

大学物理レポート

谷脇 貞善

2022 年 3 月 22 日

このレポートは、量子力学や統計力学を扱っているもので、初心者向けではない。また、微積分を使っているので、高校生向けではない。ここで取り上げた学問は、力学、電磁気学、熱力学、解析力学、量子力学、統計力学である。単位系は、SI 単位系を使う。

「力学（りきがく、英語：mechanics）とは、物体や機械（machine）の運動、またそれらに働く力や相互作用を考察の対象とする学問分野の総称である。物理学で単に「力学」と言えば、古典力学またはニュートン力学のことを指すことがある。」(Wikipedia より)

このレポートでは、主に調和振動子について説明する。理由は、統計力学に出てくるアインシュタイン模型に、調和振動子が登場するからである。また、エネルギー等についても説明する。

「電磁気学（でんじきがく、(英: electromagnetism) は、物理学の分野の 1 つであり、基本相互作用のひとつである電磁相互作用に関する現象を扱う学問である。工学分野では、電気磁気学と呼ばれることもある。」(Wikipedia より)

このレポートでは、主に電磁波について説明する。なので、このレポートでのメインテーマである調和振動子は登場していない。しかし、演算子ナブラ (∇) は量子力学で再登場する。

「熱力学（ねつりきがく、英: thermodynamics）は、物理学の一分野で、熱や物質の輸送現象やそれに伴う力学的な仕事についてを、系の巨視的性質から扱う学問。アボガドロ定数個程度の分子から成る物質の巨視的な性質を巨視的な物理量（エネルギー、温度、エントロピー、圧力、体積、物質質量または分子数、化学ポテンシャルなど）を用いて記述する。」(Wikipedia より)

このレポートでは、基礎方程式の式変形しかしていない。目的は、統計力学に出てくるボルツマン因子の導出である。一方、エントロピーの存在証明、各種自由エネルギー等には言及しない。

「解析力学（かいせきりきがく、英: analytical mechanics）とは、一般座標系に対して成り立つ運動方程式を導出して展開される力学体系を言う。その運動方程式はラグランジアンやハミルトニアンと呼ばれる座標変換に対して不変な量に変分法と最小作用の原理等を適用することで導出される。」(Wikipedia より)

このレポートでは、主に調和振動子のハミルトニアンについて説明する。理由は、量子力学で使用

するからである。説明は、ラグランジアン、ハミルトニアンについておこなう。

「量子力学（りょうしりきがく、(英: quantum mechanics) は、一般相対性理論と共に現代物理学の根幹を成す理論として知られ、主として分子や原子、あるいはそれを構成する電子など、微視的な物理現象を記述する力学である。」(Wikipedia より)

このレポートでは、調和振動子のエネルギー準位について説明する。理由は、統計力学で使用するからである。

「統計力学（とうけいりきがく、英: statistical mechanics) は、系の微視的な物理法則を基に、巨視的な性質を導き出すための学問である。統計物理学、統計熱力学とも呼ぶ。」(Wikipedia より)

このレポートでは、調和振動子のエネルギー期待値について説明する。理由は、物質の熱量を求めるからである。

目次

第 1 章	ニュートン力学	4
1.1	調和振動子微分編	5
1.2	調和振動子積分編	7
1.3	調和振動子エネルギー編	9
1.4	運動量保存則	11
1.5	角運動量保存則	12
第 2 章	電磁気学	14
2.1	電磁波導出編	15
2.2	平面電磁波	18
2.3	連続の式	20
第 3 章	熱力学	22
3.1	熱力学の基礎方程式	23
第 4 章	解析力学	24
4.1	ラグランジュ方程式	25
4.2	ハミルトンの運動方程式	27
4.3	調和振動子のハミルトニアン	28
第 5 章	量子力学	30
5.1	シュレーディンガー方程式	31
5.2	量子論的な調和振動子のハミルトニアン	32
5.3	調和振動子のシュレーディンガー方程式代入編	33
5.4	調和振動子のシュレーディンガー方程式の一般解	34
第 6 章	統計力学	36
6.1	正準集団	37
6.2	固体原子の振動	39
参考文献		41
索引		42

第 1 章

ニュートン力学

この章では、主に調和振動子について説明する。理由は、統計力学に出てくるアインシュタイン模型に、調和振動子が登場するからである。また、エネルギー等についても説明する。

質点とは、有限の質量をもつ、大きさ 0 の理想的な物体である。

「エネルギー（独: Energie、英: energy）とは、仕事をするのできる能力のことを指す。物体や系が持っている仕事をする能力の総称。」(Wikipedia より)

「運動量（うんどうりょう、(英: momentum) とは、初等的には物体の運動の状態を表す物理量で、質量と速度の積として定義される。」(Wikipedia より)

「角運動量（かくうんどうりょう、英語: angular momentum) とは、運動量のモーメントを表す力学の概念である。」(Wikipedia より)

「ベクトル積（英語: vector product) とは、ベクトル解析において、3 次元の向き付けられた内積空間において定義される、2 つのベクトルから新たなベクトルを与える二項演算である。2 つのベクトル $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ (以下、ベクトルは太字で表記) のベクトル積は $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ や $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$ で表される。演算の記号からクロス積 (cross product) と呼ばれることもある。2 つのベクトルからスカラーを与える二項演算である内積に対して外積（がいせき）とも呼ばれるが、英語で outer product は直積を意味するので注意を要する。ベクトル積を拡張した外積代数があり、ベクトル積はその 3 次元における特殊な場合である。」(Wikipedia より)

1.1 調和振動子微分編

調和振動子は、物理学によく出てくる、重りとバネがつながっている系である。バネは、重りの変位に比例した力を重りに与える。空間が1次元の場合、重りは時間に関する正弦関数で変位が変化する。

1.1.1 ニュートンの運動方程式

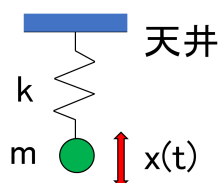


図 1.1 調和振動子

図 1.1 の様な調和振動子の、ニュートンの運動方程式 (1.1) を示す。ここで、 $m[\text{kg}]$ は重りの質量、 $x[\text{m}]$ は重りにおけるバネの自然長からの変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 $k[\text{kg}\cdot\text{s}^{-2}]$ はバネ定数、 $g[\text{m}\cdot\text{s}^{-2}]$ は重力加速度である。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx - mg \quad (1.1)$$

(1.1) を、 $x' = x + \frac{mg}{k}$ と改めて変数 x' で方程式を書き直すと、(1.2) となる。

$$m \frac{d^2 x'}{dt^2} = -kx' \quad (1.2)$$

今後は、 x' を x として扱う。

1.1.2 調和振動子の挙動

1次元の調和振動子のニュートンの運動方程式 (1.3) を示す。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx \quad (1.3)$$

(1.3) を、両辺を m で割ると、(1.4) となる。

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x \quad (1.4)$$

(1.4) の解を、(1.5) の様に仮定する。ここで、振幅 $A[\text{m}]$ 、角周波数 $\omega[\text{s}^{-1}]$ 、位相差 δ は定数である。

$$x = A \sin(\omega t + \delta) \quad (1.5)$$

(1.5) を、 t で微分すると、(1.6) となる。

$$\frac{dx}{dt} = A\omega \cos(\omega t + \delta) \quad (1.6)$$

(1.6) を、さらに t で微分すると、(1.7) となる。

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -A\omega^2 \sin(\omega t + \delta) \quad (1.7)$$

(1.4)、(1.7) より、(1.8) の様に ω が求まる。

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.8)$$

(1.4)、(1.8) より、 $u = \omega t$ とすると、調和振動子のニュートンの運動方程式の簡易版 (1.9) となる。

$$\frac{d^2x}{du^2} = -x \quad (1.9)$$

(1.7)、(1.8) より、(1.5) の仮定が正しい事が分かる。また、(1.9) は、(1.20) で用いる。

1.1.3 補足、正弦関数の微分

正弦関数 $\sin(x)$ の微分を計算する。

$$\frac{d\sin(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin(x + \Delta x) - \sin(x)}{\Delta x} \quad (1.10)$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)[\cos(\Delta x) - 1] + \cos(x) \sin(\Delta x)}{\Delta x} \quad (1.11)$$

$$= \cos(x) \quad (1.12)$$

ただし、(1.13)、(1.14) を用いた。

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin(\Delta x)}{\Delta x} = 1 \quad (1.13)$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(\Delta x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin^2(\Delta x)}{\Delta x^2} \frac{\Delta x}{1 + \cos(\Delta x)} = 0 \quad (1.14)$$

(1.13) を証明する。半径 1 の円弧を考える。角 AOB の大きさを θ とする。

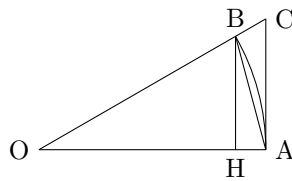


図 1.2 円弧

$$(\text{三角形 } AOB \text{ の面積}) < (\text{扇型 } AOB \text{ の面積}) < (\text{三角形 } AOC \text{ の面積}) \quad (1.15)$$

$$\frac{1}{2} \sin \theta < \frac{1}{2} \theta < \frac{1}{2} \tan \theta \quad (1.16)$$

$$1 < \frac{\theta}{\sin \theta} < \frac{1}{\cos \theta} \quad (1.17)$$

$$\cos \theta < \frac{\sin \theta}{\theta} < 1 \quad (1.18)$$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\sin \theta}{\theta} = 1 \quad (1.19)$$

1.2 調和振動子積分編

調和振動子の挙動を表す、ニュートンの運動方程式を解く。

1.2.1 ニュートンの運動方程式を解く

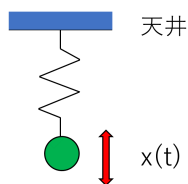


図 1.3 調和振動子

これから解く運動方程式 (1.20) を示す。単位は省略する。ここで、 x は重りの変位、 t は時間である。

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -x \quad (1.20)$$

(1.20) の両辺に $\frac{dx}{dt}$ を掛けると、(1.21) となる。

$$\frac{dx}{dt} \frac{d^2 x}{dt^2} = -x \frac{dx}{dt} \quad (1.21)$$

(1.21) を、 t で積分すると、(1.22) となる。 $a^2 > 0$ は積分定数である。

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = -x^2 + a^2 \quad (1.22)$$

(1.22) の両辺の平方根をとると、(1.23) となる。

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{a^2 - x^2} \quad (1.23)$$

(1.23) の両辺の逆数をとると、(1.24) となる。

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} \quad (1.24)$$

(1.24) を、 x で積分すると、(1.25) となる。

$$t = \int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} \quad (1.25)$$

ここで、(1.25) の右辺の積分を実行するため、 x を別の表現 (1.26) で表す。 u は変数である。

$$x = a \sin u \quad (1.26)$$

(1.26) を、 u で微分すると、(1.27) となる。

$$\frac{dx}{du} = a \cos u \quad (1.27)$$

(1.25) の t を u で表示すると、(1.28) となる。

$$t = \int \frac{a \cos u}{a \cos u} du = \int du \quad (1.28)$$

(1.28) の積分を実行すると、(1.29) となる。 $-\delta$ は積分定数である。

$$t = u - \delta \quad (1.29)$$

(1.29) の u を t で表示すると、(1.30) となる。

$$u = t + \delta \quad (1.30)$$

(1.26)、(1.30) より、(1.31) となる。

$$x = a \sin(t + \delta) \quad (1.31)$$

(1.31) より、重りは時間に対し、正弦関数で変位が変化する事が分かる。

1.2.2 補足、合成関数の微分

合成関数 $f(g(x))$ の微分を計算する。

$$\frac{d[f(g(x))]}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(g(x + \Delta x)) - f(g(x))}{g(x + \Delta x) - g(x)} \frac{g(x + \Delta x) - g(x)}{\Delta x} \quad (1.32)$$

$$= \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} \quad (1.33)$$

1.2.3 補足、逆関数の微分

逆関数の微分を計算する。逆関数の定義より、(1.34) となる。

$$f(g(t)) = t \quad (1.34)$$

合成関数の微分 (1.33)、(1.34) より、(1.35) となる。

$$\frac{d[f(g(t))]}{dt} = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dt} = 1 \quad (1.35)$$

(1.34)、(1.35) より、(1.36) となる。

$$\frac{df}{dg} = \left[\frac{dg}{df} \right]^{-1} \quad (1.36)$$

1.2.4 補足、余弦関数の微分

余弦関数 $\cos(x)$ の微分を計算する。

$$\frac{d \cos(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\cos(x + \Delta x) - \cos(x)}{\Delta x} \quad (1.37)$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)[\cos(\Delta x) - 1] - \sin(x) \sin(\Delta x)}{\Delta x} \quad (1.38)$$

$$= -\sin(x) \quad (1.39)$$

ただし、(1.13)、(1.14) を用いた。

1.3 調和振動子エネルギー編

調和振動子のエネルギー保存則について説明する。

1.3.1 調和振動子のエネルギー保存則

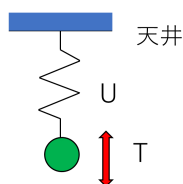


図 1.4 調和振動子

ニュートンの運動方程式 (1.40) を示す。ここで $m[\text{kg}]$ は重りの質量、 $x[\text{m}]$ は重りの変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 $k[\text{kg}\cdot\text{s}^{-2}]$ はバネ定数である。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx \quad (1.40)$$

(1.40) を x で積分すると、(1.41) となる。

$$m \int \frac{d^2 x}{dt^2} dx = - \int kx dx \quad (1.41)$$

(1.41) の左辺を変形すると、(1.42) となる。

$$m \int \frac{dx}{dt} \frac{d^2 x}{dt^2} dt = - \int kx dx \quad (1.42)$$

(1.42) を積分すると、(1.43) となる。 E は積分定数である。

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = -\frac{1}{2} kx^2 + E \quad (1.43)$$

(1.43) 右辺第一項を移項すると、(1.44) となる。

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2 = E \quad (1.44)$$

(1.44) は、エネルギー保存則 (1.45) となる。

$$T + U = E \quad (1.45)$$

ここで $T[\text{J}]$ ($T[\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}]$) は、運動エネルギーである。その定義 (1.46) を示す。

$$T = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \quad (1.46)$$

また $U[\text{J}]$ は、位置エネルギーである。その定義 (1.47) を示す。

$$U = \frac{1}{2}kx^2 \quad (1.47)$$

ここで速度 $v[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$ を $v = \frac{dx}{dt}$ で定義する。これを用いると、運動エネルギー (1.46) は、おなじみの表現 (1.48) となる。

$$T = \frac{1}{2}mv^2 \quad (1.48)$$

なお、運動エネルギー T と位置エネルギー U は、(4.17) で再び登場する。

1.3.2 補足、置換積分

置換積分を計算する。(1.49) の関係を示す。

$$F(x) = \int f(x)dx \quad (1.49)$$

また (1.50) の関係も示す。

$$x = g(t) \quad (1.50)$$

(1.49)、(1.50) より、(1.51) となる。

$$\frac{dF(g(t))}{dt} = f(g(t)) \frac{dg(t)}{dt} \quad (1.51)$$

(1.49)、(1.51) より、(1.52) となる。

$$\int f(x)dx = \int f(g(t)) \frac{dg(t)}{dt} dt \quad (1.52)$$

1.3.3 補足、足し算の微分

足し算の微分を計算する。

$$\frac{d[f(x) + g(x)]}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) + g(x + \Delta x) - f(x) - g(x)}{\Delta x} \quad (1.53)$$

$$= \frac{df(x)}{dx} + \frac{dg(x)}{dx} \quad (1.54)$$

1.3.4 補足、掛け算の微分

掛け算の微分を計算する。

$$\frac{d[f(x)g(x)]}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x)g(x + \Delta x) - f(x)g(x + \Delta x) + f(x)g(x + \Delta x) - f(x)g(x)}{\Delta x} \quad (1.55)$$

$$= \frac{df(x)}{dx} g(x) + f(x) \frac{dg(x)}{dx} \quad (1.56)$$

1.4 運動量保存則

質点系の運動量保存則について説明する。

1.4.1 運動量保存則



図 1.5 質点系

互いに力を及ぼし合う二つの質点から成る系を考える。ベクトルを太文字で表す。ここで、 $m_i[\text{kg}]$ は質点 $i(i = 1, 2)$ の質量、 $\mathbf{r}_i[\text{m}]$ は質点 i の変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 $\mathbf{F}[\text{N}]$ ($\mathbf{F}[\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}]$) は質点間の任意の力である。なお、作用反作用の法則を用いた。質点 1 の運動方程式 (1.57) を示す。

$$m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} = \mathbf{F} \quad (1.57)$$

また、質点 2 の運動方程式 (1.58) を示す。

$$m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} = -\mathbf{F} \quad (1.58)$$

(1.57)、(1.58) より、(1.59) となる。

$$m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} + m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} = \mathbf{0} \quad (1.59)$$

(1.59) を t で積分すると、(1.60) となる。 $\mathbf{P}$ は積分定数である。

$$m_1 \frac{d\mathbf{r}_1}{dt} + m_2 \frac{d\mathbf{r}_2}{dt} = \mathbf{P} \quad (1.60)$$

(1.60) は、運動量保存則 (1.61) となる。

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{P} \quad (1.61)$$

ここで、質点 1 の運動量 $\mathbf{p}_1[\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$ の定義 (1.62) を示す。

$$\mathbf{p}_1 = m_1 \frac{d\mathbf{r}_1}{dt} \quad (1.62)$$

また、質点 2 の運動量 $\mathbf{p}_2$ の定義 (1.63) を示す。

$$\mathbf{p}_2 = m_2 \frac{d\mathbf{r}_2}{dt} \quad (1.63)$$

(1.61) より、質点系について、運動量保存則が成立する事が分かる。

1.5 角運動量保存則

角運動量保存則について説明する。

1.5.1 角運動量保存則



図 1.6 質点系

一つの質点から成る系を考える。ここで、 $m[\text{kg}]$ は質点の質量、 $\mathbf{r}[\text{m}]$ は質点の変位、 r は $\mathbf{r}$ の長さ、 $f(r)[\text{N}\cdot\text{m}^{-1}]$ は任意の関数、 $t[\text{s}]$ は時間、 $\mathbf{F}[\text{N}]$ は質点を受ける力である。中心力の定義 (1.64) を示す。

$$\mathbf{F} = f(r)\mathbf{r} \quad (1.64)$$

質点の角運動量 $\mathbf{L} [\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$ の定義 (1.65) を示す。ここで、数学記号 $\times$ は外積を示す。

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1.65)$$

(1.65) から、運動量の定義より $\mathbf{p}$ を消去すると、(1.66) となる。

$$\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (1.66)$$

(1.66) を、時間 t で微分すると、(1.67) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = m \frac{d}{dt} \left[\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right] \quad (1.67)$$

(1.67) で、外積の性質より外側の微分を分配すると、(1.68) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} + m\mathbf{r} \times \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \quad (1.68)$$

(1.68) で、外積の性質より右辺第一項が消え、(1.69) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = m\mathbf{r} \times \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \quad (1.69)$$

(1.69) で、ニュートンの運動方程式より $\mathbf{F}$ に置き換えると、(1.70) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} \quad (1.70)$$

(1.70) は、(1.64) より $\mathbf{F}$ を消去すると、(1.71) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = f(\mathbf{r})\mathbf{r} \times \mathbf{r} \quad (1.71)$$

(1.71) は、外積の性質より右辺が消え、(1.72) となる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{0} \quad (1.72)$$

(1.72) より、質点に作用する力が中心力の場合、質点の角運動量 $\mathbf{L}$ は時間変化しない事が分かる。

1.5.2 補足、外積

$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ は、それぞれの軸方向への単位ベクトルである。 $\mathbf{A}$ に関し、(1.73) を示す。

$$\mathbf{A} = A_x\mathbf{e}_x + A_y\mathbf{e}_y + A_z\mathbf{e}_z \quad (1.73)$$

$\mathbf{B}$ に関し、(1.74) を示す。

$$\mathbf{B} = B_x\mathbf{e}_x + B_y\mathbf{e}_y + B_z\mathbf{e}_z \quad (1.74)$$

外積の定義を (1.75) に示す。

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = (A_yB_z - A_zB_y)\mathbf{e}_x + (A_zB_x - A_xB_z)\mathbf{e}_y + (A_xB_y - A_yB_x)\mathbf{e}_z \quad (1.75)$$

1.5.3 補足、定数の微分

定数 a の微分を計算する。

$$\frac{da}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{a - a}{\Delta x} \quad (1.76)$$

$$= 0 \quad (1.77)$$

1.5.4 補足、べき乗関数の微分

べき乗関数 x^n (n は自然数) の微分 (1.78) を証明する。

$$\frac{dx^n}{dx} = nx^{n-1} \quad (1.78)$$

$n = 1$ のとき、(1.79) となる。

$$\frac{dx}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{x + \Delta x - x}{\Delta x} = 1 \quad (1.79)$$

よって、(1.78) は成立する。

$n = k$ のとき、(1.78) が成立すると仮定する。 $n = k + 1$ のとき、(1.80) となる。

$$\frac{dx^{k+1}}{dx} = \frac{dx}{dx}x^k + x\frac{dx^k}{dx} = (k+1)x^k \quad (1.80)$$

よって、 $n = k + 1$ のときも (1.78) は成立する。

(1.79)、(1.80) より、(1.78) が証明された。

第 2 章

電磁気学

ここでは主に電磁波について説明する。なので、このレポートでのメインテーマである調和振動子は登場していない。しかし、演算子ナブラ (∇) は量子力学で再登場する。

「電荷（でんか、英語: electric charge）は、粒子や物体が帯びている電気の量であり、また電磁場から受ける作用の大きさを規定する物理量である。荷電とも、また電気量とも呼ぶ。電荷の量は電荷量と言い、電荷量のことを単に「電荷」と呼んだり、電荷を持つ粒子のことを電荷と呼んだりすることもある。」(Wikipedia より)

「電場（でんば）または電界（でんかい）（英語: electric field）は、電荷に力を及ぼす空間（自由電子が存在しない空間。絶縁空間）の性質の一つ。E の文字を使って表されることが多い。おもに理学系では「電場」、工学系では「電界」ということが多い。」(Wikipedia より)

「磁場（じば、英語: Magnetic field）は、電氣的現象・磁氣的現象を記述するための物理的概念である。工学分野では、磁界（じかい）ということもある。」(Wikipedia より)

「アンペールの法則（アンペールのほうそく; 英語: Ampère's circuital law）は電流とそのまわりにできる磁場との関係をあらわす法則である。1820 年にフランスの物理学者アンドレ＝マリ・アンペール（フランス語: André-Marie Ampère）が発見した。」(Wikipedia より)

「ファラデーの電磁誘導の法則（ファラデーのでんじゆうどうのほうそく、英語: Faraday's law of induction）とは、電磁誘導において、1 つの回路に生じる誘導起電力の大きさはその回路を貫く磁界の変化の割合に比例するというもの。ファラデーの誘導法則ともよばれる。また、ファラデーの電気分解の法則との混同のおそれのない場合は、単にファラデーの法則と呼称されることもある。」(Wikipedia より)

「ガウスの法則（ガウスのほうそく、英: Gauss' law）とは、カール・フリードリヒ・ガウスが 1835 年に発見し、1867 年に発表した電荷と電場の関係をあらわす方程式である。この式はジェームズ・クラーク・マクスウェルにより数学的に整備され、マクスウェルの方程式の 1 つとなった。」(Wikipedia より)

2.1 電磁波導出編

電磁波について説明する。

2.1.1 ベクトル解析

ここで、 $\mathbf{A}$ はベクトル場、 A_x, A_y, A_z は $\mathbf{A}$ の成分、 $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ は単位ベクトル、 ψ はスカラー場である。 $\mathbf{A}$ の表現 (2.1) を示す。

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z \quad (2.1)$$

演算子ナブラ (∇) の定義 (2.2) を示す。ここで、 $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ は、偏微分を表す演算子である。 ∇ は、(5.1) で再登場する。

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.2)$$

単位ベクトル同士の内積 (2.3) を示す。なお、 δ_{ij} は、クロネッカーのデルタである。

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad i, j = x, y, z \quad (2.3)$$

演算子 grad(勾配, gradient) の定義 (2.4) を示す。

$$\text{grad} \psi = \nabla \cdot \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \psi}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial \psi}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (2.4)$$

演算子 div(発散, divergence) の定義 (2.5) を示す。

$$\text{div} \mathbf{A} = \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \quad (2.5)$$

演算子 rot(回転, rotation) の定義 (2.6) を示す。

$$\text{rot} \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.6)$$

(2.6) を、行列式で表すと、(2.7) となる。

$$\text{rot} \mathbf{A} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

(2.7) を、単位ベクトル別に整理すると、(2.8) となる。

$$\text{rot} \mathbf{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \mathbf{e}_x + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \mathbf{e}_y + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{e}_z \quad (2.8)$$

演算子 Δ (ラプラシアン, Laplacian) の定義 (2.9) を示す。

$$\Delta = \text{div} \cdot \text{grad} = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.9)$$

2.1.2 公式 (2.14) の証明

後で使用する公式の左辺の x 成分 (2.10) を示す。rot の定義 (2.8) を当てはめる。

$$[\text{rot}(\text{rot}\mathbf{A})]_x = \frac{\partial}{\partial y}(\text{rot}\mathbf{A})_z - \frac{\partial}{\partial z}(\text{rot}\mathbf{A})_y \quad (2.10)$$

(2.10) に、さらに rot の定義 (2.8) を当てはめると、(2.11) となる。

$$[\text{rot}(\text{rot}\mathbf{A})]_x = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \quad (2.11)$$

(2.11) を、一工夫すると、(2.12) となる。

$$[\text{rot}(\text{rot}\mathbf{A})]_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial^2 A_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} \right) \quad (2.12)$$

(2.12) を、今まで定義した演算子で表すと、(2.13) となる。

$$[\text{rot}(\text{rot}\mathbf{A})]_x = \frac{\partial}{\partial x}(\text{div}\mathbf{A}) - \nabla^2 A_x \quad (2.13)$$

(2.13) と同様に、y 成分、z 成分も同様に計算出来るので、(2.14) となる。

$$\text{rot} \cdot \text{rot}\mathbf{A} = \text{grad} \cdot \text{div}\mathbf{A} - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (2.14)$$

2.1.3 電磁波

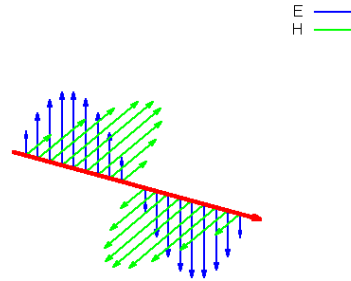


図 2.1 電磁波

真空中のマクスウェル方程式は、(2.15)、(2.16)、(2.17)、(2.18) のように書ける。ここで、電流密度 $\mathbf{j} = 0[\text{m}^{-2} \cdot \text{A}]$ である。また、電荷密度 $\rho = 0[\text{m}^{-3} \cdot \text{s} \cdot \text{A}]$ である。 $\epsilon_0[\text{m}^{-3} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^4 \cdot \text{A}^2]$ は真空の誘電率、 $\mu_0[\text{m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-2}]$ は真空の透磁率、 $\mathbf{E}[\text{m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}]$ は電場、 $\mathbf{H}[\text{m}^{-1} \cdot \text{A}]$ は磁場である。マクスウェル-アンペールの法則 (2.15) を示す。

$$\text{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.15)$$

ファラデーの電磁誘導の法則 (2.16) を示す。

$$\text{rot}\mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2.16)$$

ガウスの法則 (2.17) を示す。

$$\text{div}\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0 \quad (2.17)$$

磁荷の不在 (2.18) を示す。

$$\text{div}\mathbf{H} = 0 \quad (2.18)$$

$\mathbf{H}$ を、(2.15)、(2.16) から消去すると、(2.19) となる。

$$\text{rot} \cdot \text{rot}\mathbf{E} = -\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.19)$$

一方、(2.14)、(2.17) より、(2.20) となる。

$$\text{rot} \cdot \text{rot}\mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E} \quad (2.20)$$

(2.19)、(2.20) より、 $\mathbf{E}$ が従う方程式 (2.21) となる。

$$\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla^2 \mathbf{E} \quad (2.21)$$

(2.26) より、 $\mathbf{E}$ が光の速さ $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ で移動する電磁波であることがわかる。(2.21) のある解の x 成分 (2.22) を示す。ここで、 $f(w)$ は任意の関数である。

$$E_x = f(z - ct) \quad (2.22)$$

(2.21) のある解の y 成分 (2.23) を示す。

$$E_y = 0 \quad (2.23)$$

(2.21) のある解の z 成分 (2.24) を示す。

$$E_z = 0 \quad (2.24)$$

(2.22)、(2.23)、(2.24) を (2.21) に代入すると、(2.25) となる。ここで、 $'$ は微分を表す。

$$\epsilon_0 \mu_0 c^2 f''(z - ct) = f''(z - ct) \quad (2.25)$$

(2.25) より、(2.26) となる。

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (2.26)$$

c が検算出来た。

2.1.4 補足、2 回微分

2 回微分を詳しく書くと、(2.27) となる。

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} f(x) \quad (2.27)$$

2.2 平面電磁波

平面電磁波について説明する。物理量が、x 方向及び y 方向に対し、不変である場合を考える。

2.2.1 平面電磁波

真空中のマクスウェル方程式は、(2.15)、(2.16)、(2.17)、(2.18) である。 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(z, t)$ 、 $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(z, t)$ とする。(2.15) の x 成分は、(2.28) となる。

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = \epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} \quad (2.28)$$

(2.15) の y 成分は、(2.29) となる。

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = \epsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (2.29)$$

(2.15) の z 成分は、(2.30) となる。

$$0 = \epsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} \quad (2.30)$$

(2.16) の x 成分は、(2.31) となる。

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = -\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} \quad (2.31)$$

(2.16) の y 成分は、(2.32) となる。

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = -\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} \quad (2.32)$$

(2.16) の z 成分は、(2.33) となる。

$$0 = -\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} \quad (2.33)$$

(2.17) は、(2.34) となる。

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad (2.34)$$

(2.18) は、(2.35) となる。

$$\frac{\partial H_z}{\partial z} = 0 \quad (2.35)$$

(2.30)、(2.34) より、(2.36) となる。本来は定数だが、波動関数とはならないので、0 とした。

$$E_z = 0 \quad (2.36)$$

(2.33)、(2.35) より、(2.37) となる。本来は定数だが、波動関数とはならないので、0 とした。

$$H_z = 0 \quad (2.37)$$

(2.28)、(2.32) より、 H_y を消去すると、波動方程式 (2.38) となる。

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} \quad (2.38)$$

(2.38) を解くと、(2.39) となる。ここで、 $f_1(w)$ と $f_2(w)$ は、任意の関数である。

$$E_x = f_1(z - ct) + f_2(z + ct) \quad (2.39)$$

(2.29)、(2.31) より、 H_x を消去すると、波動方程式 (2.40) となる。

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} \quad (2.40)$$

(2.40) を解くと、(2.41) となる。ここで、 $g_1(w)$ と $g_2(w)$ は、任意の関数である。

$$E_y = g_1(z - ct) + g_2(z + ct) \quad (2.41)$$

2.2.2 電磁波のスペクトル

(2.41) の特殊な解として、正弦波 (2.42) を示す。

$$E_y(z, t) = A \sin \left[\frac{2\pi(z - ct)}{\lambda} \right] \quad (2.42)$$

実数 $A[\text{m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}]$ は電磁波の振幅である。また、正数 $\lambda[\text{m}]$ は電磁波の波長である。この波長により、電磁波の性質が異なっている。

2.2.3 補足、偏微分と微分と積分

二変数関数 $f(x, y)$ の x に関する偏微分を (2.43) に示す。

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x} \quad (2.43)$$

二変数関数 $f(x, y)$ の y に関する偏微分を (2.44) に示す。

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y} \quad (2.44)$$

一変数関数 $f(x)$ の x に関する微分を (2.45) に示す。

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2.45)$$

微分と積分の関係を (2.46) に示す。

$$\frac{d}{dx} \int f(x) dx = f(x) \quad (2.46)$$

2.3 連続の式

連続の式について説明する。

2.3.1 公式 (2.51) の証明

後で使用する公式 (2.51) の左辺 (2.47) を示す。

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\mathbf{A}) = \frac{\partial}{\partial x}(\operatorname{rot}\mathbf{A})_x + \frac{\partial}{\partial y}(\operatorname{rot}\mathbf{A})_y + \frac{\partial}{\partial z}(\operatorname{rot}\mathbf{A})_z \quad (2.47)$$

(2.47) の rot を展開すると、(2.48) となる。

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\mathbf{A}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \quad (2.48)$$

(2.48) の括弧を外すと、(2.49) となる。

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\mathbf{A}) = \frac{\partial^2 A_z}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 A_y}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 A_x}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 A_z}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 A_y}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 A_x}{\partial z \partial y} \quad (2.49)$$

(2.49) を整理すると、(2.50) となる。

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\mathbf{A}) = \frac{\partial^2 A_z}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 A_z}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 A_y}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 A_y}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 A_x}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 A_x}{\partial z \partial y} \quad (2.50)$$

(2.50) は、公式 (2.51) となる。

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\mathbf{A}) = 0 \quad (2.51)$$

2.3.2 連続の式

ここでは、 ϵ は誘電率、 μ は透磁率である。マクスウェル方程式を、(2.52)、(2.53)、(2.54)、(2.55) に示す。マクスウェル-アンペールの法則 (2.52) を示す。

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.52)$$

ファラデーの電磁誘導の法則 (2.53) を示す。

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2.53)$$

ガウスの法則 (2.54) を示す。

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (2.54)$$

磁荷の不在 (2.55) を示す。

$$\operatorname{div}\mathbf{H} = 0 \quad (2.55)$$

(2.52)、(2.54) より、(2.56) となる。

$$\operatorname{div} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H} = \operatorname{div} \mathbf{j} + \epsilon \frac{\partial \operatorname{div} \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.56)$$

(2.54)、(2.56) より、(2.57) となる。

$$\operatorname{div} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H} = \operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.57)$$

一方、(2.51) より、(2.58) となる。

$$\operatorname{div} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H} = 0 \quad (2.58)$$

(2.57)、(2.58) より、連続の式 (2.59) となる。

$$\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.59)$$

特に、系で電荷密度 ρ が時間変化しない場合、連続の式 (2.59) は (2.60) となる。

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0 \quad (2.60)$$

(2.60) は、電流密度 $\mathbf{j}$ のキルヒホッフの第一法則に相当する。

2.3.3 補足、不定積分と定積分

関数 $f(x)$ の不定積分を (2.61) に示す。

$$\int f(x) dx = F(x) \quad (2.61)$$

(2.61) での定積分を (2.62) に示す。

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) = F(x) \Big|_a^b \quad (2.62)$$

2.3.4 補足、部分積分

(2.63) の関係を示す。

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x) \quad (2.63)$$

また、(2.64) の関係を示す。

$$\frac{dG(x)}{dx} = g(x) \quad (2.64)$$

(2.63)、(2.64) より、(2.65) となる。

$$\frac{dF(x)G(x)}{dx} = f(x)G(x) + F(x)g(x) \quad (2.65)$$

(2.65) より (2.66) となる。

$$\int f(x)G(x) dx = F(x)G(x) - \int F(x)g(x) dx \quad (2.66)$$

第 3 章

熱力学

ここでは、基礎方程式の式変形しかしていない。目的は、統計力学に出てくるボルツマン因子の導出である。一方、自由エネルギー等には言及しない。

「熱力学温度（ねつりきがくおんど、英: thermodynamic temperature）は、熱力学に基づいて定義される温度である。」(Wikipedia より)

「エントロピー（英: entropy）は、熱力学および統計力学において定義される示量性の状態量である。熱力学において断熱条件下での不可逆性を表す指標として導入され、統計力学において系の微視的な「乱雑さ」を表す物理量という意味付けがなされた。」(Wikipedia より)

「多変数微分積分学における微分が完全 (exact, perfect) あるいは完全微分（かんぜんびぶん、英: exact differential）とは、それが適当な可微分函数 Q の微分 dQ となるときに言い、そうでないとき不完全微分と呼ぶ。」(Wikipedia より)

物理量を表す基本単位を表 3.1 に示す。力の大きさを表す組立単位 $[N]$ (ニュートン) は、 $[kg \cdot m \cdot s^{-2}]$ に等しい。また、エネルギーの大きさを表す組立単位 $[J]$ (ジュール) は、 $[kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}]$ に等しい。他にも、さまざまな組立単位がある。

表 3.1 物理量を表す基本単位

物理量	単位
長さ	$[m]$
時間	$[s]$
質量	$[kg]$
電流	$[A]$
温度	$[K]$

3.1 熱力学の基礎方程式

熱力学の基礎方程式について説明する。

3.1.1 熱力学の基礎方程式

理想気体を考える。完全微分で表せられる熱力学の基礎方程式 (3.1) を示す。ここで $E[\text{J}]$ は内部エネルギー、 $T[\text{K}]$ は温度、 $S[\text{J}\cdot\text{K}^{-1}]$ はエントロピー、 $P[\text{N}\cdot\text{m}^{-2}]$ は圧力、 $V[\text{m}^3]$ は体積である。

$$dE = TdS - PdV \quad (3.1)$$

3.1.2 熱力学の計算

(6.4) で用いる式を計算する。(3.1) の、 V を一定に保った、 S による E の偏微分を計算すると、(3.2) となる。

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V = T \quad (3.2)$$

(3.2) の逆数を表すと、(3.3) となる。

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_V = \frac{1}{T} \quad (3.3)$$

(3.3) を、(6.4) で用いる。同様に、(3.1) の、 S を一定に保った、 V による E の偏微分を計算すると、(3.4) となる。

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S = -P \quad (3.4)$$

(3.2)、(3.4) より、(3.5) となる。

$$\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} = \frac{\partial T}{\partial V} = -\frac{\partial P}{\partial S} \quad (3.5)$$

(3.5) を、マクスウェルの関係式と言う。他にもマクスウェルの関係式は存在するが、ここでは説明しない。

3.1.3 補足、 $\exp(x)$ の微分

指数関数 $\exp(x) = e^x$ の微分を計算する。 a^x を微分すると、(3.8) となる。

$$\frac{da^x}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{a^{x+\Delta x} - a^x}{\Delta x} \quad (3.6)$$

$$= a^x \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{a^{\Delta x} - 1}{\Delta x} \quad (3.7)$$

$$= a^x \left[\frac{da^x}{dx} \right]_{x=0} \quad (3.8)$$

ここで、 $\left[\frac{da^x}{dx} \right]_{x=0} = 1$ が成り立つときの a を e とすると、(3.9) となる。

$$\frac{de^x}{dx} = e^x \quad (3.9)$$

第 4 章

解析力学

ここでは、主に調和振動子について説明する。理由は、量子力学で使用するからである。ラグランジアン、ハミルトニアン順に説明する。

「ラグランジュ力学（ラグランジュりきがく、英語：Lagrangian mechanics）は、一般化座標とその微分を基本変数として記述された古典力学である。フランスの物理学者ジョゼフ＝ルイ・ラグランジュが創始した。」(Wikipedia より)

「ハミルトニアン（英語: Hamiltonian）あるいはハミルトン関数、特性関数（とくせいかんすう）は、物理学におけるエネルギーに対応する物理量である。各物理系の持つ多くの性質は、ハミルトニアンによって特徴づけられる。名称はイギリスの物理学者ウィリアム・ローワン・ハミルトンに因む。」(Wikipedia より)

「変分法（へんぶんほう、英: Variational method, Calculus of variations）とは、関数を取り値を返す対応である汎関数についての微分にあたる手法を言う。オイラーとラグランジュらによって導入された。」(Wikipedia より)

「最小作用の原理（さいしやうさやうのげんり、英: principle of least action）は、物理学における基本原理の一つで、特に解析力学の構成において、その基礎付けを与える動力学の原理である。最小作用の原理に従って、力学系の運動（時間発展）は、作用と呼ばれる汎関数を最小にするような軌道に沿って実現される（実際には「最小」になるとは限らず、仮想的な軌道の変化についての（第一）変分が零になる、すなわち「極値（停留）」をとるとのことなのであるが、既に「最小作用の法則（原理）」は歴史的な名称として定着してしまっているものであり、現代的には変分原理（variational principle）という方がより適切である。」(Wikipedia より)

ここでは、「変分原理」で統一する。

4.1 ラグランジュ方程式

ラグランジュ方程式について説明する。

4.1.1 ラグランジアン $\mathcal{L}$ と変分原理

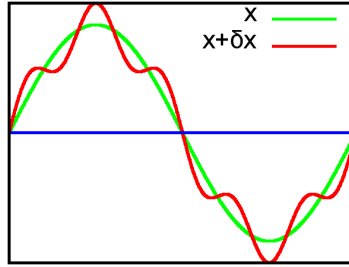


図 4.1 変分原理

ラグランジアン $\mathcal{L}[J]$ の定義 (4.1) を示す。ここで、 T は質点の運動エネルギー、 U は質点の位置エネルギーである。

$$\mathcal{L} = T - U \quad (4.1)$$

(4.2)、(4.3)、(4.4) を基本原理とする。ここで、 δ は変分、 $x[\text{m}]$ は質点の変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 t_s は質点の運動開始時刻、 t_e は質点の運動終了時刻である。変分原理 (4.2) を示す。

$$\delta \int_{t_s}^{t_e} \mathcal{L} dt = 0 \quad (4.2)$$

端点条件その 1(4.3) を示す。

$$\delta x(t_s) = 0 \quad (4.3)$$

端点条件その 2(4.4) を示す。

$$\delta x(t_e) = 0 \quad (4.4)$$

4.1.2 ラグランジュ方程式

ラグランジュ方程式を導く。ここで、 $\dot{x} = \frac{dx}{dt}[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$ と表記する。(4.2) より、(4.5) となる。

$$\int_{t_s}^{t_e} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \delta x \right) dt = 0 \quad (4.5)$$

(4.5) は、(4.6) となる。

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x \right|_{t_s}^{t_e} - \int_{t_s}^{t_e} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \right] \delta x dt = 0 \quad (4.6)$$

(4.6) 左辺第一項は、(4.3)、(4.4) より消える。どんな変分 δx でも (4.6) が成り立つので、(4.6) より、(4.7) となる。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \quad (4.7)$$

(4.7) がラグランジュ方程式である。

4.1.3 補足、 $\log(x)$ の微分

対数関数 $\log(x)$ の微分を計算する。 $\log(x)$ は $\exp(x)$ の逆関数なので、(3.9) より、(4.8) となる。

$$\frac{d \log(x)}{dx} = \frac{1}{x} \quad (4.8)$$

4.1.4 補足、等比数列の和

公比 a の等比数列の和を計算する。ただし、 $-1 < a < 1$ とする。

$$(1-a) \sum_{n=0}^{\infty} a^n = \sum_{n=0}^{\infty} a^n - \sum_{n=1}^{\infty} a^n = 1 \quad (4.9)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a^n = \frac{1}{1-a} \quad (4.10)$$

4.1.5 補足、マクローリン展開

マクローリン展開を証明する。

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \quad (4.11)$$

$$f^{(n)}(0) = c_n n! \quad (4.12)$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n \quad (4.13)$$

4.1.6 補足、指数関数の拡張版

指数関数の拡張版を示す。

$$e^{i\theta} = \exp(i\theta) = \cos \theta + i \sin \theta \quad (4.14)$$

$$\frac{d}{d\theta} e^{i\theta} = -\sin \theta + i \cos \theta = i e^{i\theta} \quad (4.15)$$

4.2 ハミルトンの運動方程式

ハミルトンの運動方程式について説明する。

4.2.1 ハミルトニアン $\mathcal{H}$

運動量 $p[\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$ の定義 (4.16) を示す。ここで、 $\mathcal{L}[\text{J}]$ はラグランジアン、 $x[\text{m}]$ は質点の変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 $\dot{x} = \frac{dx}{dt}[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$ である。

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \quad (4.16)$$

ハミルトニアン $\mathcal{H}[\text{J}]$ の定義 (4.17) を示す (ルジャンドル変換)。

$$\mathcal{H} = p\dot{x} - \mathcal{L} \quad (4.17)$$

(4.2)、(4.3)、(4.4) を基本原理とする。

4.2.2 ハミルトンの運動方程式

ハミルトンの運動方程式を導く。(4.17) より、(4.18) となる。

$$\mathcal{L} = p\dot{x} - \mathcal{H} \quad (4.18)$$

(4.2)、(4.18) より、(4.19) となる。

$$\int_{t_s}^{t_e} \left(\delta p \dot{x} + p \delta \dot{x} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \delta p - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \delta x \right) dt = 0 \quad (4.19)$$

(4.19) より、(4.20) となる。

$$p \delta x \Big|_{t_s}^{t_e} + \int_{t_s}^{t_e} \left[\frac{dx}{dt} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \right] \delta p dt + \int_{t_s}^{t_e} \left[-\frac{dp}{dt} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \right] \delta x dt = 0 \quad (4.20)$$

(4.20) の右辺第一項は、(4.3)、(4.4) より、0 となる。 $\delta p, \delta x$ に依存せずに (4.20) が成立するとき、(4.21)、(4.22) となる。(4.20) より、 x の時間変化は (4.21) となる。

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \quad (4.21)$$

(4.20) より、 p の時間変化は (4.22) となる。

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \quad (4.22)$$

(4.21)、(4.22) がハミルトンの運動方程式である。

4.3 調和振動子のハミルトニアン

調和振動子のハミルトニアンについて説明する。

4.3.1 調和振動子のハミルトニアン

調和振動子のハミルトニアンを計算して求める。ラグランジアン^(4.23)の定義を示す。

$$\mathcal{L}(\dot{x}, x) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 \quad (4.23)$$

運動量の定義^(4.24)を示す。

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \quad (4.24)$$

(4.23)、(4.24) より、(4.25) となる。

$$p = m\dot{x} \quad (4.25)$$

ハミルトニアン^(4.26)の定義を示す。

$$\mathcal{H}(p, x) = p\dot{x} - \mathcal{L} \quad (4.26)$$

(4.23)、(4.25)、(4.26) より、(4.27) となる。

$$\mathcal{H}(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \quad (4.27)$$

角周波数 $\omega[\text{s}^{-1}]$ の定義^(4.28)を示す。

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (4.28)$$

(4.27)、(4.28) より、(4.29) となる。

$$\mathcal{H}(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (4.29)$$

ハミルトンの運動方程式は、(4.30)、(4.34) となる。 x の時間変化^(4.30)を示す。

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \quad (4.30)$$

(4.27)、(4.30) より、(4.31) となる。

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad (4.31)$$

(4.31) を変形すると、(4.32) となる。

$$p = m \frac{dx}{dt} \quad (4.32)$$

(4.32) を t で微分すると、(4.33) となる。

$$\frac{dp}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (4.33)$$

一方、 p の時間変化 (4.34) を示す。

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \quad (4.34)$$

(4.27)、(4.34) より、(4.35) となる。

$$\frac{dp}{dt} = -kx \quad (4.35)$$

(4.33)、(4.35) より、(4.36) となる。

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (4.36)$$

(4.36) より、調和振動子のニュートン運動方程式が、再現される事が分かる。

4.3.2 付録、天体物理学

「天体物理学（てんたいぶつりがく、英語：astrophysics）は、天文学及び宇宙物理学の一分野で、恒星・銀河・星間物質などの天体の物理的性質（光度・密度・温度・化学組成など）や天体間の相互作用などを研究対象とし、それらを物理学的手法を用いて研究する学問である。宇宙物理学とも。天文学の中でも 19 世紀以降に始まった比較的新しい分野で、天文学の近代部門の代表的な分野と目されている。」
(Wikipedia より)

第 5 章

量子力学

ここでは、量子論的な調和振動子のエネルギー準位について説明する。理由は、統計力学で使用するからである。

「物理学における古典論とは、物理学の理論・手法において量子力学を陽に扱わないもののことである。対義語は量子論。」(Wikipedia より)

「量子論（りょうしろん）とは、ある物理量が任意の値を取ることができず、特定の離散的な値しかとることができない、すなわち量子化を受けるような全ての現象と効果を扱う学問である。粒子と波動の二重性、物理的過程の不確定性、観測による不可避な擾乱も特徴である。量子論は、マックス・プランクの量子仮説まで遡る全ての理論、モデル、概念を包括する。量子仮説は 1900 年に、例えば光や物質構造に対する古典物理学的説明が限界に来ていたために産まれた。」(Wikipedia より)

「シュレーディンガー方程式（シュレーディンガーほうていしき、英: Schrödinger equation）とは、物理学の量子力学における基礎方程式である。シュレーディンガー方程式という名前は、提案者であるオーストリアの物理学者エルヴィン・シュレーディンガーにちなむ。1926 年にシュレーディンガーは量子力学の基礎理論に関する一連の論文を提出した。」「シュレーディンガー方程式の解は一般的に波動関数と呼ばれる。波動関数はまた状態関数とも呼ばれ、量子系（電子など量子力学で取り扱う対象）の状態を表す。シュレーディンガー方程式は、ある状況の下で量子系が取り得る量子状態を決定し、また系の量子状態が時間的に変化していくかを記述する。あるいは、波動関数を量子系の状態を表すベクトルの成分と見た場合、シュレーディンガー方程式は状態ベクトルの時間発展方程式に置き換えられる。状態ベクトルによる記述は波動関数を用いた場合と異なり物理量の表現によらないため、より一般的である。シュレーディンガー方程式では、波動関数や状態ベクトルによって表される量子系の状態が時間とともに変化するという見方をする。状態が時間変化するという考え方はシュレーディンガー描像と呼ばれる。」(Wikipedia より)

5.1 シュレーディンガー方程式

シュレーディンガー方程式について説明する。

5.1.1 シュレーディンガー方程式

古典論から量子論へ移行する。量子論でよく使われるシュレーディンガー方程式 (5.1) を示す。

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{H}(-i\hbar \nabla, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.1)$$

(5.1) では、系のハミルトニアンを変更している。変更点 (5.2) を示す。

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (5.2)$$

なお、 $\psi[\text{m}^{-3/2}]$ は重りの状態を表す波動関数、 i は虚数単位、 $\hbar[\text{J}\cdot\text{s}]$ はプランク定数、 $\mathbf{r}[\text{m}]$ は変位、 $t[\text{s}]$ は時間、 $\nabla[\text{m}^{-1}]$ はナブラ演算子である。

5.1.2 時間に依存しないシュレーディンガー方程式

(5.1) を簡略化する。ここで、 $E[\text{J}]$ は系のエネルギー固有値、 ϕ は E に対応する波動関数である。 $\psi[\text{m}^{-3/2}]$ を ϕ で表記した (5.3) を示す。

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \phi(\mathbf{r}) \quad (5.3)$$

(5.1)、(5.3) より、(5.4) となる。

$$\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) E\phi(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \mathcal{H}(-i\hbar \nabla, \mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \quad (5.4)$$

(5.4) より、(5.5) となる。

$$\mathcal{H}(-i\hbar \nabla, \mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \quad (5.5)$$

(5.5) が、時間に依存しないシュレーディンガー方程式である。

5.1.3 付録、流体力学

「流体力学（りゅうたいりきがく、英: fluid dynamics / fluid mechanics）とは、流体の静止状態や運動状態での性質、また流体中での物体の運動を研究する、力学の一分野。」(Wikipedia より)

5.2 量子論的な調和振動子のハミルトニアン

一次元の量子論的な調和振動子のハミルトニアンについて説明する。波動関数は $\phi[m^{-1/2}]$ となる。

5.2.1 量子論的な調和振動子のハミルトニアン

量子論的な調和振動子のハミルトニアンを簡略化する。ハミルトニアン (5.6) を示す。

$$\mathcal{H}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (5.6)$$

(5.6) の右辺から、 $\frac{\hbar\omega}{2}$ をくくり出すと、(5.7) となる。

$$\mathcal{H}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x) = \frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2 \right] \quad (5.7)$$

(5.7)、(5.9) より、(5.8) となる。

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right] \quad (5.8)$$

ξ の定義 (5.9) を示す。

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (5.9)$$

(5.8) が簡略化された量子論的な調和振動子のハミルトニアンである。以降、「量子論的な」という言葉は省略する。

5.2.2 調和振動子のシュレーディンガー方程式

調和振動子のシュレーディンガー方程式を簡略化する。シュレーディンガー方程式 (5.10) を示す。

$$\mathcal{H}\phi(\xi) = E\phi(\xi) \quad (5.10)$$

(5.8)、(5.10) より、(5.11) となる。

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right] \phi(\xi) = E\phi(\xi) \quad (5.11)$$

(5.11) が、簡略化された調和振動子のシュレーディンガー方程式である。

5.2.3 付録、特殊相対性理論

「特殊相対性理論（とくしゅそうたいせいりろん、独: Spezielle Relativitätstheorie、英: Special relativity）とは、慣性運動する観測者が電磁気学的現象および力学的現象をどのように観測するかを記述する、物理学上の理論である。アルベルト・アインシュタインが1905年に発表した論文に端を発する。特殊相対論と呼ばれる事もある。」(Wikipedia より)

5.3 調和振動子のシュレーディンガー方程式代入編

調和振動子のシュレーディンガー方程式の解について説明する。

5.3.1 調和振動子のシュレーディンガー方程式代入編

調和振動子のシュレーディンガー方程式 (5.12) に、さまざまな波動関数 $\phi(\xi)$ を代入し、それぞれに対応するエネルギー固有値 E を求めた結果が、(5.13)、(5.14)、(5.15)、(5.16) である。シュレーディンガー方程式 (5.12) を示す。

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right] \phi(\xi) = E\phi(\xi) \quad (5.12)$$

波動関数その 1 (5.13) を示す。

$$\phi(\xi) = \xi \exp(+\frac{1}{2}\xi^2) \rightarrow E = -\frac{3\hbar\omega}{2} \quad (5.13)$$

波動関数その 2 (5.14) を示す。

$$\phi(\xi) = \exp(+\frac{1}{2}\xi^2) \rightarrow E = -\frac{\hbar\omega}{2} \quad (5.14)$$

波動関数その 3 (5.15) を示す。

$$\phi(\xi) = \exp(-\frac{1}{2}\xi^2) \rightarrow E = +\frac{\hbar\omega}{2} \quad (5.15)$$

波動関数その 4 (5.16) を示す。

$$\phi(\xi) = \xi \exp(-\frac{1}{2}\xi^2) \rightarrow E = +\frac{3\hbar\omega}{2} \quad (5.16)$$

規格化出来ない (5.13)、(5.14) は、物理的な解ではない。規格化とは、波動関数の確率解釈が出来るようにすることである。(定数) $\times$ (解) もまた (解) である。規格化の条件式 (5.17) を示す。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 \quad (5.17)$$

一般に、 $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$ に物理的な解があることが知られている。

5.3.2 付録、一般相対性理論

「一般相対性理論 (いっばんそうたいせいりろん、独: allgemeine Relativitätstheorie, 英: general theory of relativity) は、アルベルト・アインシュタインが 1905 年の特殊相対性理論に続いて、それを発展させ 1915 年から 1916 年にかけて発表した物理学の理論である。一般相対論 (いっばんそうたいろん、英: general relativity) とも。」 (Wikipedia より)

5.4 調和振動子のシュレーディンガー方程式の一般解

調和振動子のシュレーディンガー方程式の一般解について説明する。

5.4.1 調和振動子のシュレーディンガー方程式の一般解

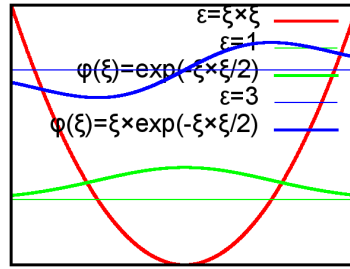


図 5.1 エネルギー固有値と波動関数

調和振動子のシュレーディンガー方程式 (5.18) のエネルギー固有値 E を求める。

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right] \phi(\xi) = E\phi(\xi) \quad (5.18)$$

波動関数 (5.19) を示す。

$$\phi(\xi) = u(\xi) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (5.19)$$

(5.19) を微分すると、(5.20) となる。

$$\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} = \left[\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi} - \xi u(\xi) \right] \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (5.20)$$

(5.20) を微分すると、(5.21) となる。

$$\frac{\partial^2 \phi(\xi)}{\partial \xi^2} = \left[\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi} + (\xi^2 - 1)u(\xi) \right] \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (5.21)$$

(5.19)、(5.21) を (5.18) に代入すると、(5.22) となる。

$$-\left[\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi} + (\xi^2 - 1)u(\xi) \right] + \xi^2 u(\xi) = \epsilon u(\xi) \quad (5.22)$$

(5.22) 中の ϵ の定義 (5.23) を示す。

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (5.23)$$

$u(\xi)$ のべき乗展開 (5.24) を示す。

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k \quad (5.24)$$

(5.22)、(5.24) より、(5.25) となる。

$$(k+2)(k+1)c_{k+2} - (2k+1-\epsilon)c_k = 0 \quad (5.25)$$

数列 c_k を、 $k > n$ で 0 となると仮定すると、(5.26) となる。

$$\epsilon = 2n + 1 \quad (5.26)$$

数列 c_k が永遠に 0 でないと、波動関数が規格化出来なくなるそうである。(5.23)、(5.26) より、(5.27) のエネルギー固有値 E_n に物理的な解があることが分かる。

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.27)$$

波動関数の具体的な導出は省略する。以降、系がエネルギー固有値 E_n に対応する波動関数で表されるとき、「系は状態 n である」と略記する。

5.4.2 付録、場の量子論

「場の量子論（ばのりょうしろん、英：Quantum Field Theory）は、量子化された場（素粒子物理ではこれが素粒子そのものに対応する）の性質を扱う理論である。」(Wikipedia より)

第 6 章

統計力学

ここでは、調和振動子のエネルギー期待値について説明する。理由は、物質の熱量を求めるためである。

「正準集団（せいじゅんしゅうだん、英語: canonical ensemble）とは、統計力学において、外界との間でエネルギーを自由にやり取り出来る閉鎖系を無数に集めた統計集団である。英語のカタカナ転写でカノニカルアンサンブルと呼ばれることも多い。」「正準集団は等温条件にある熱力学系を表現する統計集団であり、外界の温度をパラメータとして特徴付けられる。」(Wikipedia より)

「系が熱を交換する外界は熱浴 (heat bath) と呼ばれ、質量を交換する外界は粒子浴 (particle bath) と呼ばれる。」(Wikipedia より)

「小正準集団（しょうせいじゅんしゅうだん）、ミクロカノニカルアンサンブル（英: microcanonical ensemble）は、統計力学における系の微視的状态を表現する統計集団の一つである。この統計集団が従う確率分布を小正準分布（しょうせいじゅんぶんぷ）、ミクロカノニカル分布（英: microcanonical distribution）という。小正準集団は孤立系に対応する統計集団である。」(Wikipedia より)

「大正準集団（だいせいじゅんしゅうだん、英語: grand canonical ensemble）とは、統計力学において、外界との間でエネルギーと物質を自由にやり取りできる開放系を無数に集めた統計集団である。グランドカノニカルアンサンブルとも呼ばれる。」「大正準集団は等温等化学ポテンシャル条件にある系を表現する統計集団であり、外界の温度と化学ポテンシャルをパラメータとして特徴付けられる。」(Wikipedia より)

「気体分子運動論（きたいぶんしゅうどうろん、英語: kinetic theory of gases）は、原子論の立場から気体を構成する分子の運動を論じて、その気体の巨視的性質や行動を探究する理論である。気体運動論や分子運動論とも呼ばれる。最初は単一速度の分子群のモデルを使ってボイルの法則の説明をしたりしていたが、次第に一般化され、現今では速度分布関数を用いて広く気体の性質を論ずる理論一般をこの名前で呼ぶようになっている。」(Wikipedia より)

6.1 正準集団

正準集団について説明する。

6.1.1 正準集団

ここで、 $S_n[\text{J}\cdot\text{K}^{-1}]$ は系が状態 n にあるときの、熱浴のエントロピーである。 $k_B[\text{J}\cdot\text{K}^{-1}]$ はボルツマン定数である。 W_n は系が状態 n にあるときの、熱浴の状態数である。 $E_n[\text{J}]$ は系が状態 n にあるときの、系のエネルギーである。 $S_B[\text{J}\cdot\text{K}^{-1}]$ は系が $E_n = 0$ にあるときの、熱浴のエントロピーである。 $T[\text{K}]$ は熱浴と系の温度である。 P_n は系が状態 n にある確率である。 $\beta = \frac{1}{k_B T}[\text{J}^{-1}]$ である。 $E[\text{J}]$ は系のエネルギーの期待値である。統計力学の基礎方程式 (6.1) を示す。

$$S_n = k_B \log W_n \quad (6.1)$$

(6.1) を変形すると、(6.2) となる。

$$W_n = \exp\left(\frac{S_n}{k_B}\right) \quad (6.2)$$

(6.2) を E_n で表現すると、(6.3) となる。

$$W_n = \exp\left(\frac{S_B}{k_B} - \frac{\partial S}{\partial E} \frac{E_n}{k_B}\right) \quad (6.3)$$

(6.3)、(3.3) より、(6.4) となる。

$$W_n = \exp\left(\frac{S_B}{k_B} - \frac{E_n}{k_B T}\right) \quad (6.4)$$

P_n を (6.4) で表現すると、(6.5) となる。

$$P_n = \frac{\exp(-\frac{E_n}{k_B T})}{\sum_m \exp(-\frac{E_m}{k_B T})} \quad (6.5)$$

ここで、 $\exp(-\frac{E_n}{k_B T})$ はボルツマン因子と呼ばれる。 β の定義、(6.5)、(6.7) より、(6.6) となる。

$$P_n = \frac{\exp(-\beta E_n)}{Z} \quad (6.6)$$

ここで、 Z は分配関数と呼ばれる。その定義 (6.7) を示す。

$$Z = \sum_m \exp(-\beta E_m) \quad (6.7)$$

系のエネルギー E を計算する。(6.6) より、(6.8) となる。

$$E = \frac{\sum_n E_n \exp(-\beta E_n)}{Z} \quad (6.8)$$

(6.8) の右辺の分子を変形すると、(6.9) となる。

$$E = -\frac{\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n \exp(-\beta E_n)}{Z} \quad (6.9)$$

(6.7)、(6.9) より、(6.10) となる。

$$E = -\frac{\frac{\partial}{\partial \beta} Z}{Z} \quad (6.10)$$

(6.10) より、(6.11) となる。

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \quad (6.11)$$

(6.11) より、系のエネルギーの期待値 E は、系の分配関数 Z より計算出来る事が分かる。

6.1.2 付録、物性物理学

「物性物理学（ぶっせいぶつりがく）は、物質のさまざまな巨視的性質を微視的な観点から研究する物理学の分野。量子力学や統計力学を理論的基盤とし、その理論部門を物性論（ぶっせいろん）と呼ぶことも多い。これらは日本の物理学界独特の名称であるが、しばしば凝縮系物理学に比定される。狭義には固体物理学を指し、広義には固体物理学（結晶・アモルファス・合金）およびソフトマター物理学・表面物理学・物理化学、プラズマ・流体力学などの周辺分野を含む。」（Wikipedia より）

6.2 固体原子の振動

固体原子の振動について説明する。

6.2.1 固体原子の振動

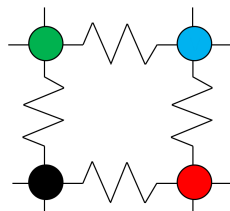


図 6.1 固体原子の模型

アインシュタイン模型 (図 6.1)。固体原子間の結合を調和振動子で近似し、これが固体の熱エネルギーとなると仮定する。ここでは 1 自由度の熱エネルギーを計算する。(5.27) より成立する (6.12) を示す。

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.12)$$

分配関数の定義 (6.13) を示す。

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n) \quad (6.13)$$

(6.13) に (6.12) を代入すると、(6.14) となる。

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\beta \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (6.14)$$

(6.14) より、(6.15) となる。

$$Z = \frac{\exp(-\beta \frac{\hbar\omega}{2})}{1 - \exp(-\beta \hbar\omega)} \quad (6.15)$$

(6.15) の対数を計算すると、(6.16) となる。

$$\log Z = -\beta \frac{\hbar\omega}{2} - \log[1 - \exp(-\beta \hbar\omega)] \quad (6.16)$$

エネルギー E を計算する。(6.11)、(6.16) より、(6.17) となる。

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ -\beta \frac{\hbar\omega}{2} - \log[1 - \exp(-\beta \hbar\omega)] \right\} \quad (6.17)$$

(6.17) より、(6.18) となる。

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega \exp(-\beta \hbar\omega)}{1 - \exp(-\beta \hbar\omega)} \quad (6.18)$$

(6.18) より、(6.19) となる。

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1} \quad (6.19)$$

(6.19) に $\beta = \frac{1}{k_B T}$ を代入すると、(6.20) となる。

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - 1} \quad (6.20)$$

$k_B T$ が $\hbar\omega$ より圧倒的に大きい場合、(6.20) は (6.21) となる。なお、近似を $\approx$ で表す。

$$E \approx \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1} \quad (6.21)$$

$k_B T$ が $\hbar\omega$ より圧倒的に大きい場合、(6.21) は (6.22) となる。

$$E \approx k_B T \quad (6.22)$$

(6.22) より、 $k_B T$ が $\hbar\omega$ より圧倒的に大きい場合、熱エネルギー E は温度 T に比例する事が分かる。

6.2.2 付録、量子コンピュータ

「量子コンピュータ（りょうしコンピュータ、英: quantum computer）（量子計算機）は、重ね合わせや量子もつれと言った量子力学的な現象を用いて従来のコンピュータでは現実的な時間や規模で解けなかった問題を解くことが期待されるコンピュータ。「量子ゲート」を用いて量子計算を行う原理のものについて研究がさかんであるが、他の方式についても研究・開発は行われている。」（Wikipedia より）

参考文献

- [1] 喜多秀次、宮武義郎、徳岡善助、山崎和夫、播野茂明共著「力学」(学術図書出版社,1988)
- [2] 十河清、和達三樹、出口哲生共著「ゼロからの力学 I」(岩波書店,2005,ISBN9784000066969)
- [3] 十河清、和達三樹、出口哲生共著「ゼロからの力学 II」(岩波書店,2005,ISBN9784000066976)
- [4] 後藤憲一、山崎修一郎共編「電磁気学演習」(共立出版,1988)
- [5] 十河清、和達三樹、出口哲生共著「ゼロからの電磁気学 I」(岩波書店,2006,ISBN9784000066983)
- [6] 十河清、和達三樹、出口哲生共著「ゼロからの電磁気学 II」(岩波書店,2006,ISBN9784000066990)
- [7] 芦田正巳著「熱力学を学ぶ人のために」(オーム社,2008,ISBN9784274067426)
- [8] 十河清、和達三樹、出口哲生共著「ゼロからの熱力学と統計力学」(岩波書店,2005, ISBN9784000067003)
- [9] 西野友年著「ゼロから学ぶ解析力学」(講談社, 2009, ISBN9784061546844)
- [10] 江沢洋著「解析力学」(培風館, 2007, ISBN9784563024369)
- [11] 小出昭一郎著「量子力学 (I)」(裳華房,1969,ISBN9784785321055)
- [12] 小出昭一郎著「量子力学 (II)」(裳華房,1969,ISBN9784785321062)
- [13] 猪木慶治、河合光著「量子力学 I」(講談社,1994,ISBN9784061532090)
- [14] 猪木慶治、河合光著「量子力学 II」(講談社,1994,ISBN9784061532120)
- [15] 加藤岳生著「ゼロから学ぶ統計力学」(講談社,2013,ISBN9784061546769)
- [16] 西條敏美著「単位の成り立ち」(恒星社厚生閣,2009,ISBN9784769910992)
- [17] 奥村晴彦、黒木裕介著「 $\text{\LaTeX}$ 2_ε 美文書作成入門」(技術評論社,2017,ISBN9784774187051)
- [18] 山本昌志著「gnuplot の精義」(カットシステム,2013,ISBN9784877833046)
- [19] 結城浩著「数学文章作法基礎編」(ちくま学芸文庫,2013,ISBN9784480095251)
- [20] 結城浩著「数学文章作法推敲編」(ちくま学芸文庫,2014,ISBN9784480095268)

索引

アインシュタイン模型, 39
アンペールの法則, 14

位置エネルギー, 10
一般相対性理論, 33

運動エネルギー, 9
運動量, 4
運動量保存則, 11

エネルギー, 4
演算子ナブラ (∇), 15
エントロピー, 22

外積, 4, 13
解析力学, 1
ガウスの法則, 14
角運動量, 4
角運動量保存則, 12
角周波数, 5
掛け算の微分, 10
完全微分, 22

気体分子運動論, 36
基本単位, 22
逆関数の微分, 8

組立単位, 22

合成関数の微分, 8
古典論, 30

作用反作用の法則, 11

指数関数の拡張版, 26
指数関数の微分, 23
質点, 4
磁場, 14
シュレーディンガー方程式, 30
小正準集団, 36

正弦関数の微分, 6
正準集団, 36

対数関数の微分, 26
大正準集団, 36
足し算の微分, 10

置換積分, 10
調和振動子のエネルギー保存則, 9
調和振動子の挙動, 5
調和振動子のハミルトニアン, 28

定数の微分, 13
定積分, 21

電荷, 14
電磁気学, 1
電磁波, 16
電磁波のスペクトル, 19
天体物理学, 29
電場, 14

統計力学, 2
等比数列の和, 26
特殊相対性理論, 32

2 回微分, 17
ニュートンの運動方程式, 5
ニュートンの運動方程式を解く, 7

熱浴, 36
熱力学, 1
熱力学温度, 22
熱力学の基礎方程式, 23
熱力学の計算, 23

場の量子論, 35
ハミルトニアン, 24, 27
ハミルトンの運動方程式, 27

微分, 19
微分と積分, 19

ファラデーの電磁誘導の法則, 14
物性物理学, 38
不定積分, 21
部分積分, 21
分配関数, 37

平面電磁波, 18
ベキ乗関数の微分, 13
ベクトル解析, 15
偏微分, 19
変分原理, 24, 25
変分法, 24

ボルツマン因子, 37

マクスウェルの関係式, 23
マクスウェル方程式, 16
マクローリン展開, 26

余弦関数の微分, 8

ラグランジアン, 25
ラグランジュ方程式, 25
ラグランジュ力学, 24

力学, 1
流体力学, 31

量子コンピュータ, 40

量子力学, 2

量子論, 30

連続の式, 20