

現代の物質観その 8

Modern view on the constituents of matter VIII. 近代物理学前史 - 19 世紀後半から 20 世紀初頭にか けての物理学 -

Fujiwara Yoshikazu

2023 年 2 月 13 日

目次

1	はじめに	3
2	メンデレーエフの周期律表	4
3	解析力学と古典統計力学	11
3.1	最小作用の原理とラグランジュ方程式	12
3.2	ハミルトン方程式と正準変換	25
3.3	モーペルテュイの原理	39
3.4	Maxwell-Boltzmann 分布	47
3.5	ボルツマン方程式と H 定理	50
4	新しい粒子と放射性元素の発見	58
5	特殊相対性理論	60
5.1	はじめに	60
5.2	ガリレイ変換とローレンツ変換	61
5.3	四元ベクトルと不変量	66
5.4	電磁場中の荷電粒子の運動	71

5.5	電磁波の Poynting ベクトルとエネルギー密度	78
6	光量子仮説	80

1 はじめに

量子力学の確立とその後の原子核・素粒子の作る微視的世界 (subatomic physics) の飛躍的解明を近代物理学とすると、19 世紀後半から 20 世紀初頭にかけての物理学の発展はいわば物理学前史といえるものである。そこでは、それ以前に成立した力学・熱力学・電磁気学等の基本的法則が体系として確立・整備されると同時に、各個別分野の描像の中から統一的普遍的な自然像の模索と追求が行われた時期である。物理学の諸原理は化学分野の発展に総合的に応用され、産業界の要請に応えるものとして次第に社会に浸透していった。特に、1865 年から 1900 年位までとされる第二次産業革命は、ドイツ、フランス、アメリカ合衆国の工業力が急発展し、藍の染物工場、肥料工場等が作られ、自動車産業の発生 (1880 年代) とともに石炭から水蒸気、石油へとエネルギー源が変化し、有機化学やプラスチック等の高分子化学へと工業化が進んだ時期であった。種々の科学的発見が相次ぎ、それらが次々と産業化された。エジソンの電球の発明は 1879 年、ヘルツによる電磁波の発見は 1888 年、マルコーニの無線通信の発見は 1896 年、またライト兄弟による最初の飛行機実験は 1903 年である。政治的には 1870 年プロイセンとフランスの間に普仏戦争が勃発し、アルザス-ロレーヌ地方等その後の深刻な領土問題の火種となった。その間ドイツは統一されたが、ドイツとフランスの間の確執が強まりその影響は後世まで続いた。大幅な世界経済の発展とともにその影も見え始め、第一次世界大戦に向かってヨーロッパの世相が不安になっていく時代でもあった。日本では江戸時代の 250 年あまりの鎖国政策から脱皮し、明治の新しい時代が始まり、大きく立ち遅れた日本の近代化と近代科学に追いつくための大きな努力がなされた時代であった。

この時期の物理学の大きな進展の 1 つはメンデレーエフの周期律表の発見 (1869 年) である。トムソンによる電子の発見 (1897 年) やラザフォードによる原子核の発見 (1911 年) はその後のことであるが、それに先立ちメンデレーエフの周期律表は元素・原子・分子概念を確立し、中性原子のイオン化現象の理解を得て元素の周期的・化学的性質の解明に成功した。その後の原子模型と量子力学による理論的解明に道を開くものであった。もう一つの発展は、熱力学の確立に伴い明らかになった熱力学第二法則の一つの表現としてのエントロピーに関して、古典統計力学への道がマクスウェルやボルツマンによって開かれたことである。完全な微視的統計理論としての統計力学の根本的解明は、量子統計力学の成立まで待たなければならないが、統計的取り扱いの考え方やボルツマンの H-定理の証明等は現代でも巨視的熱力学の基礎づけとして重要な意味を持っている。また、ボルツマン方程式等は、非平衡熱力学の出発点として現代でも重要な意味を持っている。三番

目に特筆すべき事はマイケルソン・モーリーの実験により光の速度の物理学における特別な意味が明らかになり、アインシュタインの特殊相対性理論の発見へと繋がっていったという歴史的事実である。これによりファラデー以来の電気力学が完成し、その後の量子電磁力学 (量子場の理論) への発展の始まりとなった。この間、原子核物理学の発端となったベックレルの放射線元素の発見 (1896 年)、 α -、 β -、 γ -線の同定、マリー・キュリーのポロニウム・ラジウムの発見、ピエール・キュリーの強磁性体におけるキュリー点の発見等、現在我々がその恩恵に預かっている多くの発見が相次いだ。Max Planck による黒体輻射の理論 (1900 年) やエネルギーの量子化仮説、更にアインシュタインの光量子仮説はその後の量子力学の形成に大きな影響を与えた。

2 メンデレーエフの周期律表

メンデレーエフは元素を原子番号順に並べると、化学的性質が似た元素が周期的に現れることに気づいた。これをメンデレーエフの周期律表という。(図 1 参照) 図 1 で一番右の列に位置する元素 He, Ne, Ar, Kr 等は貴ガス (希ガス) といわれ、単原子分子を作り極めて安定である。一番左の列に位置する元素 H, Li, Na, K 等は電子一つを失って容易に 1 価のイオン H^+ , Li^+ , Na^+ , K^+ に成りやすい。H を除いてこれらは常温、常圧で全て金属で、これらはアルカリ金属と呼ばれる。NaOH (水酸化ナトリウム)、KOH (水酸化カリウム) はアルカリ性であり、その水溶液はほとんどが



と解離している。ここに OH^- は水酸化イオンと呼ばれる。純水もほんの僅か (10^{-7} mol/l) であるが



と解離しており、それが水の中を電流が流れる理由である。左から二行目に位置する Be, Mg, Ca, ... は電子二つを失って二価のイオン Be^{++} , Mg^{++} , Ca^{++} , ... になる。一方、右から二行目に位置する F, Cl 等は逆に電子一つを得て F^- , Cl^- 等になる。例えば食塩である塩化ナトリウム NaCl や塩化カリウム KCl は電氣的に中性であるが、水に溶けるとほとんどが



族 周期	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	₁ H																		₂ He
2	₃ Li	₄ Be											₅ B	₆ C	₇ N	₈ O	₉ F	₁₀ Ne	
3	₁₁ Na	₁₂ Mg											₁₃ Al	₁₄ Si	₁₅ P	₁₆ S	₁₇ Cl	₁₈ Ar	
4	₁₉ K	₂₀ Ca	₂₁ Sc	₂₂ Ti	₂₃ V	₂₄ Cr	₂₅ Mn	₂₆ Fe	₂₇ Co	₂₈ Ni	₂₉ Cu	₃₀ Zn	₃₁ Ga	₃₂ Ge	₃₃ As	₃₄ Se	₃₅ Br	₃₆ Kr	
5	₃₇ Rb	₃₈ Sr	₃₉ Y	₄₀ Zr	₄₁ Nb	₄₂ Mo	₄₃ Tc	₄₄ Ru	₄₅ Rh	₄₆ Pd	₄₇ Ag	₄₈ Cd	₄₉ In	₅₀ Sn	₅₁ Sb	₅₂ Te	₅₃ I	₅₄ Xe	
6	₅₅ Cs	₅₆ Ba	<small>57-71 ランタノイド</small>	₇₂ Hf	₇₃ Ta	₇₄ W	₇₅ Re	₇₆ Os	₇₇ Ir	₇₈ Pt	₇₉ Au	₈₀ Hg	₈₁ Tl	₈₂ Pb	₈₃ Bi	₈₄ Po	₈₅ At	₈₆ Rn	
7	₈₇ Fr	₈₈ Ra	<small>89-103 アクチノイド</small>																
									非金属元素		金属元素								

図 1 メンデレーエフの周期律表。study-z.net より転写 <https://study-z.net/100057465/3>

と解離する。このような原子間の結合様式をイオン結合という。また塩酸 HCl (塩化水素) は H^+ イオンと Cl^- イオンが結合して中性化したもので、塩酸水溶液は



と解離しており、強い酸性を示す。更に右から二行目に位置する O や S は電子二つを得て二価イオン O^{--} や S^{--} になる。 OH^- イオンは O^{--} に H^+ イオンが結合したものと考えられる。酸化マグネシウム MgO は マグネシウムイオン Mg^{++} と酸素イオン O^{--} がイオン結合により中性化したものである。更に右から五行目の C は左から五行目とも考えられ、そう考えると C^{4+} という四価イオンとなる。そうすると二酸化炭素 CO_2 が自然に理解できるが、一酸化炭素 CO というものもあってこれは人体にとって非常に危険な気体である。

ここでは、周期律表の一つの応用としてペーハー (pH) について述べる。既に述べた様に、25 °C の常温の純水は水素イオン濃度が $[H^+]=10^{-7}$ mol/l、つまり 1 l あたり $10^{-7} \times N_A \sim 6.02 \dots \times 10^{17}$ 個の H^+ イオンが存在する。(水分子 5 億 5 千万個につき 1 個水素イオンが存在する。) 純水は全体としては電氣的に中性であるから、水酸化イオンのイオン濃度も $[OH^-]=10^{-7}$ mol/l である。純水は中性である。このことを pH=7 という。これに塩酸を垂らすと、水溶液の水素イオン濃度が増し強い酸性を示す。一般に、水溶液の水素イオン濃度の逆数の常用対数を取ったものをペーハーといい pH で表わす。

つまり

$$\text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+] \quad (2.5)$$

温度が一定 (25 °C) の時希薄水溶液の水素イオン濃度と水酸化イオン濃度の積は常に一定で $[\text{H}^+][\text{OH}^-]=10^{-14}$ であることが知られている。(質量作用の法則) そこで HCl を溶かして (2.4) の反応が起きると、水の解離 (2.4) が抑制され水酸化イオン濃度が減少する。NaOH を水に溶かして (2.1) の反応が起きると、逆に水酸化イオン濃度が増大し水素イオン濃度が減少する。pH \leq 7 の時酸性、pH \geq 7 の時アルカリ性という。これはリトマス試験紙によって容易に調べられる。

メンデレーエフの周期律表の理論的基礎付けは、量子力学によって与えられた。電子を発見したトムソンは、原子模型としてプラスの電荷をもったスープの中にいくつかの電子が浮かんだいわゆる葡萄パン (raisin bread) 的な構造を提案したが、それはラザフォードによるアルファ粒子の散乱による原子核の発見によって完全に否定された。熱力学の Introduction の最後のところで既に紹介したが、原子は中心部分に位置する重い原子核とその周りに分布する幾つかの軽い電子から構成されている。原子核は電子の質量の約二千倍の質量を持った有限個の陽子と中性子からなっており、電氣的に中性な陽子の数は電子の数と等しくそれが原子番号 Z である。中性子の数は陽子の数とほぼ等しいか多少小さく、その数である中性子数 N は Z とともに原子核の質量数 $A=Z+N$ を形成している。自然界には Z が同じで A が少しだけ違う原子核が多数あって、それらを元素 Z の同位元素 (アイソトープ) あるいは同位体という。電子の占める状態は原子核の及ぼすクローン力によって決まっているので原子核のグローバルな性質を正確に指定することは重要である。 Z, N, A を量子数 (quantum numbers) というがそれらを使って原子核は普通 ${}^A_Z\text{X}$ と記述される。ここに原子番号 Z が元素のタイプを指定し、それが電子の占める状態、つまり原子の化学的性質を決定している。例えば、水素の原子核 ${}^1_1\text{H}_0$ は陽子 (p) そのものであって、電子と同じ大きさで逆符号の電荷 $e = 1.602 \dots \times 10^{-19} \text{ C}$ を持っている。一方、中性子 (n) は電氣的に中性で、陽子よりほんの僅か質量が大きく、原子核の中でだけ安定に存在している。原子核内の陽子と中性子を結びつけている力は強い相互作用 (核子間力、通称核力という) といってクーロン力等の電磁氣的な力とはまた別の相互作用である。中性子は単体としては不安定で、弱い相互作用によって約 10 分で陽子と電子、及び electron anti-neutrino に崩壊する。中性子は、1932 年チャドウィックによって発見された。水素の原子核の次に周期律表に表われるのはヘリウムの原子核で ${}^4_2\text{He}_2$ と表わされる。これをヘリウム 4 という。自然界にはヘリウム 4 がメインであるが、その同位体であるヘリウム 3 (${}^3_2\text{He}$) も少量存在する。大気中にはヘリウム 3 はヘリウム 4 の百万分の

一しか含まれていないが、水素の同位体である三重水素 (トリトン、 ${}^3_1\text{H}_2$) とは違って安定な元素である。水素やヘリウムの原子はそれぞれの原子核の周りを、一つないしは二つの電子が取り巻いている描像を描くことができる。

原子核を取り巻く電子の状態は、(微視の世界の力学法則である) 量子力学の基本方程式であるシュレーディンガー方程式を解くことによって厳密に決定することができる。その詳しい導出は後に譲ることにしてここでは結果だけを述べる。その前に、量子力学で基本になるいくつかの重要な原理について述べる。まず微視の世界では、有限領域に制限された粒子の運動は必ず量子化され、エネルギーは飛び飛びの値をとる。これは、後で出てくる黒体放射のエネルギー分布を導いた時に Max Planck が仮定したプランクの量子仮説と同じものである。古典力学と違って、量子力学的状態はシュレーディンガー方程式の解である波動関数とそれに対応する量子数によって指定される。もう一つの重要な原理は、微視の世界におけるスピンと統計との関係である。陽子、中性子、電子や光子等の微視の世界の粒子には角運動量に似たスピンという内部自由度があって、その値が整数値であるか半整数値であるかによってそれらの統計的性質が大きく異なる。特に、電子、陽子、中性子のスピンは $1/2$ で、このような半整数値の粒子はフェルミ粒子 (fermion) と呼ばれる。一方、光子のスピンは 1 で、このような整数値スピンを持つ粒子はボウズ粒子 (boson) といわれる。フェルミ粒子にはいわゆるパウリの排他律が適用され、二つの量子力学的状態に同じ種類のフェルミ粒子が入る事は許されない。一方、ボウズ粒子にはそのような制限は無い。スピンは (軌道) 角運動量と同様な性質を持っており、整数値の軌道角運動量 ℓ が $2\ell + 1$ 個の縮退状態を持つと同様に、スピン S の状態は $2S + 1$ 重に縮退している。したがって、スピン $1/2$ を持つ電子は $+1/2$ と $-1/2$ の磁気量子状態を持ち、これらを上向きのスピン状態、下向きのスピン状態と表現することもある。これらの準備の上で、原子核の電荷 Ze と電子の電荷 e の間に働くクーロン引力ポテンシャル $U(r) = Ze^2/r$ (cgs-esu 単位系で) の元でのシュレーディンガー方程式の解は量子数

$$n = n_r + \ell + 1 \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots \quad \text{and} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.6)$$

で表わされる。ここに $n = 1, 2, 3, \dots$ は主量子数といわれ、これを用いて電子の束縛状態のエネルギーは

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \cdot \frac{Z^2 m_e^4}{\hbar^2} \quad (2.7)$$

と表わされる。ここに m は原子核と電子との間の換算質量だが、原子核の質量は電子の質量と比べて遥かに大きいので実質的に電子の質量 m_e である。 \hbar はあとで出てくるプランク定数 h を 2π で割ったもの $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \dots \times 10^{-27}$ erg.s で換算プランク定数、

あるいはディラック定数といわれる。 $\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$ は原子レベルのエネルギーを測るのに便利な単位で、原子単位といわれる。(以下の原子単位の項、参照) 軌道角運動量 l の状態はスピン状態と同じく軌道磁気量子数 m によって $m = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$ の状態に分かれ、 lm の組みは全部で $2l+1$ 個の状態を含んでいる。 $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ をそれぞれ s, p, d, f, \dots の記号で表わすのが普通である。したがって、 s, p, d, f, \dots 状態はそれぞれ $1, 3, 5, 7, \dots$ の状態からなる。更に nl を組みにして $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, \dots$ と表わす。これらのそれぞれを殻といい、そこには

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \times \frac{1}{2} n(n-1) + n = n^2 \quad (2.8)$$

この状態が詰まっている。電子はスピン $1/2$ で各状態が二重に縮退しているので、ある主量子数 n の軌道には全部で $2n^2$ 個の状態があることになる。つまり、 $n = 1$ は $1s$ だけであり状態数は 2 、 $n = 2$ には $2s$ と $2p$ 軌道が属し状態数は全部で $2 \times (1+3) = 8$ 、 $n = 3$ 殻には $3s, 3p, 3d$ 軌道が含まれて状態数は全部で $2 \times (1+3+5) = 18$ 等々である。電子はフェルミ粒子なのでパウリ原理の適用を受け、電子はこれらの軌道をエネルギーの低い方から順番に詰まっていくことになる。この様な機構を電子軌道の殻構造 (shell structure) という。ここで電子の「軌道」という言葉を用いたが、注意すべきことは、実際にその様な古典運動の軌道が電子に用意されている訳ではない。あくまでも電子の微視的状态を一意的に指定するためにのみこの言葉を利用する。表 1 にこうした電子の状態分類の最初の簡単な場合を挙げておく。

表 1 電子の原子軌道の状態分類。クーロン量子数 nl with $n = n_r + l + 1$ and $n_r, l = 0, 1, 2, \dots$.

主量子数 n	nl	n^2	sum of $2n^2$
$n = 1$	$1s$	1	2
$n = 2$	$2s \quad 2p$	4	10
$n = 3$	$3s \quad 3p \quad 3d$	9	28
$n = 4$	$4s \quad 4p \quad 4d \quad 4f$	16	60
\dots	\dots	\dots	\dots

これらの準備の上でもう一度メンデレーエフの周期律表を見てみると、電子の原子軌道の概念は非常によく周期律表を説明していることが分かる。まず水素原子 ${}_1^1\text{H}$ は陽子 p の周りを一つの電子が $1s$ 軌道を占めているという構造を思い描くことができる。その時

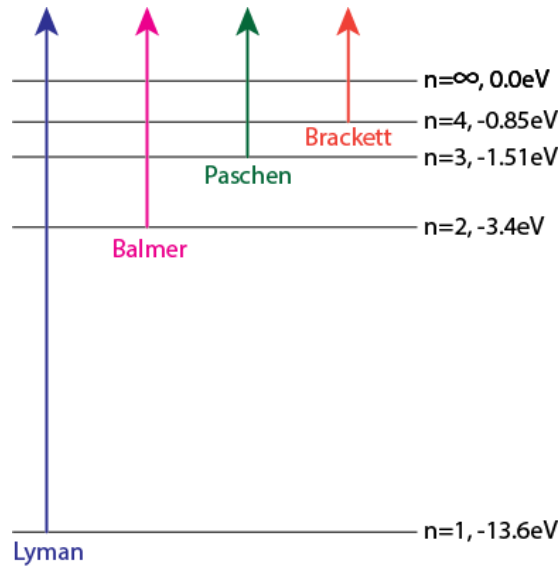


図 2 水素原子のエネルギースペクトル

の電子の結合エネルギーは、(2.7) で $Z=1$, $n = 1$, $m = m_e$ と置いて

$$E_1 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \sim -13.6\text{eV} \quad (2.9)$$

である。 $n = 1$ に電子のある状態は水素原子の基底状態といわれ、 $n = 2, 3, \dots$ の状態は励起状態といわれる。 $Z = 1, m = m_e$ の時の (2.7) を図 2 に示す。これを水素原子のエネルギースペクトル (energy spectrum) という。

次にヘリウム 4 (${}^4_2\text{He}$) は二個の電子が $1s$ 軌道を完全に占めていて、三番目の電子が付け加わるためには $n = 2$ の軌道に入らなければならないかなりのエネルギーがいる。これがヘリウム 4 が安定で希ガスと呼ばれる由縁である。この様に一つの殻 (shell) に完全に電子が詰まった状態を閉殻 (closed shell) といい、その様な原子を閉殻原子 (原子核では閉殻核) という。表 1 から分かる様に、次の閉殻原子は ${}^{20}_{10}\text{Ne}$ である。一般に、主量子数が $n = 1$ から $n = n_M$ まで完全に詰まった状態の電子数 N は

$$N = \sum_{n=1}^{n_M} 2n^2 = \frac{1}{3} n_M (n_M + 1) (2n_M + 1) \quad (2.10)$$

であり、 $n_M = 3$ の時は $N = 28$ である。 $Z = 28$ はニッケル Ni であるが Ni は希ガスではない。実際には、表 1 は軽い元素に対してだけ当てはまる近似的なもので、重い元素のより正確な記述にはクーロン力より高次の相互作用 (これを超微細構造力、hyperfine structure force という) の影響や電子相互間のクーロン斥力を考慮する必要がある。これ

らを考慮すると $n = 3$ の縮退した $3s, 3p, 3d$ 軌道は分離し、 $3s, 3p$ 軌道と $3d$ 軌道の間にエネルギーギャップが生じる。そこで ${}^{40}_{18}\text{Ar}$ は電子が $n = 1, 2$ 軌道の $3s, 3p$ 状態に詰まったものであり、 ${}^{84}_{36}\text{Kr}$ は $n = 3$ までと $4s, 4p$ が完全に詰まったものである。これらの重い元素では、一般に中性子数は陽子数より多少大きく $N \neq Z$ で数多くの同位体がある。一方、周期律表の二行目と三行目の元素では、自然界に存在する安定な元素はほとんどが $N=Z$ であり、表 1 のルールが非常に良い精度で成り立っている。二行目の最初は ${}^6_3\text{Li}$ or ${}^7_3\text{Li}$ であり、電子の軌道は $n = 1$ 軌道が全て詰まり、 $1s$ 軌道に一つ入っている。この電子は比較的容易に Li 原子核から離れ Li^+ イオンとなる。三行目、四行目のアルカリ金属 Na や K も閉殻の周りにただ一つ電子がつけ加わった構造を持っており、それ放出して容易に Na^+ や K^+ イオンになる性格を持っている。逆にフッ素 F やクロム Cl は閉殻の一つホールが空いており、そこに電子を取り込んで容易に F^- や Cl^- イオンになる。同様に酸素 ${}^{16}_8\text{O}$ は $n = 2$ 殻から電子が二つ不足した構造を持っており、それらを埋めることにより容易に二価の O^{2-} イオンになる。大気中の酸素は $99.7\% {}^{16}_8\text{O}$ であるが、 ${}^{18}_8\text{O}$ や ${}^{17}_8\text{O}$ も安定な元素として僅かばかり存在する。最後に、 $Z=57$ から 71 までの元素はランタノイド、 $Z=89$ から 103 までの元素はアクチノイドと呼ばれ複雑な電子配位をもっている。特にランタノイドにスカンジウム ${}_{21}\text{Sc}$ とイットリウム ${}_{39}\text{Y}$ を加えたものは希土類元素と呼ばれ、半導体素子や蓄電池、磁性体材料等のエレクトロニクス産業にとって必要かつ欠くべからざるものとなっている。

(追記) 原子単位系について

原子単位系とそれを含む微視の世界の物理学 (素粒子・原子核) で便利な単位系について、ここにまとめておく。長さの単位としては、原子・分子レベルのオングストローム $1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$ や原子核・素粒子レベルでのフェルミ (fermi) $1 \text{ fm} = 10^{-13} \text{ cm}$ が便利である。それらの間には 10^{-5} の差がある。次に微視の世界で便利なエネルギーの単位は、一つの電子を 1 V の電位差に逆らって持ち上げるのに必要なエネルギーでそれを 1 eV (electron volt) という。 $1 \text{ V} = 1 \text{ J/C}$ だから、 $1 \text{ eV} = 1.602 \cdots \times 10^{-19} \text{ J} = 1.602 \cdots \times 10^{-12} \text{ erg}$ である。またより大きい単位は、 $1000 \text{ eV} = 1 \text{ keV}$, $1000 \text{ keV} = 1 \text{ MeV}$, $1000 \text{ MeV} = 1 \text{ GeV}$, $1000 \text{ GeV} = 1 \text{ TeV}$, \cdots である。原子・分子の世界では eV , keV が、原子核・素粒子の世界では MeV , GeV が便利であり、その間にはおよそ 10^6 の差がある。アインシュタインの関係式 $E = mc^2$ により、静止した質量 m の粒子には mc^2 のエネルギーが対応していることが分かっているので、微視の世界の粒子の質量をエネルギーの単位 eV で表わすのが普通である。例えば、電子の質量はおよそ $m_e c^2 = 0.5 \text{ MeV}$, 陽子・中性子の質量はおよそ 1 GeV で電子の約 2000 倍である。(正確な値は表 2 参照)

あとで詳しく学ぶ様に、微視の世界はプランク定数 $\hbar = h/(2\pi)$ によって特徴付けられる。 \hbar は単位 $\text{erg} \cdot \text{s}$ の単位をもつ、大変小さい数である。そこで、この値は以下の様な色々な組み合わせで参照されることが多い。例えば、超微細構造定数 α は $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{1}{137}$ の無単位量で、電磁相互作用の大きさを表わすパラメータである。ここに、 $e = 1.602 \dots \times 10^{-19}$ C、また $c \sim 3 \times 10^{10}$ cm/s は光の速度である。また原子核・素粒子の世界では $\hbar c \sim 200$ MeV·fm が便利である。相互の間の関係は $\hbar c = 137 \times e^2 = 137 \times (1.602 \times 10^{-19})^2$ C² であるが、1 C を cgs-esu あるいは cgs- ガウス単位系に直すと電磁気学のところの (4.1.1) 式より $1 \text{ C} = 3 \times 10^9$ cgs-esu、 $1 \text{ cgs-esu} = 1 \text{ dyn}^{1/2} \text{ cm}$ だから、 $1 \text{ C}^2 = 9 \times 10^{18} \text{ dyn cm}^2 = 9 \times 10^{18} \text{ erg cm} = 9 \times 10^{18} \text{ times} 10^{-7} \times 10^{13} \text{ J fm} = 0.9 \times 10^{25} \text{ J fm}$ 。そこで、 $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$ をつかつて $\hbar c = 137 \times 1.602 \times 10^{-19} \times 0.9 \times 10^{25} \text{ eV fm} = 137 \times 0.9 \text{ times} 1.602 \text{ MeV fm} = 197.5 \text{ MeV fm} \sim 200 \text{ MeV fm}$ となる。微視の世界で有用なもう一つの物理量はコンプトン波長 $\frac{\hbar}{m_e c}$ である。微視の世界では粒子も波としての性質を持ち、その波長を示すのがコンプトン波長である。電子のコンプトン波長はおよそ $\frac{\hbar}{m_e c} = \frac{\hbar c}{m_e c^2} \sim \frac{200}{0.5} \text{ fm} = 400 \text{ fm} = 0.004 \text{ \AA}$ 、陽子のそれはおよそ $\frac{\hbar}{m_p c} = 0.2 \text{ fm}$ である。

水素原子の基底状態である $1s$ 状態の電子の軌道半径を a_0 と書くと

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{m_e c} \hbar c = 0.004 \times 137 \text{ \AA} \sim 0.5 \text{ \AA} \quad (2.11)$$

である。これをボーア半径という。また水素原子の基底状態のエネルギーは

$$E_1 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{1}{2} m_e (c\alpha)^2 = -0.5 \times 0.5 \times 137^2 \text{ MeV} \sim -13.6 \text{ eV} \quad (2.12)$$

である。長さの単位とエネルギーの単位

$$\frac{\hbar^2}{m_e e^2}, \quad \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \quad (2.13)$$

を原子単位 (atomic unit) という。

3 解析力学と古典統計力学

前回熱力学のところでも最後に学んだ理想気体の分子運動論は、統計力学的手法を用いてもう少し厳密な議論が可能である。これにより、粒子の速度やエネルギーの分布関数を与える Maxwell-Boltzmann 分布や非平衡物理学の基礎となる Boltzmann 方程式、更にエントロピーの起源に迫る Boltzmann の H-定理等、その後の量子統計力学に繋がる重要

表 2 種々の物理定数と幾つかの物理量

物理定数	値
素電荷	$e = 1.602 \cdots \times 10^{-19} \text{ C} = [e] \text{ C}$
(換算)	$1 \text{ eV} = [e] \text{ J}$
光速	$c = 2.99792 \cdots \times 10^{10} \text{ cm/s} = [c] \text{ cm/s}$
(換算)	$1 \text{ C} = [c]/10 \text{ cgs-esu} = [c]/10 \text{ dyn}^{1/2} \text{ cm}$
アボガドロ数	$N_A = 6.022 \cdots \times 10^{23}$
気体定数	$R = 8.314 \cdots \text{ J/K}$ (1 mol あたり)
ボルツマン定数	$k = R/N_A = 1.380 \cdots \text{ J/K}$
プランク定数	$h = 2\pi\hbar = 6.626 \cdots \times 10^{-34} \text{ J s}$
	$\hbar c = 197.33 \text{ MeV fm}$
超微細構造定数	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.035}$
物理量	値
電子質量	$m_e c^2 = 0.510998 \cdots \text{ MeV}$
電子のコンプトン波長	$\frac{\hbar}{m_e c} = 386 \text{ fm}$
陽子質量	$m_p c^2 = 938.272 \cdots \text{ MeV}$
陽子のコンプトン波長	$\frac{\hbar}{m_p c} = 0.210 \text{ fm}$
中性子の質量	$m_n c^2 = 939.565 \cdots \text{ MeV}$
ボーア半径	$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA}$

な流れを理解することができる。しかし、我々はその前に以後の物理学の発展に重要な役割を果たした解析力学について簡単に学んでおく必要がある。

3.1 最小作用の原理とラグランジュ方程式

17 世紀末に成立したニュートン力学のその後の発展についてはこれまで話す機会がなかったが、当然のことながら 18 世紀、19 世紀に発展がなかったわけではない。特に 18 世紀の半ばには、光の直進を示すフェルマー (Fermat) の原理に似た最小作用の原理からニュートン方程式を導く、いわゆるラグランジュ形式 (Lagrangian formalism) が確立し、その後の力学的定式化は全てこの枠内で行われるようになった。基礎になったラグランジュ方程式はニュートンの運動方程式に比べて特に何か新しく付け加わった訳ではないが、例えば拘束条件付きの力学問題に対して見通しの良い解法を与える。更にそ

の後、数学者 Hamilton や Jacobi によって定式化された古典力学の正準形式の理論や Hamilton-Jacobi 方程式は、量子力学の発展に一つの指導原理として大きな役割を果たした。

力学のラグランジュ形式では、ユークリッド空間の 3 次元座標 x, y, z を一般化した一般化座標 (あるいは一般座標) q とその速度 $\dot{q} = \frac{dq}{dt}$ 、および時間 t の関数としてラグランジュ関数、すなわちラグランジアン (Lagrangian) $L = L(q, \dot{q}, t)$ を考える。 $q = q(t)$ と $\dot{q} = \dot{q}(t)$ はもちろん時間 t の関数である。 q と \dot{q} の組み (q_i, \dot{q}_i) ($i = 1, 2, 3, \dots, n$) はいくつあっても良い。例えば $(q_1, \dot{q}_1) = (x, v_x), (q_2, \dot{q}_2) = (y, v_y), (q_3, \dot{q}_3) = (z, v_z)$ の時は $n = 3$ である。 N 粒子系の 3 次元問題を考える時は、 $n = 3N$ である。 n を自由度の数という。一般座標は拘束条件付きの力学問題に対して特に適しており、今考えている問題にとって最も便利な様に取ればよい。例えば、図 3 の振り子の問題では中心からの距離は l で一定だから粒子の運動は円軌道である。質量 m の振り子の最低位置からの振れ角 θ を q とすれば、振り子の運動は θ の一次元問題となる。ラグランジアン L を時間について t_0 から t_1 まで積分して S と書き、これを作用という。

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \quad (3.1.1)$$

以下、簡単のためにしばらく一次元問題を考えるが、一般には q, \dot{q} は上の $2n$ の座標と速度変数の総体を表わすものとすれば良い。この様な一般化は以下のほとんどの場合容易である。(そうでない場合はその都度ことわる。) $S = S[q(t), \dot{q}(t)]$ は粒子の軌道 (trajectory) を表わす関数 $(q(t), \dot{q}(t))$ によってその値が決まる関数であり、この様な関数の関数を一般に汎関数という。最小作用の原理は、粒子の軌道をほんの僅か変えた時に作用が最小になるという原理である。 $q(t), \dot{q}(t)$ の微小変化を微分 d と区別して変分といい、 δq と $\delta \dot{q}$ で表わす。これらは互いに独立な変分である。この時汎関数 S の変分は、時間積分と変分の作用が互いに独立なことから

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_0}^{t_1} \delta L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\delta L}{\delta q} \delta q(t) + \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \delta \dot{q}(t) \right] dt \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

となる。(変分は全微分と同じ様に扱える。) ここで最後の項を部分積分すると

$$\begin{aligned} \delta S &= \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \delta q(t) \Big|_{t_0}^{t_1} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1} \delta q(t) \left[\frac{\delta L}{\delta q} - \frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \right] dt \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

となる。ここに変分は時間の端の値 $\delta q(t_1) = 0$ と $\delta q(t_0) = 0$ を留めて行うものとする。そうすると (3.1.3) の右辺第一項目はゼロで、かつ二項目の $\delta q(t)$ は任意だから $\delta S = 0$ から [...] の部分 = 0 つまり

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} - \frac{\delta L}{\delta q} = 0 \quad (3.1.4)$$

が得られる。これをラグランジュ方程式 (Lagrange equation) という。

最小作用の原理に用いるラグランジアンには、 $f(q, t)$ の完全微分だけの不定性がある。すなわち、 L を $L + \frac{df(q, t)}{dt}$ と変えてもラグランジュ方程式は変わらない。そのわけは、この変更によって作用積分 (3.1.1) には新しい項 $f(q(t_1), t_1) - f(q(t_0), t_0)$ が付け加わるが、この項は $q(t)$ の変分には効かないからである。

問題はラグランジュ関数 $L = L(q(t), \dot{q}(t), t)$ をどう構成するかである。そのために我々はまず、保存力の中を運動する質量 m の一粒子運動を考える。この時位置エネルギーを表わすポテンシャル $U(q)$ が存在して、粒子に働く力 F は $F = -\frac{\partial U(q)}{\partial q}$ で表わされる。この時ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - U(q) \quad (3.1.5)$$

で与えられる。実際、この時 $\frac{\delta L}{\delta \dot{q}} = m\dot{q}$, $\frac{\delta L}{\delta q} = -\frac{\partial U(q)}{\partial q}$ よりラグランジュ方程式 (3.1.4) はニュートン方程式

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial U(q)}{\partial q} \quad (3.1.6)$$

となる。

(3.1.4) で $p = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}}$ は q に対する運動量で、これを一般化運動量 (あるいは一般運動量) という。多次元の場合も同様に $p_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}_i}$ である。今 (3.1.1) でラグランジアンが時間 t に陽には依存せず $L = L(q, \dot{q})$ であると考え。例えば (3.1.5) はその様な場合である。この時

$$H = p\dot{q} - L(q, \dot{q}) \quad (3.1.7)$$

をつくると、 H は時間に関して不変となる。実際、ラグランジュ方程式を用いると

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} \\ &= \dot{q} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \right) \\ &= \frac{d}{dt} (p\dot{q}) \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

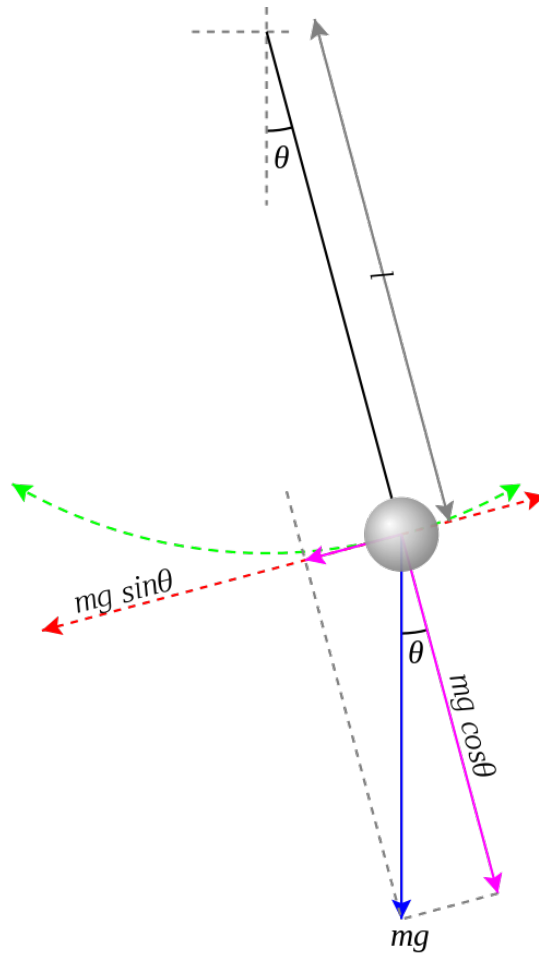


図3 単振子に働く力: ウィキペディアより転写

が成り立つから、左辺を右辺に移して $\frac{dH}{dt} = 0$ が得られる。 H は次節で定義されるハミルトニアン、 $H(q, p) = E$ は保存される系のエネルギーである。(3.1.5) に対して (3.1.7) は

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + U(q) \quad (3.1.9)$$

となる。

(練習問題 1) 単振子の問題をラグランジュ形式で解け。

ラグランジアンは $L = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2 - mgl(1 - \cos\theta)$ で与えられる。これを $\cos\theta = 1 - \frac{1}{2}\theta^2 + \dots$ を用いて $|\theta| \ll 1$ (θ はラジアンで測る) の近似のもとに計算すると、ラグランジュ方程式として

$$ml^2\ddot{\theta} + mgl\theta = 0 \quad (3.1.10)$$

が得られる。そこで $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$ として $\ddot{\theta} + \omega^2\theta = 0$ より解は $\theta = A \sin(\omega t + \delta)$ となる。

そこで単振子の周期は、 $T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{\ell}{g}}$ と求まる。(終わり)

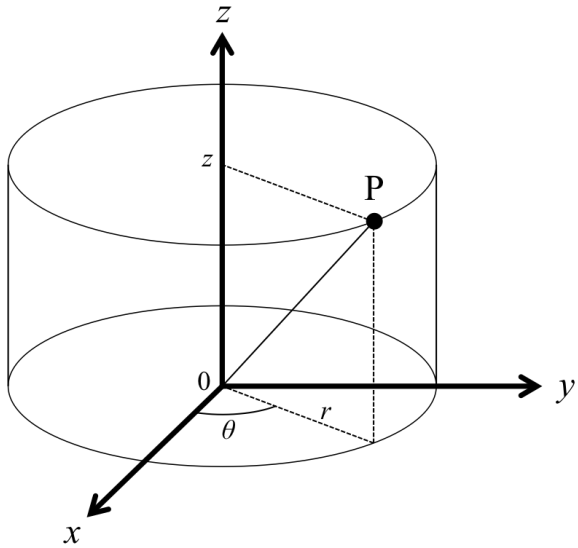


図 4 三次元円筒座標:

physics.thick.jp より転写 [http : //physics.thick.jp/PhysicalMathematics/Section3/3-8.html](http://physics.thick.jp/PhysicalMathematics/Section3/3-8.html)

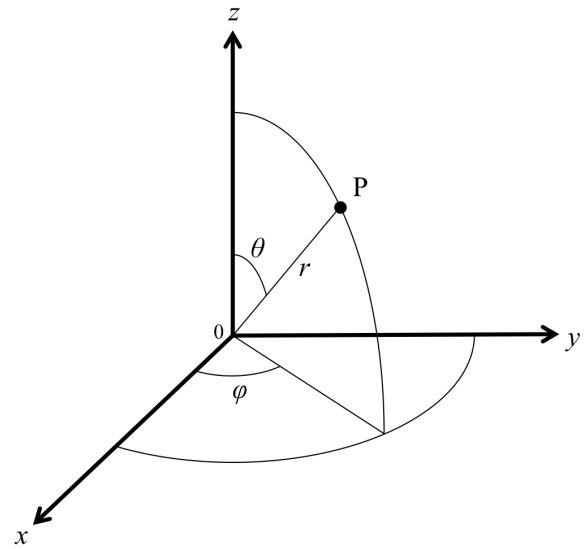


図 5 3次元極座標: 同左

(練習問題 2) 三次元直交座標のラグランジアン

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{r}) \quad (3.1.11)$$

から出発して、円筒座標と極座標 (図 4 参照) におけるラグランジュ方程式を導け。

三次元直交座標系との座標変換は

(円筒座標)

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

(極座標)

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (3.1.12)$$

また三次元空間における線素 dl は図 4 より、直交座標系では $dl^2 = d\mathbf{r}^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$ であるが、円筒座標系では $dl^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + dz^2$ 極座標系では $dl^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + (r \sin \theta d\varphi)^2$ だからラグランジアンは

(円筒座標)

$$L = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + (r\dot{\theta})^2 + \dot{z}^2 \right) - U(r, \theta, z)$$

(極座標)

$$L = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + (r\dot{\theta})^2 + (r \sin \theta \dot{\varphi})^2 \right) - U(r) \quad (3.1.13)$$

となる。ここから、一般運動量とラグランジュ方程式、さらにハミルトニアンを求めると、円筒座標系では

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r}, & p_\theta &= mr^2\dot{\theta}, & p_z &= m\dot{z} \\ \frac{d}{dt}m\dot{r} &= -\frac{\partial U(r, \theta, z)}{\partial r} \\ \frac{d}{dt}mr^2\dot{\theta} &= -\frac{\partial U(r, \theta, z)}{\partial \theta} \\ \frac{d}{dt}m\dot{z} &= -\frac{\partial U(r, \theta, z)}{\partial z} \\ H &= \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + p_z^2 \right) + U(r, \theta, z) \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

となる。一方極座標系では

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r}, & p_\theta &= mr^2\dot{\theta}, & p_\varphi &= m(r \sin \theta)^2\dot{\varphi} \\ \frac{d}{dt}m\dot{r} &= -\frac{\partial U(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \\ \frac{d}{dt}mr^2\dot{\theta} &= -\frac{\partial U(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \\ \frac{d}{dt}m(r \sin \theta)^2\dot{\varphi} &= -\frac{\partial U(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} \\ H &= \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{(r \sin \theta)^2} \right) + U(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

となる。(終わり)

(二次元中心力場の問題)

円筒座標を使った (3.1.14) の問題で、ポテンシャル $U(\mathbf{r})$ が x - y 平面での動径部分の距離 $r = |\mathbf{r}|$ だけによる時中心力場の問題という。この時 θ 方向と z 方向のラグランジュ方程式から $mr^2\dot{\theta}$ と $m\dot{z}$ が保存される。つまり $v_z = \text{const.}$ より $z = (v_z)_0 t + z_0$. そこで初期条件として $(v_z)_0 = z_0 = 0$ と取れば x - y 平面内の粒子の運動はいつまでも x - y 平面内にとどまることになる。この事は θ -方向の運動量 $p_\theta = mr^2\dot{\theta}$ が保存する事

からもわかる。この量はあとで示す三次元直交空間の角運動量ベクトル $\mathbf{M} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ の z -軸方向の成分 $M_z = xp_y - yp_x$ である。実際 $p_x = m\dot{x} = m(\dot{r} \cos \theta - r \sin \theta \dot{\theta})$, $p_y = m\dot{y} = m(\dot{r} \sin \theta + r \cos \theta \dot{\theta})$ を使うと

$$\begin{aligned} M_z &= m \left\{ (r \cos \theta)(\dot{r} \sin \theta + r \cos \theta \dot{\theta}) - (r \sin \theta)(\dot{r} \cos \theta - r \sin \theta \dot{\theta}) \right\} \\ &= mr^2 \dot{\theta} = p_\theta \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

となる。これらはまた面積速度 $\dot{f} = (1/2)r^2\dot{\theta}$ を使って $M_z = p_\theta = 2m\dot{f}$ とも表わされる。これがケプラーの第二法則「面積速度一定の法則」である。角運動量の保存則 $M_z = M$ とエネルギー保存則 $H(q, p) = E$ を使うと

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2m} \left\{ p_r^2 + \frac{M^2}{r^2} \right\} + U(r) \\ p_r &= \pm \sqrt{2m(E - U(r)) - \frac{M^2}{r^2}} \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

から

$$t = \pm m \frac{1}{\sqrt{2m(E - U(r)) - \frac{M^2}{r^2}}} dr \quad (3.1.18)$$

また $\dot{\theta} = \frac{M}{mr^2}$ を使って $\frac{d\theta}{dr} = \frac{\dot{\theta}}{\dot{r}} = \frac{M}{r^2} \frac{1}{p_r}$ より

$$\theta = \pm \int \frac{\frac{M}{r^2}}{\sqrt{2m(E - U(r)) - \frac{M^2}{r^2}}} dr \quad (3.1.19)$$

が得られる。粒子の軌跡は、この式を逆に解いて r を θ で表わすことによって得られる。(二次元中心力場の問題、終わり)

(練習問題) ケプラー問題

中心力の問題で特に $U(r) = -\frac{\alpha}{r}$ の時、ケプラー問題という。 $\alpha = GMm$ (G は万有引力定数、 M と m は例えば太陽と地球の質量) であるが、 $\alpha = e^2$ と取ることにより水素原子の古典的問題と考えることもできる。この場合 (3.1.19) の積分は初等的に実行出来て、粒子の軌跡は一般に二次曲線となる。(3.1.17) で $m \rightarrow \mu = \frac{Mm}{(M+m)}$ (換算質量)、 $M \rightarrow h = \mu r^2 \dot{\theta}$ (角運動量、(3.1.16) 参照) として、有効ポテンシャル

$$U^{(\text{eff})}(r) = \frac{h^2}{2\mu r^2} + U(r) = \frac{h^2}{2\mu r^2} - \frac{\alpha}{r} \quad (3.1.20)$$

を定義すると (3.1.17) は

$$E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + U^{(\text{eff})}(r) \quad (3.1.21)$$

となる。有効ポテンシャルの一項目は遠心力ポテンシャルといわれ、 $h \neq 0$ の時は $r \rightarrow 0$ で $1/r$ より早へ発散するので大まかな振る舞いとしては図 1 の様になる。有効ポテンシャルの最小値は $\frac{dU^{(\text{eff})}(r)}{dr} = 0$ から求められる。すなわち

$$\begin{aligned} r_{\min} &= \frac{h^2}{\mu\alpha} = d \\ U_{\min} &= -\frac{\mu\alpha^2}{2h^2} = -\frac{\alpha}{2d} < 0 \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

である。(3.1.21) は粒子の古典的運動が $E \geq U_{\min}$ の時のみ可能で、 $E < 0$ の時有限運動で $E \geq 0$ の時粒子は無限遠に飛び散ることを表わしている。この時 (3.1.19) は

$$\begin{aligned} \theta &= \pm \int \frac{\frac{h}{r^2}}{\sqrt{2\mu(E - U^{(\text{eff})}(r))}} dr \\ &= \pm \int \frac{\frac{h}{r^2}}{\sqrt{2\mu E - \frac{h^2}{r^2} + \frac{2\mu\alpha}{r}}} dr \end{aligned} \quad (3.1.23)$$

となる。ここで右辺の積分で $r = \frac{d}{u}$ とおいて u の積分に移ると $2 E \left(\frac{d}{h}\right)^2 = \varepsilon^2 - 1$ とおいて

$$\theta = \mp \int \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - (u-1)^2}} du \quad (3.1.24)$$

そこで $\varepsilon \geq 0$ として $u = 1 + \varepsilon \cos \theta$ とする (3.1.24) は $-$ 符号を取るにより自明な関係になる。結局粒子の軌道として

$$r = \frac{d}{1 + \varepsilon \cos \theta} \quad (3.1.25)$$

が得られる。二次曲線の一般論よりこの軌跡は

$$\begin{aligned} 0 \leq \varepsilon < 1 & \text{ の時、楕円 } (\varepsilon = 0 \text{ の時は円}) \\ \varepsilon = & \text{ の時、放物線} \\ \varepsilon > 1 & \text{ の時、双曲線} \end{aligned} \quad (3.1.26)$$

を表わす。 $0 \leq \varepsilon < 1$ の楕円の場合がケプラーの第一法則である。

(3.1.4) では簡単ために一次元のラグランジュ方程式を考えたが、多次元の場合にも容易に拡張できる。この時ラグランジュ方程式は $L = L(q, \dot{q}, t) =$

$L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t)$ に対し

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{q}_i} - \frac{\delta L}{\delta q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.1.27)$$

となる。一般にはラグランジアンは運動エネルギーの項が \dot{q}_i の二次形式になっていることから

$$L = \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} \alpha_{i,j}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j - U(q, t) \quad (3.1.28)$$

である。ここに $\alpha_{i,j}(q) = \alpha_{j,i}(q)$ である。一般運動量は $p_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}_i} = \sum_{j=1}^n \alpha_{i,j} \dot{q}_j$ であるから、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t) \\ &= \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} \alpha_{i,j}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j + U(q, t) \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

である。この場合も、もしラグランジアン (3.1.28) のポテンシャル項が時間に陽には依存せず $U(q)$ であれば、ハミルトニアン H も時間に陽には依存せず、それは保存される系のエネルギーになる。

具体的に三次元直交空間の N 粒子系を考えよう。この場合自由度の数は $n = 3N$ で、ラグランジュ方程式は n 個の 2 階常微分方程式となる。この連立常微分方程式は $2n$ 個の初期条件を与えることにより、完全に解くことができる。つまり q_i と \dot{q}_i は時間 t とこれら $2n$ 個の初期条件の関数である。一方、系の不変量は q_i, \dot{q}_i ($i = 1, 2, \dots, n$) だけの関数であり、独立な不変量の数はおのずと有限に限られてくる。そのわけは、独立な不変量の数があまりに大きいとこれらの連立方程式を逆に解いて $2n$ 個の変数を一位的に決めることが出来ないからである。 q_i と \dot{q}_i が t の関数であることを残しておく、独立な不変量の数は高々 $2n - 1$ 個であることがわかる。すなわち、これらの独立の不変量を $C_1, C_2, \dots, C_{2n-1}$ とすると $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(t, C_1, C_2, \dots, C_{2n-1}) \\ \dot{q}_i &= \dot{q}_i(t, C_1, C_2, \dots, C_{2n-1}) \end{aligned} \quad (3.1.30)$$

となる。

今外界から遮断された N 粒子系 (孤立系という) を考え、粒子はお互いに粒子間の相対座標の関数としてのポテンシャルを通じて相互作用しているとする。系のラグランジア

ンは

$$L = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3.1.31)$$

ここにポテンシャル項は

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i>j=1}^N U^{(2)}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \sum_{i>j>k=1}^N U^{(3)}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + \dots \quad (3.1.32)$$

で与えられると仮定する。ここに、右辺第一項目を二体力、第二項目を三体力、等々という。ラグランジアンは系の性質を完全に規定している。例えば、ニュートンの第一運動法則は慣性系の存在とガリレオの相対性原理における絶対時間の存在を主張しているが、ガリレオ変換 $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t$ に対するラグランジュ方程式の不変性は、ラグランジアンの運動エネルギー項が速度 \mathbf{v}_i の二乗の和であることに表われている。実際 $\mathbf{v}_{\alpha} = \mathbf{v}_{\alpha}' + \mathbf{V}$ より

$$\begin{aligned} T &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^2 \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}'^2 + \mathbf{V} \cdot \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}' + \mathbf{V}^2 \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

ここに右辺第二-三項目の寄与は $\mathbf{V} \cdot \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}' + t\mathbf{V}^2 \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha}$ の完全時間微分で書けるから落とすことができる。同様に (3.1.32) のポテンシャルエネルギー項の形は微少座標変換 $\mathbf{r} \rightarrow \varepsilon$ に対して $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ が不変である様にとられている。この時

$$\sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} \varepsilon = 0 \quad (3.1.34)$$

で $\mathbf{F}_{\alpha} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}$ は粒子 α に働く力だから、これは

$$\sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha} = 0 \quad (3.1.35)$$

すなわち、内力の和がゼロであることを表わす。これはニュートンの第三法則「作用・反作用の法則」の内容である。ラグランジュ方程式、あるいはニュートン方程式 $\dot{\mathbf{p}}_{\alpha} = \mathbf{F}_{\alpha}$ を使うとこの式は

$$\mathbf{P} = \text{const.} \quad \text{with} \quad \mathbf{P} = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{p}_{\alpha} \quad (3.1.36)$$

となる。 \mathbf{P} は系の全運動量である。すなわち粒子が内力だけで相互作用する時、系の全運動量は保存される。エネルギー保存則がラグランジアンの変位の微小変化に対する不変性から導かれたように、運動量保存則は座標変数の一様な微小変換に対するラグランジアンの不変性から導かれる。この意味で、エネルギー保存が時間の一様性に基いているのに対して、運動量保存則は空間の並進方向の一様性に関係している。以下に見る様に空間の等方性に基いた保存則は角運動量保存則である。

もし系が孤立系ではなく外場の影響を受けるとすると、(3.1.43) のポテンシャル項には一体ポテンシャルの項 $\sum_{\alpha=1}^N U^{(1)}(\mathbf{r}_\alpha)$ を付け加えなければならない。この時、外力

$$\mathbf{F}^{(\text{ext})} = - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_\alpha} U^{(1)}(\mathbf{r}_\alpha) \neq 0 \quad (3.1.37)$$

は一般にはゼロでない。また、ポテンシャル項が時間依存性を含むのはこの様な場合である。この時系全体のエネルギーや運動量は、一般に保存されない。

再び内力だけの場合に戻って、系の重心 (質量中心) を

$$\mathbf{R} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \mathbf{r}_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N m_\alpha} \quad (3.1.38)$$

で定義する。 $\sum_{\alpha=1}^N m_\alpha = M$ は全系の質量の和である。 \mathbf{R} の時間微分を $\mathbf{V} = \dot{\mathbf{R}}$ とすると、これは重心の速度で $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ を満たす。外力が働かない場合、 \mathbf{V} は一定でニュートンの第一法則が系全体に対しても成り立っていることがわかる。つまり、系の大きさよりはるかに大きなスケールで見た場合、全ての粒子が重心に集まったかのように見えることを意味する。重心から測った座標を $\mathbf{r}_\alpha' = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}$ として、その重心 $\mathbf{R}' = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{r}_\alpha' / M$ を計算するとゼロとなるから、系の原点を常に重心にとって興味のない重心運動を消去することができる。一つの慣性系 \mathcal{K} の座標を \mathbf{r} 、それに対して速度 \mathbf{V} で動いているもう一つの慣性系で原点を重心とするものを \mathcal{K}' その座標を \mathbf{r}' とすると $\mathbf{v}_\alpha = \mathbf{v}_\alpha' + \mathbf{V}$ より

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \mathbf{r}_\alpha = \mathbf{P}' + M\mathbf{V} \quad (3.1.39)$$

ここで $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ より $\mathbf{P}' = 0$ となる。一般に \mathcal{K} を実験室系、 \mathcal{K}' を重心系という。重心系では、全運動量=0 である。また全エネルギーも $\sum_{\alpha}^N \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} = \sum_{\alpha}^N \frac{\mathbf{p}'_\alpha{}^2}{2m_\alpha} + \mathbf{P}' \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2} M\mathbf{V}^2$ より

$$E = \frac{1}{2} M\mathbf{V}^2 + E^{(\text{int})} \quad (3.1.40)$$

ここに $E^{(\text{int})}$ は重心系における全エネルギーであり、内部エネルギーといわれる。

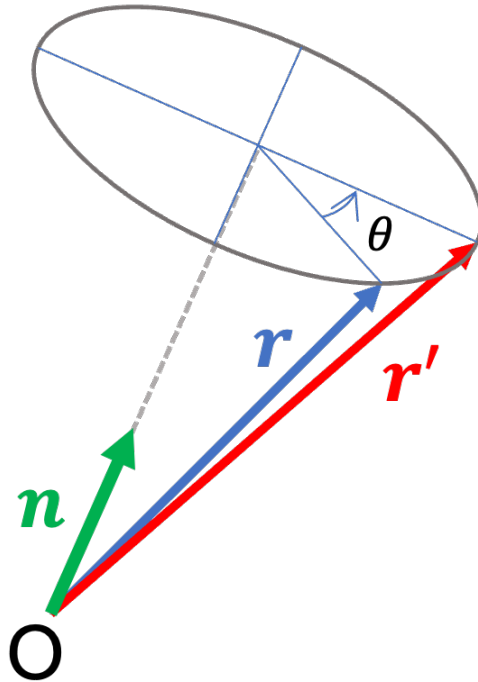


図6 座標ベクトルの微少回転: ウィキペディアより

最後に空間の等方性に関係した角運動量保存則について述べる。図5の様に三次元直交空間のある方向に原点から微少ベクトル $\delta\varphi$ を取り、その大きさを $\delta\varphi$ とする。その方向の単位ベクトルを \mathbf{n} とすると $\delta\varphi = (\delta\varphi)\mathbf{n}$ である。座標ベクトル \mathbf{r} を軸 \mathbf{n} の周りに(右ネジの向きに) 微少角 $\delta\varphi$ だけ回転すると、座標の増分は $\delta\mathbf{r} = [\delta\varphi \times \mathbf{r}]$ で与えられる。ラグランジアンのパテンシャル項 (3.1.32) にこの変換を施すと

$$\begin{aligned} \delta U &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} \cdot [\delta\varphi \times \mathbf{r}_{\alpha}] \\ &= -\delta\varphi \cdot \sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{F}_{\alpha}] \end{aligned} \quad (3.1.41)$$

となる。従ってラグランジアンがこの変換に対して不変であることを要請すると

$$\sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{F}_{\alpha}] = 0 \quad (3.1.42)$$

であることがわかる。ここで角運動量を

$$\mathbf{M} = \sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha}] \quad (3.1.43)$$

で定義すると、ニュートンの運動方程式を使って

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{M}}{dt} &= \sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{v}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha}] + \sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{F}_{\alpha}] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.44)$$

であることがわかる。これを角運動量保存則という。重心系では $\mathbf{r}_{\alpha} = \mathbf{r}'_{\alpha} + \mathbf{R}$, $\mathbf{p}_{\alpha} = \mathbf{p}'_{\alpha} + m_{\alpha}\mathbf{V}$ を用いて (3.1.43) は $\mathbf{R}' = \mathbf{P}' = 0$ より

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}' + [\mathbf{R} \times \mathbf{P}] \quad (3.1.45)$$

となる。ここに、右辺第二項目は重心系全体の回転に対する角運動量である。 \mathbf{M}' は重心系における全角運動量で、内部角運動量といわれる。もし (3.1.32) の様に外力がゼロなら $[\mathbf{R} \times \mathbf{F}^{(\text{ext})}] = 0$ であるので、系全体の角運動量と内部角運動量はそれぞれ独立に保存する。

ラグランジュ方程式が座標変換

$$q_i = q_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_n) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.1.46)$$

に対して不変なことは大変重要である。この場合、当然逆変換

$$Q_i = Q_i(q_1, q_2, \dots, q_n) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.1.47)$$

が存在することを仮定している。この時、新しいラグランジアンを

$$L' = L'(Q, \dot{Q}, t) = L(q(Q), \dot{q}(Q, \dot{Q}), t) \quad (3.1.48)$$

で定義すると、最小作用の原理からラグランジュ方程式は再び

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L'}{\delta \dot{Q}_i} - \frac{\delta L'}{\delta Q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.1.49)$$

となる。これをラグランジュ形式の共変性という。この性質は、以下の様にして直接示すこともできる。まず (3.1.48) の $\dot{q}_i(Q, \dot{Q})$ の意味は (3.1.46) から

$$\dot{q}_i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j \quad (3.1.50)$$

である。ここに、 $J_{i,j} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_j}$ は変換のヤコビアンである。これを $\dot{q}_i = \sum_{j=1}^n J_{i,j} \dot{Q}_j$ 、あるいは matrix form で $\dot{q} = J\dot{Q}$ と書く。 $\det J \neq 0$ である。(3.1.50) から

$$\begin{aligned} \frac{\delta L'}{\delta \dot{Q}_i} &= \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{Q}_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} J_{j,i} \\ \frac{\delta L'}{\delta Q_i} &= \sum_{j=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial q_j} J_{j,i} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \sum_{k=1}^n \frac{\partial J_{j,k}}{\partial Q_i} \dot{Q}_k \right] \\ &\quad (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \tag{3.1.51}$$

が得られる。

そこで $\frac{\partial J_{j,i}}{\partial Q_k} = \frac{\partial^2 q_j}{\partial Q_i \partial Q_k} = \frac{\partial^2 q_j}{\partial Q_k \partial Q_i} = \frac{\partial J_{j,k}}{\partial Q_i}$ とラグランジュ方程式 (3.1.27) を用いて

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\delta L'}{\delta \dot{Q}_i} - \frac{\delta L'}{\delta Q_i} &= \sum_{j=1}^n \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} \right] J_{j,i} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \sum_{k=1}^n \left[\frac{\partial J_{j,i}}{\partial Q_k} \dot{Q}_k - \frac{\partial J_{j,k}}{\partial Q_i} \dot{Q}_k \right] \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.1.52}$$

が導かれる。

3.2 ハミルトン方程式と正準変換

ラグランジュ方程式 (3.1.27) に表われる

$$p_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \tag{3.2.1}$$

は一般化された運動量である。これらの n 個の方程式を逆に解いて、 $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n$ を $q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n$ で表わしておく。つまり $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q, p) = \dot{q}_i(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) である。これらを用いてラグランジュ変換

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t) \tag{3.2.2}$$

によって求まる関数 $H = H(q, p, t) = H(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n, t)$ をハミルトニアンということは既に (3.1.29) で述べた。ここに、表われる \dot{q}_i は全て (3.2.1) の p_1, p_2, \dots, p_n を用いて書き換えるものとする。今ラグランジアンは時間に陽には依存せず、エネルギーは保存されるとしよう。 $H(q, p) = E$ である。この時ラグランジュ方程式

を用いると

$$\begin{aligned} dH(q, p) &= \sum_{i=1}^n [dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \dot{p}_i dq_i - p_i d\dot{q}_i] \\ &= \sum_{i=1}^n [-\dot{p}_i dq_i + \dot{q}_i dp_i] \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

が導かれる。そこで

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} &= -\dot{p}_i \\ \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i} &= \dot{q}_i \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

となる。これをハミルトン方程式 (あるいはハミルトンの正準方程式) という。ハミルトニアンが時間に陽に依存する (3.2.2) の場合も本質的に同様である。この場合 t は単なるパラメータの役割を果たすだけである。(3.2.3) には $-\frac{\partial L}{\partial t} dt$ の項が付け加わるが、これは単に $\frac{\partial H(q, p, t)}{\partial t} = -\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial t}$ の関係式を与えるだけである。この式は、ラグランジアンの中に時間依存性がポテンシャル項の形でだけ入っていることから当然である。同様に電磁場等の外場の中を運動する粒子のラグランジアンに対しても、そのパラメータを λ として $\frac{\partial H(q, p, \lambda)}{\partial \lambda} = -\frac{\partial L(q, \dot{q}, \lambda)}{\partial \lambda}$ が成り立つ。

ハミルトン方程式はまた最小作用の原理からも導かれる。それには (3.2.2) を用いて (3.1.1) の作用を

$$S[p(t), q(t)] = \int_{t_0}^{t_1} \left[\sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right] dt \quad (3.2.5)$$

と書いて、 $\delta q(t_1) = \delta q(t_0) = 0$ の条件のもとに変分をおこなう。以下簡単のために、 $q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t)$ をまとめて $q(t)$ 、 $p_1(t), p_2(t), \dots, p_n(t)$ を $p(t)$ と書くことにする。また簡単のために、再び $n = 1$ の一次元問題を考えることにする。変分をとると

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\delta p(t) \dot{q}(t) + p(t) \delta \dot{q}(t) - \delta p(t) \frac{\partial H}{\partial p} - \delta q(t) \frac{\partial H}{\partial q} \right] dt \\ &= p(t) \delta q(t) \Big|_{t_0}^{t_1} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \delta p(t) \left[\dot{q}(t) - \frac{\partial H}{\partial p} \right] - \delta q(t) \left[\dot{p}(t) + \frac{\partial H}{\partial q} \right] \right\} dt \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

より、右辺二行目はゼロだから運動方程式として

$$\begin{aligned}\frac{\delta S[p, q]}{\delta p(t)} &= \dot{q}(t) - \frac{\partial H}{\partial p} = 0 \\ \frac{\delta S[p, q]}{\delta q(t)} &= -\dot{p}(t) - \frac{\partial H}{\partial q} = 0\end{aligned}\tag{3.2.7}$$

と (3.2.4) と同じ結果が導かれる。

ハミルトニアン $H(p, q, t)$ が (3.2.2) の様に時間 t に陽に依存する時、この関数の時間についての全微分をとるとハミルトン方程式を用いて

$$\begin{aligned}\frac{dH(q, p, t)}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p}(t) + \frac{\partial H}{\partial q} \dot{q}(t) + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}\end{aligned}\tag{3.2.8}$$

が得られる。再びこれは、ハミルトニアン H が時間に陽に依存しないならば $H(q, p) = E$ は保存されるというエネルギー保存則である。ある物理量 A が、古典的粒子の一般化座標 $q(t)$, 運動量 $p(t)$ および時間 t に依存する時、その時間に関する全微分は (3.2.8) と同様に

$$\begin{aligned}\frac{dA(q, p, t)}{dt} &= \frac{\partial A}{\partial q} \dot{q}(t) + \frac{\partial A}{\partial p} \dot{p}(t) + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial A}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial A}{\partial p} + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \{H, A\} + \frac{\partial A}{\partial t}\end{aligned}\tag{3.2.9}$$

と計算される。ここに、一般の $f(q, p, t), g(q, p, t)$ に対して

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p}\tag{3.2.10}$$

をポアソン括弧 (Poisson bracket) という。一般の多次元の場合は

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right]\tag{3.2.11}$$

である。 q と p についてのポアソン括弧であることを明示する場合は $\{f, g\}_{p, q}$ と書く。(3.2.9) の関係式から、物理量 $A(q, p)$ が時間に陽に依存しなくてハミルトニアン $H = H(q, p)$ との間のポアソン括弧 $\{H, A\} = 0$ の時、 A は保存量であることが分かる。このような物理量 A を「運動の積分」という。ポアソン括弧はハイゼンベルグの量子行列力学のディラック括弧に対応するものである。

その定義から単純な計算によって次の様なポアソン括弧の性質を導くことが出来る。まず、ポアソン括弧は f と g の交換に関して反対称である。 $\{f, g\} = -\{g, f\}$ 従って $\{f, f\} = 0$ である。またポアソン括弧は各関数について p と q の一階導関数の同時一次式より、定数 c に対して $\{f, c\} = \{c, f\} = 0$ 。また定数 a, b に対して、双線型性 $\{af + bg, h\} = a\{f, g\} + b\{g, h\}$ が成り立つ。更に $\{fg, h\} = f\{g, h\} + \{f, h\}g$ かつ

$$\frac{\partial}{\partial t}\{f, g\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\} \quad (3.2.12)$$

が成り立つ。もう一つの有用な式は Jacobi 恒等式

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad (3.2.13)$$

である。これを示すためには、まずポアソン括弧 $\{f, g\}$ が p と q の一階導関数の同時一次式であることに注意する。そこで $\{f, \{g, h\}\}$ は g, h について二次導関数の同時一次式である。一方、 $F = \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = \{g, \{h, f\}\} - \{h, \{g, f\}\}$ を考え、 $D_1(f) = \{g, f\}, D_2(f) = \{h, f\}$ という線型微分作用素 D_1, D_2 を考えると $F = D_1(D_2(f)) - D_2(D_1(f)) = (D_1D_2 - D_2D_1)(f)$ だがここで $D = D_1D_2 - D_2D_1$ は再び線微分作用素となる。実際、一般の線型微分作用素を $D_1 = \sum_i \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i}, D_2 = \sum_i \eta_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ の形に書くと

$$\begin{aligned} D_1D_2 &= \sum_{i,j} \xi_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \xi_i \eta_j \partial^2 x_i \partial x_j \\ D_2D_1 &= \sum_{i,j} \eta_i \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \eta_i \xi_j \partial^2 x_i \partial x_j \\ D &= D_1D_2 - D_2D_1 \\ &= \sum_{i,j} \left(\xi_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} - \eta_i \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

となる。従って F では二次導関数の項はキャンセルして $\{f, \{g, h\}\} + F$ は f の二次導関数は含まれていない。 f, g, h をサイクリックに回して、同じことが g と h についてもいえる。結局 (3.2.13) の左辺は、 f, g, h の一次導関数だけの積である。ここから (3.2.13) を示すことができる。まず (3.2.14) から $F = D(f) = \sum_i \left[A_i(g, h) \frac{\partial f}{\partial p_i} - B_i(g, h) \frac{\partial f}{\partial q_i} \right]$ と書くと $A_i(g, h), B_i(g, h)$ は共に g と h の二次導関数と一次導関数の積の同時一次式

である。そこで (3.2.13) の左辺は

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \{g, h\} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \{g, h\} \right] + F \\ &= \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} p_i \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} + A_i(g, h) \right\} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \left\{ \frac{\partial}{\partial p_i} + B_i(g, h) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

となるが、ここで二行目の $\{\dots\}$ はいずれも再び共に g と h の二次導関数と一次導関数の積の同時一次式であり、それらが独立に g と h の二次導関数を含まないことにより、これらは全てゼロである。そこで (3.2.13) が成り立つ。(証明終わり)

ポアソン括弧を用いると正準変数 (q, p) からなる物理量の関係式を簡潔に表わすことができる。まず (3.2.11) で $g = q_i, p_i$ とすると

$$\begin{aligned} \{f, q_i\} &= \frac{\partial f}{\partial p_i} \\ \{f, p_i\} &= -\frac{\partial f}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

そこで $f = H$ とおいて (3.2.9) を使うと

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \{H, q_i\} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= \{H, p_i\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

となってハミルトン方程式が再現される。また (3.2.16) で $f = q_j, p_j$ と

$$\{q_i, q_j\} = 0 \quad , \quad \{p_i, p_j\} = 0 \quad , \quad \{p_i, q_j\} = \delta_{i,j} \quad (3.2.18)$$

となる。この式は正準変数 (q, p) の定義であり q と p は互いに正準共役量であるといわれる。ヤコビの恒等式はまた新しい運動の積分を求めるためにも使われる。まず $f(q, p)$ 等が時間に陽に依存しない場合は、これは簡単に次のようにして求めることができる。(3.2.9) から $\{H, f\}$ かつ $\{H, g\} = 0$ であればそれらは運動の積分である。ここから $\{f, g\}$ を作るとヤコビ恒等式を使って

$$\{H, \{f, g\}\} = \{f, \{H, g\}\} - \{g, \{H, f\}\} = 0 \quad (3.2.19)$$

より、これも運動の積分である。次に $f(q, p, t)$ 等が時間に陽に依存する場合は、(3.2.12)

とヤコビ恒等式を用いて

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\{f, g\} &= \frac{\partial}{\partial t}\{f, g\} + \{H, \{f, g\}\} \\
 &= \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} \right], g \right\} + \left\{ f, \left[\frac{\partial g}{\partial t} + \{H, g\} \right] \right\} \\
 &= \left\{ \frac{df}{dt}, g \right\} + \left\{ f, \frac{dg}{dt} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.2.20}$$

が得られる。しかしながら $\{f, g\}$ が常に新しい運動の積分を与えるわけではない。それらが trivial な定数になったり、もとの幾つかの不変量の単なる関数であったりすることもある。それは、独立な不変の数の最大値は $2n - 1$ で限られているからである。例えば、3次元空間を運動する一粒子の中心力場の問題では、不変量はエネルギーと3つの運動量、および粒子の運動平面の法線方向を向いた軸の周りの角運動量の5つである。これは $2n - 1 = 5$ と整合している。また別の例は

$$\{p_x, M_y\} = -p_z, \quad \{p_y, M_z\} = -p_x, \quad \{p_z, M_x\} = -p_y \tag{3.2.21}$$

である。これらは直接計算によって簡単に示すことができる。

(3.2.5) の作用 S を粒子の軌道 $(q(t), p(t))$ に沿って計算して、 S を最終点の座標 $q = q(t_2)$ の関数とみなすこともできる。この場合 (3.2.6) より

$$\delta S = \sum_i p_i \delta q_i \tag{3.2.22}$$

である。そこで

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i \tag{3.2.23}$$

である。また更に S を最終点の時間の関数とも見なすことができる。この時、作用の定義から

$$\frac{dS}{dt} = L \tag{3.2.24}$$

であるが、 S を q と t の関数と考えると

$$\begin{aligned}
 \frac{dS}{dt} &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i \\
 &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i p_i \dot{q}_i
 \end{aligned} \tag{3.2.25}$$

そこで (3.2.24) とハミルトニアン の定義 (3.2.2) を使うと

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} + \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right] &= 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} + H &= 0\end{aligned}\tag{3.2.26}$$

つまり

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\tag{3.2.27}$$

が得られる。また (3.2.23) と (3.2.27) から

$$S = \int \left\{ \sum_i p_i dq_i - H dt \right\}\tag{3.2.28}$$

であることがわかる。今ハミルトニアンが時間には陽に依存せず、更に最終点だけでなく始点も変数と考えると $H^{(1)} = H^{(0)} = E$ だから行列式

$$\begin{aligned}dS &= \left[\sum_i p_i^{(1)} dq_i^{(1)} - H^{(1)} dt \right] - \left[\sum_i p_i^{(0)} dq_i^{(0)} - H^{(0)} dt \right] \\ &= \sum_i p_i^{(1)} dq_i^{(1)} - \sum_i p_i^{(0)} dq_i^{(0)}\end{aligned}\tag{3.2.29}$$

が得られる。この式は始点と終点の $[\dots]$ 内の量が独立ではあり得ず、ある関数の全微分だけの不定性を含んでいることを示している。

前節の最後でラグランジュ方程式が座標変換 (3.1.46) に対して不変であることを示したが、同じことがハミルトン方程式に対しても成り立っている。すなわち新しい座標と運動量を Q_i, P_i として $H^{prime}(Q, P) = H(q(Q), p(Q, P))$ とすると (3.2.4) と同様に

$$\begin{aligned}\dot{P}_i &= -\frac{\partial H'(Q, P)}{\partial Q_i} \\ \dot{Q}_i &= \frac{\partial H'(Q, P)}{\partial P_i}\end{aligned}\tag{3.2.30}$$

が成り立つ。ここに $p(Q, P)$ の意味は (3.1.46) - (3.1.48) より

$$\begin{aligned}p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \\ &= \sum_j \left[\frac{\partial L'}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}_j} \frac{\partial \dot{Q}_j}{\partial \dot{q}_i} \right] \\ &= \sum_j P_j (J^{-1})_{j,i}\end{aligned}\tag{3.2.31}$$

ここで (3.1.50) から導かれる

$$\frac{\partial \dot{Q}_j}{\partial \dot{q}_i} = (J^{-1})_{j,i} \quad (3.2.32)$$

を用いた。 $J_{i,j} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_j}$ は変換 (3.1.46) に対するヤコビアンで、すべて Q_1, Q_2, \dots だけで書かれているものとする。(3.2.31) は簡単に $p = PJ^{-1}$ と書くこともできる。(3.2.30) はこの式を使ってラグランジュ方程式の時の様に直接証明することもできるが、これは次の考察から明らかである。まず (3.2.31) と $\dot{q}_i = \sum_j J_{i,j} \dot{P}_j$ より

$$\sum_i p_i \dot{q}_i = p\dot{q} = PJ^{-1}J\dot{Q} = P\dot{Q} = \sum_i P_i \dot{Q}_i \quad (3.2.33)$$

そこで (3.1.48) を用いると

$$\begin{aligned} H'(Q, P) &= H(q(Q), p(Q, P)) \\ &= \sum_i p_i \dot{q}_i \Big|_{q=q(Q), p=p(Q, P)} - L(q(Q), \dot{q}(Q, \dot{Q})) \\ &= \sum_i P_i \dot{Q}_i - L'(Q, \dot{Q}) \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

そこで $L'(Q, \dot{Q})$ のラグランジュ方程式 (3.1.49) を使って、容易にハミルトン方程式 (3.2.30) を示すことができる。

しかしながら、ハミルトン形式ではある条件のもとに q, p を混ぜる、より一般的な変換

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(Q_1, Q_2, \dots, P_1, P_2, \dots) \\ p_i &= p_i(Q_1, Q_2, \dots, P_1, P_2, \dots) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (3.2.35)$$

に対しても不変であることを示すことができる。そのためには (3.2.29) にならって

$$dS = \left[\sum_i p_i dq_i - H(q, p, t) dt \right] - \left[\sum_i P_i dQ_i - H'(Q, P, t) dt \right] \quad (3.2.36)$$

を考える。二つのラグランジアン之差は完全微分 dS であるから、そこから導かれるハミルトン方程式は同じ形となる。 $S = F(q, Q, t)$ を変数 q, Q, t の母関数だと考えたと

$$dF(q, Q, t) = \sum_i p_i dq_i - \sum_i P_i dQ_i + (H' - H) dt \quad (3.2.37)$$

より

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F}{\partial q_i} \\ P_i &= -\frac{\partial F}{\partial Q_i} \\ H' &= H + \frac{\partial F}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

となる。特別の場合として $F(q, Q) = \sum_i q_i Q_i$ とすると

$$p_i = Q_i \quad , \quad P_i = -q_i \quad , \quad H' = H \quad (3.2.39)$$

となって $H'(Q, P) = H(-P, Q)$ であることより (3.2.4) は

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i} \rightarrow -\dot{P}_i = \frac{\partial H(-P, Q)}{\partial Q_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} \rightarrow \dot{Q}_i = \frac{\partial H(-P, Q)}{\partial P_i} \end{aligned} \quad (3.2.40)$$

となるが、新しい式 (3.2.30) は古い式で q を $-P$ と、また p を Q と呼び変えただけの式になっている。この意味で一般座標と一般運動量の区別は単なる便宜上のものにすぎないことがわかる。また別の母関数の取り方として $F(q, Q, t)$ にルジャンドル変換を施して

$$\Phi(q, P, t) = F(q, Q, t) + \sum_i P_i Q_i \quad (3.2.41)$$

を選ぶこともできる。この時

$$d\Phi(q, P, t) = dF(q, Q, t) + \sum_i (P_i dQ_i + Q_i dP_i) \quad nonumber \quad (3.2.42)$$

$$= \sum_i p_i dq_i + \sum_i Q_i dP_i + (H' - H)dt \quad (3.2.43)$$

より

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial \Phi}{\partial q_i} \\ Q_i &= \frac{\partial \Phi}{\partial P_i} \\ H' &= H + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.2.44)$$

が得られる。特別の場合として $\Phi(q, P, t) = \sum_i f_i(q_1, q_2, \dots) P_i$ ととると $Q_i = f_i(q_1, q_2, \dots)$ かつ (3.2.32) より

$$\begin{aligned} p_i &= \sum_j \frac{\partial f_j(q_1, q_2, \dots)}{\partial q_i} P_j \\ &= \sum_j \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} P_j = \sum_j P_j (J^{-1})_{j,i} \end{aligned} \quad (3.2.45)$$

となる。この変換は (3.1.46) の逆変換で、(3.2.45) は以前の $p = PJ^{-1}$ である。すなわち (3.2.35) は以前の点変換 (3.1.46) を特別の場合として含んでいる。更に p, Q を母関数とする変換は $\Psi = F - pq = \Psi(p, Q, t)$ として

$$\begin{aligned} d\Psi &= - \sum_i q_i dp_i - \sum_i P_i dQ_i + (H' - H)dt \\ q_i &= - \frac{\partial \Psi}{\partial p_i} \\ P_i &= - \frac{\partial \Psi}{\partial Q_i} \\ H' &= H + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.2.46)$$

また p, P を母関数とする変換は $G = F + PQ - pq = G(p, P, t)$ として

$$\begin{aligned} dG &= - \sum_i q_i dp_i + \sum_i Q_i dP_i + (H' - H)dt \\ q_i &= - \frac{\partial G}{\partial p_i} \\ Q_i &= \frac{\partial G}{\partial P_i} \\ H' &= H + \frac{\partial G}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.2.47)$$

となる。この様なハミルトン形式を不変にする様な変換 (3.2.35) を正準変換、ハミルトン形式を正準形式、ハミルトン方程式を正準方程式という。その意味で (q, p) や (Q, P) はを正準変数という。

正準変数は (3.2.37) - (3.2.47) から簡単に証明できる次の様な基本的な偏微分係数間の

対称関係を持っている。

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} &= -\frac{\partial P_k}{\partial q_j} \\
 \frac{\partial p_j}{\partial P_k} &= \frac{\partial Q_k}{\partial q_j} \\
 \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} &= \frac{\partial P_k}{\partial p_j} \\
 \frac{\partial q_j}{\partial P_k} &= -\frac{\partial Q_k}{\partial p_j}
 \end{aligned} \tag{3.2.48}$$

例えば、はじめの式は (3.2.37) を使って

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} &= \frac{\partial p_j(Q, P)}{\partial Q_k} \\
 &= \frac{\partial^2 F(q, Q, t)}{\partial Q_k \partial q_j} = \frac{\partial^2 F(q, Q, t)}{\partial q_j \partial Q_k} \\
 &= -\frac{\partial P_k}{\partial q_j}
 \end{aligned} \tag{3.2.49}$$

と証明される。これらを使うとポアソン括弧の基本的な関係式

$$\{q_i, q_j\}_{\{P, Q\}} = 0 \quad , \quad \{p_i, p_j\}_{\{P, Q\}} = 0 \quad , \quad \{p_i, q_j\}_{\{P, Q\}} = \delta_{i,j} \tag{3.2.50}$$

を示すことが出来る。実際 (3.2.48) を使って

$$\begin{aligned}
\{q_i, q_j\}_{\{P, Q\}} &= \sum_k \left[\frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} - \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \frac{\partial q_j}{\partial P_k} \right] \\
&= \sum_k \left[\frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial P_k}{\partial p_j} + \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \frac{\partial Q_k}{\partial p_j} \right] \\
&= \frac{\partial q_i}{\partial p_j} = 0 \\
\{p_i, p_j\}_{\{P, Q\}} &= \sum_k \left[\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} - \frac{\partial p_i}{\partial Q_k} \frac{\partial p_j}{\partial P_k} \right] \\
&= - \sum_k \left[\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial P_k}{\partial q_j} + \frac{\partial p_i}{\partial Q_k} \frac{\partial Q_k}{\partial q_j} \right] \\
&= - \frac{\partial p_i}{\partial q_j} = 0 \\
\{p_i, q_j\}_{\{P, Q\}} &= \sum_k \left[\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} - \frac{\partial p_i}{\partial Q_k} \frac{\partial q_j}{\partial P_k} \right] \\
&= \sum_k \left[\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial P_k}{\partial p_j} + \frac{\partial p_i}{\partial Q_k} \frac{\partial Q_k}{\partial p_j} \right] \\
&= \frac{\partial p_i}{\partial p_j} = \delta_{i,j}
\end{aligned} \tag{3.2.51}$$

が得られる。(3.2.50) からポアソン括弧の共変性

$$\{f, g\}_{\{p, q\}} = \{f', g'\}_{\{P, Q\}} \tag{3.2.52}$$

を導くことができる。ここに $f' = f'(Q, P, t) = f(q(Q, P), p(Q, P), t)$ である。実際

$$\begin{aligned}
\{f', g'\}_{\{P, Q\}} &= \sum_k \left[\frac{\partial f'}{\partial P_k} \frac{\partial g'}{\partial Q_k} - \frac{\partial f'}{\partial Q_k} \frac{\partial g'}{\partial P_k} \right] \\
&= \sum_{i, j, k} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial P_k} + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial P_k} \right) \left(\frac{\partial g}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} + \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} \right) - \{P_k \leftrightarrow Q_k\} \right] \\
&= \sum_{i, j, k} \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial p_j} \left(\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} - \{P_k \leftrightarrow Q_k\} \right) \right] \\
&\quad + \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_j} \left(\frac{\partial p_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} - \{P_k \leftrightarrow Q_k\} \right) \\
&\quad + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_j} \left(\frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial p_j}{\partial Q_k} - \{P_k \leftrightarrow Q_k\} \right) \\
&\quad + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial q_j} \left(\frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} - \{P_k \leftrightarrow Q_k\} \right) \\
&= \sum_{i, j} \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial p_j} \{p_i, p_j\}_{\{P, Q\}} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_j} \{p_i, q_j\}_{\{P, Q\}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_j} \{q_i, p_j\}_{\{P, Q\}} + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial q_j} \{q_i, q_j\}_{\{P, Q\}} \right] \\
&= \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right] = \{f, g\}_{\{p, q\}} \tag{3.2.53}
\end{aligned}$$

この結果は新しい共変変数 (Q, P) のポアソン方程式

$$\frac{df'(Q, P, t)}{dt} = \{f', g'\}_{\{P, Q\}} + \frac{\partial f'(Q, P, t)}{\partial t} \tag{3.2.54}$$

が $H^{prime}(Q, P, t)$ のハミルトン方程式から導かれることから当然の結果である。

正準変換に関して不変な量の例として重要なものにリウヴィル定理 (Liouville's theorem) がある。一般座標 q と運動量 p の作る (q, p) $2n$ 次元ユークリッド空間を位相空間 (phase space) という。(一方、時間 t と座標 q の普通のユークリッド空間を配位空間 (configuration space) という。) 粒子の古典力学的状態は $q = q(t)$ と $p = p(t)$ によって指定されるので、位相空間の点 (代表点という) (q, p) は粒子の状態を、時間 t が変動した時の $(q(t), p(t))$ のグラフは粒子の運動の軌跡を表わしている。初期条件 $(q(t_0), p(t_0)) = (q_0, p_0)$ をもった粒子の運動の軌跡は、異なった初期条件をもつ運動の軌跡と交わることは決してない。もし交わるとすると、その交点を初期条件とする軌道が二つあることになるからである。位相空間内の有限領域の体積は正準変換に対して保存され

る。すなわち Γ を位相空間内の有限領域として

$$\int_{\Gamma} dq dp = \int_{\Gamma'} dQ dP \quad (3.2.55)$$

が成り立つ。ここに $dq dp = \prod_{i=1}^n dq_i dp_i$ 等である。これを示すには、変換 (3.2.35) のヤコビアン (行列式) の $(2n \times 2n)$ 行列式

$$\left\| \frac{\partial(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)}{\partial(Q_1, Q_2, \dots, P_1, P_2, \dots)} \right\| = 1 \quad (3.2.56)$$

が 1 であることを示せばよい。これは (3.2.48) の性質を用いて肯定的に証明される。まずヤコビアンの関係式から行列として

$$\frac{\partial(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)}{\partial(Q_1, Q_2, \dots, P_1, P_2, \dots)} = \frac{\frac{\partial(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)}{\partial(q_1, q_2, \dots, P_1, P_2, \dots)}}{\frac{\partial(Q_1, Q_2, \dots, P_1, P_2, \dots)}{\partial(q_1, q_2, \dots, P_1, P_2, \dots)}} \quad (3.2.57)$$

この関係式は右辺の分母を払って容易に証明できる。ところで右辺は

$$\text{右辺} = \frac{\frac{\partial(p_1, p_2, \dots)}{\partial(P_1, P_2, \dots)}}{\frac{\partial(Q_1, Q_2, \dots)}{\partial(q_1, q_2, \dots)}} \quad (3.2.58)$$

と簡約化できる。ここで分母、分子の行列の (i, j) 成分はそれぞれ $\frac{\partial p_i}{\partial P_j}$, $\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}$ だが (3.2.48) の二番目の式を使うと分母は $\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}$ でこれは分子の (j, i) である。つまり分母と分子の行列は単に行と列が入れ替わっただけの関係で行列式を取るとその比は 1 となる。同様にして

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} dq_i dp_i &= \int_{\Gamma'} dQ_i dP_i \\ \int_{\Gamma} dq_i dq_j dp_i dp_j &= \int_{\Gamma'} dQ_i dQ_j dP_i dP_j \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (3.2.59)$$

等も示すことができる。これらの性質はハミルトニアンが時間に陽に依存せず孤立系のエネルギーが保存する時、(3.2.29) の様に時間ごとに変化する (q, p) を正準変換と考えて $(q = q(t_0), p = p(t_0))$ かつ $(Q = q(t_1), P = p(t_1))$ としても良いことから重要な結論に導く。この時 (3.2.29) の S は (3.2.37) の $F(q, Q)$ の様にこの正準変換の母関数である。この時粒子の軌跡に沿って位相空間内の有限領域を追いかけていくとそれらの体積はいずれも不変で、代表点の軌跡はあたかも非圧縮性流体の速度ベクトルの様に振る舞う。つまり

$$\int_{\Gamma} dq dp = \text{const} \quad (3.2.60)$$

これをリウヴィル定理 (Liouville's theorem) という。

3.3 モーペルテュイの原理

系のエネルギーが保存される時、(3.2.28) を

$$S = S_0 - E(t_1 - t_0)$$

$$S_0 = \int \sum_i p_i dq_i \quad (3.3.1)$$

と書いて、 S_0 を簡約化された作用という。この時、(3.3.1) の右辺第項目は定数項であるので粒子の運動は S_0 の最小作用の原理 $\delta S_0 = 0$ から求めることができる。これをモーペルテュイの原理 (Mqupertuis' principle) という。

まず初めに三次元ポテンシャル場 $U = U(\mathbf{r})$ における一粒子問題を考える。ラグランジアンは $L = (1/2)mv^2 - U(\mathbf{r})$ である。一般座標の例として、粒子の軌道上である点から取った距離 $s = s(t)$ を取って粒子の座標 \mathbf{r} を s を媒介変数 (パラメータ) の関数として表わす。つまり $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s) = \mathbf{r}(s(t))$ である。また $s_0 = s(t_0), s_1 = s(t_1)$ として、 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(s_0) = \mathbf{r}(s(t_0))$ は始点、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}(s_1) = \mathbf{r}(s(t_1))$ は終点である。まず速度ベクトル \mathbf{v} は

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}}{ds} \frac{ds}{dt} = v\mathbf{e}_t$$

$$\mathbf{e}_t = \frac{d\mathbf{r}}{ds}$$

$$v = \frac{ds}{dt} \quad (3.3.2)$$

ここに \mathbf{e}_t は軌道の接線方向の単位ベクトル、 v は速度の大きさ (速さ) である。これらは $ds = \sqrt{d\mathbf{r}^2} = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$ を使って簡単に示すことができる。次に \mathbf{e}_t を s で微分すると

$$\frac{d(\mathbf{e}_t)^2}{ds} = 2 \left(\mathbf{e}_t \cdot \frac{d\mathbf{e}_t}{ds} \right) = \frac{d1}{ds} = 0 \quad (3.3.3)$$

より $\frac{d\mathbf{e}_t}{ds}$ は \mathbf{e}_t に直交するベクトルである。そこで

$$\frac{d\mathbf{e}_t}{ds} = \frac{1}{\rho} \mathbf{e}_n \quad (3.3.4)$$

とにおいて ρ を曲率半径、 \mathbf{e}_n (単位ベクトル) を主法線ベクトル (principal normal vector) という。 \mathbf{e}_n は接線ベクトル (tangent vector) \mathbf{e}_t に直交する単位ベクトルである。 \mathbf{e}_t と \mathbf{e}_n とから作られる平面を粒子の運動の接触平面という。(図 1 参照) 接触面の法線ベクトル (で右手系のもの) $\mathbf{e}_b = [\mathbf{e}_t \times \mathbf{e}_n]$ を陪法線ベクトル (binormal vector) という。

$\mathbf{e}_t, \mathbf{e}_n, \mathbf{e}_b$ は三次元空間の右手完全系を成している。接触平面の意味は、粒子の運動が局所的にはその平面内で起きることである。すなわち、最初接触平面上の \mathbf{r} にあった粒子が時間 Δt 後に $\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}$ に移ったすると、座標の微小変化 $\Delta \mathbf{r}$ は Taylor 展開して

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{v} \Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a} (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3) \quad (3.3.5)$$

ここに $O((\Delta t)^3)$ は $(\Delta t)^3$ と同じオーダーの微量を表わす。同様に Δs で展開すると

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{e}_t \Delta s + \frac{1}{2\rho} \mathbf{e}_n (\Delta s)^2 + O((\Delta s)^3) \quad (3.3.6)$$

図 1 の様に、点 $\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}$ から接触平面までの距離は内積 $\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_n = |\mathbf{r}| \cos \theta_b$ (θ_b は陪法線ベクトルと \mathbf{r} の間の角度) で与えられるので (??) より

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_n &= \mathbf{e}_t \cdot [\mathbf{e}_t \times \mathbf{e}_n] \Delta s \\ &\quad + \frac{1}{2\rho} \mathbf{e}_n \cdot [\mathbf{e}_t \times \mathbf{e}_n] (\Delta s)^2 + O((\Delta s)^3) \\ &= O((\Delta s)^3) \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

すなわち $(\Delta s)^3$ の微量である。この表示における加速度 $\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}}$ は

$$\dot{\mathbf{e}}_t = \frac{d\mathbf{e}_t}{dt} = \frac{d\mathbf{e}_t}{ds} \frac{ds}{dt} = \frac{v}{\rho} \mathbf{e}_n \quad (3.3.8)$$

より

$$\begin{aligned} \mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} &= v \dot{\mathbf{e}}_t = \dot{v} \mathbf{e}_t + v \dot{\mathbf{e}}_t \\ &= \dot{v} \mathbf{e}_t + \frac{v^2}{\rho} \mathbf{e}_n \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

すなわち、接線方向成分は $\mathbf{a}_t \dot{v}$ 、主法線方向の加速度成分は $\mathbf{a}_n = \frac{v^2}{\rho}$ となる。 \mathbf{a}_n は局所的な円運動に対する向心加速度であり、これにより ρ は曲率半径であることが分かる。

この問題をラグランジュ形式により解くと、まずラグランジアンは $L = \frac{m}{2} (\dot{s})^2 - U(\mathbf{r})$ より一般運動量は $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = m \dot{s} = m v$ より、ラグランジュ方程式は

$$\begin{aligned} m \dot{v} &= \frac{\partial L}{\partial s} = - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial s} \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \\ &= \mathbf{e}_t \cdot \mathbf{F} = F_t \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

となる。ここに $\mathbf{F} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}$ は粒子に働く力、 $F_t = \mathbf{e}_t \cdot \mathbf{F}$ は接線方向の力の成分である。ハミルトニアンは $H = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r})$ で $H = E$ より、簡略化された作用は (3.3.1) より

$$S_0 = \int p ds = \int \sqrt{2m(E - U)} ds \quad (3.3.11)$$

この変分を取ると $(d\mathbf{r})^2 = (ds)^2$ より

$$\delta S_0 = \sqrt{2m} \int \left[-\frac{\delta U}{2\sqrt{E-U}} ds + \sqrt{E-U} \delta ds \right] \quad (3.3.12)$$

ここに $-\delta U = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} = \mathbf{F} \cdot \delta \mathbf{r}$ かつ $(d\mathbf{r})^2 = (ds)^2$ から得られる $2(d\mathbf{r})\delta d\mathbf{r} = 2(ds)\delta ds$, $\delta ds = \mathbf{e}_t \delta d\mathbf{r}$ を使って部分積分すると (3.3.12) は

$$\delta S_0 = \sqrt{2m} \int \delta \mathbf{r} \cdot \left[\frac{\mathbf{F}}{2\sqrt{E-U}} ds - d \left\{ \sqrt{E-U} \mathbf{e}_t \right\} \right] \quad (3.3.13)$$

となる。そこで $\delta \mathbf{r}$ の係数をゼロとおいて

$$2\sqrt{E-U} \frac{d}{ds} \left\{ \sqrt{E-U} \mathbf{e}_t \right\} = \mathbf{F} \quad (3.3.14)$$

ここに左辺は

$$-\frac{dU}{ds} \mathbf{e}_t + 2(E-U) \frac{d\mathbf{e}_t}{ds} = \mathbf{e}_t (\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{F}) + mv^2 \frac{1}{\rho} \mathbf{e}_n \quad (3.3.15)$$

より結局

$$m \frac{v^2}{\rho} \mathbf{e}_n = \mathbf{F} - \mathbf{e}_t (\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{F}) \quad (3.3.16)$$

が得られる。ここに右辺は接線方向以外の力の成分である。(3.3.16) に $\mathbf{e}_b = [\mathbf{e}_t \times \mathbf{e}_n]$ をかけると $\mathbf{e}_b \cdot \mathbf{F} = F_b = 0$ つまり陪法線方向の成分はゼロである。そこで $\mathbf{e}_t, \mathbf{e}_n, \mathbf{e}_b$ の完全性を使うと、(3.3.16) の右辺は力の主法線ベクトル方向の成分 $\mathbf{F}_n = \mathbf{F} - \mathbf{e}_t (\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{F}) = \mathbf{e}_n (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{F})$ である。 $F_n = (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{F})$ を主法線方向の力として (3.3.16) は

$$m \frac{v^2}{\rho} = F_t \quad (3.3.17)$$

となる。これは局所的な円運動の運動方程式である。

特別の場合として $U = U(r)$ の中心力の問題を考えると、この時

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= -\frac{\partial U(r)}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial U(r)}{\partial r} = f(r) \mathbf{e}_r \\ \text{with } f(r) &= -\frac{dU(r)}{dr} \quad \text{and} \quad \mathbf{e}_r = \frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} \end{aligned} \quad (3.3.18)$$

ここに \mathbf{e}_r は極座標の動径方向の単位ベクトルである。粒子の運動が直線運動でなければ、座標ベクトル \mathbf{r} と速度ベクトル $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = v\mathbf{e}_t$ は一つの平面をなしそれを $x-y$ 平面とすることができる。中心力の場合、 z -軸方向の角運動量 \mathbf{M}_z は保存されるので、はじめ

粒子が x - y 平面にあれば引き続き同じ平面内にあり続ける。すなわち x - y 平面は運動の接平面である。 \mathbf{e}_n は x - y 平面にあり $\mathbf{e}_b = \mathbf{e}_z$, $\mathbf{e} \cdot \mathbf{F} = 0$ である。すなわち三次元の中心力場の問題は二次元の中心力場の問題に帰着する。更に特別の場合として (3.3.11) で $U = 0$ とするとすると $E = \frac{p^2}{2m}$ かつ $p = mv = \text{const.}$ で

$$\delta S_0 = \delta \int p \, ds = mv \delta \int ds = 0 \quad (3.3.19)$$

より、これは

$$\delta \int ds = 0 \quad (3.3.20)$$

と同じである。これは二点を結ぶ最短距離が直線であることを意味する。これは以前の様に $\delta ds = \mathbf{e}_t \cdot \delta d\mathbf{r}$ を使って部分積分して

$$\delta S_0 = m \int v \delta ds = m \int v \mathbf{e}_t \cdot d\mathbf{r} = -m \int d\mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{v} = 0 \quad (3.3.21)$$

より $\mathbf{v} = \text{const.}$ としても同様である。

モーペルテュイの原理は幾何光学におけるフェルマーの原理に対応するものである。フェルマーの原理では $n = \frac{c}{v} > 1$ を物質の屈折率として

$$\delta \int n ds = 0 \quad (3.3.22)$$

を要請する。ここに c は真空中の光速、 $v < c$ は物質中の光速である。(3.3.23) の $L = \int n ds$ は光行路といわれ、光が同じ時間の中に物質ではなく真空中の中を走ったと仮定した時の距離である。すなわちフェルマーの定理は、光がその周りで最小の光行路を取る様に伝搬するというを表わす。あるいは同じことだが $T = L/c$ として $\delta T = 0$ としても定式化できる。この場合は最少時間の原理で、光は二点を最短時間で伝わる経路に沿って伝播するともいうことができる。フェルマーの定理を用いて、光の屈折に対するスネルの法則を次の様にして証明することができる。光は質量を持った普通の粒子ではないので、力学的問題の様な取扱いは出来ない。そこで今図 1 の様に二次元平面を考え、 $y > 0$ の上半平面は真空 $y < 0$ の下半平面は屈折率 n の物質とする。二点 $(0, b)$, $(L, -b)$ を繋ぐ経路を考え、二点を x -軸上の点 $(x, 0)$ と繋ぐ。この点を通る垂線から測った二直線の角を図 1 の様に θ, θ' とする。二直線の長さを $\ell = \sqrt{x^2 + b^2}$, $\ell' = \sqrt{(L-x)^2 + b^2}$ として $L(x) = \ell + n\ell'$ にフェルマーの定理を適用すると

$$\begin{aligned} \delta L(x) &= \delta \ell + n \delta \ell' = \left[\frac{x}{\ell} - n \frac{L-x}{\ell'} \right] \delta x \\ &= [\sin \theta - n \sin \theta'] \delta x = 0 \end{aligned} \quad (3.3.23)$$

ここからスネルの法則

$$\frac{\sin \theta}{\sin \theta'} = n \quad (3.3.24)$$

が得られる。

一般にはラグランジアン kinetic-energy part は一般座標の時間微分の二次形式である。(3.1.28) の potential-energy part が時間に陽に依存しない場合には、(3.1.29) のハミルトニアンは保存されるエネルギー E に等しいとおけるから微分の関係式を積分して

$$\begin{aligned} dt &= \sqrt{\frac{\sum_{i,j} \alpha_{i,j}(q) dq_i dq_j}{2(E - U(q))}} \\ t - t_0 &= \int_{t_0}^t \sqrt{\frac{\alpha_{i,j}(q) dq_i dq_j}{2(E - U(q))}} \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

が得られる。また (3.3.1) の簡約化された作用は (3.3.19) のはじめの式を使って

$$\begin{aligned} S_0 &= \int \sum_i p_i dq_i = \int \sum_{i,j} \alpha_{i,j}(q) \dot{q}_j dq_i \\ &= \int \sqrt{2(E - U(q)) \sum_{i,j} \alpha_{i,j}(q) dq_i dq_j} \end{aligned} \quad (3.3.26)$$

となる。(3.3.1) の作用をエネルギー E と最終点の時間 $t_1 = t$ の関数と考えて

$$\begin{aligned} S &= S_0(E) - E(t - t_0) \\ S_0(E) &= \int \sum_i p_i dq_i \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

とすると

$$\begin{aligned} \delta S &= \left[\frac{\partial S_0(E)}{\partial E} - (t - t_0) \right] \delta E - E \delta t \\ \frac{\partial S}{\partial E} &= \frac{\partial S_0(E)}{\partial E} - (t - t_0) \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= -E \end{aligned} \quad (3.3.28)$$

が得られる。一方、(3.3.26) を E で偏微分して (3.3.25) を使うと $\frac{\partial S}{\partial E} = 0$ かつ $\delta S = -E \delta t$ が得られる。

3.3.1 ハミルトン-ヤコビ方程式

(3.2.28) を導いた時の様に作用 $S = S(q, t)$ を q と t の関数と考えると、 $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$ より (3.2.27) は

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) \quad (3.3.29)$$

と書ける。ここに q_i 等は q_1, q_2, \dots 等を示すものとする。この式はハミルトニアン $H(q, p, t)$ が与えられた時に、 $S(q, t)$ を定数項の不定性を除いて決定する方程式を与えている。特に、ハミルトニアンが時間に依存しない時はエネルギー E は保存されて (3.3.28) より

$$H\left(q_i, \frac{\partial S_0}{\partial q_i}\right) = E \quad (3.3.30)$$

が得られる。この時 $S_0 = S_0(q)$ かつ $S(q, t) = S_0(q) - Et$ である。(3.3.29) や (3.3.30) をハミルトン-ヤコビ方程式という。ハミルトン-ヤコビ方程式は幾つかの問題について、それらを変数分離の方法によって解く一つの方法を与える。今 (3.3.30) である特定の i に対して q_i と $\frac{\partial S_0}{\partial q_i}$ だけが $\varphi_i\left(q_i, \frac{\partial S_0}{\partial q_i}\right)$ の形で含まれているとする。 i 以外の添字を $j \neq i$ として (3.3.30) は

$$H\left(q_j, \frac{\partial S_0}{\partial q_j}, \varphi_i\left(q_i, \frac{\partial S_0}{\partial q_i}\right)\right) = E \quad (3.3.31)$$

である。今

$$S_0(q) = S_0^{\text{res}}(q_j) + S_{0i}(q_i) \quad (3.3.32)$$

を仮定して 1 階の常微分方程式

$$\varphi_i\left(q_i, \frac{dS_{0i}(q_i)}{dq_i}\right) = \alpha_i \quad (3.3.33)$$

が求められたとする。残りは

$$H\left(q_j, \frac{\partial S_0^{\text{res}}}{\partial q_j}, \alpha_i\right) = E \quad (3.3.34)$$

で新しいパラメータ α_i を含むより簡単な $n-1$ 個の q_j の偏微分方程式となっている。この過程を「変数分離」という。これを更に繰り返すことができると仮定すると

$$\begin{aligned} S_0(q) &= \sum_i S_{0i}(q_i) \\ \varphi_i\left(q_i, \frac{dS_{0i}(q_i)}{dq_i}\right) &= \alpha_i \\ H(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) &= E \end{aligned} \quad (3.3.35)$$

が得られる。 $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$ であるから (3.3.35) の最後の式はハミルトニアンを $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$ で表わしたものになっている。 特別の場合として、ハミルトニアン $H(q, p)$ が q_i 依存性を持たない場合一般座標 q_i を循環座標というが、この時は (3.3.33) で $\varphi_i(p_i) = p_i$ と選ぶことができる。 そうすると $\alpha_i = p_i$ で (3.3.32) は

$$S_0(q) = p_i q_i + S_0^{\text{res}}(q_j) \quad (3.3.36)$$

となる。

三次元極座標におけるポテンシャル問題の例として $U(r, \theta) = a(r) + \frac{b(\theta)}{r^2}$ の時を考えよう。 ハミルトニアンは (3.1.15) より

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r}, & p_\theta &= mr^2\dot{\theta}, & p_\varphi &= m(r \sin \theta)^2 \dot{\varphi} \\ \frac{d}{dt} m\dot{r} &= -\frac{\partial U(r, \theta)}{\partial r} = -\frac{da(r)}{dr} + \frac{2b(\theta)}{r^3} \\ \frac{d}{dt} mr^2\dot{\theta} &= -\frac{\partial U(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} = -\frac{1}{r^2} \frac{db(\theta)}{d\theta} \\ \frac{d}{dt} m(r \sin \theta)^2 \dot{\varphi} &= 0 \text{ nonumber} \end{aligned} \quad (3.3.37)$$

$$H = \left[\frac{p_r^2}{2m} + a(r) \right] + \frac{1}{r^2} \left[\frac{p_\theta^2}{2m} + b(\theta) \right] + \frac{p_\varphi^2}{2m(r \sin \theta)^2} = E \quad (3.3.38)$$

であるが、一般座標 φ は循環座標であり p_φ はエネルギー $E = H(p, q)$ と共に保存量である。 そこで簡約化された作用は

$$S_0(q) = p_\varphi \varphi + S_0^{\text{res}}(r, \theta) \quad (3.3.39)$$

で与えられる。 今簡単のために、特に興味のある $p_\varphi = 0$ の時を考えると

$$\frac{p_\theta^2}{2m} + b(\theta) = \beta \quad (3.3.40)$$

として

$$\frac{p_r^2}{2m} + a(r) + \frac{\beta}{r^2} = E \quad (3.3.41)$$

が得られる。 そこでこれらから

$$\begin{aligned} p_\theta &= \sqrt{2m(\beta - b(\theta))} \\ p_r &= \sqrt{2m\left(E - a(r) - \frac{\beta}{r^2}\right)} \\ S_0(r, \theta) &= \int \sqrt{2m(\beta - b(\theta))} d\theta + \int \sqrt{2m\left(E - a(r) - \frac{\beta}{r^2}\right)} dr \end{aligned} \quad (3.3.42)$$

となる。特に $b(\theta) = 0$ の時は $p_\theta = \sqrt{2m\beta}$ は保存されて

$$S_0(r, \theta) = p_\theta \theta + S_0(r)$$

$$S_0(r) = \int \sqrt{2m(E - a(r)) - \frac{p_\theta^2}{r^2}} dr \quad (3.3.43)$$

である。これは中心力場の場合である。(3.3.38) から $p_\theta = mr^2\dot{\theta} = h$ は保存する角運動量である。更に $a(r) = -\frac{\alpha}{r}$ の時は、以前ラグランジュ形式のところで議論したケプラー問題である。

もう一つの例として放物線座標系におけるポテンシャル問題を考える。図のように円筒座標 (ρ, φ, z) と放物線座標 (ξ, η, φ) をとると相互の変換は

$$z = \frac{\xi - \eta}{2}, \quad \rho = \sqrt{\xi\eta} \quad (3.3.44)$$

ここに $\xi, \eta > 0$ である。 ξ か η が一定の時、 $z = (1/2)(\xi - \rho^2/\xi)$ や $z = (1/2)(\rho^2/\eta - \eta)$ は z -軸を回転軸とする放物線回転体をなしている。また三次元動径座標を r とすると $r = \sqrt{\rho^2 + z^2} = \frac{\xi + \eta}{2}$ なので

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z \quad (3.3.45)$$

である。そこでラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2} (\dot{\rho}^2 + (\rho\dot{\varphi})^2 + \dot{z}^2) - U$$

$$= \frac{m}{8} \left[(\xi + \eta) \left(\frac{\dot{\xi}^2}{\xi} + \frac{\dot{\eta}^2}{\eta} \right) + 4\xi\eta\dot{\varphi}^2 \right] - U(\xi, \eta, \varphi) \quad (3.3.46)$$

であり、一般運動量は

$$p_\xi = \frac{m}{4} \frac{\xi + \eta}{\xi} \dot{\rho}$$

$$p_\eta = \frac{m}{4} \frac{\xi + \eta}{\eta} \dot{\eta}$$

$$p_\varphi = m\xi\eta\dot{\varphi} \quad (3.3.47)$$

であるので、ハミルトニアンは

$$H = \frac{2}{m} \left[\frac{1}{\xi + \eta} (\xi p_\xi^2 + \eta p_\eta^2) + \frac{1}{4\xi\eta} p_\varphi^2 \right] + U(\xi, \eta, \varphi) \quad (3.3.48)$$

となる。ここで特に興味のあるのはポテンシャルが

$$U(\xi, \eta, \varphi) = \frac{a(\xi) + b(\eta)}{\xi + \eta} = \frac{a(r + z) + b(r - z)}{2r} \quad (3.3.49)$$

の場合である。この時 φ は循環座標だから p_φ はエネルギー $E = H(q, p)$ と共に保存される。そこで (3.3.48) で $m(\xi + \eta)$ を全体にかけて

$$\begin{aligned} m(\xi + \eta)E &= \left(2\xi p_\xi^2 + ma(\xi) + \frac{1}{2\xi} p_\varphi^2 \right) \\ &\quad + \left(2\eta p_\eta^2 + mb(\eta) + \frac{1}{2\eta} p_\varphi^2 \right) \end{aligned} \quad (3.3.50)$$

が得られる。これを

$$\begin{aligned} &2\xi p_\xi^2 + ma(\xi) - m\xi E + \frac{1}{2\xi} p_\varphi^2 \\ &= - \left(2\eta p_\eta^2 + mb(\eta) - m\eta E + \frac{1}{2\eta} p_\varphi^2 \right) \\ &= \beta \end{aligned} \quad (3.3.51)$$

とおくと

$$\begin{aligned} p_\xi &= \sqrt{\frac{mE}{2} + \frac{\beta}{2\xi} - \frac{ma(\xi)}{2\xi} - \frac{p_\varphi^2}{4\xi^2}} \\ p_\eta &= \sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{\beta}{2\eta} - \frac{mb(\eta)}{2\eta} - \frac{p_\varphi^2}{4\eta^2}} \end{aligned} \quad (3.3.52)$$

より結局

$$\begin{aligned} S &= -Et + p_\varphi \varphi \\ &\quad - \int \sqrt{\frac{mE}{2} + \frac{\beta}{2\xi} - \frac{ma(\eta)}{2\xi} - \frac{p_\varphi^2}{4\xi^2}} d\xi \\ &\quad + \int \sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{\beta}{2\eta} - \frac{mb(\eta)}{2\eta} - \frac{p_\varphi^2}{4\eta^2}} d\eta \end{aligned} \quad (3.3.53)$$

が得られる。ここに E, β, p_φ は任意定数である。

3.4 Maxwell-Boltzmann 分布

上に述べたように、古典的運動を指定する状態変数は座標と速度、あるいは座標と運動量である。ここでは質量 m の粒子 N 個からなる理想気体を考え、前回気体分子運動論のところで導いた諸公式を古典統計力学からもう少し厳密に導くことを試みる。今 N 個の粒子は辺の長さ L 、体積 $V = L^3$ の立方体の中に閉じ込められていて、粒子は相互に

相互作用しないと仮定する。長い時間の間に粒子は何回も衝突を繰り返した結果既に系は熱的平衡状態に達しており、一粒子の確率分布により系の状態は完全に決まっていると仮定する。一粒子の座標を \mathbf{r} 、運動量を \mathbf{p} としてその確率分布を $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \geq 0$ で表わし、これを粒子の (古典的) 分布関数という。 (\mathbf{r}, \mathbf{p}) からなる位相空間の中で、代表点 (\mathbf{r}, \mathbf{p}) は一粒子の古典的状态を表し、その運動は一つの軌跡として表わされる。異なる曲線はお互いに交わることがなく、それらは粒子の初期状態によって完全に決定される。粒子が位相空間の何処かにあるという条件 (規格化条件) は

$$\int \int_V f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = 1 \quad (3.4.1)$$

で表すわされる。粒子の空間的分布は体積 V の立方体の中で一様だと仮定しているので、 $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (1/V)f(\mathbf{p})$ である。今興味があるのは $f(\mathbf{p})$ で、それは

$$\int f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1 \quad (3.4.2)$$

で規格化されている。 $f(\mathbf{r}) = f(p_x, p_y, p_z)$ の関数であるが、分布は \mathbf{p} の三次元空間の中で等方的と仮定されるので、それは $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ だけの関数である。あるいは \mathbf{p}^2 の代わりに運動エネルギー $\varepsilon = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2$ を使うと

$$F(\varepsilon) = F\left(\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\right) = f(p_x, p_y, p_z) \quad (3.4.3)$$

である。ここで、確率論の基礎原理である次の命題を用いる。すなわち「事象 A の起きる確率を p_A 、事象 B の起きる確率を p_B とする時、これらの事象になんら相関がなく独立事象ならば、事象 AB あるいは BA が続けて起きる確率は $p_{AB} = p_{BA} = p_A p_B$ で与えられる。」これを用いると x - 方向に運動量が p_x から $p_x + dp_x$ の間にある確率を新しく $\varphi(p_x)dp_x$ として $f(p_x, p_y, p_z)dp_x dp_y dp_z = (\varphi(p_x)dp_x) \times (\varphi(p_y)dp_y) \times (\varphi(p_z)dp_z)$ であることより

$$f(p_x, p_y, p_z) = \varphi(p_x)\varphi(p_y)\varphi(p_z) \quad (3.4.4)$$

が得られる。これを (3.4.3) と等しいとおいてそのあと、 $p_y = p_z = 0, p_z = p_x = 0, p_x = p_y = 0$ とおくと

$$\begin{aligned} F(\varepsilon_x) &= f(p_x, 0, 0) = \varphi(p_x)\varphi(0)\varphi(0) \\ F(\varepsilon_y) &= f(0, p_y, 0) = \varphi(0)\varphi(p_y)\varphi(0) \\ F(\varepsilon_z) &= f(0, 0, p_z) = \varphi(0)\varphi(0)\varphi(p_z) \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

が得られる。ここに $\varepsilon_x = \frac{1}{2m}p_x^2, \dots$ である。そこで $\varphi(0) = a$ とおくと、 $\varphi(p_x) = a^{-2}F(\varepsilon_x), \dots$ より、これらを (3.4.3), (3.4.4) に代入して

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) &= F(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z) \\ &= a^{-6}F(\varepsilon_x)F(\varepsilon_y)F(\varepsilon_z) \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

が得られる。ここから $F(\varepsilon)$ の関数形を決定することができる。すなわち、(??) を ε_y で微分してそのあと $\varepsilon_y = \varepsilon_z = 0$ とおくと

$$F'(\varepsilon_x) = -\beta F(\varepsilon_x) \quad (3.4.7)$$

が得られる。ここに $\beta = -a^{-6}F'(0)F(0)$ とおいた。この微分方程式を解き、そのあと $\varepsilon_x \rightarrow \varepsilon$ とすると

$$F(\varepsilon) = Ce^{-\beta\varepsilon} \quad (3.4.8)$$

となる。ここに $\varepsilon \rightarrow \infty$ の時 $F(\varepsilon) \rightarrow 0$ とならなければいけないという物理的要請から $\beta > 0$ がわかる。実際あとで見る様に

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (3.4.9)$$

である。ここに T は絶対温度、 k はボルツマン係数である。結局 $f(\mathbf{p}) = F(\varepsilon) = Ce^{-\beta\varepsilon} = Ce^{-\beta(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)}$ あることが分かった。これを (3.4.2) にしたがって規格化すると、積分公式

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-x^2} dx &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\ \int_{-\infty}^\infty e^{-ax^2} dx &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0) \\ \int_{-\infty}^\infty e^{-\beta \frac{p_x^2}{2m}} dp_x &= \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

を用いて

$$f(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-\frac{\mathbf{p}^2}{2mkT}} \quad (3.4.11)$$

となる。これをマクスウェル-ボルツマン分布 (Maxwell-Boltzmann distribution) という。

一粒子の運動エネルギーの平均値 $\langle \varepsilon \rangle$ は $f(\mathbf{r})$ の規格化の式 (3.4.2) を多少変形して

$$\langle \varepsilon \rangle = \int \frac{\mathbf{p}^2}{2m} f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (3.4.12)$$

を計算すれば良い。これを要領よく行なう方法は (3.4.11) を

$$Z(\beta) = \int e^{-\beta\varepsilon} d\mathbf{p} = \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \quad (3.4.13)$$

と書き

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{1}{Z(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) \quad (3.4.14)$$

を計算すれば良い。(3.4.13) より簡単に、 $-\log Z(\beta) = (3/2) \log \beta + \text{const.}$ より β についての微分は $(3/2)(1/\beta) = (3/2)kT$ となる。結局 (3.4.12) は

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{2}kT \quad (3.4.15)$$

となる。また理想気体の全運動エネルギー、つまり内部エネルギーは

$$U = N \langle \varepsilon \rangle = N \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2}nRT \quad (3.4.16)$$

となって以前の結果と一致する。ここに $R = kN_A$ は気体定数、 $n = N/N_A$ は粒子数をアボガドロ数を単位として測ったモル数である。ここから定積モル比熱は $C_V = (3/2)R$ となる。また、理想気体の状態方程式を得るには、再び x -方向の運動量変化 $2p_x$ を用いて 1 秒あたりの衝突回避 $v_x/(2L)$ を掛け $x = L$ の壁にかかる圧力を計算すると、全 N 粒子に対して $P = N2p_x(1/L^2)v_x/(2L) = (N/V)p_x^2/m = (N/V)(\mathbf{p}^2/3m$ より \mathbf{p}^2 を $\langle 2m\varepsilon \rangle$ に置き換えて (3.4.15) を使うと

$$PV = N \frac{2}{3} \langle \varepsilon \rangle = NkT = nRT \quad (3.4.17)$$

と以前の結果となる。

3.5 ボルツマン方程式と H 定理

ここでは、理想気体が熱平衡に達するまでの状態を記述する輸送方程式の一つであるボルツマン方程式とそこから導かれる H -定理について簡単に述べる。これまでと同様、簡単のために分子は質量 m を持った或る単原子分子で二原子分子の時のように分子の回転の自由度や振動の自由度はなく、並進自由度のみであると考え。一粒子の分布関数は熱平衡性を仮定しないので必ずしも $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \geq 0$ である必要はないが、原理的にはそれが満たす方程式を初期条件をつけて解いてはじめて証明されるべきものである。しかしながら、ここで考えている分布関数は単位体積あたりに含まれる古典的運動粒子の分布であ

り、一つ一つの分子の量子力学的振る舞いを追跡するものではない。理想気体は分子間の衝突をほとんど無視できるくらいに希薄であるが、単位体積あたりの粒子数はアボガドロ数に匹敵するほどの十分な粒子数を含んでいるものとする。その意味でここで考える一粒子分布関数は古典的数密度であり、実質的に常にゼロか正であるとして良い。つまり $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \geq 0$ として、かつ時間に陽に依存するとする。ここでは時間変数 t をはじめに書き、また多数の粒子を統計的に取り扱うのでこれまでとは多少規格化の方法を変え以下の様に規格化する。またこの節では、簡単のために以下のような notation を使う。 $\Gamma = \mathbf{p}$, $d\Gamma = d\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$, $dV = d\mathbf{r} = dx dy dz$ として

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &= \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} = \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma \\ N &= \int n(\mathbf{r}, t) dV \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

すなわち N は体積 V 内の粒子数、 $n(\mathbf{r}, t)$ は数密度の分布関数、 $mn(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)$ が普通の密度関数である。従って、分布関数 $f = f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ に $d\Gamma$ をかけた数密度 $n = f d\Gamma$ は $1/\text{cm}^3$ の単位を持っており、単位体積あたりの粒子数を表わす。

一粒子分布関数 (あるいは一粒子分布関数ともいう) $f = f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ の時間全微分は、ハミルトン方程式の解をもちいて

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \quad (3.5.2)$$

と表わされる。ここに $\mathbf{F} = m\dot{\mathbf{v}}$ は一粒子に働く力である。熱平衡系におけるリウヴィル定理 (3.2.60) はここでは

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (3.5.3)$$

によって表わされる。このことは次の様にして分かる。6次元位相空間内の代表点の軌跡があたかも非圧縮性流体の速度ベクトルの様に振る舞うということは、 (q_i, p_i) をあたかも6次元座標の如く考えて (\dot{q}_i, \dot{p}_i) を速度ベクトルとして次の連続の式を満たすということである。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{\partial f \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial f \dot{p}_i}{\partial p_i} \right] = 0 \quad (3.5.4)$$

ここで左辺第二項目は

$$\begin{aligned} \text{左辺第二項目} &= \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] \\ &+ f \sum_i \left[\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right] \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

で、更にこの二項目の $[\dots]$ 内でハミルトン方程式を使うと

$$[\dots] = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad (3.5.6)$$

となるから (3.5.4) は

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.5.7)$$

となる。

(3.5.3) はまた次の様にして証明することもできる。まずリウヴィル定理 (3.2.60) は熱平衡にある理想気体の位相空間 $d\mathbf{r}d\Gamma$ 内の代表点の数が一定であることと理解される。すなわち t の時の粒子数を $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)d\mathbf{r}d\Gamma$ とすると、粒子の軌道に沿っての時間と代表点の変化 $t' = t + dt, \mathbf{r}' = \mathbf{r} + d\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \Gamma' = \Gamma + d\Gamma = \Gamma + \mathbf{F}dt$ における粒子数 $f(t', \mathbf{r}', \Gamma')d\mathbf{r}'d\Gamma'$ は

$$f(t', \mathbf{r}', \Gamma')d\mathbf{r}'d\Gamma' - f(t, \mathbf{r}, \Gamma)d\mathbf{r}d\Gamma = 0 \quad (3.5.8)$$

を満たす。そこで $[\dots] = 0$ つまり (3.5.3) が得られる。(証明終わり)

系が熱平衡でない時には (??) はもはや成り立たない。その時には粒子間の衝突が起こり系はもはや一体分布関数だけでは記述しきれず、二体・三体... 相関関数が必要である。ここではそうした一般論に立ち入ることはせず、粒子間の弾性衝突によって一体分布関数が増減を受ける仕組みを考えることにする。すなわち (3.5.2) で $\frac{\partial f}{\partial t}$ の項を粒子衝突による一体分布関数 $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ の変化を表わす項と考えこれを衝突項 (collision term) といい Stf で表わす。すなわち

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = Stf \quad (3.5.9)$$

これを使って (3.5.1) を

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Stf \quad (3.5.10)$$

と書き、これを輸送方程式 (transport equation) という。衝突項の取り方によって様々な輸送方程式があり、以下で議論するボルツマン衝突項をもつボルツマン方程式はその一つである。特に $Stf = 0$ の時は無衝突ボルツマン方程式、あるいはブラソフ方程式 (あるいはリウヴィル方程式) と呼ばれる。

一体分布関数 $f = f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ に対して

$$(Stf)dVd\Gamma = \frac{df}{dt}dVd\Gamma \quad (3.5.11)$$

は位相空間 $dVd\Gamma$ に含まれる粒子数の単位時間あたりの変化を表わす。状態 $(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \in dVd\Gamma$ にある粒子が $\mathbf{p}_1 \in d\Gamma_1$ にある粒子と弾性衝突して新しく $d\Gamma', d\Gamma_1'$ にある運動量 $\mathbf{p}', \mathbf{p}_1'$ に移ったとすると、二体散乱問題の性質から素過程について運動量の保存則 $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_1'$ とエネルギー保存則 $\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon_1'$ が成り立つ。ここに $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 等である。二体散乱問題の素過程の遷移確率を $w = w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) \geq 0$ と書いてこれを散乱衝突 $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma_1'$ の遷移確率という。これに終状態の微少状態要素 $d\Gamma' d\Gamma_1'$ を掛けて $w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1'$ を作ると、これは cm^3/s の単位を持っていることが後で分かる。一方、 $f = f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ として $f d\Gamma$ は位置 \mathbf{r} にある微少運動量領域 $d\Gamma$ 内の粒子の単位体積あたりの粒子数であり単位 $1/\text{cm}^3$ を持つ粒子密度であるから、この入射粒子密度と標的粒子密度 $f_1 d\Gamma_1$ (ここに $f_1 = f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1)$) を更に掛けると

$$f f_1 w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.12)$$

は単位時間・単位体積あたりに起きる散乱衝突 $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma_1'$ の回数である。

衝突問題は普通、原点に静止した一散乱中心に対して密度 ρ , 速度 \mathbf{v} をもつ一様な流れの密度 $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ の入射ビームを照射した時、とにかく衝突が起きた単位時間あたりの粒子数 $\dot{N} = \frac{dN}{dt}$ を使って

$$d\sigma = \frac{\dot{N}}{|\mathbf{j}|} \quad (3.5.13)$$

で表わされる微分断面積を用いて定式化される。微分断面積の単位は cm^2 の単位をもつ。そこで二体散乱素過程の遷移確率に入射粒子密度 $\rho = f d\Gamma$ を掛けて

$$\dot{N} = (f d\Gamma) w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.14)$$

とすると、これを $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ の大きさを割ったものが散乱微分断面積となる。ただし今の場合、標的粒子も速度 \mathbf{v}' で動いているため \mathbf{j} の中の \mathbf{v} を相対速度 $\mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ と変えておかねばならない。結局 (3.5.13) は

$$d\sigma = \frac{w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1'}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} \quad (3.5.15)$$

となる。

二体散乱過程 $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma_1'$ に対する遷移確率 $w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1)$ はその定義から直接導かれるいくつかの対称性を持つ。まず (??) で入射粒子と標的粒子を入れ替えると $\Gamma, \Gamma^{prime} \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma_1'$ より $f f_1$ と微少積分要素は不変だから

$$w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma_1', \Gamma'; \Gamma_1, \Gamma) \quad (3.5.16)$$

が成り立つ。また (3.5.15) を終状態で積分して全散乱断面積を作ると

$$\sigma = \int \int \frac{w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1'}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} \quad (3.5.17)$$

は cm^2/s の次元を持っており、それは粒子の大きさや相互作用のレンジに関係した量であり一般には重心系における入射エネルギー $E_{\text{inc}} = \frac{m}{4} |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|^2 = \frac{1}{m} |(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)/2|^2$ の関数である。そこで (3.5.17) の遷移確率は相対運動量 $\mathbf{p}_{\text{rel}} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)/2$, $\mathbf{p}'_{\text{rel}} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1)/2$ を用いて

$$w(\Gamma' \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) = w(\mathbf{p}'_{\text{rel}}; \mathbf{p}_{\text{rel}}) \quad (3.5.18)$$

と表わされる。この表示では (3.5.16) は

$$w(\mathbf{p}'_{\text{rel}}; \mathbf{p}_{\text{rel}}) = w(-\mathbf{p}'_{\text{rel}}; -\mathbf{p}_{\text{rel}}) \quad (3.5.19)$$

と表わされる。また (3.5.15) で $d\Gamma d\Gamma_1' = d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_{\text{rel}} \mathbf{P}$ より全運動量 \mathbf{P} で積分すると

$$d\sigma = \frac{w(\mathbf{p}'_{\text{rel}}; \mathbf{p}_{\text{rel}}) d\mathbf{p}'_{\text{rel}}}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} \quad (3.5.20)$$

となる。

二体散乱過程 $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma_1'$ に対する遷移確率 $w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1)$ は種々の基本的保存則に基づく幾つかの対称性を持っている。古典力学や強い相互作用のもつ時間反転対称性やパリティ反転に対する不変性は散乱・反応過程に「個別釣り合いの原理」という重要な対称性に導く。時間反転に対して始状態と終状態は互いに入れ替わるが、その時運動量も $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ と符号を変える。そこで更にパリティ反転を施すと運動量の符号は元へ戻る。そこで、 TP 変換に対する不変性から導かれる「個別釣り合いの原理」は今の場合

$$w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1') \quad (3.5.21)$$

と表わされる。もう一つの対称性は量子力学的散乱過程の確率の保存、 S -行列のユニタリティーに関係している。全散乱断面積は (3.5.15) を全終状態で積分して

$$\sigma = \int \int \frac{w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1'}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} \quad (3.5.22)$$

で与えられる。量子力学的散乱過程の記述の一般論によれば、全散乱断面積は確率の保存の結果として次の光学定理 (Optical theorem) を満たす。

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im m f(0) \quad (3.5.23)$$

すなわち、全散乱断面積は前方散乱振幅 $f(0)$ の虚数部で表わされる。そこでこれを (3.5.17) で表わすと Γ, Γ_1 を始状態とする全散乱断面積 $\sigma(\Gamma, \Gamma_1)$ に対して

$$|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| \sigma(\Gamma, \Gamma_1) = 4\pi \frac{\hbar}{m} \Im m f(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) \quad (3.5.24)$$

となるはずである。特に、 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1$ の時は散乱が起こらないことを表わす。しかしながらこの様な議論は今考えている古典力学的散乱過程に対しては (古典力学では量子力学的散乱振幅の概念が存在しないことを考えると) 多少無理があるかも知れない。(古典力学では確率の保存は結局粒子数の保存に帰着する。) 光学定理は S -行列のユニタリティー $SS^\dagger = S^\dagger S = 1$ に対応している。ここから

$$\sum_{n \neq i} |S_{n,i}|^2 = \sum_{n \neq i} |S_{i,n}|^2 \quad \text{for } \forall i \quad (3.5.25)$$

が成り立つ。ここでは、この関係式に関係してリフシツ・ピターエフスキー著「物理的運動論」で述べられている次の式を引用するにとどめる。

$$\int \int w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1' = \int \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1') d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.26)$$

この式は「個別釣り合いの原理」(3.5.16) から導くことができる。

(3.5.12) を $d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1'$ で積分し dV を掛ければ、単位時間あたりに状態 $\Gamma \in d\Gamma$ から衝突によつて失われる粒子数となつて、(3.5.11) で表わされる粒子数変化 (減少) に対応する。従つて

$$\int \int \int f f_1 w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.27)$$

は Stf の粒子数の減少分を与える。一方逆過程は $d\Gamma$ に流れ込む粒子数を表し、それは

$$\int \int \int f' f_1' w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1') d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.28)$$

によつて表わされる。結局 Stf の表式として

$$Stf = \int \int \int (f' f_1' w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1') - f f_1 w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1)) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.29)$$

が得られる。ここに減少する方の積分で $f f_1$ は Γ', Γ_1' に依存しないからこれらの変数の積分を (3.5.21) を使って書き換えることができる。更に「個別釣り合いの原理」(3.5.16) を使うと最終的に

$$Stf = \int \int \int (f' f_1' - f f_1) w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1' \quad (3.5.30)$$

が得られる。これをボルツマンの衝突項という。これは散乱断面積 (3.5.15) を用いて

$$Stf = \int (f'f_1' - ff_1) v_{\text{rel}} d\sigma d\Gamma_1 \quad (3.5.31)$$

とも書かれる。ここに $v_{\text{rel}} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$ である。

特に熱平衡状態については (3.5.25)-(3.5.26) の分布関数 $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ に対しては前節の Maxwell-Boltzmann 分布 (3.4.11) が成り立つ。そこで弾性散乱のエネルギー保存則 $\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon_1'$ を使って

$$\begin{aligned} f'f_1' - ff_1 &\rightarrow f_0 f_0' - f_0 f_0' \\ &= \text{const} \times \left(e^{-\frac{\varepsilon'}{kT}} e^{-\frac{\varepsilon_1'}{kT}} - e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.5.32)$$

が成り立つ。このことは、熱平衡状態では状態 Γ に入る粒子数と散乱によって失われる粒子数が釣り合っていて結果として無衝突ボルツマン方程式の条件が満たされていることを表わしている。

ボルツマン方程式から出発して、熱力学のエントロピー増大の法則に古典的に対応すると考えられるボルツマンの H -定理を導くことができる。まず分布関数 $f = f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ を利用して

$$S = \int f \log \frac{e}{f} dV d\Gamma \quad (3.5.33)$$

という量を作る。この時間微分をとると

$$\frac{\partial}{\partial t} f \log \frac{e}{f} = -\log f \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.5.34)$$

を使って、更に (3.5.10) を使うと

$$\begin{aligned} S &= - \int (\log f) \frac{\partial f}{\partial t} dV d\Gamma \\ &= - \int (\log f) \left[(Stf) - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right] dV d\Gamma \end{aligned} \quad (3.5.35)$$

ここに [...] 内の衝突項以外の部分の寄与は (3.5.34) と同様の式を用いて

$$\begin{aligned} &- \int (\log f) \left[-\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right] dV d\Gamma \\ &= \int \left[\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right] f \log \frac{f}{e} dV d\Gamma \end{aligned} \quad (3.5.36)$$

だが、一項目で dV 積分をまず実行すると気体の存在する境界で $f \log \frac{f}{\epsilon} \rightarrow 0$ よりゼロとなる。また二項目についても $|\mathbf{p}| \rightarrow \infty$ を考えることにより同様にゼロとなる。結局

$$S = - \int (\log f)(St f) dV d\Gamma \quad (3.5.37)$$

が得られる。

(??) を計算するために、より一般的に積分

$$\int \varphi(\Gamma)(St f) d\Gamma \quad (3.5.38)$$

を考える。衝突項の表式 (3.5.29) を用いると

$$\int \varphi(St f) d\Gamma = \int \varphi (f' f' f_1' w' - f f_1 w) d^4\Gamma \quad (3.5.39)$$

ここに $\varphi = \varphi(\Gamma), w' = w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1'), w = w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1), d^4\Gamma = d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1'$ と略記した。(3.5.39) の右辺二項目で $\Gamma, \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma', \Gamma_1'$ と積分変数を入れ替えて更に $w = w'$ を使うと

$$\int \varphi(St f) d\Gamma = \int (\varphi - \varphi') f' f' f_1' w d^4\Gamma \quad (3.5.40)$$

が得られる。ここに $\varphi' = \varphi(\Gamma')$ である。次に (3.5.40) を 2 で割って $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma_1'$ の変換を行なって w の対称性 (3.5.16) を使って書き直してそれを足しておく

$$\int \varphi(St f) d\Gamma = \int \frac{1}{2} (\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi_1') f' f' f_1' w d^4\Gamma \quad (3.5.41)$$

が得られる。この公式の特別の場合として $\varphi(\Gamma) = 1, \mathbf{p}, \epsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ をとると

$$\begin{aligned} \int (St f) d\Gamma &= 0 \\ \int \mathbf{p}(St f) d\Gamma &= 0 \\ \int \epsilon(St f) d\Gamma &= 0 \end{aligned} \quad (3.5.42)$$

が得られる。ここに、二番目と三番目の式は衝突項の運動量保存とエネルギー保存の式による。(3.5.43) を更に dV で積分して、(3.5.36) がゼロとなることを示した時と同じ議論を用いると $(St f)$ を $\frac{\partial f}{\partial t}$ で置き換えることができる。これらは、次で定義される全粒子

数、平均運動量、平均エネルギーが時間に依存せず一定であることを表わす。

$$\begin{aligned} N &= \int f dV d\Gamma = 0 \\ \langle \mathbf{p} \rangle &= \int \mathbf{p} f dV d\Gamma = 0 \\ \langle \varepsilon \rangle &= \int \varepsilon f d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (3.5.43)$$

(??) の計算に戻って $\varphi(\Gamma) = -\log f$ として dV で積分すると

$$\begin{aligned} &= \int \frac{1}{2} \left(\log \frac{f' f_1'}{f f_1} \right) f' f' f_1' w dV d^4\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \int f f_1 w (x \log x) dV d^4\Gamma \end{aligned} \quad (3.5.44)$$

ここに $x = \frac{f' f_1'}{f f_1}$ とおいた。更に (3.5.39) で $\varphi = 1$ とおいて得られる

$$\int f f_1 w (x - 1) dV d^4\Gamma = 0 \quad (3.5.45)$$

を 2 で割って引くと

$$S = \frac{1}{2} \int f f_1 w (x \log x - x + 1) dV d^4\Gamma \quad (3.5.46)$$

が得られる。ここに関数 $x \log x - x + 1$ は $x = 1$ で最小値 0 となり $x \geq 0$ で正となる。
($x = 0$ で極限 1 をもつ。) そこで $f f_1 \geq 0, w \geq 0$ より

$$S \geq 0 \quad (3.5.47)$$

が導かれる。ここに等号が成り立つのは $x = 1$ 、つまり $f f_1 = f' f_1'$ の時のみである。これは熱平衡が成り立っている場合である。。

4 新しい粒子と放射性元素の発見

1895年にレントゲンによって発見された X 線は電磁波の一種である事はすでに述べたが、それ以後 1900 年代初頭に向けて多くの放射性物質の発見が相次いだ。1896 年ベックレルはウラン塩からなんらかの放射線が出ていて、それが写真乾板を感光させることを偶然に発見した。更に 1898 年にはキュリー夫妻がウラン塩よりも数万倍もの強い放射線を出す天然の元素、ポロニウムとラジウムを発見した。これらの元素を放射性元素とい

う。放射能 (radioactivity) という言葉は彼らの発案である。更に同じ頃、ラザーフォードは放射性物質からは実は三種類の異なる放射線が出ていることを突き止め、それらをアルファ線 (α -線)、ベータ線 (β -線)、ガンマ線 (γ -線) と名づけた。(図 1 参照)

図 1: α, β, γ -線の磁場による影響

これらの放射線が混ざったものを磁場の間にくぐらすと、図 1 の様に三つの飛跡に分かれる。これは放射線を作っている粒子が電荷 q を帯びており、磁場の中で電磁気学のところで学んだローレンツ力 $\mathbf{F} = (q/c)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$ を受けるためである。詳細な分析によって、大きく曲がる粒子は 1897 年にトムソンによって発見された電荷 $q = -e$ を持つ軽い粒子である電子、反対側に緩やかに曲がる粒子は電荷 $q = 2e$ を持つ重い粒子である He_4 の原子核であることが明らかになった。更に真っ直ぐに進む粒子は電荷を持たない X 線に似た電磁波の一種でガンマ粒子と名づけられた。ガンマ粒子はガンマ線ともいわれるが、X 線に比べてその波長が極端に小さくエネルギーが大きい極めて粒子的性格の強い電磁波である。トムソンが電子を発見した時、彼は原子模型として正の電荷を持ったスプーに負の電荷を k 持った電子を散りばめたいわゆるブドウパンの様なものを想定していたが、1904 年長岡半太郎はそれに対して原子核の周りに電子が土星の輪の様に回るいわゆる土星型原子模型を提唱した。1911 年に至ってラザーフォードと彼の協力者によって明らかにされた原子構造は、中心に位置する重くて小さい原子核のはるか外側をめぐるいくつかの電子という驚くべきものであった。ラザーフォード達は放射性物質から出る α -粒子を金箔等の薄膜や酸素の気体等に照射する実験を繰り返し、ほとんどの場合 α -粒子は標的を素通りするが、ほんの僅かの粒子は非常に大きな角度で跳ね返されることを発見した。(図 2 参照) 彼はこのような状況は、中心に位置する非常に小さくて重い原子核によってのみ説明し得ることを示した。

図 2: 原子核による α -粒子の散乱

もう一つの重要な放射線は 1932 年にチャドウィック (James Chadwick) により発見された中性子ビームによるものである。中性子は電氣的に中性で陽子とほぼ同じ質量を持つ原子核の重要な構成要素である。中性子は単独では約 10 分の半減期で陽子と電子、反中性微子 (anti-neutrino) に崩壊する放射性元素であるが、原子核の内部では安定に存在する。これにより、陽子・中性子・電子と原子の基本的構成要素が揃ったことで陽子-中性子間の力「強い相互作用」の研究から湯川の間接子論 (1935 年、湯川秀樹) が生まれ、ここに原子核・素粒子論という新しい研究分野が誕生した。放射性物質による核反応は「弱い相互作用」と呼ばれ、イタリア人物理学者のフェルミ (Enrico Fermi、1928 年「ベータ崩壊の理論」) によりその基礎が築かれた。

放射線の人体に対する影響は、近年福島における原子炉事故によって大きな社会的関心

をよんでいる。放射線の主な影響は生物の細胞の中に入り込み、原子内の電子を弾き飛ばすことにより電離作用を惹き起こす事である。図 3 にその概略を模式図として示すが、これはあくまでも放射線のエネルギー強度が小さい場合の話で、原子爆弾の場合の様にとつもない大量の強い放射線が放出される場合には事情は全く異なってくる。しかしいずれの場合にも一番危険な放射線は中性子線で、それは弱い放射線であっても電荷を全く持たないために体内深く潜り込み原子核反応によって更に二次的な放射線を発生させる。このような放射線は細胞を破壊したり癌細胞化するだけでなく、遺伝子の配位を変え突然変異や奇形を生む大変危険なものである。

図 3: 放射線の電離作用

5 特殊相対性理論

5.1 はじめに

1905 年アインシュタインは三つの論文を発表した。それらは 1) ブラウン運動の理論、2) 光電効果について、3) 特殊相対性理論、の三つである。このうち近代物理学の発展に決定的な役割を果たすと同時に現代においてもその価値が全く衰えないものは「相対性理論」である。「特殊相対性理論」はニュートンの力学が不完全なものであることを示すと同時に、真空中の荷電粒子の運動を根本原理から力学に組み込んだ電気力学として Maxwell 方程式を基礎づけ、ファラデー以来の電磁気学を完成した点でまさにランダウ-リフシッツ教程の「場の古典論」と呼び得るものである。

Maxwell 方程式の解として電磁波が発見されてからも、その波を伝える媒体は何かということは大きな問題であった。多くの物理学者がエーテルなるものを考えたが、その性質は調べれば調べるほど奇妙キテレツなものであった。しかし、その解決は以外なところから得られた。それがマイケルソン-モーリーによる光の速度の測定である。(1887 年、Michelson-Morley) 彼らは精密な光干渉計を用いて地球の自転方向と地軸方向の光の速さを測定し、それらがほとんど変わらないことを確かめた。アインシュタインは逆にこの実験的事実から出発して、光の速さが全ての慣性系から見て一定であれば、ニュートンの絶対時間の仮定を捨てざる得ないことを演繹的に導いた。彼によれば、我々の空間は時間軸を四番目の座標軸とするいわゆるミンコフスキー計量 (metric) を持った四次元空間である。ニュートンの力学を不変にするガリレイ変換に対してミンコフスキー空間におけるローレンツ変換は質量を始めとする不変量の新しい概念を通じてローレンツ共変性という強力な物理法則の指導原理を得た。例えば、量子力学が生まれてすぐに特殊相対性原理に

基づく相対論的量子力学が作られ、そこから電子がスピンという純粋に微視の世界の新しい内部自由度が存在しなければならないということが導かれた。(Dirac 方程式、1928年、Paul Dirac) アインシュタインはその後 1907 年から 1915 年にかけて重力理論を組み込んだ一般相対性理論の完成に取り組み、その理論は現在の宇宙論の基礎となっている。その後、電磁相互作用と弱い相互作用が統合されたことを契機として、重力の量子論と四つの基本的相互作用の統一を目指して超弦理論や大統一理論が精力的に研究されているが最終的解決には未だ至っていない。

5.2 ガリレイ変換とローレンツ変換

Newton の第一法則である慣性の法則は慣性系の存在を仮定し、それが少なくとも一つ存在すればそれに対して等速で運動する座標系は全て慣性系で、ここではニュートンの力学法則が等しく成り立つことが示される。アインシュタインはこの慣性系間の座標変換をガリレイ変換と呼んだ。ここでは時間を測る時計は、全ての慣性系に対して共通で彼はこれを絶対時間と呼んだ。(図 1 参照)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K} : \mathbf{x} &= (x, y, z) \\
 \mathcal{K}' : \mathbf{x}' &= (x', y', z') \\
 \text{慣性系} \cdots \text{運動方程式は不変} \\
 t = t' \quad \text{絶対時間} \\
 \mathbf{x} = \mathbf{x}' + \mathbf{V}t &\quad \rightarrow \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V} \quad : \quad \text{Galilei 変換} \quad (5.2.1)
 \end{aligned}$$

これに対して、アインシュタインは「マイケルソン・モーリーの実験」結果“光の速度はどんな慣性系でみても一定” ($c \sim 3 \times 10^{10}$ cm/s) から出発し、この様な結果を得るためにはどの様な座標変換を考えなければならないかを考察した。その結果、絶対時間の考え方を放棄するしかないことを見出した。彼によれば時間はスケールこそ違うが、一般の空間座標と対等のもので慣性系にはそれぞれその座標系に結びついた独自の時計が存在する。すなわち彼はガリレイ変換の三次元空間を

$$\mathcal{K} : \mathbf{x} = (x, y, z) : \text{非相対論} \rightarrow x^\mu = (ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{x}) \quad (5.2.2)$$

と四次元に拡張し、この座標変換をローレンツ変換と呼んだ。ここに $\mu = 0, 1 - 3$ で x^μ を「反変ベクトル」という。この四次元ベクトル空間はユークリッド計量 (metric) $g_{i,j} = \delta_{i,j}$ ($i, j = 1-3$) を持つ三次元ユークリッド空間に似ているが、今度は 4×4 行列

である次のミンコフスキー計量を導入しこのベクトル空間をミンコフスキー空間という。

$$(g_{\mu,\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.3)$$

この計量により次ベクトル空間の内積が導入される。

$$(x, y) = {}^t x g y = x^\mu g_{\mu\nu} y^\nu \quad \boxed{\text{bilinear metric}} \quad (5.2.4)$$

ここに簡単のため、ベクトルやテンソルに現れる上下の同じ添え字 (ここでは μ と ν) については常に和を取ることとし、これをローレンツベクトルの縮約という。またこのルールは、Einstein の規約と呼ばれている。(5.2.3) の metric $g_{\mu\nu}$ は x^μ の添え字を上げ下げする。すなわち、上で定義した反変ベクトル x^μ に対して「共変ベクトル」を

$$x^\mu = (ct, \mathbf{x}) \quad (\text{反変ベクトル}) \quad \longleftrightarrow \quad x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = (ct, -\mathbf{x}) \quad (\text{共変ベクトル}) \quad (5.2.5)$$

で定義する。四元ベクトル x^μ の長さは

$$(x, x) = {}^t x g x = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = x^\mu x_\mu = x_\mu x^\mu \equiv x^2 \quad (5.2.6)$$

で表わされる。 x^μ を世界点といい、 $s^2 = (\times - y, x - y)$ から決まる s を世界間隔という。特に、微少世界間隔に対しては $(ds)^2 = (dx)^\mu g_{\mu,\nu} (dx)^\nu = (cdt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2$ である。ミンコフスキー空間での新しい座標への座標変換を $K' : x'^\mu = (ct', x', y', z')$ として

$$x^\mu = a^\mu_\nu (x')^\nu \longrightarrow x = a x' \quad (5.2.7)$$

と書く。(5.2.4) の内積を不変にする様な変換を (Galilei 変換に対して) Lorentz 変換という。

以下簡単のため、 x -軸方向に一定速度 V で動く慣性系 K' への Lorentz 変換を考え空間一次元で $\mu = 0, 1$ ($(x^\mu) = (ct, x)$) だけとする。つまり

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.8)$$

と考える。 $x' = a x$ が内積 $(x, y) = {}^t x g y$ を不変にするという条件

$$(x, y) = (ax', ay') = {}^t (ax') g (ay') = {}^t x' ({}^t a g a) y' = {}^t x' g y' \quad \leftarrow \quad (x', y') \quad (5.2.9)$$

から変換行列 a に

$${}^t a g a = g \quad (5.2.10)$$

の条件が付く。つまり

$${}^t a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.11)$$

この事情はユークリッド空間における座標系の回転に似ている。その場合には g は単位行列であり、不変量は空間ベクトルの大きさである。 ${}^t a a = 1$ は行列 a が直交行列であることを表わす。すなわち、空間回転を表わす変換は直交変換である。つまり ${}^t a a = 1$ に対しては

$$a = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \text{ の} \quad (5.2.12)$$

ここに θ は座標系の回転角である。今の場合、ミンコフスキー metric だから (5.2.11) の解は

$$a = \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \quad (5.2.13)$$

実際 $(\cosh \phi)^2 - (\sinh \phi)^2 = 1$ より

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ -\sinh \phi & -\cosh \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.2.14)$$

となる。ここに ϕ はあとで g 見るように V と $\tanh \phi = \beta = \frac{V}{c}$ で結び付いている。また $x = ax'$ を具体的に書くと

$$\begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sinh \phi \\ \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} \quad (5.2.15)$$

あるいは

$$ct = (\cosh \phi)ct' + (\sinh \phi)x' \quad , \quad x = (\sinh \phi)ct' + (\cosh \phi)x' \quad (5.2.16)$$

となる。この変換の不変量は

$$\begin{aligned} s^2 &= (ct)^2 - x^2 = (ct')^2 - (x')^2 \\ &= (c\tau)^2 \end{aligned} \quad (5.2.17)$$

であり s を世界間隔、 τ を不変時間という。特に、 \mathcal{K}' 系の原点を考えると、 $x' = 0$ より、 $V = (x/t)$ を \mathcal{K} 系における \mathcal{K}' 系の原点の速度として

$$\begin{pmatrix} ct = (\cosh \phi)ct' \\ x = (\sinh \phi)ct' \end{pmatrix} \longrightarrow \frac{V}{c} = \tanh \phi = \beta \quad (5.2.18)$$

と書くと、 $(\cosh \phi)^2 - (\sinh \phi)^2 = 1$ より $(\operatorname{sech} \phi)^2 = (1/\cosh \phi)^2 = 1 - (\tanh \phi)^2 = 1 - (V/c)^2$ そこで

$$\begin{aligned}\sinh \phi &= \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = \beta\gamma \\ \cosh \phi &= \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma \quad (> 1)\end{aligned}\tag{5.2.19}$$

となる。そこで β を γ で表すと $1 - \beta^2 = 1/\gamma^2$ より

$$\beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2} = \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \quad \beta = \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma}\tag{5.2.20}$$

が成り立つ。そこで x -軸方向のローレンツ変換 $x = ax'$ は (5.2.16) より

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \gamma & \gamma\beta \\ \gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} \\ ct &= \gamma(ct' + \beta x') \\ x &= \gamma(\beta ct' + x')\end{aligned}\tag{5.2.21}$$

あるいは

$$\begin{aligned}t &= \frac{t' + \frac{V}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \\ x &= \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}\end{aligned}\tag{5.2.22}$$

となる。この式はアインシュタインに先立ってラーモア (1897 年) とローレンツ (1899 年、1904 年) により提案された。特に $c \rightarrow \infty$ の時

$$t = t' \quad , \quad x = x' + Vt'\tag{5.2.23}$$

と Galilei 変換へもどる。

速度の合成の公式を得るには、(5.2.21) の微分をとって

$$\begin{aligned}dt &= \gamma \left(dt' + \frac{\beta}{c} dx' \right) \\ dx &= \gamma (\beta c dt' + dx')\end{aligned}\tag{5.2.24}$$

より、 $v = (dx/dt)$ 、 $v' = (dx'/dt)$ として

$$\begin{aligned}
 v &= \frac{\beta c dt' + dx'}{dt' + \frac{\beta}{c} dx'} \\
 &= \frac{v' + \beta c}{1 + \frac{\beta}{c} v'} \\
 &= \frac{v' + V}{1 + \frac{V}{c^2} v'} \tag{5.2.25}
 \end{aligned}$$

となる。すなわち、Galilei 変換の時の速度合成 (5.2.1) と比較して分母が 1 から変更を受ける。ここから

$$\begin{aligned}
 v &= v' + \frac{\left(1 - \left(\frac{v'}{c}\right)^2\right) V}{1 + \frac{V}{c^2} v'} \\
 &= \frac{c^2}{v'} \left\{ V + \frac{v'}{V} + \frac{c^2}{v'} \right\} = \frac{c^2}{v'} \left(1 + \frac{v' - \frac{c^2}{v'}}{V + \frac{c^2}{v'}} \right) \\
 &= \frac{c^2}{v'} - \frac{c^2 \left(\left(\frac{c}{v'}\right)^2 - 1 \right)}{V + \frac{c^2}{v'}} \tag{5.2.26}
 \end{aligned}$$

特に $V = c$ の時

$$= \frac{v' + c}{1 + \frac{v'}{c}} = c \tag{5.2.27}$$

また $v' \rightarrow c$ の時に常に $v = c$ (光速一定) となる。

ローレンツ変換の意味は (x, ct) 二次元平面で直線 $ct = \pm|x|$ によって領域を四つに分けことによって明解になる。四次元ミンコフスキー空間におけるそのような円錐を 光円錐 (light cone) という。 $|ct| < |x|$ の領域を space-like、 $|ct| > |x|$ の領域を time-like という。ローレンツ変換は space-like の世界点間の世界点だけを、time-like の世界点間の世界点だけを結びつける。すなわち、二つの異なる領域の世界点間の世界点を結びつけることは出来ない。 $ct > |x|$ にある世界点は space-like 領域にある世界点からは絶対的に未来にあり、 $ct < |x|$ にある世界点は絶対的に過去にある。(図 3 参照)

図 3: 2+1 次元空間における光円錐

最後にローレンツ収縮 (Lorentz 収縮) と動いる座標系における時計の遅れについて述べる。今 K 系を観測している座標系 (Lab 系という)、 K' 系を速度 V で動いている粒子に結びついた座標系 (静止系: rest frame、あるいは重心系 cm 系という) として、静止系で長さ l_0 の物体を Lab 系で測定するものとする。この時、長さ l を測定するためには Lab 系で時間を揃えておかなければならない。つまり、(5.2.24) で $dt = 0$ として得られる関係式 $dt' = -\frac{\beta}{c} dx'$ を二番目の式に代入して $dx|_{dt=0} = \gamma(1 - \beta^2)dx' = (1/\gamma)dx'$ が得られる。つまり

$$l = \frac{1}{\gamma} l_0 = \sqrt{1 - \beta^2} l_0 \quad (5.2.28)$$

すなわち、高速で飛翔している物体の長さはその進行方向の向きに縮んだように見える。これを「ローレンツ収縮」という。近代的な大加速器で超高速に加速された例えば金の原子核について、これは実験的に観測されている。(図 4 参照)

図 4: ローレンツ収縮

次に Lab 系における時計と静止系における時計の進行を比較するためには、cm 系の同じ場所にある時計で比較しなければならない。そこで、(5.2.24) で $dt' = 0$ として得られる関係式 $dt = \gamma dt'$ を一番目の式に代入して自然な結果 $dx = \gamma \beta c dt' = V dt$ が得られる。例えば、崩壊粒子の静止系における半減期 (寿命) を τ とすると Lab 系での半減期は $t = \gamma \tau > \tau$ であり、崩壊粒子の速度を V として粒子の生成場所から ($V\tau$ ではなしに) $Vt > V\tau$ だけ離れたところで崩壊する。このことは図 5 の様に、上空で発生した π^- 中間子が半減期 $\tau = 2.6 \times 10^{-8}$ s ののち μ^- 粒子に崩壊したあと、更に電子とニュートリノに崩壊する過程を示した原子核乾板上の飛跡によっても確かめられている。

図 5: 写真乾板場での π^- 中間子の崩壊 $\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$

5.3 四元ベクトルと不変量

線型空間論の一般論として、座標と同じ様に変換する物理量をベクトルという。 $K' \rightarrow K$ に対する Lorentz 変換 $x = ax'$ ($x^\mu = a^\mu{}_\nu x'^\nu$) に対して $A = aA'$ ($A^\mu = a^\mu{}_\nu A'^\nu$) と変換するベクトルを四元ベクトルという。まず「四元速度」は四元座標ベクトル $x^\mu = (ct, \mathbf{x})$ を不変

$$ds = \sqrt{(cdt)^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2} = cdt \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} = cdt \sqrt{1 - \beta^2} \quad (5.3.1)$$

で微分することによって得られる。すなわち $u^\mu = (dx^\mu/ds)$ とすると $u = au'$ で

$$\begin{aligned} u^0 &= \frac{dx^0}{ds} = \frac{cdt}{cdt\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma \\ \mathbf{u} &= \frac{d\mathbf{x}}{ds} = \frac{d\mathbf{x}}{cdt\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{\gamma}{c}\mathbf{v} = \gamma\boldsymbol{\beta} \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

ここに、 $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$ である。そこで $u = (u^0, \mathbf{u}) = (\gamma, \gamma\boldsymbol{\beta})$ であることが示される。 u の不変量は

$$u^2 = \gamma^2 - (\gamma\boldsymbol{\beta})^2 = \gamma^2(1 - \beta^2) = \frac{1}{1 - \beta^2}(1 - \beta^2) = 1 \quad (5.3.3)$$

である。次に「四元加速度」はもう一度 ds で微分して

$$a^\mu = \frac{du^\mu}{ds} = \frac{d^2x^\mu}{ds^2} \quad (5.3.4)$$

となる。ここで $u^2 = 1$ より $u^\mu a_\mu = 0$ or $ua = 0$ つまり四元速度と四元加速度は互いに直交している。更に「四元運動量」は u に mc を掛けて

$$P = mcu = (mc\gamma, mc\gamma\boldsymbol{\beta}) = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (5.3.5)$$

を定義すると $P^2 = (mc)^2$ すなわち質量 m は不変量で、エネルギー E と三次元運動量 \mathbf{p} は

$$\begin{aligned} E &= mc^2\gamma = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \\ \mathbf{p} &= mc\gamma\boldsymbol{\beta} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \end{aligned} \quad (5.3.6)$$

で与えられる。 $\mathbf{p} = \frac{E\mathbf{v}}{c^2}$ が成り立っている。四元運動量の不変量は

$$\begin{aligned} P^2 &= \left(\frac{E}{c} \right)^2 - \mathbf{p}^2 = (mc)^2 \\ \text{or} \quad \left(\frac{E}{c} \right)^2 &= \mathbf{p}^2 + (mc)^2 \end{aligned} \quad (5.3.7)$$

である。ここで最後の式は、 $c = 1$ の単位系をとって $E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2$ と書くこともある。非相対論的速度 $|\mathbf{v}| \ll c$ に対して微少パラメータ $(\mathbf{p}/mc)^2$ で展開すると

$$\begin{aligned} E &= c\sqrt{(mc)^2 + \mathbf{p}^2} = mc^2\sqrt{1 + \left(\frac{\mathbf{p}}{mc}\right)^2} \\ &\sim mc^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}}{mc}\right)^2 + \frac{1}{2!} \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\mathbf{p}}{mc}\right)^4 + \dots \right\} \\ &= mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{\mathbf{p}^4}{m^3 c^2} + \dots \end{aligned} \quad (5.3.8)$$

と非相対論的近似される。(5.3.7) は質量はローレンツ変換に対する不変量であり、(5.3.6) は粒子の静止座標系 ($\mathbf{p} = 0$ となる系: rest frame という) で mc^2 がエネルギーを表わすことを示している。 $E = mc^2$ は質量がある条件のもとにはエネルギーに変わり得ることを示し (質量欠損という)、アインシュタインの式としてあまりにも有名である。質量がゼロの時 ($m = 0$) も (5.3.5) の四元運動量は

$$P = \left(\frac{\mathcal{E}}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (5.3.9)$$

として成り立ち、 $P^2 = 0$ かつ $\mathcal{E} = |\mathbf{p}|c$ が成り立つ。光を粒子として見た光子の場合がこれに対応し、波としての角振動数を ω として $\mathcal{E} = \hbar\omega$, $|\mathbf{p}| = \frac{\hbar\omega}{c}$ の関係がある。ここに $\hbar = (h/2\pi)$ はプランク定数 (を 2π で割ったもの) である。これを光量子という。この場合光子は常に光速で飛翔し、静止系なるものは存在しない。言い換えれば、質量がゼロの粒子のみ光速で飛び得る。有限の質量を持つ粒子を限りなく光速に近い速度で飛ばすためには無限大のエネルギーを必要とする。また現在のところ負の質量を持った粒子 (Anion という) は知られていない。

次に、四元カレント (current) J^μ について考察する。密度 ρ は不変量ではないので $J = (\rho\gamma, \rho\gamma\mathbf{v})$ とすることはできない。 $dm = \rho dx dy dz$ が不変量である。今、 x 方向への運動を考えると Lorentz 収縮 $dx|_{dt=0} = (1/\gamma) dx'$ (\mathcal{K}' : body fixed 系: $dt = 0$ の条件に注意! 長さを測るためには、時間を揃えておかねばならない) より $\rho dx = \rho' dx' \rightarrow \rho = \gamma\rho'$ である。そこで rest frame での密度を $\rho' = \rho_0$ として $J = (\rho c, \rho\mathbf{v})$ とすると

$$J^2 = \rho^2 (c^2 - \mathbf{v}^2) = \rho^2 c^2 (1 - \beta^2) = \frac{\rho^2 c^2}{\gamma^2} = \rho_0^2 c^2 \quad (5.3.10)$$

つまり四元 current は普通の定義でよい。 ρ_0 (or ρ/γ) が不変量である

三次元空間における nabla ∇ (gradient) に対応する線型微分作用素は

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \quad (5.3.11)$$

によって定義される。ここに、上付き添字 x^μ に対して下付き添字 ∂_μ が対応することは重要である。添字の上げ下げのルールに従って

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \quad (5.3.12)$$

である。 $\partial_\mu x^\nu = \delta_\nu^\mu = \delta^{\mu,\nu}$ はユークリッド metric である。またミンコフスキー metric は $g_{\mu,\nu} = \delta_{\mu,\nu}$, $g^{\mu,\nu} = \delta^{\mu,\nu}$ とも書ける。これらの定義を用いると、三次元における連続の式は

$$\partial_\mu J^\mu = \frac{\partial \rho c}{c\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \rho(\mathbf{v})_i}{\partial(\mathbf{x})_i} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \mathbf{v} = 0 \quad (5.3.13)$$

と表わされる。

電磁気学におけるスカラーポテンシャル φ とベクトルポテンシャル \mathbf{A} を組み合わせて、四元ポテンシャル $A = (A^\mu)$ を

$$A = (A^\mu) = (\varphi, \mathbf{A}) \quad (5.3.14)$$

で定義する。ここでは常に電磁気学で導入した cgs-ガウス単位系を使うことにする。ローレンツ条件は

$$\partial_\mu A^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div } \mathbf{A} = 0 \quad (5.3.15)$$

と表わされる。また四元ポテンシャルの運動方程式は、四元カレント J^μ を使って

$$\square A^\mu = \frac{4\pi}{c} J^\mu \quad (5.3.16)$$

と表わされる。ここに

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad (5.3.17)$$

はダランベリアンでローレンツ不変量である。(5.3.16) を成分で書くと

$$\begin{aligned} \square \varphi &= 4\pi \rho \\ \square \mathbf{A} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \end{aligned} \quad (5.3.18)$$

となる。ここに $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ である。(5.3.16) の様にローレンツ不変性が明解に示されている形式は、運動方程式や種々の物理量の関係を簡潔に表わすために大変便利である。正しい相対論的關係式は常にこの様な形式で書き下されなければならない。これをローレンツ共変性という。

ユークリッド空間の場合に習って、一般座標変換に対して座標と同じ様に変換する量をテンソルという。ベクトルは一階のテンソル、スカラーはゼロ階のテンソルである。例えば

$$F^{\mu,\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \quad (5.3.19)$$

を電磁場テンソルという。今の場合 $F^{\mu,\nu} = -F^{\nu,\mu}$ の性質を持つので、これを反対称テンソルという。 $F^{\mu,\mu} = 0$ と対角成分はゼロだから、四元反対称テンソルは全部で6つの独立成分を持っている。具体的にこれらを書き下すと、電磁気学で学んだ様に

$$F^{\mu,\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} & \frac{1}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} & \frac{1}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} & 0 & -\frac{\partial A_y}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} & -\frac{\partial A_z}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} & -\frac{\partial A_x}{\partial y} + \frac{\partial A_y}{\partial x} & 0 & -\frac{\partial A_z}{\partial y} + \frac{\partial A_y}{\partial z} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} & -\frac{\partial A_x}{\partial z} + \frac{\partial A_z}{\partial x} & -\frac{\partial A_y}{\partial z} + \frac{\partial A_z}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{E}_x & -\mathbf{E}_y & -\mathbf{E}_z \\ \mathbf{E}_x & 0 & -\mathbf{H}_z & \mathbf{H}_y \\ \mathbf{E}_y & \mathbf{H}_z & 0 & -\mathbf{H}_x \\ \mathbf{E}_z & -\mathbf{H}_y & \mathbf{H}_x & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3.20)$$

となる。添字を下に移すと $(\mu, \nu) = (0, i), (i, 0)$ 成分だけ符号を変えるから

$$F_{\mu,\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{E}_x & \mathbf{E}_y & \mathbf{E}_z \\ -\mathbf{E}_x & 0 & -\mathbf{H}_z & \mathbf{H}_y \\ -\mathbf{E}_y & \mathbf{H}_z & 0 & -\mathbf{H}_x \\ -\mathbf{E}_z & -\mathbf{H}_y & \mathbf{H}_x & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3.21)$$

となる。更に高階のテンソルも同様に定義される。

5.3.1 電気力学の基本方程式

電磁気学のところで既に学んだ様に、電気力学の基本方程式である Maxwell 方程式はゲージ変換について不変である。四元ポテンシャルの言葉では、ゲージ変換はあるスカラー関数 $f(x)$ を用いて

$$A^\mu = A'^\mu - \partial^\mu f \quad (5.3.22)$$

と表わされる。これにより、ローレンツ条件 $\partial_\mu A^\mu = 0$ (see (5.3.15)) は常に成り立つ様にすることができる。そこで、四元ポテンシャルの運動方程式 (5.3.16) はゲージ変換に対して不変である。またゲージ変換 (5.3.22) に対して、電磁場テンソル (5.3.19)-(5.3.21) も全て不変である。

ローレンツ条件と四元ポテンシャルの運動方程式を用いると、(5.3.19) から

$$\partial_\mu F^{\mu,\nu} = \frac{4\pi}{c} J^\nu \quad (5.3.23)$$

を導くことができる。この式は電磁場テンソル (5.3.20) の表式を使って、Maxwell の運動方程式を与える。実際、 $\nu = 0, i$ の各成分ごとに考えると

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \end{aligned} \quad (5.3.24)$$

が得られる。一方、Maxwell 方程式の第一の組みは (5.3.20) の関係を

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\operatorname{grad}\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{H} &= \operatorname{rot} \mathbf{A} \end{aligned} \quad (5.3.25)$$

と書いて、ベクトル解析の公式を用いることにより簡単に得られる。すなわち

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

この公式をローレンツ共変性のあらわな形に書くと

$$\partial_\rho F_{\mu,\nu} + \partial_\mu F_{\nu,\rho} + \partial_\nu F_{\rho,\mu} = 0 \quad (5.3.27)$$

と表わされる。この関係式は (5.3.19) の定義から簡単に導かれる。ここに添字 ρ, μ, ν は $0, 1, 2, 3$ から三つとったものだけが non-trivial であり、独立なものとして $(\rho\mu\nu) = (123), (230), (301), (012)$ の四つを取ることができる。ここから四つの関係式が得られる。実際、これらの四つの場合について (5.3.21) を用いて根気よく計算すると (5.3.26) が得られる。

5.4 電磁場中の荷電粒子の運動

電磁場中の荷電粒子の運動は既に電磁気学のローレンツ力のところで議論したが、ここではもう少し広い立場で電磁場と荷電粒子の相互作用という観点から運動学の基本原理である最小作用の原理を用いて議論する。その際まず電磁場は荷電粒子に力を及ぼすが、逆に荷電粒子の運動は電磁場に何ら影響を及ぼさないと仮定する。この様な状況は電荷の大きさが小さい時には常に可能である。まず初めに自由粒子の相対論的ラグランジアンを考える。作用はローレンツ変換に対する不変量として定義されなければならない。四元座標ベクトルの不変量は $ds = cdt\sqrt{1 - (d\mathbf{x}/cdt)^2} = cdt/\gamma$ である。そこで作用 S としては世界点の 2 点を結んだこれらの積分でもって定義する。

$$S = \alpha \int ds = \alpha c \int \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)^2} dt = \int L dt \quad (5.4.1)$$

ここに α はラグランジアン L が非相対論的近似の時これまでと同じになる様に決める。すなわち

$$L = \alpha c \left[1 - \frac{v^2}{2c^2} + \dots \right] \quad (5.4.2)$$

より $\alpha = -mc$ と取ると

$$L = -mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \dots \quad (5.4.3)$$

かつ

$$S = -mc \int ds = -mc^2 \int \frac{1}{\gamma} dt \quad (5.4.4)$$

となる。(5.4.3) の第一項目は作用に $-mc^2 t$ の寄与を与えるが、既に知っている通り ラグランジアンには時間の完全微分だけの不定性があるからこの項は無視して差支えない。

最小作用の原理は (5.4.4) を変分して $\delta(ds)^2 = \delta(dx)^2$ から得られる $\delta ds = u \delta dx = u_\mu \delta dx^\mu$ を使うと

$$\begin{aligned} \delta S &= -mc \int \delta ds = -mc \int u_\mu \delta x^\mu \\ &= -mc u_\mu \delta x^\mu \Big|_a^b + mc \int \delta x^\mu du_\mu \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

ここで二行目の第一項目はいつもの様に端の値だから消える。結局 $\delta S = 0$ から $du_\mu = 0$ つまり四元速度 $u = \text{一定}$ が得られる。更に、現実的な軌道に沿っての作用の計算を考えて一項目の終点を変数と考えると、 $\delta S = -mc u_\mu \delta x^\mu$ より

$$\partial_\mu S = -mc u_\mu = -p_\mu \quad (5.4.6)$$

が得られる。成分でこれを書くと

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\mathcal{E} \quad , \quad \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{p} \quad (5.4.7)$$

であるから、これは依然の結果と同じである。相対論的なハミルトン-ヤコビ方程式は $\mathbf{p}^2 = (mc)^2$ より $(\partial S)^2 = (mc)^2$ あるいは

$$\left(\frac{\partial S}{c \partial t} \right)^2 = (mc)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 \quad (5.4.8)$$

となる。(5.4.3) から $S = -mc^2 t + S'$ とすると

$$\frac{\partial S'}{\partial t} - \frac{1}{2mc^2} \left(\frac{\partial S'}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S'}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 = 0 \quad (5.4.9)$$

が得られる。ここで $c \rightarrow \infty$ とすると非相対論的近似での結果が得られる。

次に四元ベクトル A^μ をもつ電磁場内を運動する荷電粒子を記述する作用として

$$S = -mc \int ds - \frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu \quad (5.4.10)$$

を考える。ここに電荷 e は相対論的不変量と考える。 $A_\mu dx^\mu = c\varphi dt - \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$ と $d\mathbf{x} = \mathbf{v} dt$ を使って、ラグランジアンは

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)^2} - e\varphi + \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \quad (5.4.11)$$

そこで一般化運動量

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (5.4.12)$$

ここに $\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{1 - (\mathbf{v}/c)^2}$ は自由粒子の運動量である。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{v} - L = \frac{mc^2}{1 - (\mathbf{v}/c)^2} + e\varphi \quad (5.4.13)$$

そこで $\mathcal{H} - e\varphi$ と $\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ は通常のエネギーと運動量の関係を満たす。すなわち

$$\left(\frac{\mathcal{H} - e\varphi}{c}\right)^2 = \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + (mc)^2 \quad (5.4.14)$$

が成り立つ。非相対論的近似では

$$\mathcal{H} = mc^2 + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + e\varphi \quad (5.4.15)$$

である。

運動方程式を求めるために $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}}$ を計算する。(5.4.11) より

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = -e \text{grad} \varphi + \frac{e}{c} \nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) \quad (5.4.16)$$

ここにベクトル解析の公式

$$\nabla(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{a} + [\mathbf{a} \times \text{rot} \mathbf{b}] + [\mathbf{b} \times \text{rot} \mathbf{a}] \quad (5.4.17)$$

より $\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} + [\mathbf{v} \times \text{rot} \mathbf{A}]$ から

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = -e \text{grad} \varphi + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \text{rot} \mathbf{A}] \quad (5.4.18)$$

そこで、これを (5.4.12) の時間微分に等しいとおいて二項目を右辺に移すと

$$\begin{aligned}
 & -\frac{e}{c} \frac{d\mathbf{A}}{dt} + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} \\
 &= -\frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} + \frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \\
 &= -\frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{5.4.19}$$

そこで、 \mathbf{E} と \mathbf{H} の定義

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E} &= -\text{grad}\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\
 \mathbf{H} &= \text{rot}\mathbf{A}
 \end{aligned} \tag{5.4.20}$$

を使うと運動方程式は

$$\dot{\mathbf{p}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \tag{5.4.21}$$

となる。この式は、運動量が $m\mathbf{v}$ でなく相対論的表式であることを除いて非相対論の時の結果と同じである。右辺を $\mathbf{f} = e\mathbf{E} + (e/c)[\mathbf{v} \times \mathbf{H}]$ と書いてこれをローレンツ力という。この時

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{f} \tag{5.4.22}$$

とニュートンの第二法則と同じかたちに書ける。更に

$$\frac{d\mathcal{E}_{\text{kin}}}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (\mathbf{v}/c)^2}} = \mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{5.4.23}$$

が成り立つ。実際、 $(\mathcal{E}_{\text{kin}}/J)^\epsilon = (\uparrow J)^\epsilon + \mathbf{p}^\epsilon$ を微分して $\mathbf{p} = \mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbf{v}/c^2)$ を用いると $d\mathcal{E}_{\text{kin}} = \mathbf{v} \cdot d\mathbf{p}$ が得られる。そこで (5.4.21) に \mathbf{v} を掛けて

$$\frac{d\mathcal{E}_{\text{kin}}}{dt} = e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \tag{5.4.24}$$

が成り立つ。荷電粒子の運動エネルギーの変化は、電磁場が荷電粒子に及ぼした仕事量だけ増大する。磁場は荷電粒子に対して仕事をしないから、これは電場のした仕事 $e\mathbf{E} \cdot d\mathbf{x}$ に等しい。

(5.4.22) の共变的なかたちは四元運動量 $p = mcu$ を不変量 ds で微分して

$$mc \frac{du^\mu}{ds} = g^\mu \tag{5.4.25}$$

を考えることによって得られる。特に g^0 は (5.4.22) - (5.4.23) を用いて

$$g^0 = \frac{\gamma}{c^2} \frac{d\mathcal{E}_{\text{kin}}}{dt} = \frac{\gamma}{c^2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}) = \frac{1}{c^2} \gamma (\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}) \tag{5.4.26}$$

となる。 $(g^i) = \mathbf{g}$ を求めるには $u^2 = 1$ から得られる直交性 $u\mathbf{g} = u^\mu g_\mu = u^0 g^0 - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) = 0$ を用いるのが一番簡単である。 $\mathbf{g} = (1/c)\gamma\mathbf{f}$ である。結局

$$g = (g^\mu) = (g^0, \mathbf{g}) = \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}}{c^2 \sqrt{1 - (\mathbf{v}/c)^2}}, \frac{\mathbf{f}}{c \sqrt{1 - (\mathbf{v}/c)^2}} \right) \quad (5.4.27)$$

が得られる。

ローレンツ力による運動方程式は (5.4.10) の作用の変分を直接考えることによっても得られる。すなわち相互作用項の a 変分を (5.4.5) に加えると

$$\begin{aligned} \delta S &= -mc \int \delta ds - \frac{e}{c} \int [\delta A_\mu dx^\mu + A_\mu \delta dx^\mu] \\ &= \left[-m c u_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right] \delta x^\mu \Big|_a^b + \int \left[\delta x^\mu \left(m c d u_\mu + \frac{e}{c} d A_\mu \right) - \frac{e}{c} \delta A_\mu dx^\mu \right] \end{aligned} \quad (5.4.28)$$

ここに積分の端の値はゼロ、かつ $dA_\mu = (\partial_\nu A_\mu)(dx^\nu/ds)ds = (\partial_\nu A_\mu)u^\nu ds$ また $\delta A_\mu dx^\mu = (\partial_\nu A_\mu)\delta x^\nu dx^\mu = (\partial_\mu A_\nu)\delta x^\mu dx^\nu = (\delta x^\mu)(\partial_\mu A_\nu)u^\nu ds$ より

$$\delta S = \int (\delta x^\mu) \left[m c \frac{d u_\mu}{ds} + \frac{e}{c} ((\partial_\nu A_\mu) - (\partial_\mu A_\nu)) u^\nu \right] ds \quad (5.4.29)$$

ここで $p = m c u$, $F_{\mu,\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ とすると $\delta S = 0$ より

$$\frac{d p_\mu}{ds} = \frac{e}{c} F_{\mu,\nu} u^\nu \quad (5.4.30)$$

が得られる。この式に u^μ を掛けて μ で和をとると $F_{\mu,\nu}$ が反対称テンソルであることによる自明の式 $F_{\mu,\nu} u^\mu u^\nu = 0$ が得られる。また (5.4.30) を成分で書いて (5.3.21) or (5.3.20) を使うと (5.4.24) と (5.4.21) が得られる。(確かめよ。) また (5.4.28) で変分を軌道に沿って撮って作用を終点の関数と考えると

$$\partial_\mu S = -m c u_\mu - \frac{e}{c} A_\mu = -p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \quad (5.4.31)$$

だから、ハミルトン-ヤコビ方程式は

$$\begin{aligned} \left(\partial S + \frac{e}{c} A \right)^2 &= (m c)^2 \quad \text{or} \\ \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} + e\varphi \right)^2 &= (m c)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \end{aligned} \quad (5.4.32)$$

となる。

ローレンツ力による荷電粒子の運動の例として、一定磁場内での運動を考えよう。磁場の方向を z -軸にとり $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ とする。磁場は荷電粒子に対して仕事をしないから、粒子の運動エネルギー \mathcal{E} は保存される。そこで $\mathbf{p} = \mathcal{E}\mathbf{v}/c^2$ を使って、運動方程式は

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{ec}{\mathcal{E}}[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \quad (5.4.33)$$

となる。これを成分で書くと

$$\omega = \frac{ecH}{\mathcal{E}} \sim \frac{eH}{mc} \quad (\text{in 非相対論}) \quad (5.4.34)$$

を使って

$$\dot{v}_x = \omega v_y, \quad \dot{v}_y = -\omega v_x, \quad \dot{v}_z = 0 \quad (5.4.35)$$

これを

$$\frac{d}{dt}(v_x + iv_y) = -i\omega(v_x + iv_y) \quad (5.4.36)$$

と書くと便利である。ここから $v_x + iv_y = (v_{0x} + iv_{0y})e^{-i\omega t}$ が得られるもう一度積分して $i(v_{0x} + iv_{0y})/\omega = Re^{-i\alpha}$ とおくと $x + iy = Re^{-i(\omega t + \alpha)}$ から

$$\begin{aligned} x &= R \cos(\omega t + \alpha), & y &= -R \sin(\omega t + \alpha) \\ z &= v_{0z}t + z_0 \end{aligned} \quad (5.4.37)$$

となる。すなわち、荷電粒子は z -軸方向に向かって螺旋運動をする。特に $v_{0z} = z_0 = 0$ の時は、荷電粒子は x - y 平面内の等速円運動をする。このような運動をサイクロトロン運動といい、(5.4.34) の ω をサイクロトロン振動数という。

5.4.1 電磁場のラグランジュ形式

電磁場のラグランジュ形式は普通ラグランジアン密度 \mathcal{L} を用いて四次元ミンコフスキー空間の体積積分

$$S = \int \mathcal{L} d^4x = \int \mathcal{L} d\Omega \quad (5.4.38)$$

で定式化される。ここに $d\Omega = d\tau dx dy dz = cdxdydzdt = cdV dt$ は不変量である。(実際、ローレンツ変換 $dx^\mu = a^\mu_\nu dx'^\nu$ のヤコビアン $J = (\partial x^\mu / \partial x'^\mu) = (a^\mu_\nu)$ を計算すると $\det|J| = \det|a^\mu_\nu| = \gamma^2(1 - \beta^2) = 1$ である。) まずはじめに (5.4.10) で導入した荷電粒子と電磁場との相互作用

$$S_{mf} = -\frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu \quad (5.4.39)$$

を四元カレント $j^\mu = (\rho c, \rho \mathbf{v})$ を用いて (5.4.38) のかたちに表わすことを考えよう。ここでは詳しいことは省略するが、相対論的枠組みの中では相対論的不変量である電荷を持った粒子は大きさを持ち得ないことを示すことが出来る。従って電荷 e_α を持った質量 m_α の粒子は常に質点と考えなければならない。そこで (5.4.39) に表われる電荷 e は、電荷密度を $\rho \sum_\alpha e_\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha)$ として

$$S_{\text{mf}} = - \sum_\alpha \frac{e}{c} \int A_\mu dx_\alpha^\mu = - \frac{1}{c} \int \rho A_\mu dx^\mu dV \quad (5.4.40)$$

ここに全電荷 Q は

$$Q = \epsilon \int \rho dV \quad (5.4.41)$$

である。(5.4.40) を

$$\begin{aligned} S_{\text{mf}} &= - \int A_\mu \frac{1}{c} \rho u^\mu ds dV = - \int A_\mu \rho u^\mu \frac{1}{\gamma} dV dt \\ &= - \frac{1}{c^2} \int A_\mu \frac{c}{\gamma} \rho u^\mu d\Omega \\ &= - \frac{1}{c^2} \int j_\mu A^\mu d\Omega \end{aligned} \quad (5.4.42)$$

ここに四元カレントの定義

$$\frac{c}{\gamma} \rho u = \frac{c}{\gamma} (\gamma, \gamma \boldsymbol{\beta}) \rho = (\rho c, \rho \mathbf{v}) = j \quad (5.4.43)$$

を用いた。

有限個の荷電粒子と電磁場全体の作用

$$S = S_{\text{m}} + S_{\text{mf}} + S_{\text{f}} \quad (5.4.44)$$

を求めよう。ここに $S_{\text{m}} = - \sum mc \int ds$ は既に議論した自由粒子の作用である。電磁場だけの作用 S_{f} は不変量 $F_{\mu,\nu} F^{\mu,\nu} = 2(\mathbf{H}^2 - \mathbf{E}^2)$ を用いて (5.4.38) のかたちの

$$S_{\text{f}} = - \frac{1}{16\pi c} \int F_{\mu,\nu} F^{\mu,\nu} d\Omega \quad (5.4.45)$$

として与えられる。積分の前の係数が負であることは、ベクトルポテンシャルの時間微分が \mathbf{E} の中にしか入っていないことから容易に推測される。係数の値が正しいことは、あとで運動方程式が正しく求められることから明らかになる。まず S_{f} の電磁ポテンシャル

A^μ についての変分を求めると、 $F^{\mu,\nu}$ の反対称性を用いて

$$\begin{aligned}\delta S_f &= -\frac{1}{8\pi c} \int F_{\mu,\nu} \delta(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \\ &= -\frac{1}{4\pi c} \int F_{\mu,\nu} \delta \partial^\mu A^\nu d\Omega \\ &= \frac{1}{4\pi c} \partial^\mu F_{\mu,\nu} \delta A^\nu d\Omega - \frac{1}{4\pi c} \int \partial^\mu \{F_{\mu,\nu} \delta A^\nu\} d\Omega\end{aligned}\quad (5.4.46)$$

が得られる。ここに最後の式の二項目はガウスの定理により無限遠領域における電磁場がゼロであることから消える。ここで (5.4.44) で粒子の運動は与えられているとして電磁場の運動方程式だけを考えているので、(5.4.42) の S_{mf} の中の電磁場だけについて変分をとると

$$\delta S = \int \delta A^\nu \left[-\frac{1}{c^2} j_\nu + \frac{1}{4\pi c} \partial^\mu F_{\mu,\nu} \right] d\Omega \quad (5.4.47)$$

が得られる。そこで電磁場の運動方程式として

$$\partial^\mu F_{\mu,\nu} = \frac{4\pi}{c} j_\nu \quad (5.4.48)$$

あるいは

$$\partial_\mu F^{\mu,\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu \quad (5.4.49)$$

が得られる。これは以前の (5.3.23) の結果と同じである。

まとめると、有限個の荷電粒子と電磁場全体の作用は

$$\begin{aligned}S &= S_m + S_{mf} + S_f \\ &= -\sum mc \int ds - \frac{1}{c^2} \int j_\mu A^\mu d\Omega - \frac{1}{16\pi c} \int F_{\mu,\nu} F^{\mu,\nu} d\Omega\end{aligned}\quad (5.4.50)$$

で与えられる。ここではローレンツ力を求めた時の様に電荷が小さいという様な仮定は一切していないことに注意しよう。

5.5 電磁波の Poynting ベクトルとエネルギー密度

電気力学での基礎方程式である Maxwell 方程式をもう一度まとめておこう。

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{H} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi \rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}\quad (5.5.1)$$

これらを組み合わせると

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}] &= \mathbf{H} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H} \\
 &= -\frac{1}{c} \left[\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \right] \\
 &= -\frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}
 \end{aligned} \tag{5.5.2}$$

が得られる。ここで

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] \tag{5.5.3}$$

を電磁場の Poynting ベクトルという。これを使うと (5.5.2) は

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi} \right] + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\operatorname{div} \mathbf{S} \tag{5.5.4}$$

と書ける。これを体積で積分して、左辺第二項目で (5.4.24) を使って

$$\begin{aligned}
 \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} dV &= \int \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} = \int \sum_{\alpha} e_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} dV \\
 &= \sum_{\alpha} e_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{E} \\
 &= \sum_{\alpha} (\mathcal{E}_{\text{kin}})_{\alpha}
 \end{aligned} \tag{5.5.5}$$

とする。右辺ではガウスの定理を用いると

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi} dV + \sum \mathcal{E}_{\text{kin}} \right] = - \int \mathbf{S} \cdot d\mathbf{f} \tag{5.5.6}$$

が得られる。もし全空間での積分をとると右辺はゼロだから左辺は粒子の運動エネルギーと電磁場のエネルギーの和が保存されることを示す。そこで $W = \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi}$ は電磁場のエネルギー密度である。有限の体積で積分すると右辺はその体積から流れ出るエネルギーを表わす。そこで Poynting ベクトル \mathbf{S} は単位面積あたりに表面を貫いて流れ出る単位時間あたりのエネルギーの流れを表わしていることが分かる。電磁気学のところの (5.1.14) で見た様に \mathbf{S} を c^2 で割った

$$\frac{1}{c^2} \mathbf{S} = \frac{[\mathbf{E} \times \mathbf{H}]}{4\pi c} \tag{5.5.7}$$

は磁場の運動量密度を表わす。

6 光量子仮説

既に電磁気学のところで学んだ様に、電磁場は真空それ自身が備えた物理的実態であって Maxwell 方程式の解である電磁波は空洞の中に封じ込まれた時に、理想気体の分子が壁に圧力を及ぼすように圧力を持ち内部エネルギーが存在する。また、宇宙空間の一部に閉じ込まれた電磁波はその温度に応じたエネルギー分布を持ち、高い温度の物体からの電磁波は青い光を発生し低い温度の物体からの電磁波は赤い光を発生する。これを黒体輻射とか黒体放射 (black body radiation) とかいう。黒体とは全ての電磁波を反射することなく吸収する理想的な物体である。長い時間の後黒体は熱平衡に達し、そこから放射される電磁波は温度に依存したエネルギー分布をもつ。これを理想気体の時の様に、空洞の中に封じ込まれた電磁波 (すなわち光子) 自体の温度と考えることも出来る。しかしながら、光子は質量を持たないから、理想気体の平衡分布をそのまま適用するわけにはいかない。結論から先に言うと、光子 (光量子) はスピン 1 を持った純粋に量子力学的実態であり、微視の世界での基本原理であるスピンと統計性の間の厳密な規則を満たす。整数値のスピンを持った粒子は Bose 粒子と呼ばれ、古典力学のボルツマン統計に対して Bose-Einstein 統計に従う。(また別のスピン半整数値を持つ粒子は Fermi 粒子、それらの粒子の満たすべき統計性は Fermi-Dirac 統計と呼ばれる。)

図 1: 波長で表わした黒体輻射のスペクトル (Wikipedia より)

黒体輻射の正しいエネルギー分布とその理論は 1900 年、Max Planck によって得られた。彼によると振動数 ν を持つ電磁波の単位体積あたりのエネルギー密度 $u(\nu, T)d\nu$ (単位 J/m^3) は

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (6.1)$$

で与えられる。ここに T は絶対温度、 k はボルツマン定数、 h は彼自身が導入した定数で Planck 定数である。(現在、量子力学の基本定数とされる Planck 定数は h を 2π で割って $\hbar = (h/2\pi)$ で表わされることが多く、その値は大変小さい: $\hbar = 1.054 \dots \times 10^{-34} \text{ Js} = 6.582 \dots \times 10^{-16} \text{ (eV)s}$) 現代的視点からは、 $\epsilon = h\nu = \hbar\omega$ (ここに $\omega = 2\pi\nu$ は角振動数である) は光量子一個の持つエネルギーであって h (or \hbar) は単に振動数とエネルギーの間の比例係数にすぎない。(kT はエネルギーの単位を持っている。) (6.1) はプランクの公式といわれる。振動数が ν から $\nu + d\nu$ の間にある温度 T の電磁波のエネルギー密度 $n(\nu, T)d\nu$ を、単位時間に単位面積を通過する単位放射角あたりの放射強度 $I(\nu, T)$ で

表わすと $\int I(\nu, T) d\nu d\Omega = I(\nu, T) 4\pi\nu = cu(\nu, T) d\nu$ より

$$I(\nu, T) = \frac{c}{4\pi} u(\nu, T) = \frac{2\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (6.2)$$

となる。 $(I(\nu, T) d\nu)$ の単位は $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ St})$ この式は二つの極限の場合として、振動数が大きい時 (温度が低い時) と小さい時 (高い時) の実験公式である Wien の公式とレイリー・ジーンズの法則 (Rayleigh-Jeans Law) を再現する。すなわち

$$I(\nu, T) = \frac{2\nu^2}{c^2} (h\nu) e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad \text{for } kT \rightarrow \infty$$

(Wien の公式)

$$I(\nu, T) = \frac{2\nu^2}{c^2} kT \quad \text{for } kT \rightarrow 0$$

(Rayleigh-Jeans の法則) (6.3)

プランクの公式 (6.1) を用いて、熱輻射により黒体から放出されるエネルギーを与えるシュテファン=ボルツマンの法則 (1879 年、1884 年) を導くことが出来る。この法則は、放射強度 (6.2) を積分して

$$\begin{aligned} I(T) &= \int I(\nu, T) d\nu = \frac{c}{4\pi} \int u(\nu, T) d\nu \\ &= \int \frac{2\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu \\ &= \sigma' T^4 \end{aligned} \quad (6.4)$$

と T^4 に比例する。ここに ν 積分は、変数変換 $x = h\nu/kT$ により

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \Gamma(4)\zeta(4) = 6 \cdot \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15} \quad (6.5)$$

となるので、(6.4) の σ' は

$$\sigma' = \frac{2\pi^4 k^4}{15c^2 h^3} \quad (6.6)$$

となる。(最後の追補参照) 普通 σ は放射強度 (6.2) (単位 $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ St})$) のかわりに大きさのある黒体の放射発散度 R (単位 W/m^2) に対して定義される。放射強度 (6.2) は黒体を点として扱ったときの単位面積、単位立体角あたりのエネルギー flux を表しており、これは大きさのある黒体における放射輝度 L に対応している。そこで放射輝度が一定の時の関係式 $R = \pi L$ に対応して、 σ' に π を掛けた

$$\sigma = \pi \sigma' = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} \quad (6.7)$$

をシュテファン=ボルツマン係数 (Stdfan-Boltzmann constant) といひ $\sigma = 5.670 \dots 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$ である。

シュテファン=ボルツマンの法則の一つの応用として、太陽の表面温度を求めることが出来る。太陽は核融合反応によって輝いているが、表面付近では核融合反応によるエネルギー生成とエネルギー放射が熱平衡により釣り合っていると考えられる。太陽から単位時間あたりに放出されるエネルギー flux は太陽の半径を R_{Sun} として、太陽の放射発散度 $R = \sigma T^4$ を使って $4\pi(R_{\text{Sun}})^2 R$ で表わされる。一方太陽から半径 D だけ離れた軌道を廻る地球の表面で受け取る単位面積あたりの放射照度 P (単位 W/m^2) は、地球軌道を赤道とする球表面の面積 $4\pi D^2$ をかけて $4\pi D^2 P = 4\pi(R_{\text{Sun}})^2 R$ から求められる。すなわち $P = R(R_{\text{Sun}}/L)^2$ である。地球から太陽の直径を観測した時の角度 (視直径) は $\theta = 2R_{\text{Sun}}/L \sim 0.5^\circ$ ($\theta = (0.5\pi/180)$) と表わされるから $P = R(\theta/2)^2 = \sigma(\theta/2)^2 T^4$ である。ここから、観測値 $P = 1.3 \text{ kW}/\text{m}^2$ を使うと

$$T = \left(\frac{4P}{\sigma\theta^2} \right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{4 \times 1.3 \times 10^3}{5.67 \times 10^{-8}} \left(\frac{360}{\pi} \right)^2 \right)^{\frac{1}{4}} = 5890 \quad (6.8)$$

すなわち、太陽の表面温度はおおよそ 6,000 K となる。

図 2: 弦の基準振動

Planck の公式 (6.1) の本質的な点は、電磁波のエネルギー分布を求めるのに波としての固有振動の考え方から、エネルギーが連続的に変化するのではな一定の振動数ごとにその固有振動の整数倍の値だけが可能とした点である。簡単のため、一次元の弦でこのことを考えると図 2 の様に弦の長さが L の時には波の波長の半分 $\lambda/2$ がこれに等しい時最低の基準振動数となる。一般に飛び飛びの振動数は $n = 1, 2, \dots$ の整数として $\lambda\nu = c$ から

$$n = \frac{L}{\lambda/2} = (2L)\nu/c \quad (6.9)$$

λ は光の波長程度で L に比べてはるかに小さいから n は充分大きく連続的な取り扱いが可能である。そこで n を連続変数と考えて微分をとると $dn = (2L/c)d\nu$ となる。実際には三次元の立法体 $V = L^3$ を考えて、そこに含まれる基準振動の数を数えなければならない。 x, y, z -成分ごとに $n_x = (2L)/\lambda_x$ 等として $(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2$ を考えると

$$(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2 = (2L)^2 \left(\frac{1}{(\lambda_x)^2} + \frac{1}{(\lambda_y)^2} + \frac{1}{(\lambda_z)^2} \right) \quad (6.10)$$

一方三次元波動では $k = |\mathbf{k}| = (2\pi)/\lambda = (2\pi)\nu/c$ だから

$$\begin{aligned} k^2 &= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = (2\pi)^2 \left(\frac{1}{(\lambda_x)^2} + \frac{1}{(\lambda_y)^2} + \frac{1}{(\lambda_z)^2} \right) \\ &= \frac{(2\pi)^2}{(2L)^2} ((n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2) = (2\pi)^2 \left(\frac{\nu}{c} \right)^2 \end{aligned} \quad (6.11)$$

そこで整数点 (n_x, n_y, n_z) の原点からの距離 d は

$$d = \sqrt{(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2} = \frac{2L\nu}{c} \quad (6.12)$$

で与えられる。半径 d の球に含まれる状態の数 N は整数点の $n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots$ が正の整数 (自然数) だけであることから、球の体積 $(4\pi/3)d^3$ を 8 等分配して $N = (1/8)(4\pi/3)(2L\nu/c)^3$ である。 $L^3 = V$ より単位体積あたりの状態数は $n = N/V = (4\pi/3)(\nu/c)^3$ となる。そこでこれを微分して

$$dn = m(\nu)d\nu = 4\pi \text{frac} \nu^2 c^3 d\nu \quad (6.13)$$

となる。実際には、電磁波は横波で二つの偏光の自由度をもつため上の式を二倍しておかなければならない。そこで最終的に

$$dn = m(\nu)d\nu = 8\pi \text{frac} \nu^2 c^3 d\nu \quad (6.14)$$

が得られる。あとで前期量子論のところで述べる、ボーア-ゾンマーフェルト (Bohr-Zommerfeld) の量子化条件を使っても同じ結果が得られる。これによると六次元位相空間 $V4\pi p^2 dp$ に含まれる量子力学的状態数はこの体積を $2\pi\hbar = h$ で割って得られる。そこで $p = \hbar k$ を使うと $dn = 4\pi k^2 dk / (2\pi)^3$ 更に $k = 2\pi/\lambda = 2\pi\nu/c$ を使うと $dn = 4\pi\nu^2 d\nu / c^3$ 従って $m(\nu) = 4\pi\nu^2 / c^3$ となる。更に電磁波には二次元の偏光の自由度があるから、これを二倍しておく (6.14) と同じになる。そこで、電磁波のエネルギーの分布関数を $\langle \varepsilon \rangle$ とすると単位体積あたりのエネルギー密度は $u(\nu, T)d\nu = m(\nu) \langle \varepsilon \rangle d\nu$ つまり $u(\nu, T) = m(\nu) \langle \varepsilon \rangle$ となる。

次にエネルギー分布 $\langle \varepsilon \rangle$ を計算するには Maxwell-Boltzmann 分布の (3.4.12) の時の様に

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\int \varepsilon f(\mathbf{p}) d^3 \mathbf{p}}{\int f(\mathbf{p}) d^3 \mathbf{p}} \quad (6.15)$$

を計算すれば良い。ここに、分布関数 $f(\mathbf{p})$ は一応 Maxwell-Boltzmann 分布に比例すると仮定しておく: $f(\mathbf{p}) \propto e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} = e^{-\beta\varepsilon}$ ここに $\beta = 1/(kT)$ である。しかし今度はエネル

ギーを離散化して $\varepsilon = nh\nu$ ($n = 1, 2, \dots$) とする。すなわち

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\beta nh\nu}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nh\nu}} \quad (6.16)$$

としておく。ここで Maxwell-Boltzmann 分布の (3.4.13) - (3.4.14) の所でした様に分布関数 $Z(\beta)$ をまず計算すると

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nh\nu} = \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}} = \frac{e^{\beta h\nu}}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (6.17)$$

より

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) = \frac{\partial}{\partial \beta} \log(1 - e^{-\beta h\nu}) = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (6.18)$$

が得られる。結局単位体積あたりのエネルギー密度は

$$u(\nu, T) = \mu(\nu) \langle \varepsilon \rangle = 8\pi \text{frac} \nu^2 c^3 \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (6.19)$$

となってプランクの公式 (6.1) が得られる。(証明終わり)

(追補) Riemann のゼータ関数 (zeta function)

$$\begin{aligned} \zeta(s) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx \end{aligned} \quad (6.20)$$

は物理の応用上でも重要である。二行目の積分を計算すると

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} x^{s-1} \frac{1}{(1 - e^{-x})e^{-x}} dx &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{s-1} e^{-(n+1)x} dx \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^s} \int_0^{\infty} x^{s-1} e^{-x} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \Gamma(s) \end{aligned} \quad (6.21)$$

ここに $\Gamma(s) = (s-1)!$ はガンマ関数である。 $s = 2n$ が偶数の時 $\zeta(2n)$ はベルヌーイ数 B_{2n} で表わされる。ベルヌーイ数については数学の教科書 (例えば、「解析概論」(高木貞治著) 232 ページ、web ページ <http://qmpack.homelinux.com/~fujiwara/note3.pdf>)

等) にゆずってここでは結果だけを示すと

$$\begin{aligned}\zeta(2n) &= (-1)^{n+1} \frac{B_{2n}(2\pi)^{2n}}{2(2n)!} \quad (n = 1, 2, \dots) \\ B_2 &= \frac{1}{6} \rightarrow \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \\ B_4 &= -\frac{1}{30} \rightarrow \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} \\ &\dots\end{aligned}\tag{6.22}$$

となる。これらを使って

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty \frac{x^{m+1}}{e^x - 1} dx \\ &= \begin{cases} m = 0 & \frac{x}{e^x - 1} & 1!\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \\ m = 1 & \frac{x^2}{e^x - 1} & 2!\zeta(3) = 2 \times 1.20205 \dots \\ m = 2 & \frac{x^3}{e^x - 1} & 3!\zeta(4) = 6 \times (\pi^4/90) = \frac{\pi^4}{15} \\ & \dots \end{cases}\end{aligned}\tag{6.23}$$

が導かれる。

(「近代物理学前史」の項、終わり)