x' = E_x, \quad E_y' = \gamma(E_y - VB_z), \quad E_z' = \gamma(E_z + VB_y) \quad (\text{C-12-1})$$

$$B_x' = B_x, \quad B_y' = \gamma[B_y + (V/c^2)E_z], \quad B_z' = \gamma[B_z - (V/c^2)E_y] \quad (\text{C-12-2})$$

付録 B で説明した考え方 (Herglotz 表示) と同じように, S'系の S に対する x 軸方向の速度 \mathbf{V} をベクトルとして, $\mathbf{V} = (V, 0, 0)$ と表現し, 電磁場(\mathbf{E}, \mathbf{B})も \mathbf{V} に平行な成分 ($\mathbf{E}_{//}, \mathbf{B}_{//}$) と垂直な成分($\mathbf{E}_{\perp}, \mathbf{B}_{\perp}$)に分けて考えることで, 電磁場(\mathbf{E}, \mathbf{B})の一般の変換式を得ることが出来る.

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{//} &= (E_x, 0, 0), & \mathbf{E}_{\perp} &= (0, E_y, E_z) \\
\mathbf{B}_{//} &= (B_x, 0, 0), & \mathbf{B}_{\perp} &= (0, B_y, B_z)
\end{aligned} \quad (\text{C-13})$$

であるから、(C-12-1)と(C-12-2)の結果は、

$$\begin{aligned}\mathbf{E}'_{\parallel} &= \mathbf{E}_{\parallel}, \\ \mathbf{E}'_{\perp} &= (0, \gamma(E_y - VB_z), \gamma(E_z + VB_y)) = \gamma(0, E_y, E_z) + \gamma(0, -VB_z, VB_y) \\ &= \gamma(\mathbf{E}_{\perp} + \mathbf{V} \times \mathbf{B}_{\perp})\end{aligned}\quad (\text{C-14-1})$$

$$\begin{aligned}\mathbf{B}'_{\parallel} &= \mathbf{B}_{\parallel}, \\ \mathbf{B}'_{\perp} &= (0, \gamma[B_y + (V/c^2)E_z], \gamma[B_z - (V/c^2)E_y]) \\ &= \gamma(0, B_y, B_z) + \gamma(0, VE_z/c^2, -VE_y/c^2) \\ &= \gamma(\mathbf{B}_{\perp} - \mathbf{V} \times \mathbf{E}_{\perp}/c^2)\end{aligned}\quad (\text{C-14-2})$$

となる。

このように、運動方向の電場、磁場成分は変更されず、運動方向に垂直な成分では $\gamma = 1/\sqrt{1-(V/c)^2} = 1/\sqrt{1-\beta^2} > 1$ の因子が掛かり、さらに電場と磁場の成分が次のように混ざりあって変換される。

$$\mathbf{E}'_{\perp} = \gamma(\mathbf{E}_{\perp} + \mathbf{V} \times \mathbf{B}_{\perp}), \quad \mathbf{B}'_{\perp} = \gamma(\mathbf{B}_{\perp} - \mathbf{V} \times \mathbf{E}_{\perp}/c^2)$$

これは、次のようにも表現出来る。

$$\mathbf{E}'_{\perp}/c = \gamma[(\mathbf{E}_{\perp}/c) + (\mathbf{V}/c) \times \mathbf{B}_{\perp}], \quad \mathbf{B}'_{\perp} = \gamma[\mathbf{B}_{\perp} - (\mathbf{V}/c) \times (\mathbf{E}_{\perp}/c)]$$

だから、 $(\mathbf{E}_{\perp}/c, \mathbf{B}_{\perp}) \rightarrow (\mathbf{E}'_{\perp}/c, \mathbf{B}'_{\perp})$ の変換には、 $(\mathbf{E}_{\perp}/c, \mathbf{B}_{\perp}) \rightarrow (\mathbf{B}_{\perp}, -\mathbf{E}_{\perp}/c)$ の入れ替えが伴っている。これは § 28-(6)-1 で述べた双対変換に当る。

(C-12-1)と(C-12-2)から、座標系 S' が x 軸の正方向に \mathbf{V} の速度で運動する場合、電場と磁場は、 (E_y, B_z) と (E_z, B_y) がそれぞれ一組になって変換される。

$$\begin{pmatrix} E'_y \\ B'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma V \\ -\gamma V/c^2 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_y \\ B_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -V \\ -V/c^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_y \\ B_z \end{pmatrix} \quad (\text{C-15-1})$$

$$\begin{pmatrix} E'_z \\ B'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \gamma V \\ \gamma V/c^2 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_z \\ B_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & V \\ V/c^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_z \\ B_y \end{pmatrix} \quad (\text{C-15-2})$$

§ 27 では「無限平板コンデンサー」と「長方形断面の中空筒状コイル」について、空間固定の座標系 S と、これに対して x 軸の負の方向に $-v$ で運動する座標系 S' での電磁場を考え、 (E_y, B_z) に関する次の変換式を得た。

$$\begin{pmatrix} E'_y \\ B'_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & v \\ (v/c^2) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_y \\ B_z \end{pmatrix} \quad (\text{§ 27-24})$$

(C-15-1)式に対応するが、 $-v$ で運動する座標系 S' を前提にしているので、 x 軸の正方向に V の速度に直せば、(§ 27-24)は、

$$\begin{pmatrix} E'_y \\ B'_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -V \\ -V/c^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_y \\ B_z \end{pmatrix}$$

となり、確かに、(C-15-1)のローレンツ変換に一致することが判る。この変換係数は座標成分のローレンツ変換 $(x, t) \rightarrow (x', t')$ の係数(§ 27-41)にも一致する。

しかしながら、§ 27-3)の最後に指摘したように、 $(E_z, B_y) \rightarrow (E'_z, B'_y)$ の変換係数は、座標成分のローレンツ変換 $(x, t) \rightarrow (x', t')$ の係数(§ 27-41)には一致しない。電磁場成分の全てが、座標成分と同じように変換される訳ではないことに注意。電磁場の全成分は、(C-5)の $f'_{\mu\nu} = \beta_\mu^\rho \cdot \beta_\nu^\sigma f_{\rho\sigma}$ に従い、上述のように反対称二階共変テンソル $f_{\mu\nu}$ の要素として変換される。

付録 D : 電磁気学と単位系

電磁気学には、MKSA 単位系 (SI 単位系) だけではなく、幾つかの異なる単位系がある。CGS ガウス単位系は、現在でも理論物理学や天文学で使われており、名著とされる電磁気学の教科書も、多くは CGS ガウス単位系で記されている。マックスウェル方程式を MKSA 単位系 (SI 単位系) と CGS ガウス単位系で表現すると、単位系の相違に起因して、表現式に違いが現れる。もちろん、異なる単位系の電磁気学量を相互変換する問題も生じる。単位系の問題は電磁気学の内容を一通り学んだ後に考えるが良いので、ここで議論する。

1. マックスウェル方程式 : CGS ガウス単位系と SI 単位系

マックスウェル方程式を、MKSA 単位系 (SI 単位系) と CGS ガウス単位系で表現すると、単位系の違いにより表現式に違いが生じる。この違いを確認しておこう。真空も含めた均質連続媒体に電荷密度(ρ)と電流密度(\mathbf{j})が分布するとき、媒体の一点に於ける電場強度を \mathbf{E} 、電束密度を \mathbf{D} 、磁束密度を \mathbf{B} 、磁場強度を \mathbf{H} とすると、以下のマックスウェル方程式が成立する。

< CGS ガウス単位系 >

$$\operatorname{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho \quad (\text{D-1c})$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \frac{1}{c}(4\pi\mathbf{j} + \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}) \quad (\text{D-2c})$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-3c})$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0 \quad (\text{D-4c})$$

< MKSA 単位系 (SI 単位系) >

$$\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho \quad (\text{D-1m})$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} \quad (\text{D-2m})$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} + \frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-3m})$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0 \quad (\text{D-4m})$$

ただし、 c は真空中の光速度である。マックスウェル方程式は、電磁場の変数

($\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{H}$) に於ける一般的関係を与える方程式群である。そこには媒体の性質はあらわには現れない。MKSA 単位系(SI 単位系)の表現ではこれが明確である。CGS ガウス単位系のマックスウェル方程式には、真空中の光速 c があるが、これは媒体の性質を直接表すものではなく、後で述べるように、この単位系で採用されている定義による。

媒体を真空の空間とすると、電束密度 \mathbf{D} と磁場強度 \mathbf{H} では、次の関係

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (\text{D-2})$$

が成立し、比例係数は真空の誘電率(ϵ_0)と真空の透磁率(μ_0)である。MKSA 単位系(SI 単位系)では、 c を真空の光速として、

$$c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \quad (\text{D-3})$$

の関係にある。真空以外の媒体を考える場合は、媒体の電気分極 \mathbf{P} (§13)と磁化 \mathbf{M} (§20)を用いて、

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \lambda \mathbf{P}, \quad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \lambda' \mathbf{M} \quad (\text{D-4})$$

として、 \mathbf{D} と \mathbf{H} ならびに比例定数 λ と λ' を定め、(D-2) の真空の誘電率と透磁率の組(ϵ_0, μ_0)を、その媒体の誘電率と透磁率の組(ϵ, μ),

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (\text{D-5})$$

に変えることで、巨視的あるいは現象論的なマックスウェル方程式となる。

本来、マックスウェル方程式では電磁場の変数の組は ($\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{H}$) で与えられる。しかし、(D-2) あるいは (D-5) の関係を用いて、媒体の誘電率と透磁率を持ち込めば、マックスウェル方程式は ($\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{B}$) の変数で表現できる。もちろん、変数を ($\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{H}$) としても良いが、電流が磁場を作ると考える立場

からは $(\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{B})$ の方が好まれる。 $(\rho, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{H})$ の選択は、磁場は“磁荷”を想定できる磁石に依るとの立場に繋がるからである。

第一式の(D-1c), (D-1m) は、電荷に関するガウスの法則で、電場の源が電荷であることを示す (§ 5) 。第二式の(D-2c), (D-2m)は、電流と磁場に関するアンペール・マクスウェルの法則を示す (§ 22-1)。第三式の(D-3c), (D-3m) は、ファラデーの電磁誘導の法則で、時間変動する磁場から誘起される電場を表現する (§ 21)。最後の(D-4c), (D-4m)は、磁場の源に当たる“磁荷”は存在しないことを表現している (§ 19) 。法則として名前はないが、電荷と“磁荷”の本質的違いを表す。

このように、マックスウェル方程式の電磁気学の法則には、その具体的表現に単位系の違いが付随する。この問題を考える。

2. SI 単位系の普及と旧来の電磁気学単位系

最近では SI 単位系(MKSA 単位系)が普及し、理工系学部学生向けの電磁気学テキストも、大多数はこの単位系を採用している。その結果、大学院生以上を対象とするテキストでは一部で CGS ガウス単位系も使われているものの、SI 単位系以外の表現はこれらテキストから姿を消してしまった。1960~1970 年代に出版された学部学生向けテキストの多くは、MKSA 単位系と CGS 単位系の表現を併記していたが、今はこのような状況は無い。筆者は両単位系併記のテキストで電磁気学を学んだ為か、CGS ガウス単位系を採用する旧世代の電磁気学テキストの名著を参照する時には、単位系の違いが今も気になる。

ここでは、岡部(2008)⁶⁴、山崎(2009)⁶⁵、Jackson (1998)⁶⁶などを参照しながら、

電磁気学での単位系の問題を議論する。MKSA 単位系 (SI 単位系) だけではなく、CGS ガウス単位系、CGS 静電単位系、CGS 電磁単位系にも注意を払う為である。また、理論・実用の両面での電磁気学の発展は、単位系の変遷史に直接繋がっている。この観点からの木幡 (2003)⁶⁷⁾ の論考は重要で参考になる。

3. 電磁気学単位系の構成

力学的物理量は、長さ(l)、質量(m)、時間(t)を独立な基本単位とすることで定義される。これら独立な基本単位を

長さ(l)、質量(m)、時間(t) = cm, gram, second

とするのが、CGS-単位系である。力の次元は、 $mlt^{-2} = g \cdot cm \cdot s^{-2}$ となり、この単位の力は「ダイン(dyn)」と呼ばれる。エネルギー (仕事) は「力・距離」の次元を持つので、その単位は $dyn \cdot cm$ で「エルグ(erg)」と呼ばれる。一方、

長さ(l)、質量(m)、時間(t) = m, kilogram, second

とする単位系が、MKS 単位系である。現在普及している国際単位系(SI 単位系) は MKS 単位系に属する。この単位系での力の次元は $mlt^{-2} = kg \cdot m \cdot s^{-2}$ となり、その単位の力は「ニュートン(N)」と呼ばれる。エネルギーの単位は $N \cdot m$ で「ジュール(J)」である。「ダイン(dyn)」、 「エルグ(erg)」、 「ニュートン(N)」、 「ジュール(J)」も、基本単位から誘導される単位 (誘導単位) である。 $1N = 10^5 dyn$ であることは、 $1 kg \cdot m \cdot s^{-2} = 10^3 g \cdot 10^2 cm \cdot s^{-2} = 10^5 (g \cdot cm \cdot s^{-2})$ に依る。同様にして、 $1J = 10^7 erg$ である。このように、力学的単位の換算は単純であるが、電磁気学単位の換算はこのように単純ではない。同一の電磁気学量でも、単位系毎に次元が異なることもある。また、電磁気学には多数の誘導単位がある(表 D-3)。

電磁気学では、上記の三つの力学的単位以外に、電流 (I) または電荷 (q) を、**第四の基本単位**として採用することが出来る。電流は電荷の時間変化率 $I = dq/dt$ であるから、電流 (I) を第四の基本単位に採用すれば、電荷 (q) は「電流と時間の積 ($I \cdot t$)」の次元を持つ物理量として扱える。MKS 単位系のもとで、電流 (I) の単位 A (アンペア) を第四の基本単位に採用するのが、**MKSA 単位系**である。MKS の最後にアンペアの A を加えて表記する。**国際単位系(SI 単位系)**は MKSA 単位系を基礎にしているが、国際単位系(SI 単位系)自体は、長さ(l)、質量(m)、時間(t)、電流 (I) 以外に、温度 (T, K) , 物質質量 (n , mol) , 光度 (I_v , cd) も独立な基本単位としているので、両者は同一の単位系ではない。しかし、ここでは電磁気の単位だけを考えるので、国際単位系(SI 単位系)は MKSA 単位系と同じとして扱う。

CGS 単位系や MKS 単位系のように、長さ(l)、質量(m)、時間(t)の三つを基本単位とする単位系は「**3 元単位系**」と呼ばれる。一方、MKSA 単位系のように、電流 (I) の単位 A (アンペア) を第四の基本単位に採用するものは、「**4 元単位系**」である。本来は実用単位である電流を基本単位に格上げし、「**4 元単位系**」とすることで、他の電磁気学の実用単位、ボルト(電圧)、オーム(抵抗)、ファラッド(電気容量)、クーロン(電荷)など、が基本単位と結びつきやすくなる(表 D-3)。

既に見たように、電磁気学の法則は、採用されている単位系に依存して、やや異なった形で表現される。許される自由度の範囲内で、表記上の便宜や実用性にも配慮した異なる単位系を作ることができる。CGS ガウス単位系では、マクスウェル方程式に 4π が現れるが、MKSA 単位系(SI 単位系)では 4π は現れ

ない。後者のタイプを**有理単位系**と呼ぶ。従って、MKSA 単位系(SI 単位系)は、正式には、MKSA 有理単位系と呼ばれる。マクスウェル方程式に 4π が現れる CGS-ガウス単位系は**非有理単位系**である。しかし、これは MKSA 単位系(SI 単位系)では「電荷のクーロン則」に $1/(4\pi\epsilon_0)$ の比例定数を用いることに依る。一方、CGS ガウス単位系では、「電荷のクーロン則」の比例定数を無次元の 1 とする CGS 静電単位系の結果を受け入れている為に、マクスウェル方程式に 4π が現れる。どの段階で単位球表面積 4π を記すかは便宜的な選択の問題であり、有理単位系か非有理単位系かの違いはあまり重要な問題ではない。

一方、CGS ガウス単位系のマクスウェル方程式では、(D-2c), (D-3c)の式に真空中の光速度 c が現れる。しかし、MKSA 単位系(SI 単位系)の(D-2m), (D-3m)の式には c は現れない。(D-2c)は電流と磁場に関するアンペール・マクスウェルの法則で、(D-3c)は磁場の変動に誘起される電場を表現する電磁誘導の法則である。いずれも電場(電気量)と磁場(磁気量)の関係を指定する式である。CGS ガウス単位系では、電荷の単位は CGS 静電単位系の単位 (electrostatic unit, **esu**) を受け入れ、磁気量には CGS 電磁単位系の単位 (electromagnetic unit, **emu**) を採用している。其の為、CGS ガウス単位系で電場(電気量)と磁場(磁気量)を同時に扱う際には、両単位系の換算係数としての真空中の光速度 c が忽然と現れる。これは、有理化・非有理化の 4π 問題よりも重要である。

同一の電磁気学の法則と実験結果に立脚しながらも、幾つかの異なる単位系が共存できる状況を、Jackson (1998)⁶⁶⁾と木幡茂雄(2003)⁶⁷⁾を参考にして、もう少し具体的に考えてみよう。岡部(2008)⁶⁴⁾や山崎(2009)⁶⁵⁾の議論との対応は最後に述べる。

4. 電磁気学の法則における比例定数

既に述べたように (電荷/電流) = q/I の次元は時間(t)に等しい. 電荷の次元は $I \cdot t$ で, 電流の次元は q/t である. これは, 単位体積内の電荷量である**電荷密度**(ρ)と単位断面積を通過する電流である**電流密度**(\mathbf{j})に対する**連続の式**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0 \quad (\text{D-6})$$

からも判る. これは**電荷保存則**の式(§4)とも呼ばれるが, 1以外の比例係数は介在しない.

電荷のクーロン則は, k_1 を比例定数として, 電荷間に作用する力の大きさが

$$F_1 = k_1 \frac{qq'}{r^2} \quad (\text{D-7})$$

であることを述べている. F_1 は力の次元を持つから, $k_1 qq'$ の次元は,

$$[k_1 qq'] = ml^3 t^{-2} \quad (\text{D-8})$$

である. 比例定数 k_1 の次元は, 単位系によって異なり, また, 一般には媒体の性質を表現する定数も含む. ただし, 後に述べるように, CGS 静電単位系と CGS ガウス単位系では, 比例定数 $k_1=1$ で無次元と約束している. その為, 静電単位系の電荷(esu)の次元は, $[esu] = m^{1/2} l^{3/2} t^{-1}$ となる. しかし, MKSA 単位系(SI 単位系)では, 第四の基本単位として電流の単位 A(アンペア)を採用するので, $[q] = [I \cdot t] = A \cdot t$ であり, k_1 の次元は $[k_1] = ml^3 t^{-4} A^{-2}$ となり, k_1 の値自体は $k_1 = 1/(4\pi\epsilon_0)$ となる. これは § 1 でも述べたが, ここでも後に説明する.

電場 \mathbf{E} は, 単位電荷あたりに作用する力と定義されるので, その大きさは (D-7)より,

$$E = \frac{F_1}{q'} = k_1 \frac{q}{r^2} \quad (\text{D-9})$$

とできる.

二つの定常直線電流間に働く力は次のように定義される. アンペールによれば, d の距離だけ隔たった 2 本の無限に長い平行直線導線に, 電流 I と I' が流れている時, 2 本の導線に働く「単位長さ当たりの力の大きさ」は次式で決まる.

$$\frac{dF_2}{dl} = 2k_2 \frac{I \cdot I'}{d} \quad (\text{D-10})$$

k_2 は比例定数で, 右辺の無次元数 2 の意味は(D-13)の説明の際に述べる. ここで k_2 の値を決める際の便宜の為にあると理解しておこう. (D-7)の両辺を(D-10)で割ると,

$$\frac{F_1}{(dF_2/dl)} = \frac{k_1}{2k_2} \cdot \frac{qq'}{I \cdot I'} \cdot \frac{d}{r^2}$$

である. 故に, 両辺の次元は, $l = [k_1/k_2]t^2l^1$ で, これより k_1/k_2 の次元は,

$$[k_1/k_2] = l^2 \cdot t^{-2} = (l/t)^2 \quad (\text{D-11})$$

で, 速度の二乗の次元になることが判る. k_1/k_2 の大きさは, 電荷と電流が既知の実験から, 真空中の光速 c の二乗に等しいことが知られている.

$$k_1/k_2 = c^2 \quad (\text{D-12})$$

これは実験事実による. 歴史的には, ウェーバー と R. コールラウシュ (1856) が, 電荷を静電単位系と電磁単位系で測定し, $Q_{(esu)}/Q_{(emu)} = c$ であることを示したことに基づく (木幡, 2003). 遠隔論の立場から得られた実験結果であるが, 近接論の立場から, マックスウェルはこれが光速の値であると解釈した. この連関については, 後に補足説明を記すので参照されたい.

直線電流が I である無限に長い一本の導線があるとして, これから d の距離

にある点の磁束密度 \mathbf{B} の大きさは、

$$B = 2k_2\alpha \frac{I}{d} \quad (\text{D-13})$$

で与えられる。 α は比例定数である。これはビオー・サバルの法則を一本の無限長の直線電流に適用した結果である。直線電流に沿った $(-\infty, +\infty)$ の積分から因子 2 が生じる (§ 18-5)。(D-10) の無次元数 2 はこれに当たる。(D-13) で $I \rightarrow I'$ として、(D-10) での I' を B で表現すると、(D-10) は

$$\frac{dF_2}{dl} = \frac{1}{\alpha} \cdot I \cdot B \quad (\text{D-10}')$$

となる。これは、比例係数 $(1/\alpha)$ を持つアンペール力の定義

$$d\mathbf{F}_2 = \frac{1}{\alpha} \cdot I d\mathbf{l} \times \mathbf{B}$$

に対応する。同時に、この式で $I d\mathbf{l} \rightarrow q\mathbf{v}$ と読み替えると、電荷が q で速度が \mathbf{v} の粒子に作用するローレンツ力の式 $\mathbf{F} = (1/\alpha) \cdot q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ となる。SI 単位系では、アンペール力やローレンツ力の定義には特別な係数は無かったことを思い起こそう。この比例定数 α の重要性は後の議論で明らかになる。

(D-9)と(D-13)の両辺の比を作ると、

$$\frac{E}{B} = \frac{k_1}{2k_2\alpha} \frac{Q}{I} \cdot \frac{d}{r^2}$$

となるので、 E/B の次元は、

$$[E/B] = l^2 \cdot t^{-2} \cdot [\alpha^{-1}] \cdot t \cdot t^{-1} = l \cdot t^{-1} \cdot [\alpha^{-1}] \quad (\text{D-14})$$

である。このように、比例定数 α の次元は、 E/B の次元に結び付いている。

磁場と電場のつながりは、**電磁誘導の法則**として知られている (§ 21) 。電流回路に誘起される起電力は、回路を貫く磁束の変化率に比例する。この起電

力に相当する電場 \mathbf{E} と磁束密度 \mathbf{B} の関係は、微分形で

$$\text{rot}\mathbf{E} + k_3 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-15})$$

となる。 k_3 は比例定数である。(D-15) 式では、この二項の次元が等しい訳だから、 $[E]l^{-1} = [k_3] \cdot [B]t^{-1}$ である。これは、(D-14) の結果を使うと、

$$[k_3] = [E/B]l^{-1} \cdot t = [\alpha^{-1}] \quad (\text{D-16})$$

となる。比例定数 k_3 の次元は、比例定数 α の逆数の次元に等しい。さらに、次に示すように、大きさについても、 $k_3 = 1/\alpha$ が成立する。この関係は、ローレンツ力と相対性原理からも導出できるが、以下のマックスウェル方程式を経由した導出方法が判りやすい(Jackson, 1998)⁶⁶⁾。

5. 一般的比例定数を含むマックスウェル方程式

上述の一般的比例定数 (k_1, k_2, k_3, α) を使うと、マックスウェル方程式は、

$$\text{div}\mathbf{E} = 4\pi k_1 \rho \quad (\text{D-17-1})$$

$$\text{rot}\mathbf{B} = 4\pi k_2 \alpha \mathbf{j} + \frac{k_2 \alpha}{k_1} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{D-17-2})$$

$$\text{rot}\mathbf{E} + k_3 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-17-3})$$

$$\text{div}\mathbf{B} = 0 \quad (\text{D-17-4})$$

となる(Jackson, 1998)。以下では、(D-17-1)と(D-17-2)の導出についてのみ簡単な説明を記す。(D-17-3)は、既に述べたように、SI単位系での電磁誘導の微分形の式 (§21) では係数は1であったが、これが一般化のために定数 k_3 となったと考えれば良い。(D-17-4) は特別の係数をもたないので、その導出は §19-1,-2 を参照されたい。

(D-17-1)式は, (D-9)式の $E = \frac{F_1}{q} = k_1 \frac{q}{r^2}$ に基づく. 電場ベクトル \mathbf{E} につい

て, 半径 r の球面 S に関する面積分をつくると,

$$\int_S E(r) dS = E(r) \int_S dS = E(r)(4\pi r^2) = 4\pi k_1 q = 4\pi k_1 \int_V \rho dV$$

である. 電荷 q は電荷密度 ρ の体積積分で置き換えた. 半径 r の球面 S を考えたが, r は最終的には残らない. この表現は一般的な面積分でも成立する. 即ち,

$$\int_S E(r) dS = \int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS$$

であり, ガウスの発散定理 $\int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{div} \mathbf{E} \cdot dV$ (§ 5)から,

$$\int_V \text{div} \mathbf{E} \cdot dV = 4\pi k_1 \int_V \rho dV$$

となる. 故に, 体積積分での変数の関係として, (D-17-1)の $\text{div} \mathbf{E} = 4\pi k_1 \rho$ が得られる. SI 単位系での結果, $\text{div} \mathbf{E} = \rho / \epsilon_0$ (§ 5), とは見かけの係数が異なる.

(D-17-2) は, $B = 2k_2 \alpha \frac{I}{d}$ (D-13)による. 直線電流 I を取り囲む半径 $R=d$ の

円形ループを考えると, 右ねじの回転方向が \mathbf{B} に一致し, 右ねじの進行方向が電流の向きである. この \mathbf{B} の方向沿って円形ループを一周する線積分が, 以下の定常電流に関するアンペールの定理に繋がる (§18-7, §20-4).

$$\int_C \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \int_C \mathbf{B} \cdot \mathbf{t} ds = B \int_{C=2\pi d} ds = B \cdot 2\pi d = 2k_2 \alpha (I/d) \cdot 2\pi d = 4\pi k_2 \alpha \cdot I$$

結果的に $R=d$ は残らないので, この表現は特定経路 (半径 $R=d$ 円形ループ) に限定されない一般性を持つ. SI 単位系では, 最後の項は $\mu_0 \cdot I$ であるが, ここでは一般的単位系の条件を考えるので, $4\pi k_2 \alpha \cdot I$ である.

ストークスの定理 (§ 6) より, 線積分は面積分に変更でき,

$$\int_C \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \int_C \mathbf{B} \cdot \mathbf{t} ds = \int_S \text{rot} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dS = 4\pi k_2 \alpha \int_S \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS$$

となる。最後の等式で、電流 I は電流密度 \mathbf{j} の面積分に変更した。故に、面積分の変数だけの関係として、

$$\text{rot} \mathbf{B} = 4\pi k_2 \alpha \cdot \mathbf{j}$$

となる。これは定常電流に関するアンペールの定理である。しかし、この結果は、マックスウェルの変位電流を導入し、電荷保存則 (D-6) $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0$ を満足する形に変更されねばならない (アンペール・マックスウェルの定理, §22-1)。

通常の伝導電流も変位電流も同じように扱うべきだから、 \mathbf{j}_d を変位電流として、

$$\text{rot} \mathbf{B} = 4\pi k_2 \alpha \cdot (\mathbf{j} + \mathbf{j}_d)$$

である。この両辺の div を取ると、ベクトル解析の公式より、

$$\text{div} \cdot \text{rot} \mathbf{B} = 0 = 4\pi k_2 \alpha \cdot \text{div}(\mathbf{j} + \mathbf{j}_d)$$

である。一方、電荷保存則 (D-6) は、(D-17-1) を用いて $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{4\pi k_1} \text{div} \mathbf{E} \right)$ と

なるが、空間微分と時間微分の順序を入れ替えて良いので、

$$\frac{1}{4\pi k_1} \text{div} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0$$

である。この両辺に $4\pi k_2 \alpha$ を掛けて、

$$\frac{4\pi k_2 \alpha}{4\pi k_1} \cdot \text{div} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi k_2 \alpha \cdot \text{div} \mathbf{j} = 0$$

となる。一般に、 $\text{div}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \frac{\partial(a_x + b_x)}{\partial x} + \frac{\partial(a_y + b_y)}{\partial y} + \frac{\partial(a_z + b_z)}{\partial z} = \text{div} \mathbf{a} + \text{div} \mathbf{b}$

だから、 $\text{div} \left(\frac{k_2 \alpha}{k_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi k_2 \alpha \cdot \mathbf{j} \right) = 0$ である。この結果を、

$$\text{div} \cdot \text{rot} \mathbf{B} = 0 = 4\pi k_2 \alpha \cdot \text{div}(\mathbf{j} + \mathbf{j}_d) = \text{div}[4\pi k_2 \alpha \cdot (\mathbf{j} + \mathbf{j}_d)]$$

と比べると, $\frac{k_2\alpha}{k_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 4\pi k_2\alpha \cdot \mathbf{j}_d$ となる. 従って, 変位電流は

$$\mathbf{j}_d = \frac{1}{4\pi k_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

であり, (D-17-2)式の $\mathit{rot}\mathbf{B} = 4\pi k_2\alpha \cdot \mathbf{j} + \frac{k_2\alpha}{k_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ が得られる.

こうして, (D-17-1)~(D-17-4)の (k_1, k_2, k_3, α) を含む一般形マックスウェル方程式となる. ここで, $\mathbf{j} = 0, \rho = 0$ の状況 (電流も電荷も無い真空自由空間) を考えると,

$$\mathit{div}\mathbf{E} = 0 \quad (\text{D-17-1}')$$

$$\mathit{rot}\mathbf{B} = \frac{k_2\alpha}{k_1} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{D-17-2}')$$

$$\mathit{rot}\mathbf{E} + k_3 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-17-3})$$

$$\mathit{div}\mathbf{B} = 0 \quad (\text{D-17-4})$$

となる. ベクトル代数の公式, $\mathit{rot} \cdot \mathit{rot}\mathbf{A} = \mathit{grad}(\mathit{div}\mathbf{A}) - \nabla^2\mathbf{A}$ で, $\mathit{div}\mathbf{A} = 0$ の時は

$\mathit{rot} \cdot \mathit{rot}\mathbf{A} = -\nabla^2\mathbf{A}$ となる. これを利用する為に, (D-17-2')の両辺の rot を取り,

(D-17-3)と(D-17-4)を使うと, $\mathit{div}\mathbf{B} = 0$ (D-17-4) と $\mathit{rot}(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}) = \frac{\partial}{\partial t}(\mathit{rot}\mathbf{E})$ なので,

$$\mathit{rot} \cdot \mathit{rot}\mathbf{B} = -\nabla^2\mathbf{B} = \frac{k_2\alpha}{k_1} \mathit{rot}(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}) = \frac{k_2\alpha}{k_1} (\frac{\partial}{\partial t} \mathit{rot}\mathbf{E}) = -\frac{k_2k_3\alpha}{k_1} (\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2})$$

となる. これは

$$\nabla^2\mathbf{B} = \frac{k_2k_3\alpha}{k_1} (\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2}) \quad \rightarrow \quad (\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2}) = \frac{k_1}{k_2k_3\alpha} \nabla^2\mathbf{B} \quad (\text{D-18})$$

となるから, 伝播速度が v の波動方程式であり,

$$\frac{k_2k_3\alpha}{k_1} = \frac{1}{v^2} = \frac{1}{c^2} \quad \rightarrow \quad \frac{k_1}{k_2k_3\alpha} = v^2 = c^2 \quad (\text{D-19})$$

が成立しなければならない. \mathbf{B} は真空中を光速度 $v=c$ で伝播する.

一方, (D-17-1'), (D-17-2'), (D-17-3)を使うと, \mathbf{E} に関する同様な波動方程式

$$\left(\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}\right) = \frac{k_1}{k_2 k_3 \alpha} \nabla^2 \mathbf{E} \quad (\text{D-20})$$

が得られる. 従って, (D-18) と (D-20) は, (\mathbf{E}, \mathbf{B}) の電磁波が真空中の伝播速度 c を持つことを表す. (D-12) の $k_1/k_2 = c^2$ から, (D-19) は, 結局,

$$k_3 = 1/\alpha \quad (\text{D-21})$$

となる. 逆に, $k_3 = 1/\alpha$ なら, $\frac{k_1}{k_2 k_3 \alpha} = v^2 = c^2$ は, $k_1/k_2 = c^2$ (D-12) である.

従って, 電磁気学の法則に付随する比例定数を一般的に (k_1, k_2, k_3, α) と表現しても, 各定数は自由に選べない. (k_1, k_2) で一方を決めれば, 他方は $k_1/k_2 = c^2$ の条件から自動的に決まる. また, (k_3, α) でも $k_3 = 1/\alpha$ から同じ事情にある. 四つの比例定数 (k_1, k_2, k_3, α) に対し, 拘束条件が2つあり, 自由度は2である. この自由度の使用法が異なれば, 異なる単位系となる. この状況を具体的に見てみよう.

6. 単位系で異なる電磁気学の比例定数の定義

6.1) MKSA 有理単位系(SI 単位系)における比例定数

MKSA 有理化単位系(SI 単位系)の (k_1, k_2) から考えると, (D-1m) と (D-9) を比べて,

$$k_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad k_2 = \frac{1}{c^2} \cdot k_1 = (\epsilon_0 \cdot \mu_0) \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\mu_0}{4\pi},$$

である. (D-10) の k_2 に代入すると,

$$\frac{dF_2}{dl} = 2k_2 \frac{I \cdot I'}{d} = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{I \cdot I'}{d} \quad (\text{D-22})$$

となる. 実は (D-22) の結果は, 電流の単位アンペア (A) の定義と繋がっている. “真空中で 1 m だけ隔てられた二本の無限に長い直線電流があり, これらに 1 A の電流が流れている時, これらが相互に及ぼす 1 m あたりの力は $2 \times 10^{-7} \text{N}$ である”として電流単位は (D-22) を用いて定義される (§ 1, §18-1).

言明されている値をそのまま (D-22) に代入すれば,

$$2 \times 10^{-7} (\text{N/m}) = \frac{\mu_0}{2\pi} \cdot (\text{A}^2/\text{m}) \quad (\text{D-23-1})$$

である. これが MKSA 単位系の電流単位 A を定義する等式である. この等式の両辺に, 2π と単位長さ (1 m) を掛ければ, 以下の真空の透磁率を定義する式

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} (\text{N} \cdot \text{A}^{-2}) \quad (\text{D-23-2})$$

になる. 従って, 電流の定義とは真空の透磁率の定義であり, これによって k_1 は

$$k_2 = \frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} (\text{N} \cdot \text{A}^{-2}) \quad \rightarrow \quad k_1 = c^2 \cdot k_2 = \frac{1}{\epsilon_0 \cdot \mu_0} \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (\text{D-24})$$

と決まる. 即ち, $k_1/k_2 = c^2 = 1/(\epsilon_0 \cdot \mu_0) \rightarrow \epsilon_0 = 1/(c^2 \cdot \mu_0)$ である.

(k_3, α) については, いずれも最も単純な無次元数 1 を採用する. ところで, 電

流の定義に使われている $2 \times 10^{-7} \text{N}$ は、どう考えても“自然な値”ではなく、“人為的な値”である。従来から実用上の単位として使用されている電流、電圧、抵抗などの値を変更しない為に導入された値だからである。

6.2) CGS 静電単位系と CGS 電磁単位系における比例定数

CGS 静電単位系では、電荷に関するクーロン則の比例定数 k_1 を無次元数の 1 と約束する ($k_1 = 1$)。その結果、(D-12) の $k_1/k_2 = c^2$ の条件より、

$$k_2 = \frac{k_1}{c^2} = \frac{1}{c^2} \quad (\text{D-25})$$

となる。一方、CGS 電磁単位系では、「直線電流間に働く単位長さ当たりの力」での比例定数 k_2 を、無次元数の 1 と約束する ($k_2 = 1$)。 (D-12) の $k_1/k_2 = c^2$ の条件より、電荷に関するクーロン則の比例定数は、

$$k_1 = c^2 \cdot k_2 = c^2 \quad (\text{D-26})$$

となる。両単位系の (k_3, α) については、MKSA 有理化単位系(SI 単位系)と同様に、最も単純な無次元数 1 を採用する。

6.3) CGS ガウス単位系における比例定数

CGS ガウス単位系では、電荷に関するクーロン則の比例定数 k_1 を無次元数の 1 と約束する CGS-静電単位系の結果をそのまま受け入れる。だから、

$$k_1 = 1, \quad k_2 = \frac{k_1}{c^2} = \frac{1}{c^2} \quad (\text{D-27})$$

である。しかし、 (k_3, α) については、異なる定義

$$k_3 = 1/c, \quad \alpha = c \quad (\text{D-28})$$

を採用する。この理由は以下に記す通りである。

(D-17-1'), (D-17-2'), (D-17-3), (D-17-4)から。結果的には、 \mathbf{E} と \mathbf{B} に関して同じ波動方程式となり、(D-19) の $\frac{k_1}{k_2 k_3 \alpha} = v^2 = c^2$ が得られる。これは

$$\text{rot}\mathbf{B} = \frac{k_2 \alpha}{k_1} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{D-17-2}') \quad \text{rot}\mathbf{E} + k_3 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-17-3})$$

における係数 $(\frac{k_2 \alpha}{k_1})$ と k_3 を対称的にセットすることに通ずる。即ち、

$$\frac{1}{c^2} = \frac{k_2 k_3 \alpha}{k_1} = \left(\frac{k_2 \alpha}{k_1}\right) \cdot k_3 \quad \rightarrow \quad \left(\frac{k_2 \alpha}{k_1}\right) = \frac{1}{c^2} \cdot \alpha = \frac{1}{c}, \quad k_3 = \frac{1}{c}$$

と、両係数の積 $(1/c^2)$ を、両者で等しい値 $(1/c)$ に分割する。そうすれば、(D-17-2') と (D-17-3) は、

$$\text{rot}\mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \text{rot}\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-29})$$

となり、 \mathbf{E} と \mathbf{B} は相互の対称性を確保できる。この結果が(D-28)である。

(D-14) と (D-16) から、 α が速度の次元 (l/t) を持てば、 \mathbf{E}/\mathbf{B} の次元は無次元で、 \mathbf{E} と \mathbf{B} は同次元である。(D-18) と (D-20) で見たように、両者の大きさも等しい。 $\alpha = c$ (光速度) である CGS ガウス単位系ではこのことが成立する。しかし、 (k_3, α) を無次元の 1 とする限り、(D-17-2') と (D-17-3) の係数は対称的にはならない。MKSA 有理化単位系(SI 単位系)で考えると、 (k_3, α) は無次元の 1 であるから、(D-14) の関係より、 $\mathbf{E} = c\mathbf{B}$ で次元が等しくなる。自由空間の平面電磁波では、大きさの関係はやはり $\mathbf{E} = c\mathbf{B}$ として成立する。このように、MKSA 有理化単位系(SI 単位系)では \mathbf{E} と \mathbf{B} は区別できる。しかし、(D-29) の対称係数を使う CGS-ガウス単位系では、 \mathbf{E} と \mathbf{B} の区別が曖昧になる。これは CGS-ガウス単位系の欠点とされる (木幡, 2003)。

なお、CGS ガウス単位系を有理化した結果が、「ヘビサイド・ローレンツ単位系」である。MKSA 有理単位系(SI 単位系)が受容されるまでは、重要な有理単位系であった。しかし、実質的には CGS ガウス単位系であり、ここでは省略する。

以上のように、電磁気学の法則での比例定数は、各単位系で異なって定義されている。この違いに応じて、幾つかの異なる単位系が出来ている。各単位系での比例定数の値と次元をまとめると、次の表 D-1 のようになる。

<表 D-1. 単位系で定義される電磁気学の法則の比例定数とその次元>

比例定数 単位系	k_1 (式 D-7) $F_1 = k_1 \frac{qq'}{r^2}$	k_2 (式 D-10) $\frac{dF_2}{dl} = 2k_2 \frac{I \cdot I'}{d}$	k_3 (式 D-15) $rot\mathbf{E} + k_3 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0$	α (式 D-13) $B = 2k_2 \alpha \frac{I}{d}$
CGS 静電単位系	1	c^{-2} $(t^2 \cdot l^{-2})$	1	1
CGS 電磁単位系	c^2 $(l^2 \cdot t^{-2})$	1	1	1
CGS ガウス単位系	1	c^{-2} $(t^2 \cdot l^{-2})$	c^{-1} $(t \cdot l^{-1})$	c $(l \cdot t^{-1})$
MKSA 有理単位系 SI-単位系	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 10^{-7} c^2$ $(m \cdot l^3 \cdot t^{-4} \cdot I^{-2})$	$\frac{\mu_0}{4\pi} \equiv 10^{-7}$ $(m \cdot l \cdot t^{-2} \cdot I^{-2})$ $= (N/A^2)$	1	1

(c =真空中での光速 $=2.99792458 \times 10^8$ m/s, 「比例定数=1」は無次元数の1)

この表 D-1 に掲げた四つの単位系の違いが理解できれば、各単位系でのマクスウェル方程式の具体的表現もわかる。式(D-17-1)~(D-17-4)は、 (k_1, k_2, k_3, α) で

表現したマックスウェル方程式だから、これらに表の値を代入し、CGS ガウス単位系では、 $\mathbf{D}=\mathbf{E}$, $\mathbf{H}=\mathbf{B}$ とし、MKSA 有理化単位系(SI 単位系)の場合は、 $\mathbf{D}=\epsilon_0\mathbf{E}$, $\mathbf{H}=(1/\mu_0)\mathbf{B}$ とすれば、(D-1c)~(D-3c)と(D-1m)~(D-3m)が得られる。さらに、単位系の間での電磁気学量の互換関係も導くことができる。具体的は、Jackson (1998)⁶⁶⁾での付録の表 2, 3, 4 などを確認して頂きたい。

SI 単位系が普及しているが、それ以外の単位系、CGS 静電単位系、CGS 電磁単位系、CGS ガウス単位系、についても適切に理解しておきたい。前節では、 $k_1/k_2 = c^2$ (D-12) の根拠として、「歴史的には、ウェーバー と R. コールラウシュ (1856) が、電荷を静電単位系と電磁単位系で測定し、 $Q_{(esu)}/Q_{(emu)} = c$ であることを示したことに基づく (木幡, 2003)」と述べた。この記述に対し、表 D-1 の結果を使った補足説明を以下に記す。

二つの等しい電荷に作用する力は、次元も大きさも、CGS 静電単位系(esu) と CGS 電磁単位系(emu)で等しい。CGS 単位系としては同じだからである。

$$F = \left\{ k_1 \frac{(Q \cdot Q)}{r^2} \right\}_{esu} = \left\{ k_1 \frac{(Q \cdot Q)}{r^2} \right\}_{emu}$$

両者の比を作れば無次元量の 1 となる。両単位系で r は共通なので、比の中では相殺される。従って、表 D-1 での CGS 静電単位系(esu)の $k_1 = 1$ と CGS 電磁単位系(emu)の $k_1 = c^2$ の値を代入して、

$$1 = \left\{ k_1 \frac{(Q \cdot Q)}{r^2} \right\}_{esu} / \left\{ k_1 \frac{(Q \cdot Q)}{r^2} \right\}_{emu} = (Q^2)_{esu} / \{c^2 Q^2\}_{emu}$$

となる。これより、

$$Q_{esu} / Q_{emu} = c \text{ (cm/sec)}$$

である。従って、実験より決定される電荷の比は、CGS 単位系の速度の次元を

持ち、値は真空中の光速度である。これは、表 D-1 の結果から判るように、各単位系で成立する $k_1/k_2 = c^2$ (D-12)に繋がる。

7. 誘電率，透磁率，対称化定数による単位系の分類

表 D-1 では、Jackson (1998)^{6.6)} に従い、比例定数(k_1, k_2, k_3, α)から単位系を分類している。しかし、岡部(2008)^{6.4)} や山崎(2009)^{6.5)} のように、(非有理化・有理化係数, ϵ_0, μ_0 , 対称化定数) の値で電磁気学単位系を分類することも出来る。これを($\beta, \epsilon_0, \mu_0, \gamma$)による分類と呼ぶとすれば、こちらの方が判りやすいと思う人はいるかも知れないので、ここでは (k_1, k_2, k_3, α) は ($\beta, \epsilon_0, \mu_0, \gamma$) に

表 D-2. 単位系の非有理化・有理化係数，誘電率，透磁率，対称化定数^{1, 2, 3)}

単位系	有理化・非有理化の係数 β	真空の誘電率 (電気定数) ϵ_0	真空の透磁率 (磁気定数) μ_0	連結因子 (対称化定数) γ
CGS 静電単位系	4π	1	c^{-2}	1
CGS 電磁単位系	4π	c^{-2}	1	1
CGS ガウス単位系	4π	1	1	c
MKSA 有理単位系 SI-単位系	1	$1/(4\pi 10^{-7} c^2)$ $= 1/(\mu_0 c^2)$	$4\pi \times 10^{-7}$	1

- 1) 「 $4\pi, 1$ 」は無次元数。c=真空中での光速度= 2.99792458×10^8 m/s.
- 2) 岡部 (2008) の表 A.1 に対応する。岡部 (2008) では「有理化・非有理化の係数」= α であるが、我々は既に α を表 D-1 で使用しているので、表 D-2 では便宜的に β とする。また、岡部 (2008) は「電気定数」, 「磁気定数」, 「対称化定数」の用語を使用している。
- 3) この表の結果は山崎 (2009) の表 1 にも対応する。ただし、山崎 (2009) での「有理化・非有理化の係数=k」は $k = 4\pi/\beta$ と換算する。また、山崎 (2009) では「真空の誘電率」, 「真空の透磁率」, 「連結因子」の用語が使われている。

変換出来ることを示す。その結果が表 D-2 である。表 D-2 は、岡部(2008)による $(\beta, \epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ に基づく単位系の分類表に当たる。また、山崎(2009)の表 1 にも対応する。ただし、山崎 (2009) での「有理化・非有理化の係数=k」は $k = 4\pi/\beta$ と換算する必要がある。

$(\beta, \epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ 分類の岡部 (2008) では、次のように力の大きさを定義している：

$$F_1 = \frac{\beta}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (\text{D-30-1})$$

$$F_2 = \frac{\beta\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{I_1' I_2'}{r^2} = \left(\frac{\beta\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{1}{\gamma^2} \right) \cdot \frac{I_1 I_2}{r^2} \quad (I_1' = \frac{1}{\gamma} \cdot I_1, \quad I_2' = \frac{1}{\gamma} \cdot I_2) \quad (\text{D-30-2})$$

ただし、 γ は対称化定数（連結因子）で、これまでの議論（表 D-1）では α としてた因子に等しい。また、(D-30-2) を、(D-10) のように、無限長の直線電流についての積分形に直し、単位長さ当たりの力で表現すると、

$$\frac{dF_2}{dl} = 2 \left(\frac{\beta\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{1}{\gamma^2} \right) \cdot \frac{I_1 I_2}{r} \quad (\text{D-30-2}')$$

である。これらに対応するマックスウェル方程式は、

$$\text{div}\mathbf{E} = \frac{\beta}{\epsilon_0} \rho \quad (\text{D-31-1})$$

$$\text{rot}\mathbf{B} = \frac{\beta\mu_0}{\gamma} \mathbf{j} + \frac{\mu_0\epsilon_0}{\gamma} \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{D-31-2})$$

$$\text{rot}\mathbf{E} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{D-31-3})$$

$$\text{div}\mathbf{B} = 0 \quad (\text{D-31-4})$$

となる（岡部，2008）。

表 D-1 の (k_1, k_2, k_3, α) を表 D-2 の $(\beta, \epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ に変換するには、以下の式を使えば良いことが判る：

$$\alpha = \gamma \quad \rightarrow \quad \gamma = \alpha \quad (\text{D-32-1})$$

$$k_1 = \frac{\beta}{4\pi\epsilon_0} \quad \rightarrow \quad \epsilon_0 = \frac{\beta}{4\pi} \cdot \frac{1}{k_1} \quad (\text{D-32-2})$$

$$k_2 = \frac{\beta}{4\pi} \cdot \frac{1}{\gamma^2} \cdot \mu_0 \quad \rightarrow \quad \mu_0 = \frac{4\pi}{\beta} \cdot \gamma^2 \cdot k_2 \quad (\text{D-32-3})$$

(D-13) 式に関連して、アンペール力は $d\mathbf{F}_2 = (1/\alpha) \cdot I d\mathbf{l} \times \mathbf{B}$ となり、ローレンツ力も $\mathbf{F} = (1/\alpha) \cdot q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ となることを述べた。 $\alpha = \gamma$ である。岡部 (2008) は、 $\gamma (= \alpha)$ を電気量と磁気量の「対称化定数」と呼び、山崎(2009)は電気量と磁気量の「連結因子」と呼んでいる。 (D-32-3)の第一式から、 $k_2 \propto 1/\gamma^2$ であることが判る。これは(D-30-2)式が $F_2 \propto I_1 I_2$ であることに依る。対称化定数 $\gamma (= \alpha)$ については、岡部 (2008) の付録 A に議論がある。表 D-1 と表 D-2 の四つの単位系では、CGS ガウス単位系だけが $\gamma (= \alpha) = c$ で、他の三つの単位系では 1 である。 $\gamma (= \alpha)$ は CGS ガウス単位系の含めた一般的単位系を想定している為に必要となる。

変換係数(D-32-1)~ (D-32-3)が適切であることは、以下のように確認できる。(D-32-1)~ (D-32-3)の第一式を、Jackson(1998)による一般的マクスウェル方程式 (D-17-1)~(D-17-4)に代入すると、(D-31-1)~(D-31-4)の岡部(2008)によるマクスウェル方程式となる。また逆に、(D-32-1)~(D-32-3)の第二式を(D-31-1)~(31-4)に代入すれば、(D-17-1)~(D-17-4)のマクスウェル方程式となる。だから、変換式 (D-32-1)~ (D-32-3)を通じて、表 D-1 と表 D-2 の内容は同一である。

(D-31-2)右辺の $\frac{\mu_0 \epsilon_0}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ の係数と (D-31-3)左辺の $\frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ の係数の積は、(D-19)式で

既に議論したように、 $1/c^2$ でなければならないから、

$$\frac{\mu_0 \epsilon_0}{\gamma^2} = \frac{1}{c^2} \quad (\text{D-33})$$

である。これは、 $k_1/k_2 = \gamma^2 / (\mu_0 \cdot \epsilon_0) = c^2$ (D-12)のことである。4. の議論では

これを前提にした。そして、 $k_1/k_2 = \gamma^2/(\mu_0 \cdot \epsilon_0) = c^2$ となることは、このように後に説明することになる。

$(\epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ の三パラメーターで、拘束条件(D-33)が一つあるので、自由に設定できるのは二つのパラメーターに限られる。自由度が2である。前述の表 D-1での結論と同じである。(D-33)式と表 D-2を参照すれば、自由度2は以下のように各単位系の定義に利用されていることが判る。

- a) $\epsilon_0 \equiv 1, \gamma \equiv 1 \rightarrow \mu_0 = 1/c^2$: CGS 静電単位系
- b) $\mu_0 \equiv 1, \gamma \equiv 1 \rightarrow \epsilon_0 = 1/c^2$: CGS 電磁単位系
- c) $\epsilon_0 \equiv \mu_0 \equiv 1 \rightarrow \gamma = c$: CGS ガウス単位系
- d) $\mu_0 \equiv 4\pi \times 10^{-7} (NA^{-2}), \gamma \equiv 1 \rightarrow \epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$: MKSA 有理単位系

$(\epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ の拘束条件が (D-33) 式一つなので、a)~d) の場合分けの違いは判りやすい。また、 $(\epsilon_0, \mu_0, \gamma)$ の設定条件 からすると、MKSA 有理単位系(SI 単位系)は CGS 電磁単位系に類似することも容易に理解できる。即ち、CGS 電磁単位系における $\mu_0 \equiv 1$ (無次元)を、MKSA 有理単位系(SI 単位系)では $\mu_0 \equiv 4\pi \times 10^{-7} (N \cdot A^{-2})$ としていると思えば良い。ただし、 μ_0 は無次元でなく、 $[N \cdot A^{-2}] = [m \cdot l \cdot t^{-2} \cdot I^{-2}]$ の次元を持つことになる。

表 D-2 は、岡部 (2008) や山崎 (2009) で議論されている電磁気学量を単位系間で変換する際の出発点である。表 D-2 の内容は表 D-1 と同一であることを理解した上で、これらの単位系の相互変換表を利用することが望ましい。

また、現実社会での技術発達と連動して「電磁気学単位系」が進化している事実も知っておきたいが、そのような知識を得る際にも表 D-1, 表 D-2 は手助けとなる。木幡 (2003) によれば、第二次世界大戦中に敵航空機の襲来を知る

方法として発展したレーダー技術は、その後のマイクロ波工学の進展を促し、その中で「電波インピーダンス、 $Z_0 = |\mathbf{E}/\mathbf{H}| = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ (§ 24-3, 式 68', SI 単位系)」の重要性が認識されるようになった。しかし、表 D-2 から判るように、CGS ガウス単位系では、 $Z_0 = |\mathbf{E}/\mathbf{H}| = 1$ となり、その次元はインピーダンスに直接対応しない。もちろん、無次元の 1 がいけないという訳ではない。だが、SI 単位系では、表 D-3 に示すように、 $[\mathbf{E}] = [V/m]$, $[\mathbf{H}] = [A/m]$ だから、 $Z_0 = |\mathbf{E}/\mathbf{H}| = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0} = c\mu_0 \approx 120\pi = 376.5 (V/A = \Omega)$ となり、インピーダンスに対応した次元となる。このように、マイクロ波技術の進展は、「電波インピーダンス」の重要

表 D-3. MKSA 有理単位系, 国際 (SI) 単位系での電磁気学量の単位と次元

電磁気学量	記号	単位	基本単位の次元指数			
			<i>l</i>	<i>m</i>	<i>t</i>	<i>A</i>
電荷	<i>q</i>	1 クーロン (C)	0	0	1	1
電荷密度	ρ	1 C/m ³	-3	0	1	1
電流	<i>I, i</i>	1 アンペア (A)	0	0	0	1
電流密度	<i>J, j</i>	1 A/m ²	-2	0	0	1
電場 (の強さ)	<i>E</i>	1 ボルト/m (V/m)	1	1	-3	-1
電位 (電位差)	<i>V</i>	1 ボルト (V=Joul/C)	2	1	-3	-1
電気分極	<i>P</i>	1 C/m ²	-2	0	1	1
電束密度	<i>D</i>	1 C/m ²	-2	0	1	1
抵抗	Ω	1 オーム ($\Omega=V/A$)	2	1	-3	-2
電気容量	<i>C</i>	1 ファラッド (F=C/V)	-2	-1	4	2
磁束	Φ	1 ウェーバー (Wb=V·s)	2	1	-2	-1
磁束密度	<i>B</i>	1 テスラ (T=Wb/m ²)	0	1	-2	-1
磁場 (の強さ)	<i>H</i>	1 A/m	-1	0	0	1
磁化	<i>M</i>	1 A/m	-1	0	0	1
インダクタンス	<i>L</i>	1 ヘンリー (H=Wb/A)	2	1	-2	-2

性を明確にし、結果として、MKSA 有理単位系(SI 単位系)の普及を後押しする要因となった。

以上のように、SI 単位系以外の電磁気学の単位系も考えてみることは、電磁気学の復習としても面白いだけでなく、電磁気学をより普遍的な視点から再考する契機となる。そして、そこに見えるものは、SI 単位系に至る電磁気学単位系の歴史的進化である。