

熱力学の基礎

藤田 丈久

(よろず物理研究所)

はじめに

この小ノートは『教養物理学の基礎』の第5章を抜粋したものに、統計力学の基礎問題の考察を少し付け加えてまとめ直したものである。熱力学は現象論であるため、それを理解する事が非常に難しいものとなっている。しかし、熱力学の基礎は『 $\frac{\delta Q}{T}$ が経路に依らない』と言う事である。そしてこれが事実上、熱力学の最も重要な実験事実であり、熱力学の第1法則となっている。

また、この現象論をある程度、統計力学の言葉で解説する事は可能であると考えている。ところが、統計力学はその基礎に量子力学を仮定しているため、量子力学の知識がどうしても必要となっている。その意味では統計力学の計算においては量子力学のエネルギー固有値をきちんと理解している事が前提となっている。

一方、統計力学における観測量は分配関数で平均を取る事により求められている。従って、統計力学を理解するためにはその平均操作の計算技術をしっかり自分のものにすることが必要がある。ここでは、読者がその技術をうまく使いこなすことができるようにと付録に数学のまとめを入れてある。

第5章では統計力学の基礎的な問題に関して、少し議論している。これらは古くて新しい問題ではあるが、明確な回答があるとは言えないものでもある。しかしこれは物理をより深く理解するために何らかの形でプラスになって来るものと考えている。

目次

第1章 熱力学	1
1.1 熱量	1
1.1.1 内部エネルギー U	1
1.1.2 圧力 P	2
1.1.3 地球の重力と気体の圧力	2
1.2 熱力学の法則	3
1.2.1 熱力学の第1法則	3
1.3 エントロピー S の導入	4
1.3.1 熱力学の第2法則	4
1.4 熱力学関数	5
1.4.1 内部エネルギー U	5
1.4.2 ヘルムホルツの自由エネルギー F	5
1.4.3 その他の熱力学関数	5
第2章 統計力学	6
2.1 統計力学の目的	6
2.2 ヘルムホルツの自由エネルギー F と分配関数 Z	7
2.3 分布関数	8
2.3.1 ミクロカノニカル集団	8
2.4 カノニカル分布	9
2.5 エントロピー	10
2.5.1 エントロピーと観測量	10
2.5.2 n 状態の確率 p_n によるエントロピー	10
2.6 統計力学の例題	11
2.6.1 理想気体：ミクロカノニカル集団	11
2.6.2 理想気体：カノニカル集団	12
2.6.3 熱容量	13

第 3 章 熱伝導	14
3.1 熱伝導	14
3.1.1 物質の流れはない熱伝導	14
3.2 フーリエの法則	15
3.2.1 熱量の移動	15
3.2.2 注意書き	16
3.3 真空中の熱移動	16
3.3.1 プランクの公式	16
3.4 粒子数変化と化学ポテンシャル	18
第 4 章 経済物理学	19
4.1 ブラック・ショールズの方程式	19
4.1.1 ブラック・ショールズの方程式	20
4.2 ランダム行列とゆらぎの分布関数	20
4.2.1 量子論のハミルトニアン	21
4.3 リスク管理	22
4.3.1 不一致の原因	23
第 5 章 統計力学の基礎問題	24
5.1 スピンと統計	25
5.1.1 フォトンとボーズ統計	25
5.1.2 フェルミ統計	25
5.1.3 複合粒子のスピンと統計	26
5.2 古典統計力学は物理的に意味があるか？	27
5.2.1 調和振動子	27
5.3 直感的理由	28
5.3.1 近似の段階	28
5.4 熱力学の演習問題	29
付 録 A 準備	30
A.1 関数とは？	30
A.2 微分	31
A.2.1 傾きの重要性	31
A.2.2 関数の微分	31
A.2.3 合成微分	32
A.3 積分	33

A.3.1	領域としての面積	33
A.3.2	積分の定義	33
A.3.3	数値積分	34
A.4	微分と積分の関係	35
A.5	ベクトル	36
A.5.1	ベクトルの内積 (スカラー積)	36
A.5.2	ベクトルの極座標表示	36
A.5.3	ベクトルの外積 (ベクトル積)	36
A.5.4	一般化されたベクトル	37
A.6	行列	38
A.6.1	行列の積	38
A.6.2	エルミート行列	38
A.6.3	エルミート行列の固有値は実数	39
A.6.4	エルミート行列の固有関数の直交性	39
A.6.5	パウリ行列	40
A.6.6	ユニタリー行列	40
A.6.7	実対称行列の対角化可能性の証明	40
A.7	オペレータの固有値と固有関数	41
A.7.1	固有値問題	41
A.7.2	同時固有関数	42
A.8	微分方程式	43
A.8.1	1回の微分方程式	43
A.8.2	2回の微分方程式	43
A.9	フーリエ展開	45
A.9.1	フーリエ展開の意味	45
A.9.2	スペクトル分解	45
付録 B	物理の数学	46
B.1	何故、偏微分か？	46
B.1.1	偏微分の定義	46
B.1.2	2変数関数の偏微分	46
B.1.3	偏微分の例題	47
B.2	座標系	48
B.3	回転座標系	48
B.3.1	回転座標系 $\hat{r}$ の計算	49
B.4	数学の公式	49

B.4.1	デルタ関数 $\delta(x)$ とクロネッカーデルタ δ_{ij}	49
B.4.2	ベクトルの内積と外積	49
B.4.3	ベクトルの公式	50
B.5	物理でよく使う積分公式	50
B.5.1	Exponential の積分	50
B.5.2	ガウス積分	50
B.5.3	その他の積分公式	51
B.6	n 次元球の体積	51
B.7	微分演算公式と座標系	52
B.7.1	直交座標系 (x, y, z)	52
B.7.2	極座標系 (r, θ, φ)	52
B.8	三角関数	53
B.9	指数関数と対数関数	53
B.10	テイラー展開	53
B.11	複素数と複素積分	54
B.11.1	複素数 z の定義	54
B.11.2	オイラーの公式	54
B.11.3	解析関数	54
B.12	線積分と面積分	55
B.13	ガウスの定理	55
B.13.1	立方体でのガウスの定理	56
B.13.2	一般の場合のガウスの定理	56
B.14	ストークスの定理	57
B.14.1	ストークスの定理の証明	57

第1章 熱力学

熱力学は自然現象を理解する上で重要な理論体系であるが、熱と言う概念は通常、日常生活で体験している割にはそう簡単に理解できるものではない。「熱」の問題を考え始めると、初年次の学生にとっては難しすぎるかも知れない。実際、専門家にとっても熱を物理的に正確に取り扱う事は容易な事ではない。ここでは熱力学 (thermodynamics) の物理とその基本的な方程式を統計力学 (statistical mechanics) の言葉を交えながら解説して行くが、その場合の物理過程は全て準静的 (熱力学系の状態変化がない) であるとしている。

1.1 熱量

熱量 (heat value) は通常、変化分で定義されている。今、それを δQ と書こう。ここで単原子からなる気体を考えて、それがあつた体積 V の中に閉じ込められているとしよう。

1.1.1 内部エネルギー U

この場合、気体の内部エネルギーを U としよう。気体の内部エネルギーとは気体分子の運動エネルギーのことであり、気体間の相互作用エネルギーはここでは考慮していない。この内部エネルギーの大きさ自体にはそれ程重要な物理的な意味はなく、内部エネルギーの変化分 dU が重要な物理量である。この微小な変化は微分に対応していて、熱量の場合の変化分 δQ とは異なっている。後で議論するように、この熱量の変化分 δQ はその仕事の経路に依存してしまい、積分と関係づける事ができない。

1.1.2 圧力 P

この体積の一端の面を考えて、その面積にかかる圧力 (pressure) を P としよう。圧力 P とは単位面積あたりに働く力である。すなわち、圧力 P に面積を掛けるとそれはその面積に働く力となっている。これは質点系の力学を学んだ学生には理解しにくいかも知れない。しかし、例えば、分子が壁に衝突している場合、平面全体が一様に力を受けていると考えれば、単位面積あたりの力という概念が物理的に意味を持っているのである。

1.1.3 地球の重力と気体の圧力

気体が地球上で平衡状態にあるのは、勿論、この気体に働く地球の重力と分子運動が釣り合っているからである。一方、水の場合は地球重力が勝っているため、地表面にしか存在しない。但し、水蒸気は水分子の集合体ではあるが、これはむしろ気体に近い振る舞いを持っていると言える。水蒸気の集合体がどの程度集まれば、雨滴になるかと言う問題は興味深いが、難しくて著者が答えられる問題ではない。

1.2 熱力学の法則

熱力学は実験から求められた経験法則をもとにして構築された理論体系である。従って、この熱力学の基本法則は常に正しいものとなっている。しかしながらこの法則は現象論的に求められているため、その基礎的な部分に立ち入ってくると、必ずしも明解とは言えない部分がある。特に、温度とは何かという疑問に対して、簡単には答えられない。ある程度は統計力学の言葉により理解できるが、しかし熱力学は基本的にはマクロスケール（長さとして cm を超える大きさ）の物理を扱うためこれは多体問題となっている。その多体系の平均値として熱力学があり、このため熱力学の方程式を厳密に理解する事は非常に難しい。これは古典力学でも事情は同じ場合があり、例えば乱気流を理論的に理解することはほとんど不可能である。

1.2.1 熱力学の第1法則

内部エネルギーの増加分 dU と圧力による仕事量 PdV を足したものが熱量の増加分になっている。これを δQ と書くと

$$\delta Q = dU + PdV \quad (1.1)$$

となっている。これはエネルギーの保存則を表していて、熱力学で最も重要な方程式であり熱力学の第1法則と呼ばれている。

● PdV は何故、仕事量か？： 式 (1.1) 右辺第2項が仕事量である事を確かめよう。仕事量はポテンシャルエネルギーと関係しているがこれは

$$\text{仕事量} = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} \quad (1.2)$$

と定義されている。ポテンシャルエネルギーとは符号が逆である事に注意しよう。この符号の違いは「仕事量は気体が外部（円筒の蓋）にしたエネルギー」である事と関係している。ポテンシャルエネルギーの場合は、外力、例えば重力が質点にした仕事になっているため符号が逆になっている。今、半径 r 、長さ ℓ の小円筒を考えて、この円筒の蓋は移動が可能であるとしよう。この円筒の端が力 F により dz だけ増加したとしよう。この時、この円筒面 πr^2 に対する圧力を P とすれば、仕事量は

$$\text{仕事量} = Fdz = P\pi r^2 dz = PdV \quad (1.3)$$

となっている。これは考えている系のエネルギー（熱量）が増えている事に対応している。従って、式 (1.1) が求められたのである。

1.3 エントロピー S の導入

式 (1.1) の熱量の増加分は実験的に「その仕事をする経路」に依ってしまいう事がわかっている．しかしながらこの熱量の増加分を温度 T で割った量

$$\frac{\delta Q}{T} \equiv dS \quad (1.4)$$

は経路に依らない事が実験的に証明されている．

この式 (1.4) の右辺で定義した S をエントロピー (entropy) と呼んでいる．このように、熱量の増加分を温度 T で割った量が経路 (path) によらないと言う実験事実は熱力学では最も重要であり、これが熱力学の本質である．一般的には式 (1.1) を

$$TdS = dU + PdV \quad (1.5)$$

と書いて、これを熱力学の第1法則と呼ぶ場合が多い．

1.3.1 熱力学の第2法則

導入したエントロピー S は微分としての数学的な取扱いが可能となっている．ここで、このエントロピー S はほとんど増大するという法則がある．エントロピー増大の法則とも呼ばれているが、これが熱力学の第2法則である．しかしこのことが物理学へどのような影響を与えているかと言う問題はそれ程明解とは言えない．むしろ、エントロピーの変化分 dS は経路には依らないと言う実験事実をしっかり理解する事が物理的には遥かに重要である．

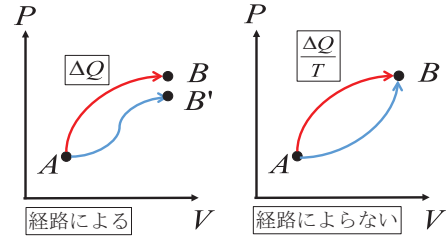


図 1.1: カルノーサイクル

1.4 熱力学関数

熱力学では式 (1.5) に微分の公式を使うと面白い関係式が求められる。式 (1.5) は微分学の立場からすると、エントロピー S が U と V の関数になっている事 ($S = S(U, V)$) を示している。この場合、数学の公式として

$$dS = \frac{\partial S}{\partial U} dU + \frac{\partial S}{\partial V} dV \quad (1.6)$$

が知られている。従って、これを式 (1.5) と比較すると次式が証明される。

$$\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{P}{T} \quad (1.7)$$

1.4.1 内部エネルギー U

式 (1.5) を書き直して $\boxed{dU = TdS - PdV}$ としてみよう。この時、エネルギー U は エントロピー S と体積 V の関数となっている。従って

$$\frac{\partial U}{\partial S} = T, \quad \frac{\partial U}{\partial V} = -P \quad \text{が証明される。}$$

1.4.2 ヘルムホルツの自由エネルギー F

ヘルムホルツ (Helmholtz) の自由エネルギー (free energy) F は

$$F = U - TS \quad (1.8)$$

で定義されている。この時、 $\boxed{dF = -SdT - PdV}$ が示される。これは自由エネルギー F が T と V の関数になっている事を示している。これは、自由エネルギー F が温度と体積の変化に対してどう反応するかを見る時に重要な役割を果たしている。この時、次式が証明される。

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -S, \quad \frac{\partial F}{\partial V} = -P \quad (1.9)$$

1.4.3 その他の熱力学関数

実際の応用としてはギブスの自由エネルギー $\boxed{G = F + PV}$ ($dG = -SdT + VdP$) やエンタルピー $\boxed{H = U + PV}$ ($dH = TdS + VdP$) などが良く使われている。どの変数を変化させるかに応じて (例えば G では T と P) それぞれ熱力学関数が定義されているからである。

第2章 統計力学

熱力学は実験的に見つかった現象を定式化したものであるため、どうしても基本的な式が『天下りの』になっていると言えよう。その定式化自体は現象そのものを表しているため、確かに正しいスキームになっている。しかし、物理学がより基本的な原理から出発して理解を深める学問である限り、熱力学をしっかりと基礎的な定式化により理解したいと考えるのは当然であろう。

ここでは熱力学で得られた幾つかの公式を統計力学の言葉で理解して行く事を考えて見よう。

2.1 統計力学の目的

統計力学の主要目的は系の分配関数 Z を計算する事である。 Z は

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (2.1)$$

で定義されている。物理的な観測量は分配関数 (partition function) によりその期待値として計算される。ここで E_n は状態 n におけるエネルギー固有値であり、 k はボルツマン定数である。エネルギーの平均 $\langle E \rangle$ は

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{Z} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \quad (2.2)$$

となる。この $\langle E \rangle$ は内部エネルギー U と考えてよい。 E_n は量子力学のエネルギー固有値であり「統計力学」という力学は存在しない事に注意しよう。

2.2 ヘルムホルツの自由エネルギー F と分配関数 Z

ヘルムホルツの自由エネルギー F は分配関数 Z によって

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (2.3)$$

と書かれる．ここでこの式 (2.3) を証明しておこう．エントロピー S は

$$S = -k \sum_n p_n \ln p_n, \quad \text{但し,} \quad p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad (2.4)$$

と n 状態の確率 p_n の言葉で書く事ができる．これより式 (2.4) を変形すると

$$\begin{aligned} S &= -k \sum_n \left[\frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \ln \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \right] = k\beta \sum_n \frac{E_n e^{-\beta E_n}}{Z} + k \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \ln Z \\ &= \frac{U}{T} + k \ln Z \end{aligned} \quad (2.5)$$

となっている．この式 (2.5) は $TS = U + kT \ln Z$ と変形できるので， F の定義式 $F = U - TS$ と比較してみると式 (2.3) が示される事がわかる．

2.3 分布関数

統計力学における観測量は平均値 (アンサンブル・アベレージ) である。従って、どの分布関数で平均するのと言う事だけが物理的な興味である。実際には分布関数としてカノニカル分布が一義的に決まってしまうので、その意味においては統計力学は単純明快である。

2.3.1 ミクロカノニカル集団

まず、ミクロカノニカル集団 (孤立系) を考えて、その状態数を $W(E_t)$ としよう。この時、 E_t はその孤立系の全エネルギーである。この系の中で、微小な部分を考えて、その微小部分のエネルギーを E とする。

この時、この微小部分が実現される確率 $p(E)$ は

$$p(E) = \frac{W(E_t - E)}{W(E_t)} = \exp [\ln(W(E_t - E)) - \ln W(E_t)] \quad \text{である。}$$

ここで確率 $p(E)$ は $p(0) = 1$ を満たしている。また、 $\exp$ 化したのはカノニカル分布が導出される事を予想しているためである。ここで重要な事は「微小部分が実現される確率 $p(E)$ の計算において $W(E)$ の関数形が E_t と $E_t - E$ で同じである」と言う仮定である。これは恐らくは E が E_t と比べて十分小さいと仮定している事から正当化されるものと考えてよい。

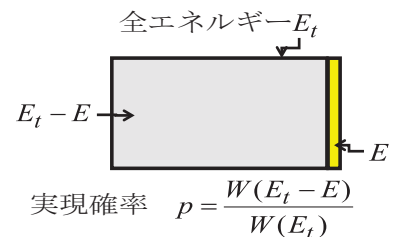


図 2.1: カノニカル分布導出

2.4 カノニカル分布

E は微小量であるためその状態数が $W(E)$ で与えられるとは限らない． $W(E_t - E)$ はその関数形として $W(E_t)$ と同じと仮定して十分意味があると考えられるが，これと $W(E)$ は全く別物である可能性が高い．実際問題として微小部分の状態数は $W(E_t)$ の関数形からは予想出来ないと言う事である．今， E が E_t と比べて十分小さいので展開すると

$$\begin{aligned} p(E) &\simeq \exp \left[\ln \left(W(E_t) - \left(\frac{\partial W(E)}{\partial E} \right)_{E=E_t} E \right) - \ln W(E_t) \right] \\ &\simeq \exp \left[- \left(\frac{\partial \ln W(E)}{\partial E} \right)_{E=E_t} E \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる．これから見ても，確かに分布関数は

$$p(E) \simeq \exp(-aE) \quad (2.7)$$

の形をしており，これがカノニカル分布に対応している．この時，観測されているカノニカル分布と一致するとするならば

$$a = \frac{1}{kT} = \frac{\partial \ln W(E)}{\partial E} \quad \text{である事がわかる.}$$

2.5 エントロピー

この分布関数を熱力学に結びつける事を考える．熱力学の基本方程式は $TdS = dE + pdV$ であった．この式と数学の微分公式より $\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$ である事がわかっている．従って、 $\frac{\partial \ln W(E)}{\partial E} = \frac{1}{kT}$ と比較すると $S = k \ln W$ の関係式が予想される．即ち、統計物理において分布関数がカノニカル分布である事を要求し、さらにその係数 a は熱力学の公式から予測される $\frac{1}{kT}$ と同じであるとするとき、エントロピーが状態数の Log に比例する事がわかる．

2.5.1 エントロピーと観測量

この時、 S のエネルギー依存性を考える事が重要である．即ち、

$$S(E) = k \ln W(E) \quad (2.8)$$

におけるエネルギー E はミクロカノニカルなエネルギー E_t である．従って、 S 自体は物理的な観測量に直接は結びつかない．観測量に結びつくのは S の変化分 ΔS つまりその微分値のみである．従って、エントロピーの取り扱いには十分な注意深さが必要である．

2.5.2 n 状態の確率 p_n によるエントロピー

エントロピー $S(E)$ を n 状態の確率 p_n により

$$S(E) = -k \langle \ln p_n \rangle \quad (2.9)$$

と定義しよう． $\langle * \rangle$ は状態平均を表している．これがミクロカノニカルな確率だとすれば $S = -k \ln p = k \ln W$ になっていて、式 (2.8) と一致している．実際は、 n 状態の確率 p_n によって平均する必要がある．これは

$$S(E) = -k \langle \ln p_n \rangle = -k \sum_n p_n \ln p_n \quad (2.10)$$

となっていて、式 (2.4) そのものである．

2.6 統計力学の例題

熱力学および統計力学において重要な問題は理想気体 (ideal gas) である。これをきちんと理解する事が最も重要であり、統計力学の目的の大半を占めている。ここではその基本を見据えるとともに、統計力学がどのように応用されているかという具体的な例題も議論しよう。但し、この場合、統計操作の本質と直感的に関連する部分を主に取り扱って行こう。

2.6.1 理想気体：ミクロカノニカル集団

質量 m の N 個の粒子が一辺が L の立方体の中に閉じ込められているとしよう。この時、エネルギーが E の場合の状態数 $W(E)$ の計算を実行しよう。状態数の計算法は体積が充分大きいとして和を積分で置き換える

$$\sum_n = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3p \quad (2.11)$$

の公式を用いている。この時、状態数 $W(E)$ は

$$W = \frac{1}{N!} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^{3N} \int_{p_1^2 + \dots + p_N^2 \leq 2mE} d^3p_1 \cdots d^3p_N \quad (2.12)$$

となる。 $N!$ で割り算しているのは粒子の区別ができないためである。

● 同種粒子： 状態数の計算において、量子統計では $N!$ での割り算が自然に理解できている。しかしながら古典統計ではこの因子を理解することは容易ではない。古典力学には「状態」という概念が存在しないからである。このことは「古典統計力学」は物理的に定義できていない事を意味している。実際、位相空間の積分が状態数の和に一致するのは、自由粒子の場合の特殊性である。この教科書では、古典統計の記述はすべて省く事にしている。

● 半径 R の N 次元球の体積： ここで 半径 R の N 次元球の体積 $V(R)$ は $V(R) = \frac{\pi^{\frac{N}{2}}}{\Gamma(\frac{N}{2}+1)} R^N$ と書ける事が簡単に示される。この式の証明はある数学の技術を用いており、付録 (B.6) で解説しているので参照して欲しい。よって状態数 $W(E)$ は

$$W(E) = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3N} \frac{(2\pi mE)^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} \quad \text{となる。}$$

● エントロピー S : エントロピー S は $S = k \ln W(E)$ であり, また式 (1.7) より $\boxed{\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{P}{T}}$ だから

$$\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{kN}{V} \quad (2.13)$$

となっている. これは $PV = NkT$ であり理想気体の状態方程式である.

2.6.2 理想気体：カノニカル集団

質量 m の N 個の粒子が温度 T で一辺 L の立方体の中に閉じ込められているとしよう. この時, 分配関数 Z は

$$Z = \left(\sum_n e^{-\beta E_n} \right)^N \quad (2.14)$$

で与えられている. 但し $E_n = \frac{p^2}{2m}$, $(p = \frac{2\pi\hbar}{L}n)$ である. また式 (2.11) で示されたように状態和は運動量積分となる. この計算は

$$\sum_n e^{-\beta E_n} = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 \int e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} d^3p = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 \times \left(\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right)^3$$

となるので, 分配関数 Z は $\boxed{Z = \left(V \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right)^3 \right)^N}$ である. よって

$$\ln Z = N \ln V - \frac{3N}{2} \ln \beta + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2m\pi}{(2\pi\hbar)^2} \right) \quad (2.15)$$

となっている. 一方, ヘルムホルツの自由エネルギー F は式 (2.3)

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (2.16)$$

で与えられているので, その立方体の面における圧力 P は式 (1.7) より

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{NkT}{V} \quad (2.17)$$

となる. よって $PV = NkT$ となり, これは理想気体の状態方程式である.

2.6.3 熱容量

ある系を考えた場合、温度 T の時にどれだけエネルギーを蓄える事ができるかという物理量の事を熱容量 (heat capacity) と呼び

$$C_X = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_X \quad (2.18)$$

と定義されている。ここで X は条件式を意味している。例えば C_V は体積を一定にした定積熱容量 (比熱) を表している。

● 単原子分子の定積熱容量： 温度 T の単原子分子集団の定積熱容量を計算しよう。まず、この気体の内部エネルギー U は

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (2.19)$$

で与えられているので、式 (2.15) より

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{3N}{2} kT \quad (2.20)$$

となっている。よって定積熱容量 C_V は $C_V = \frac{3kN}{2}$ と求まる。

第3章 熱伝導

ここでは熱力学を少し超えた問題について議論して行こう。熱伝導は物理学としては相当、難しいものと考えている。熱の流れと言っても、それが何なのか今一、はっきりとは解説できないのである。しかし重要である事には変わらないので、最小限の議論となっている。

3.1 熱伝導

熱力学は通常、温度 T で定義されたある体積中の物質についての物理である。しかし日常生活でよく見る現象は熱の伝達である。この熱伝導 (heat conduction) は2個以上の物質系が接している場合に起こる現象である。

3.1.1 物質の流れはない熱伝導

ここで議論する熱伝導は1次元系のエネルギーの流れとして考えている。2個の物質系がそれぞれ異なった温度で境界面で接触しているとしよう。この場合、物質は移動しないでエネルギーだけが移動すると仮定している。

● エネルギー (熱量) の流れ q : 今、単位時間あたりの熱量の流れを q としよう。この時、単位長さあたりの内部エネルギーを u とすると、そこには流れの保存則 (連続方程式) が成り立っている (内部エネルギーの時間変化が熱量の流れに一致すると言う法則)。これは

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

と書かれている。ちなみに3次元では $\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0$ となっていて、電荷の連続方程式 ($\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) と同じ形になっている。

3.2 フーリエの法則

熱量の流れ q と温度勾配の間には現象論的な法則が知られている。これは

$$q = -\kappa \frac{\partial T(t, x)}{\partial x} \quad (3.2)$$

という関係式でフーリエ (Fourier) の法則と言う。ここで κ は熱伝導率である。また、内部エネルギー u と温度関数 $T(t, x)$ の間には、式 (2.18) からわかるように定積比熱 c_v (但し、単位長さあたり) により

$$u = c_v T(t, x) \quad (3.3)$$

という関係式がなりたつ。これら q, u を式 (3.1) に代入すると

$$c_v \frac{\partial T(t, x)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T(t, x)}{\partial x^2} \quad (3.4)$$

という熱伝導の方程式が求まる。

3.2.1 熱量の移動

微小熱量移動 ΔQ は式 (3.2) より、

$$\Delta Q = q \Delta x = -\kappa \Delta T \quad (3.5)$$

となっている。これは熱量移動が温度差 ΔT に比例している事を示している。夏に 30 °C と 37 °C で体感温度は大きく異なっている。この理由としては、熱量放射が温度差に比例している事が挙げられるだろう。熱量移動はその差に比例しているので、人間の体温 36.5 °C と比べてみると

$$30 \text{ °C} \Rightarrow \Delta T = (36.5 - 30) = 6.5 \text{ より } \Delta Q = 6.5\kappa \quad (3.6)$$

$$37 \text{ °C} \Rightarrow \Delta T = (36.5 - 37) = -0.5 \text{ より } \Delta Q = -0.5\kappa \quad (3.7)$$

となっている。このため、37 °C では熱量の移動がなくなってしまい、これでは非常に暑く感じるのは当然であろう。

3.2.2 注意書き

ここで二つのコメントをしておこう。

- (1) フーリエの法則は実験を記述している現象論的な経験法則である。これは電磁気学における「オームの法則」に近いものであるが、このオームの法則も実は、理論的な導出はまだできていない。しかし両者ともに実験をうまく再現している法則であることは間違いない。
- (2) 熱伝導の方程式は3次元では

$$C_v \frac{\partial T(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T(t, \mathbf{r}) \quad (3.8)$$

と書かれている。この方程式の特殊解が ブラック・ショールズによって経済学に応用されたことがある。残念ながら、この試みは成功はしなかったが、しかしこれが経済物理学の出発点になったことは確かであろう。

3.3 真空中の熱移動

熱の伝導は物質を通して行われる。それでは真空中では熱 (エネルギー) の移動はあるのだろうか？例えば地球の外側は事実上、真空であるが地球の冷却は実際、起きている。この冷却はどのようなメカニズムなのであろうか？その答えは簡単である。地球は放射冷却によってのみ、熱エネルギーを発散している。そしてこの放射冷却は黒体輻射 (black body radiation) により行われる。ここではこの黒体輻射の物理的な機構について解説しよう。

3.3.1 プランクの公式

プランク (Planck) は光には最小単位である「量子」があるとして、この量子仮説のもとに黒体輻射の正しい理論式を発見して実験を見事に説明した。今、フォトン粒子であると仮定しよう。この場合、フォトンの運動量が p と $p + dp$ にある時の光の強度 $I(p)$ は、単位体積当たり何個のフォトンが放射されたかと言う物理量である。

それを式で書くと

$$I(p)dp = 2 \langle p \rangle \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = 8\pi \langle p \rangle \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.9)$$

となる．最初の 2 はフォトンの偏極度である．ここでエネルギー E_n (但し $E_n = n\hbar\omega = nh\nu$) を持つフォトン集団の分配関数 Z は温度 T の場合に

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n e^{-\beta nh\nu} \quad (\text{但し } \beta = \frac{1}{kT})$$

となっている．よってフォトンの平均運動量は

$$\langle p \rangle = \frac{1}{c} \langle E \rangle = \frac{1}{cZ} \sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{cZ} \sum_{n=0}^{\infty} (nh\nu) e^{-\beta nh\nu} = \frac{1}{c} \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

となる．ここで強度 I を振動数 ν で表すとプランクの公式

$$I(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (3.10)$$

が求まる．

● シュテファン・ボルツマン則: 有限温度の物質は輻射によりエネルギーを失っている．例えば地球は太陽からの輻射エネルギーを吸収し続けているが、地球の表面温度が一定値であるのはシュテファン・ボルツマン (Stefan-Boltzmann) 則 $[U = \sigma T^4]$ によるエネルギー放射と太陽からの輻射エネルギーが平衡状態になっているからである．

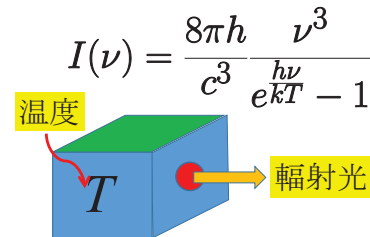


図 3.1: Planck の公式

このシュテファン・ボルツマン則は式 (3.10) を ν で積分すれば

$$U = \sigma T^4, \quad \text{但し,} \quad \sigma = \frac{8\pi k^4}{c^3 h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

と求まる．

3.4 粒子数変化と化学ポテンシャル

2個の熱力学系が接している時、粒子数変化 (dN) により熱伝導が起こる場合が生じる。この時、ギブス (Gibbs) の自由エネルギー G は

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN \quad (3.11)$$

と変更される。ここで μ は化学ポテンシャル (chemical potential) と呼ばれている。この μ は式を見れば明らかなように、エネルギーの次元を持っている。このため、化学ポテンシャルと言うことである。さらに、粒子数はそのポテンシャルが高い所から低い所へと変化して行くことになっている。

● 化学ポテンシャル μ : この化学ポテンシャルは圧力と温度が一定の場合にはギブスの自由エネルギーから

$$\mu = \left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,p} \quad (3.12)$$

と与えられている。ここで括弧の右下の T, p は温度と圧力が一定であることを表している。

● ドライアイスとシャボン玉 : 粒子数が実際に変化する具体例を解説しよう。まず、カラの水槽の底にドライアイスを敷き詰める。この場合、水槽の底は炭酸ガスで覆われる事になる。そこにシャボン玉を入れよう。この時、シャボン玉は炭酸ガスと接触して空間に停止している。しばらくするとこのシャボン玉は少し大きくなって行く。この理由として、シャボン玉の中は空気であるが、その炭酸ガスは少量であり、化学ポテンシャルは水に溶けた炭酸ガスの移動を促すからである。従ってシャボン玉が少し大きくなって行くことが理解できる。

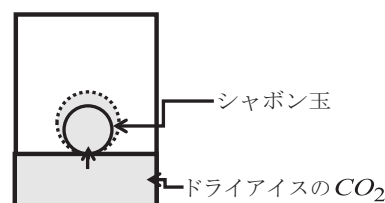


図 3.2: CO₂ の移動

● シャボン玉内の化学ポテンシャル : この場合、シャボン玉内の化学ポテンシャルはドライアイス上の炭酸ガスの塊の化学ポテンシャルよりも低い事になっている。この化学ポテンシャルに対する微視的な計算は相当に難しいものと思われる。

第4章 経済物理学

近年、経済物理学 (econophysics) が少しずつ発展し始めている。経済学を物理的な観点から研究することは、非常に面白い事ではある。最初の発展は金融工学 (financial engineering) への応用から始まったと考えてよいであろう。しかしこの考え方は必ずしも経済物理としての進展を意味するものとは言えない面があり、その後の発展はあまり見られていない。一方、株価のゆらぎ分布の問題は物理的な模型により詳細に研究されている。実際、株価の平均値からのゆらぎ (fluctuation) の分布はランダム行列という物理学における手法により、非常にうまく記述されることがわかっている。

ここでは金融工学で導入された概念とそれに関係する方程式について簡単に解説しよう。また今後、経済物理学の発展の基礎となるべき「リスク管理 (risk management)」の考え方についての解説を試みて行こう [7]。

4.1 ブラック・ショールズの方程式

金融工学という一見、奇妙な分野を発展させたのはブラック (Black) やショールズ (Scholes) 達によるものであろう。この場合、投資の対象となる「金融商品」に対して、デリバティブズ (金融派生商品) という量が考案されている。まずは、その言葉の解説を簡単にしておこう。

- 先物取引： 例えば、ある商品のある期日に「予定価格」で売買する取り決めを「先物取引」としよう。これは単純で、商談が成立すればその価格で取引が行われる事になる。しかし実際に売買された価格は「予定価格」と異なる可能性が高くそのリスクは避けられない。
- オプション： ここで新しい考え方として「オプション」と言う商品が提案されている。それはある商品のある期日に「予定価格」で売買する権利のことである。その場合、そのオプションに対して少額のプレミアムを付けることで先物取引で起こるリスクを軽減しようという事である。

4.1.1 ブラック・ショールズの方程式

ブラック・ショールズの方程式はそのデリバティブズが満たすべき微分方程式であり、

$$\frac{\partial W_d(\tau, z)}{\partial \tau} = \frac{1}{2}\sigma^2 \frac{\partial^2 W_d(\tau, z)}{\partial z^2} \quad (4.1)$$

と書かれている．ここで W_d がデリバティブズの分布関数であり、また σ は商品価格変動の標準偏差である． τ は時系列の流れに関係しており、また z という変数は価格変動を記述する時系列変数に関係している．しかしこれらの説明はここでは省略しよう．式 (4.1) には特殊解が知られている．それは

$$W_d(\tau, z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi\tau}} e^{-\frac{(z-c)^2}{2\sigma^2\tau}} \quad (4.2)$$

となっている． c は任意定数である．現実的にはこの解が有用とは到底考えられないものであり、実際に成功を収めたと言う事実はない．熱の伝達を売買価格の変動と関係すると考えたことはある程度は、理解できる．しかしながら、そこに「人為性」が入らないという保証はなく、従って方程式が予測している価格変動の分布関数が充分信頼できるとは到底、言えるものではない．

4.2 ランダム行列とゆらぎの分布関数

経済物理学において株価などの価格変動の平均値を記述しようとしても、それを予測することは不可能であろう．この事は経済活動が単純に「自然界の現象」として扱う事ができない事と関係している．従って、価格変動の平均値を解析して、その変動が何を意味しているのかと言う問題を議論することは科学的に意味がある事であろうが、予測はできないことである．

● 経済物理における観測量： それでは価格変動に関するもので、自然現象として扱える「観測量」は存在するのであろうか？これは重要な質問であるが、ある程度「自然現象」として扱う事ができるものが知られている．それは価格変動における「ゆらぎ」である．ゆらぎとは、価格変動に対してその平均値からのズレを意味している量である．そしてこの価格変動のゆらぎはランダム行列による予言値により、正確に記述される事が知られている．この事はゆらぎの分布は何らかの普遍性 (universality) がある事を意味している．しかしここで使っている数学はそう易しいものではないので、その詳細な数式を追う必要はない．その結果だけを応用することを学んでほしい．

4.2.1 量子論のハミルトニアン

ランダム行列を議論する場合、その出発点になるものがハミルトニアン H である。これは量子力学において最も重要な物理量である。量子力学では基本的に状態のエネルギーを求める事が目標である。このため、その状態のエネルギーを決める物理量が基本的なものとなり、それがハミルトニアンである。そしてその固有値がエネルギーとなっている。固有値が実数であるためにはハミルトニアンはエルミート行列である事が必要である。ここで扱うランダム行列ではそのハミルトニアンが実対称行列と仮定されている。従ってその行列要素はすべて実数である。

● ランダム行列： ランダム行列の方法とは、ある量子系を考えたとして、その「ハミルトニアンの各行列要素がすべてランダムな分布をしている」と仮定するものである。簡単な模型として2行2列のハミルトニアン H を

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

としよう。この時、それぞれの行列要素 H_{11} , H_{22} , H_{12} がすべてランダムな量だとして、これらが ガウス直交系アンサンブルの分布関数 $P(H)$ に従っていると仮定しよう。すなわち

$$P(H) = P(H_{11})P(H_{22})P(H_{12}) = N e^{-\alpha(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2)} \quad (4.4)$$

である。但し N , α は定数である。ここで、式 (4.3) のハミルトニアンの固有値を E_1 , E_2 として、その差を $s = |E_1 - E_2|$ としよう。この時、このエネルギー固有値の差 s の分布関数 $P(s)$ は

$$P(s) = \frac{\pi}{2D^2} s \exp \left\{ -\frac{\pi}{4} \left(\frac{s}{D} \right)^2 \right\} \quad (4.5)$$

となる事が示されている。ここで D は α に関係する量であり、また $P(s)$ は規格化されている。この分布関数はウィグナー分布と呼ばれていて、例えば原子核における複合核のエネルギー準位間差のゆらぎの分布関数の実験値と非常によく一致することが分かっている。

4.3 リスク管理

自然界で観測されたゆらぎの分布関数がランダム行列による理論計算と一致した事実は重要である。実際、これは何かもっと普遍的な現象である可能性が高いと言える。実際、確率的な現象におけるゆらぎの分布関数はこのランダム行列により普遍的に理解されることがわかっている。

- 株価のゆらぎへの応用： このランダム行列の模型計算が株価の変動に対するゆらぎの問題に応用されている。そして、観測された株価のゆらぎがランダム行列による予言値により、非常によく再現されている事が知られている。詳細は説明できないが、基本的にはエネルギー準位のゆらぎの記述と同じものと考えて分布を取り扱うと上手く行くと言うことである。この事は、株価の平均値自体は自然科学の対象にはならないが、その株価平均値からの変動であるゆらぎ分布は物理学の対称になると言う事である。従って、このゆらぎを扱う模型計算が経済物理学の一つの方向を示していると言える。

- リスク管理への応用： この事実を利用してリスク管理の考え方に応用した例題を議論しよう。今、例えば1000社の株価のゆらぎ分布を解析したとしよう。この時、基本的には、すべての会社の株価のゆらぎ分布は理論と一致することが予想される。しかしながら、このうち3社の株価のゆらぎ分布は理論の予想から大幅にずれていた事がわかったとしよう。この場合、理論の予言値と一致しなかった3社の株価のゆらぎ分布はどのように理解したら良いのであろうか？

4.3.1 不一致の原因

株価のゆらぎ分布が理論計算と合わなかった原因はそう単純ではないであろう。しかしながら、これは「普遍性」からずれていると言う意味で、この3社の株価ゆらぎに何らかの問題があることを示している。株価の変動に何らかの人為性が加わることは良くあることであろう。しかしこの影響がゆらぎに反映された場合、その株の会社が持っている何らかのトラブルが影響した可能性があるとと言える。



図 4.1: 株と平均値

まだその原因まで関係付けることはできていないが、これがリスク管理の問題である。残念ながら、そのリスクが何であるかは理論的にはわからないが、しかし何か問題が発生している可能性がある事は指摘できている。純粋に数学的な指標により、その企業に対するある種の「リスク」の存在がわかることは面白い手法と言えよう。

● 経済物理学の将来： この分野はまだ始まったばかりではあり、様々な問題点が出てくるものと思う。しかしながら、経済の現象においてもある種の「物理量」をうまく取り出すことができれば科学的な解析がある程度は可能になると言う事であろう。



第5章 統計力学の基礎問題

統計力学では何が計算出来るのかをしっかりと理解する事が重要である．基本的には統計力学における観測量は平均値 (アンサンブル・アベレージ) である．従って、どの分布関数で平均するのかと言う事だけが物理的な興味である．一般にはある物理系を考えた時に、その分配関数を計算する事がその主要目的である．すなわち、

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (5.1)$$

を計算する事が基本的には最も重要である．ここで E_n は状態 n におけるエネルギー固有値である．従って、例えばエネルギーの平均は

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{Z} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \quad (5.2)$$

となる事はすぐに計算できるものである．この事は、逆に言えば E_n がどの様に計算されて求められているかと言う事が重要になる．そしてこれは量子力学のエネルギー固有値問題を解く事によって得られる事になっている．その意味では、統計力学という「力学」があるわけではない．これが統計力学に関して大半の学生が混乱する原因でもある．

5.1 スピンと統計

粒子のスピンが整数の場合、その統計はボーズ統計であるとの教科書にも書いてあるし、自分もそれに対して疑いを持たなかった。しかしながら、最近のボーズ凝縮の話を書くにおよび何かがおかしいと思い始めた。それはかなり重い原子のボーズ凝縮について議論しているからである。ボーズ凝縮の実験の話を書くとおよそ信じられない事がボーズ凝縮の実験として議論されている。すなわち、重い原子系でその全体のスピンの整数の時にボーズ凝縮が起こっていると言うものである。原子系の物性は電子の振る舞いにより決定されている。原子核のスピンが影響する事はまずあり得ない。もしある原子系でボーズ凝縮が起こったと考えたならば、原子核の中性子を一つ増やしたアイソトープに関しても実験してみて、今度は全スピンの半整数だからボーズ凝縮が起こらないことを証明する必要がある。しかし、このような現象は現実離れしている。原子核のスピンにより原子系全体のスピンの半整数になったからと言って、系の統計が変わる事は考えられない。物質の性質は全て電子によって支配されている。原子核のスピンが影響するような現象は、余程強い磁場を系にかけたりしない限り現われる事はない。

実はスピンと統計の問題を調べてみると Feynman も不思議に思ったらしくて、電子の場合とフォトンの場合のスピンと統計は理解できるが、それ以外はわからないから教えて欲しいと言うようなコメントをしている。

5.1.1 フォトンとボーズ統計

一つははっきりわかっている事がある。それは光は確かにスピンの1であり、これはボーズ統計に属しているという事である。Planck の黒体輻射の公式もフォトンがボーズ粒子であると仮定して求められているし、実験的にもフォトンがボーズ統計に属するとして全く矛盾がない。しかしながら、基本粒子で整数スピンを持っているのはフォトンだけである。他のボーズ粒子と言っているのは全て複合粒子である。そうすると、一体ボーズ統計とは何かと言う基本的な疑問が出て来るのである。

5.1.2 フェルミ統計

実験的にはっきりわかっている事は、電子や核子などのフェルミオンは確かにフェルミ統計に属すると言う事である。これはパウリ原理として良く知られているし、実験的にも疑う所は全くない。Dirac 方程式から始まって、フェルミオン場を反交換関係で量子化するとこのパウリ原理はしっかり理解できるものである。むしろ、ここには理論と実験の矛盾はないし概念的にも理解していると思われる。

5.1.3 複合粒子のスピンと統計

それでは、原子の統計はどうであろうか？原子の全スピンが統計に影響するのだろうか？これに対する理論的考察は皆無に近い。人々が疑う事無くスピンと統計をこれまでは信じてきた。問題ははっきりしていて、まだ信頼できる実験が何処にも無いと言う事である。理論模型を作るにしても、複合系を考える場合、それが複合系である事がわかるような現象は統計力学では処理できない。統計力学と言っても、ダイナミックスそのものを扱う事は出来なく、考えている粒子が持っている状態関数によって指定されるエネルギーを分布関数に入れて平均操作をする事が統計力学の本質である。従ってもし複合粒子の内部構造を考える必要があるような物理現象は統計力学では扱えないと言う事である。

例えば、重い原子系の「ボーズ凝縮」の実験を見る限り、これはただ単に、密度の高いミクロ系を作ったと言う事以上に物理的な意味はあり得ないのである。実験的にわかっている現象としては、 ^3He と ^4He の超流動の実験がある。この2つは質量が25%も違うので、その意味では2つの振る舞いに実験的な影響が出てきても不思議ではない。しかし、現実はその程大きな差は無く、この両者の全スピンの整数か半整数かによる違いは観測されていない。すなわち、基本的な物性は当然電子によって決められているのである。

5.2 古典統計力学は物理的に意味があるか？

統計力学の教科書には、ほとんどの場合、古典統計力学という解説が出てくる。分配関数を求める時に、古典力学の位相空間で $e^{-\beta E}$ を積分する公式の事である。1次元の粒子を考える場合、

$$Z = N \int \int dx dp e^{-\beta H} \quad (5.3)$$

と書く。ここで H は系の Hamiltonian であり、 N は規格化定数である。これはしかしながら物理的には全く意味をなさない。それは明らかで、古典力学では Hamiltonian 自体は意味を持っていないからである。力学で議論されているように、Hamilton 方程式を求めて始めて物理的に意味のある量が得られるのである。古典力学ではエネルギーは Newton 方程式を解いた場合の積分定数に対応している。と言う事は、エネルギーはダイナミクスで決まる量ではなく、外から手で入れて決める量である。そのような H を位相空間で積分しても勿論、物理的には全く意味のある物理は出て来ないのである。

5.2.1 調和振動子

これは調和振動子の場合を見ると良くわかる。ここで調和振動子の分配関数を計算しよう。但しダイナミクスは量子力学を使う。この時分配関数は

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} = \frac{1}{2 \sinh(\frac{\beta \hbar \omega}{2})} \quad (5.4)$$

となる事が容易に確かめられる。しかし、ここで明らかに古典力学の極限が無いのである。すなわち、 $\hbar \rightarrow 0$ とすると無限大になってしまう。これは何を意味しているのだろうか？答えは明瞭で、古典統計力学は上手く定義できないと言う事を示している。

5.3 直感的理由

古典統計力学が定義できない事の直感的理由は何であろうか？きちんとした物理的な理由付けは今後の研究に任せて、直感的理由のみここで議論する事にしよう。分配関数により全ての計算が実行される統計力学では、状態和と言う事が非常に重要になる。ある粒子を考えたとしても、常にその状態を考えるとと言う事、すなわち常に場の理論的な発想が重要であると言う事である。一方、古典力学では、状態と言う概念が存在しない。そこでは常に粒子の軌道を考えている。すなわち、古典力学では系の時間発展のみが物理量に関係するのである。従って、古典力学で統計的な考え方を導入する事が始めから不可能であったと言う事である。この事は、やはり古典力学が基本方程式ではなく、量子力学から求められるものであると言う事と密接に関係している。すなわち、古典力学は量子力学の近似式として理解されるべきであると言う事である。従って、場の概念で全ての基本的な物理は理解して行く事が重要である事を意味していて、統計力学は最初に近似した古典力学では定義できない事に対応している。

5.3.1 近似の段階

物理では、近似をする段階が重要になる事が良く起こるものである。基本的には、近似はなるべく遅い段階ですべきであると言う事である。方程式の早い段階で近似をしてしまい、その近似された式を使うと良く間違えるのである。例えば、量子力学でミニマル変換により Zeeman 効果の相互作用 Hamiltonian を導出する時、Dirac 方程式の段階でミニマル変換をする事と、近似をした Schrödinger 方程式でミニマル変換をするのでは答えが違うのである。勿論、Dirac 方程式の段階でミニマル変換をした式が正しく、この場合スピンの依存した Zeeman 効果を与える Hamiltonian が求められるのである。しかしながら、最初に近似して Schrödinger 方程式でミニマル変換をしてもスピンによる項は出てこないのである。

5.4 熱力学の演習問題

問1 熱力学の第1法則 $TdS = dU + PdV$ のそれぞれの項の物理的な意味を解説せよ.

問2 分配関数を $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ とする時, $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$ であることを示せ.

問3 ヘルムホルツの自由エネルギー F は $F = -\frac{1}{\beta} \log Z$ と表されることを示せ.

問4 ミクロカノニカル集団からカノニカル集団における分布関数

$$p(E) \simeq \exp[-aE] \quad (5.5)$$

を導け.

問5 プランクの公式

$$I(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (5.6)$$

を導出せよ.

問6 微分方程式

$$\frac{\partial W_d(\tau, z)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2 W_d(\tau, z)}{\partial z^2}$$

の特殊解は

$$W_d(\tau, z) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi\tau}} e^{-\frac{(z-c)^2}{2\sigma^2\tau}}$$

であることを確かめよ.

付 録 A 準備

自然現象を理解しようとする時、物理学ではその言語として数学を使っている。その場合、数学を覚えるだけではなくそれを使えるまで練習する必要がある。語学における会話と同じであるが、その練習方法は簡単な計算を繰り返し行うことである。ここでは物理学でよく使う数学を解説しよう。その数学の基礎は微分である。その微分を行う際に必要となるのは「関数」であり、その概念は非常に便利である。従って、この関数に慣れる事は必須であろう。

A.1 関数とは？

まず平面を考えて、そこに座標系を導入してその横軸と縦軸を頭に入れてみよう。横軸を x -軸とし、縦軸を y -軸としよう。この y -軸が関数 $f(x)$ の値を示す事になる。この $f(x)$ の意味は x の値を入れたら縦軸の値が決まると言っている。これが「関数」という言葉の定義である。それでは関数の形はどうなっているのかと言うと、 f という表記がその形を表している。例えば、原点を通る直線だったら

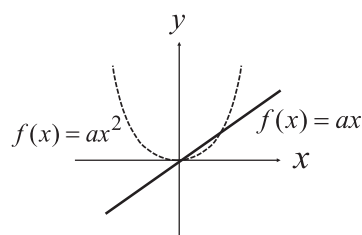


図 A.1: 関数

$f(x) = ax$ と書く事ができる。この場合 a は 3 とか 0.2 とかの定数である。よく使う関数に放物線があり、放物線で原点を通るものは $f(x) = ax^2$ と書き表す事ができる。結局、関数とは x という「変数」の値を決めるとそれに応じて $f(x)$ の値が決まると言っているだけであり、それ以上の概念ではない。しかし、関数の形を一般的に f で表している事でもあり、これが関数の言語に対応しており、非常に便利である事は間違いない。

A.2 微分

微分とは傾きの事を表している。微分係数はその傾きの角度を θ とする時, $\tan \theta$ (タンジェント) で表されている。但し, 微分の言う傾きは基本的に言って1点の傾きである。1点の傾きとは意味がないと思われがちだが, 十分意味があるように定義できている。すなわち, ある点を考えた時, その点から微小部分離れた点を考えて, この2点間の傾きを微分と言う。この2点を無限に近くすることが「極限操作」と呼ばれている。

A.2.1 傾きの重要性

それでは「傾き」が何故それ程重要なのであろうか? これを具体的な坂道で考えてみよう。その道が坂となっているとき, その坂の傾きは歩行者にとって重要である。坂が上り坂であればこれから歩くのに大変であろうし, 下り坂ならば少し楽になる。この場合, 傾きが正であれば上り坂だし, 負であれば下り坂である。この傾きが正か負かの問題は少なくとも歩き出して数歩に関しては正しいものと言えよう。傾きがゼロであれば道はしばらくは平坦である事を示している。ここで山の頂上かまたは谷の底かの判断は比較的簡単にわかる。坂を登って行って(傾きは正), ある点で傾きがゼロとなりその後は傾きが負になったとすれば山の頂上を超えた事になる。これよりその近辺においては傾きがゼロになる点が最大値か最小値を与えることはがわかる。

A.2.2 関数の微分

関数の微分とはある点とその直ぐ近くの点(前後どちらでも良い)での傾きを意味している。今, x からほんの少し(Δx)ずれた点 $x + \Delta x$ への傾き($f'(x)$ や $\frac{df(x)}{dx}$ と書いて微分係数と呼ぶ)は傾きの定義から

$$f'(x) \simeq \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (\text{A.1})$$

となる。ここで $\simeq$ という記号はほぼ等しいが厳密には少しずれているという意味である。少しずれる可能性があるのは Δx は十分小さいがゼロではないからである。ここで問題なのは, Δx はどのくらい小さく取ればよいのか? ということである。例えば Δx として $\Delta x \simeq 10^{-100}$ と取ったらもはや現実的にはゼロと同じである。数学ではこの Δx の値を十分小さく取るという言語を「極限」と言う。具体的

に $f(x) = ax^2$ の時に計算してみると

$$f'(x) \simeq \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \frac{a(x + \Delta x)^2 - ax^2}{\Delta x} = 2ax + a\Delta x \quad (\text{A.2})$$

となる．この右辺の最後の項は Δx を限りなくゼロに近い値を取るので無視して良く，従って

$$f'(x) = 2ax \quad (\text{A.3})$$

となる．ここで微分で重要な事は，幾つかの関数形に対してその微分係数 $f'(x)$ をある程度の計算練習をして覚えてしまう事である．物理でよく使う関数形とその微分係数は以下であろう．但し n と α は任意の定数．

$$\left\{ \begin{array}{ll} f(x) = x^n & f'(x) = nx^{n-1} \\ f(x) = \sin \alpha x & f'(x) = \alpha \cos \alpha x \\ f(x) = \cos \alpha x & f'(x) = -\alpha \sin \alpha x \\ f(x) = \tan \alpha x & f'(x) = \frac{\alpha}{\cos^2 \alpha x} \\ f(x) = e^{\alpha x} & f'(x) = \alpha e^{\alpha x} \\ f(x) = \ln \alpha x & f'(x) = \frac{1}{x} \end{array} \right. \quad (\text{A.4})$$

A.2.3 合成微分

関数 $f(x)$ の変数 x が時間 t の関数になっている時，この $f(x)$ を時間 t で微分した計算結果を導出しよう． $y = f(x(t))$ の時

$$\begin{aligned} \frac{df(x(t))}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(x(t + \Delta t)) - f(x(t))}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(x(t) + \Delta x) - f(x(t))}{\Delta x} \frac{\Delta x}{\Delta t} \\ &= \frac{df(x)}{dx} \frac{dx}{dt} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

である．但し， $\Delta x \equiv x(t + \Delta t) - x(t)$ と定義している．これより公式として

$$\boxed{\frac{df(x)}{dt} = \frac{df(x)}{dx} \frac{dx}{dt}} \quad \text{を覚えておこう.}$$

A.3 積分

微分と積分はほとんど何時でも対になって教えられている．これは微分と積分が結びつく事が証明されているからである．

A.3.1 領域としての面積

積分は面積で定義されている．1 辺が a の正方形を考えるとその面積 S は $S = a^2$ であり，これが面積の定義である．この時，辺の長さが a と b の長方形の面積は $S = ab$ である事が直ぐに確かめられる．次に関数 $f(x)$ と x -軸で囲まれる領域を考えよう．関数 $f(x)$ が $f(x) = c$ という x -軸に平行な直線の場合， $x = a$ から $x = b$ までの領域の面積 S は $S = |c| \times |b - a|$ である． $|c|$ は絶対値を表す記号であり，必ず正の値にしなさいという命令である．

● 面積の一般化： 積分における面積の定義ではこの絶対値をはずしている．従って積分による面積は正・負の両方の値が存在している．この一般化によって積分による面積の定義に矛盾点がない事が数学的に証明されている．

A.3.2 積分の定義

今，関数 $f(x)$ と x -軸で囲まれる領域を考えよう．さらに $x = x_0$ から x までの領域の面積を $S(x)$ としよう．この面積は小さな長方形に分けて計算する．例えば， x を 10 区間 $x = x_1, x_2, \dots, x_{10}$ に分けてこの領域を 10 等分する． $x = x_1$ における関数 $f(x_1)$ の値と x_0 から x_1 までの長方形を $S_1 = f(x_1)\Delta x$ とし，次に $f(x_2)$ の値と $x_2 - x_1$ までの長方形を S_2 として，次々に長方形を作っていく．

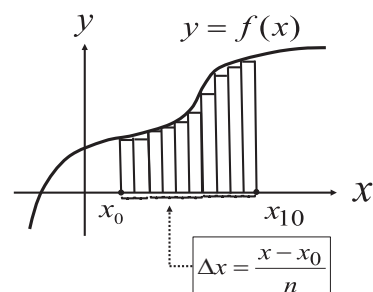


図 A.2: 積分

この場合，10 個の長方形ができるので $S(x) \simeq S_1 + S_2 + \dots + S_{10}$ と書ける．ここで和の記号 $\sum$ を $S(x) \simeq S_1 + S_2 + \dots + S_{10} \equiv \sum_{i=1}^{10} S_i$ と導入する．これはまだ厳密な面積ではない．分割を無限個にした式が

$$S(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x \quad (\text{A.6})$$

である．ここで Δx は $\Delta x = \frac{x - x_0}{n}$ であり，また $x_n = x$ に対応している．

A.3.3 数値積分

この様に定義した積分の式は確かに正しい面積を与えている．例えば， $x > 0, y > 0$ の第1象限を考えて，そこで半径 $a = 1$ の円と x - 軸と y - 軸から作られる面積を計算しよう．まず $n = 10$ で具体的に計算してみると答えは $S(1)_{(n=10)} = 0.73$ となる．次に計算機に計算させて $n = 10^8$ の場合の値をみると $S(1)_{(n=10^8)} = 0.78539811$ となり，これは $\frac{\pi}{4} = 0.785398163$ の値にかなり近い．これより n の値を無限大にすれば正しい答えが求まる．

● FORTRAN のプログラム： ここで単純な FORTRAN のプログラムを書いておこう．これは第一象限における半径 $r = 1$ の円の面積の計算プログラムで，分割は $N = 100000000$ である．厳密な答えが $\frac{\pi}{4}$ なのでこの面積を4倍して π の値と比較しやすくしている．

```

PROGRAM DAIKEI
OPEN(6,FILE='DAIKEI.DAT')
XMAX=1
N=100000000
H=XMAX/FLOAT(N)
ANS=0
DO 1 I=1,N
X=H*FLOAT(I)
ANS=ANS+H*SQRT(1.0-X*X)
1 CONTINUE
ANSPAI=ANS*4.0D0
WRITE(6,100) N,ANSPAI
100 FORMAT(1H , 'N=', I10, 5X, 'ANS=', E10.6 /)
STOP
END

```

こうすると DAIKEI.DAT というファイルに答が出ていて
 $N = 100000000$ $ANS = 0.314159E+01$ となっている．

A.4 微分と積分の関係

積分の範囲が $x + \Delta x$ までの面積は $S(x + \Delta x)$ である。ここでこの2つの面積の差 $S(x + \Delta x) - S(x)$ は図を書けばわかるように $f(x)\Delta x$ であり

$$S(x + \Delta x) - S(x) = f(x)\Delta x \quad (\text{A.7})$$

となっている。但し $x_n = x$ を使っている。

この式の両辺を Δx で割ると

$$\frac{S(x + \Delta x) - S(x)}{\Delta x} = f(x) \quad (\text{A.8})$$

となる。今、 $n \rightarrow \infty$ を実行すると $\Delta x = \frac{x}{n} \rightarrow 0$ であるから

$$f(x) = \frac{dS(x)}{dx} \quad (\text{A.9})$$

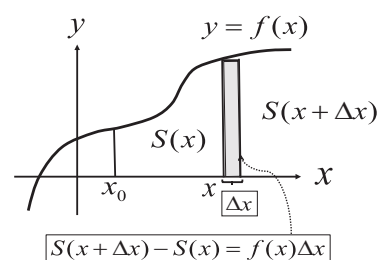


図 A.3: 微分と積分

となる。すなわち、積分量を微分したら元の関数が求まる。従って

$$S(x) = \int_0^x f(x)dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i)\Delta x \quad (\text{A.10})$$

と書く事ができる。積分記号 $\int_0^x$ の上下は積分の範囲を表していて、関数 $f(x)$ を $x = 0$ から x まで積分しなさいという意味である。よって

$$\frac{dS(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \int_0^x f(x')dx' = f(x) \quad (\text{A.11})$$

となる。積分中の x は外部変数 x と区別するため x' としている。

● ゼロの積分： ゼロを積分したらどうなるかと質問されることがよくあるが

$$\int 0 dx = 0$$

である。これは式 (A.6) において $f(x) = 0$ だから式 (A.11) は使えない。

A.5 ベクトル

3次元空間での点 P を座標 (x, y, z) で表す時、ベクトル r を

$$\boldsymbol{r} = (x, y, z) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

などと定義する．この段階では並べて書いてだけである．

A.5.1 ベクトルの内積 (スカラー積)

ここで2個のベクトル量 $\boldsymbol{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ と $\boldsymbol{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ に対して

$$\boldsymbol{r}_1 \cdot \boldsymbol{r}_2 \equiv x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2 \quad (\text{A.13})$$

という内積を定義しよう．この場合「内積の演算」が通常の演算法則に必要な条件をすべて満たしている事が証明されている．

A.5.2 ベクトルの極座標表示

ベクトル $\boldsymbol{r}$ を極座標で書くと $\boldsymbol{r} = r \boldsymbol{e}_r$ となる． r はこのベクトルの大きさを表している．また $\boldsymbol{e}_r$ は 動径方向の単位ベクトルを意味している．この事はベクトルが「大きさと方向」によって表されていることを示している．ついでに2個のベクトル量 $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の内積を極座標表示で書くと

$$\boldsymbol{r}_1 \cdot \boldsymbol{r}_2 = r_1 r_2 \cos \theta_{12} \quad (\text{A.14})$$

となる． θ_{12} は2個のベクトル間の角度を表している．どちらの内積の定義を使っても結果は同じであるが，便利さにおいて差が出る事も良くある．

- 2次元ベクトル $\boldsymbol{r}$: 2次元平面でベクトル $\boldsymbol{r}$ を極座標表示すると $\boldsymbol{r} = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ なので $\boldsymbol{e}_r = (\cos \theta, \sin \theta)$ となっている．

A.5.3 ベクトルの外積 (ベクトル積)

2個のベクトル量 $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ には「外積」も定義できる．何故，2個のベクトルからまたベクトルが作れる事が出るかと言う問題は「群論」を使うと理解できるがこ

ここでは議論しない．2個のベクトル量 r_1 と r_2 の外積は

$$\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 \equiv (y_1 z_2 - z_1 y_2, z_1 x_2 - x_1 z_2, x_1 y_2 - y_1 x_2) \quad (\text{A.15})$$

である．この式の覚え方は色々あるが，行列式で覚えるのが最も便利だと思われる．これは下記のように書かれる．

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 &= \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} \\ &= (y_1 z_2 - z_1 y_2) \mathbf{e}_x + (z_1 x_2 - x_1 z_2) \mathbf{e}_y + (x_1 y_2 - y_1 x_2) \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

ベクトルの外積の事をベクトル積と呼ぶ事も良くある．このベクトル積には大切な性質がある．定義から明らかなのだが， r_1 と r_2 の外積には

$$\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 = -\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1 \quad (\text{A.17})$$

が成り立っている．このため，おなじベクトルの外積はゼロである

$$\mathbf{r} \times \mathbf{r} = 0 \quad (\text{A.18})$$

A.5.4 一般化されたベクトル

数学ではベクトル空間という言葉を使う．これは座標空間とは関係なくベクトルを定義するからである．ベクトル a, b を

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n), \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n) \quad (\text{A.19})$$

として n -次元ベクトルと呼ぶ事がある．内積はこれまでと同様に

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i \quad (\text{A.20})$$

と定義されている．外積は $n \geq 3$ で定義されるが，一般的ではないので3次元空間のみを覚えておけば十分である．

A.6 行列

行列について議論しよう。ここでは2行2列の正方行列 A を考えて

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

と書く。 a_{11} , a_{12} など (a_{ij} と書く) を行列の成分という。勿論, これらは単なる数である。この段階での行列はただ並べて書いてだけである。ここでもう一つの行列 B を考えよう。

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.22})$$

この場合, 2つの行列の足し算はそれぞれの成分同士を足せばよい。

A.6.1 行列の積

ここで2個の行列の掛け算を

$$AB = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

と定義しよう。この式を覚えるのは結構大変であるが, しかし覚えるしか方法はない。覚え方として,

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1,2} a_{ik}b_{kj} \quad (\text{A.24})$$

がある。すなわち, 行列の積 AB の (i, j) 成分 $(AB)_{ij}$ はそれぞれの成分 a_{ik} と b_{kj} を掛けて k で和を取ればよいと言う事である。

● 行列の割り算は定義されない! : それでは行列の割り算はどうであろうか? 行列の割り算は単純には定義できないし, 物理には不要である。

A.6.2 エルミート行列

物理で最も重要な行列はエルミート行列であろう。この場合, 行列要素は複素数となっている。行列 A がエルミート行列であるとは

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = A^\dagger \equiv \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

の事である。すなわち, $a_{ij} = a_{ji}^*$ である。

A.6.3 エルミート行列の固有値は実数

エルミート行列の固有値方程式を書くと

$$A\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.26})$$

であり、 λ が固有値である。この λ が実数である事を示そう。

● 複素数ベクトルの内積： ここで複素数ベクトルの内積を

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \equiv \sum_{i=1,2} u_i^* v_i \quad (\text{A.27})$$

で定義しよう。この時

$$(\mathbf{u}, A\mathbf{u}) = \sum_{i=1,2} u_i^* \left(\sum_{j=1,2} a_{ij} u_j \right) = \sum_{i=1,2} u_i^* \left(\sum_{j=1,2} a_{ji}^* u_j \right) = \sum_{j=1,2} \left(\sum_{i=1,2} a_{ji} u_i \right)^* u_j$$

とエルミート行列の性質を使って書き直すことができる。これは

$$(\mathbf{u}, A\mathbf{u}) = (A\mathbf{u}, \mathbf{u}) \quad \Rightarrow \quad \lambda(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \lambda^*(\mathbf{u}, \mathbf{u})$$

となっている。よって $\lambda = \lambda^*$ であり、**エルミート行列の固有値 λ は実数** であることが証明された。この証明は2行2列の行列で行ったが一般のエルミート行列で示されることは上記の計算法から明らかであろう。

A.6.4 エルミート行列の固有関数の直交性

エルミート行列 A の固有値と固有ベクトルを $\lambda_1, \mathbf{u}^{(1)}$ と $\lambda_2, \mathbf{u}^{(2)}$ とすると

$$A\mathbf{u}^{(1)} = \lambda_1 \mathbf{u}^{(1)}, \quad A\mathbf{u}^{(2)} = \lambda_2 \mathbf{u}^{(2)} \quad (\text{A.28})$$

である。ここで **$\lambda_1 \neq \lambda_2$** の時 **$(\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}) = 0$** の直交性が成り立つ。これは

$$(\mathbf{u}^{(1)}, A\mathbf{u}^{(2)}) = (A\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}), \quad \text{よって} \quad \lambda_2(\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}) = \lambda_1(\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)})$$

となっているため、 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ なので $(\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}) = 0$ が証明されている。

A.6.5 パウリ行列

パウリ行列 $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ は

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.29})$$

と定義される 2 行 2 列のエルミート行列である．一般のエルミート行列 A は常に $A = \begin{pmatrix} a_1 + a_2 & b_1 - ib_2 \\ b_1 + ib_2 & a_1 - a_2 \end{pmatrix} = a_1 + b_1\sigma_x + b_2\sigma_y + a_2\sigma_z$ とパウリ行列で書くことができる．

● 反交換関係： このパウリ行列には，反交換関係を $\{A, B\} = AB + BA$ と定義すると $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$ の関係式が存在している．

A.6.6 ユニタリー行列

ユニタリー行列 $U = \{u_{ij}\}$ は $U^\dagger U = 1$ を満たす正方行列の事である．これを成分で書くと $(U^\dagger U)_{ij} = \sum_{k=1,n} u_{ki}^* u_{kj} = \delta_{ij}$ となる．ここでユニタリー行列による変換はノルムを不変に保つ事を証明しよう．今，ベクトル ϕ を $\psi = U\phi$ と変換した時，そのノルム $|\psi|^2$ は

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &\equiv (\psi, \psi) = (U\phi, U\phi) = \sum_{k=1,n} \left(\sum_{i=1,n} u_{ki}^* \phi_i \right) \left(\sum_{j=1,n} u_{kj} \phi_j \right) \\ &= \sum_{i=1,n} \sum_{j=1,n} \left(\sum_{k=1,n} u_{ki}^* u_{kj} \right) \phi_i^* \phi_j = \sum_{i=1,n} \sum_{j=1,n} \delta_{ij} \phi_i^* \phi_j = |\phi|^2 \end{aligned}$$

となり不変である．

A.6.7 実対称行列の対角化可能性の証明

実対称行列は常に対角化が可能である事を示そう．以下の証明は 2 行 2 列で表記するが一般化は容易である．実対称行列はエルミート行列であるためその固有値は実数である．実対称行列を R ，その固有値と規格化された固有ベクトルを $\kappa_1, u^{(1)}$ および $\kappa_2, u^{(2)}$ とすると

$$Ru^{(1)} = \kappa_1 u^{(1)}, \quad Ru^{(2)} = \kappa_2 u^{(2)} \quad (\text{A.30})$$

となる．ここで $\mathbf{u}^{(1)}$, $\mathbf{u}^{(2)}$ から作られた行列 U と対角行列 K を

$$U = (\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}) = \begin{pmatrix} u_1^{(1)} & u_1^{(2)} \\ u_2^{(1)} & u_2^{(2)} \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 \\ 0 & \kappa_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.31})$$

と定義しよう．この時，式 (A.30) は

$$RU = UK \quad (\text{A.32})$$

とまとめて書く事ができる．この時，行列 U はユニタリー行列なので，式 (A.32) の左から $U^\dagger$ を掛けると

$$U^\dagger RU = K \quad (\text{A.33})$$

となり，確かに実対称行列 R が適当なユニタリー行列により対角化された．

A.7 オペレータの固有値と固有関数

量子論ではあるオペレータが状態 Ψ に演算すると何かの定数がでて再び状態 Ψ に戻るという方程式が最も重要な方程式になっている．これを固有値方程式と言う．式で書くとそのオペレータを $\hat{A}$, 状態を Ψ とすると

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi \quad (\text{A.34})$$

となっている．ここで λ , Ψ の事を固有値，固有ベクトルと呼んでいる．この場合，オペレータ $\hat{A}$ は行列か微分演算子と考えて十分である．

A.7.1 固有値問題

固有値問題の例題を挙げておこう．まずは行列での問題である．

- 例題 (1): 具体例としてオペレータ $\hat{A}$ を 2 行 2 列の行列，状態 Ψ を 2 列のベクトルとするとこの式は

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi \quad \implies \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (\text{A.35})$$

と書ける．固有値 λ と固有ベクトル Ψ の求め方としては行列式がゼロ

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A.36})$$

の方程式をまず解く．これより固有値 λ が求まる．

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[a_{11} + a_{22} \pm \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} \right] \quad (\text{A.37})$$

さらにこの固有値の値を元の式に代入すると x と y の比が求まり，これにより固有値問題が解けた事になっている．2次元の行列の場合，固有値は2個求まり，それに応じて固有ベクトルも2セット求まる事になる．

● 例題 (2): 次に微分演算子の例題を挙げよう．オペレータ $\hat{A}$ として運動量演算子 $\hat{p} = -i\frac{d}{dx}$ としよう．この時，固有値方程式は

$$\hat{p}\Psi = k\Psi, \quad \Rightarrow \quad -i\frac{d\Psi}{dx} = k\Psi \quad (\text{A.38})$$

となっている．この時，固有関数 Ψ は $\Psi(x) = Ne^{ikx}$ と求まる．固有値 k がどのような値をとるかは Ψ に条件 (境界条件) を課すことにより求めることができる．

A.7.2 同時固有関数

オペレータ $\hat{A}$, $\hat{B}$ が交換するとき，すなわち

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (\text{A.39})$$

のとき，オペレータ $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は同時固有関数を持っている．この証明を簡潔にしておこう．まずオペレータ $\hat{A}$ の固有値を a ，固有関数を Ψ とすると

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \quad (\text{A.40})$$

が固有値方程式である．この時，

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{B}\hat{A}\Psi = a(\hat{B}\Psi) \quad (\text{A.41})$$

が示される．従って， $(\hat{B}\Psi)$ も $\hat{A}$ の固有関数である．よって

$$\hat{B}\Psi = b\Psi, \quad (b \text{ は定数}) \quad (\text{A.42})$$

であり，これは Ψ が $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有関数であることを示している．

A.8 微分方程式

物理では微分方程式を解く事がその計算のかかなりの部分を占めている。その場合、基本的な微分方程式の解き方を何回か練習して覚える事が大切である。

A.8.1 1回の微分方程式

もっとも単純な1回の微分方程式は

$$\frac{df(x)}{dx} = G(x) \quad (\text{A.43})$$

であろう。この場合、右辺 $G(x)$ は x のみの関数としている。この場合、その解は $f(x) = \int^x G(x')dx'$ と積分で書けている。

- 1回の微分方程式の例題： 問題となる微分方程式は

$$\frac{df(x)}{dx} + \lambda f(x) = 0 \quad (\text{A.44})$$

の形の微分方程式である。この解は

$$f(x) = Ce^{-\lambda x} \quad (\text{A.45})$$

であり C は任意の定数である。これは具体的に入れて見れば明らかであり、この解の形を覚える事が重要である。

A.8.2 2回の微分方程式

単純な2回の微分方程式は

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = G(x) \quad (\text{A.46})$$

であろう。その解は $f(x) = \int^x \int^{x'} G(x'')dx''dx'$ と積分で書けている。

- 2回の微分方程式の例題 (1)： よく出てくる2回の微分方程式は

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + k^2 f(x) = 0 \quad (\text{A.47})$$

であろう。この解の求め方はいろいろあるが、解は

$$f(x) = A_1 \sin kx + A_2 \cos kx \quad (\text{A.48})$$

と書けるのでこれを覚える事が大切である． A_1, A_2 は任意定数である．

- 2回の微分方程式の例題 (2) : 上式において k^2 の前の符号がマイナスの

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - k^2 f(x) = 0 \quad (\text{A.49})$$

の微分方程式も良く出てくる．この解は

$$f(x) = B_1 e^{kx} + B_2 e^{-kx} \quad (\text{A.50})$$

と書かれる． B_1, B_2 は任意定数である．

- その他の微分方程式 : 物理でよく使う微分方程式としては

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \alpha = 0 \quad (\text{一様重力中の運動}) \quad (\text{A.51})$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{\alpha}{y^2} = 0 \quad (\text{1次元重力ポテンシャル中の運動}) \quad (\text{A.52})$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + (\alpha + \beta x^2)y = 0 \quad (\text{量子力学の調和振動子}) \quad (\text{A.53})$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \alpha \frac{dy}{dx} + \beta y = \gamma \cos x \quad (\text{LCR 回路}) \quad (\text{A.54})$$

$$\left(\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) u = 0 \quad (\text{波の方程式}) \quad (\text{A.55})$$

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\alpha}{r^2} + \frac{\beta}{r} + \gamma \right] \psi = 0 \quad (\text{水素原子}) \quad (\text{A.56})$$

などがある．但し α, β, γ, v は定数である．

A.9 フーリエ展開

状態関数 $\psi(x)$ を良く知られている関数 (例えば, $\sin kx$, $\cos kx$) で展開することが良くある. この $\psi(x)$ を

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin \frac{2\pi n}{L} x \quad (\text{A.57})$$

と書く場合, これをフーリエ展開と言う. c_n が展開係数であり, これが決められるべき定数である. 実際, $\psi(x)$ が知られている場合, この系数 c_n は

$$c_n = \frac{\pi}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \psi(x) \sin \frac{2\pi n}{L} x \, dx \quad (\text{A.58})$$

によって決定される.

A.9.1 フーリエ展開の意味

フーリエ展開は非常に便利な式であり, 物理では良く使うことになる. この式を見るだけでは, それが何故, 便利なのかはわからないと思う. 使い慣れて初めて, その便利さがわかるものである. 読者は, 式 (A.57) の右辺は無限個の和になっているので, あまり意味がないのではないかと思われるかもしれない. 実際の応用では, この和が数個で大体, うまく近似できる場合が多いので, 利用価値が高いのである.

A.9.2 スペクトル分解

物理においては $\sin kx$ と書いた時, この k は運動量に関係している. これは x が長さの次元 $[L]$ を持っているため, k は $[L^{-1}]$ の次元を持つことになり, これが運動量の次元と関係してくるためである. 従って, 式 (A.57) における $\frac{2\pi n}{L}$ はある運動量での大きさを表していることに対応しているため, その前の係数 c_n はその運動量における振幅の大きさを表している. このため, このフーリエ展開表式をスペクトル分解と呼ぶことがある. それは運動量が光で言ったらその波長 (スペクトル) に対応していることに依っている.

付 録 B 物理の数学

物理学では数学は言語として使っている．ここでは物理で良く使う数学とその公式を挙げて解説しよう．

B.1 何故，偏微分か？

大学で微分を勉強する時，必ず偏微分が一緒に出てきて多少面食らうものである．何故，偏微分が必要なのかを理解しておく必要がある．

B.1.1 偏微分の定義

関数 $f(x, y)$ に対して

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}, \quad (y \text{ を定数とみて } x \text{ で微分}) \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \equiv \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}, \quad (x \text{ を定数とみて } y \text{ で微分}) \quad (\text{B.2})$$

が偏微分の定義である．それ以上の意味はない．

B.1.2 2変数関数の偏微分

ここで関数 $f(x(t), y(t), t)$ を全微分することを考える．すなわち，

$$\frac{df(x(t), y(t), t)}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(x(t + \Delta t), y(t + \Delta t), t + \Delta t) - f(x(t), y(t), t)}{\Delta t}$$

を計算してみよう．この時，次のようにある項を引いたり足したりを繰り返して変形して行くと偏微分を使わざるを得ないことがわかる．すなわち，

$$\begin{aligned}
\frac{df(x(t), y(t), t)}{dt} = & \\
\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\{ & \frac{f(x(t+\Delta t), y(t+\Delta t), t+\Delta t) - f(x(t), y(t+\Delta t), t+\Delta t)}{\Delta x} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right. \\
& + \frac{f(x(t), y(t+\Delta t), t+\Delta t) - f(x(t), y(t), t+\Delta t)}{\Delta y} \frac{\Delta y}{\Delta t} \\
& \left. + \frac{f(x(t), y(t), t+\Delta t) - f(x(t), y(t), t)}{\Delta t} \right\} \quad (B.3)
\end{aligned}$$

と変形できる．ここで $\Delta x \equiv x(t+\Delta t) - x(t)$, $\Delta y \equiv y(t+\Delta t) - y(t)$ と定義している．また $\Delta t \rightarrow 0$ で $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ なので

$$\frac{df(x(t), y(t), t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (B.4)$$

が示される．偏微分により確かに簡単な形で書く事ができて合理的である．

B.1.3 偏微分の例題

偏微分でよく使う微分演算子は $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ であろう．この微分演算子 ∇ (ナブラと呼ぶ) を $\frac{1}{r}$ に演算すると

$$\nabla \frac{1}{r} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{r} \right) = - \left(\frac{x}{r^3}, \frac{y}{r^3}, \frac{z}{r^3} \right) = - \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (B.5)$$

となる．ここで上式にさらに ∇ を演算すると

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{r^3} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{r^3} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{z}{r^3} \right] = - \left[\frac{3}{r^3} - \frac{3(x^2 + y^2 + z^2)}{r^5} \right] = 0 \quad (B.6)$$

となる．ところが $\nabla^2 \frac{1}{r}$ を半径 a の球内で積分してみると

$$\int_{|r| \leq a} \nabla \cdot \left(\nabla \frac{1}{r} \right) d^3r = - \int_{|r|=a} \left(\frac{\mathbf{r}}{r^3} \right) \cdot d\mathbf{S} = - \int_{|r|=a} \left(\frac{1}{a^2} \right) a^2 \sin \theta d\theta d\varphi = -4\pi$$

となりゼロではない事がわかる．これが δ 関数に関係している．このため式 (B.6) は $\boxed{\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})}$ と修正される．但し $\int \delta(\mathbf{r}) d^3r = 1$ である．

B.2 座標系

座標系は数学の基本である．座標系を導入する事により様々な記述が可能になり，言語としては最高に便利である．

● デカルト座標： 座標系の基本はデカルト座標 (x, y, z) であり，これがすべての出発点である．この場合，座標は自然に定義されるし最もわかり易い事は事実である．しかし物理の方程式を解こうとする場合，ポテンシャルが極座標表示で書かれている場合が多いため，極座標表示も重要になる．

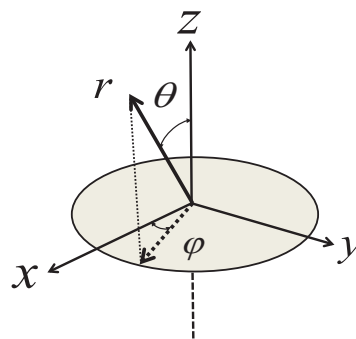


図 B.1: 座標系

● 極座標： (r, θ, φ) と書いて
$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \text{である.}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz = \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

B.3 回転座標系

力学では回転している座標系に移って物理を議論する場合がよく出てくる．このため，回転座標系で運動エネルギーがどのように表せられるかと言う問題が重要になっている．今，静止系の座標を (X, Y, Z) として，これを φ だけ回転した回転系の座標を (x, y, z) としよう．以降の議論では，回転を Z 軸回りにして議論を進めるがこれで一般性を失う事はない．両者の間には

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{R}, \quad \text{但し } \mathbf{R} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

の関係がある．

B.3.1 回転座標系 $\dot{r}$ の計算

ここで, $\dot{r}$ を計算してみよう. 簡単な計算で

$$\dot{r} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \dot{R} - \omega \times r \quad (\text{B.8})$$

となることがわかる. 右辺第2項は回転行列を時間微分したものと R の積であるが, これを式 (B.7) を使って r に書き直している. ここで系の回転角速度ベクトルを $\omega = (0, 0, \dot{\varphi})$ とした. 上式の右辺第1項を $\dot{R}_r$ と書くと式 (B.8) は

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \dot{R} \equiv \dot{R}_r = \dot{r} + \omega \times r \quad (\text{B.9})$$

となる. 式 (B.9) の行列は直交行列なので $\dot{R}_r^2 = \dot{R}^2$ が証明される. これより静止系での運動エネルギー $T = \frac{1}{2}m\dot{R}^2$ を回転系での変数 r で書くと

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{r} + \omega \times r)^2 \quad (\text{B.10})$$

となっている. これが回転系での運動エネルギーである.

B.4 数学の公式

B.4.1 デルタ関数 $\delta(x)$ とクロネッカーデルタ δ_{ij}

$$\begin{aligned} \bullet \quad \delta(x) &= \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}, & \bullet \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx &= 1 \\ \bullet \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx &= f(a), & \bullet \quad \delta(\mathbf{r}) &\equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z) \\ \bullet \quad \delta_{ij} &= \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}, & \bullet \quad \sum_{j=1}^{\infty} \delta_{ij} A_j &= A_i \end{aligned}$$

B.4.2 ベクトルの内積と外積

3次元ベクトルの場合, 内積と外積が定義できる.

内積 : $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \theta$

外積 : $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{e}_1(a_2 b_3 - a_3 b_2) + \mathbf{e}_2(a_3 b_1 - a_1 b_3) + \mathbf{e}_3(a_1 b_2 - a_2 b_1)$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} a_j b_k, \quad \text{但し } \epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (123 \text{ の偶置換}) \\ -1 & (123 \text{ の奇置換}) \\ 0 & (\text{それ以外の時}) \end{cases}$$

$$|\mathbf{a} \times \mathbf{b}| = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \sin \theta$$

● **単位ベクトルの変換** :

$$\begin{cases} \mathbf{e}_r = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_\theta = \cos \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \cos \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y - \sin \theta \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_\varphi = -\sin \varphi \mathbf{e}_x + \cos \varphi \mathbf{e}_y \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

B.4.3 ベクトルの公式

- $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$
- $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - (\nabla \cdot \nabla) \mathbf{A}$
- $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{c}$
- $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = (\nabla \times \nabla) \cdot \mathbf{A} = 0$
- $\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$
- $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{B}$ (但し $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列)

B.5 物理でよく使う積分公式

B.5.1 Exponential の積分

- $\int_0^\infty e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha}, \quad \bullet \int_0^\infty x e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha^2}, \quad \bullet \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x} dx = \frac{2}{\alpha^3}$
- $\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$

B.5.2 ガウス積分

- $\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha^2 x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}, \quad \bullet \int_{-\infty}^\infty x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}$

$$\bullet \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\beta x^2} dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \beta^n} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{(2n-1)!! \sqrt{\pi}}{2^n \beta^{n+\frac{1}{2}}}$$

(但し, $(2n-1)!! = 1 \times 3 \times \cdots \times (2n-1)$)

B.5.3 その他の積分公式

$$\begin{aligned} \bullet \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{(x^2 + a^2)^{\frac{3}{2}}} &= \frac{1}{a^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} f(a \tan \theta) \cos \theta d\theta \quad (x = a \tan \theta) \\ \bullet \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + a^2)^{\frac{3}{2}}} &= \frac{2}{a^2}, \quad \bullet \int_0^{\pi} \sin^2 \theta d\theta = \int_0^{\pi} \cos^2 \theta d\theta = \frac{\pi}{2} \\ \bullet \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{a+bt}} &= \frac{2}{b} \left(\sqrt{|a+b|} - \sqrt{|a-b|} \right) \end{aligned}$$

B.6 n 次元球の体積

半径 R の n 次元球の体積を求めよう．これを I とすると

$$I = \int \cdots \int_{p_1^2 + \cdots + p_n^2 \leq R^2} dp_1 \cdots dp_n = \int_0^R p^{n-1} \Omega_n dp = \Omega_n \frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{2\alpha^{\frac{n}{2}}} \quad (\text{B.12})$$

と書ける．ここで Ω_n は n 次元の角度積分である．この Ω_n は以下のように求めて行く．まず

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dp_n e^{-\alpha(p_1^2 + \cdots + p_n^2)} = \int_0^{\infty} e^{-\alpha p^2} p^{n-1} \Omega_n dp \quad (\text{B.13})$$

を計算する．このガウス積分は直ちに実行できて

$$G = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\alpha p^2} \right)^n = \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{n}{2}} = \Omega_n \frac{1}{n\alpha^{\frac{n}{2}}} \quad (\text{B.14})$$

となる．これより Ω_n が求まり I は
$$I = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} R^n$$
 となる．

B.7 微分演算公式と座標系

B.7.1 直交座標系 (x, y, z)

- グラジエント ∇ :
$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\phi}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\phi}{\partial z}\mathbf{e}_z$$
- ラプラシアン Δ :
$$\Delta\phi \equiv \nabla^2\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}$$
- 発散 :
$$\operatorname{div}\mathbf{A} \equiv \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$
- ローテーション :
$$\operatorname{rot}\mathbf{A} \equiv \nabla \times \mathbf{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right)\mathbf{e}_x + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\mathbf{e}_y + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\mathbf{e}_z$$

B.7.2 極座標系 (r, θ, φ)

- グラジエント :
$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial r}\mathbf{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\phi}{\partial\varphi}\mathbf{e}_\varphi$$
- ラプラシアン :
$$\nabla^2\phi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\phi}{\partial\varphi^2}$$
- 極座標におけるベクトル:
$$\mathbf{A} = A_r\mathbf{e}_r + A_\theta\mathbf{e}_\theta + A_\varphi\mathbf{e}_\varphi$$

$$\begin{cases} A_r = A_x \sin\theta \cos\varphi + A_y \sin\theta \sin\varphi + A_z \cos\theta \\ A_\theta = A_x \cos\theta \cos\varphi + A_y \cos\theta \sin\varphi - A_z \sin\theta \\ A_\varphi = -A_x \sin\varphi + A_y \cos\varphi \end{cases}$$
- 発散 :
$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 A_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}$$
- ローテーション:
$$\nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{r\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\varphi) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\varphi}\right)\mathbf{e}_r +$$

$$\frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial r}(r A_\varphi)\right)\mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right)\mathbf{e}_\varphi$$

B.8 三角関数

三角関数の基本公式をあげておこう.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \\ \cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y \\ \tan(x \pm y) = \frac{\tan x \pm \tan y}{1 \mp \tan x \tan y} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta \\ \sin^2 \theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta) \\ \cos^2 \theta = \frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sin A + \sin B = 2 \sin \frac{A+B}{2} \cos \frac{A-B}{2} \\ \cos A + \cos B = 2 \cos \frac{A+B}{2} \cos \frac{A-B}{2} \end{array} \right.$$

$$a \sin \theta + b \cos \theta = \sqrt{a^2 + b^2} \sin(\theta + \alpha), \quad \text{但し} \quad \cos \alpha = \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

B.9 指数関数と対数関数

物理で良く使う対数関数はほとんどすべて, その底が e である. このため $\ln \equiv \log_e$ と定義してこの対数関数のみが対象となっている.

- 基本的な性質: $e^x \cdot e^y = e^{(x+y)}, \quad (e^x)^y = e^{xy}, \quad e = 2.7182818$
 $\ln xy = \ln x + \ln y, \quad \ln x^y = y \ln x$

- 微分: $\frac{de^x}{dx} = e^x, \quad \frac{d \ln x}{dx} = \frac{1}{x}$

B.10 テイラー展開

- $e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots + \frac{1}{n!}x^n + \dots$
- $\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \dots$
- $\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 + \dots, \quad \bullet \quad \cos x = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 + \dots$
- $e^{ix} = 1 + ix - \frac{1}{2}x^2 - i\frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{4!}x^4 + i\frac{1}{5!}x^5 + \dots = \cos x + i \sin x$

B.11 複素数と複素積分

B.11.1 複素数 z の定義

$$\bullet z = x + iy = r(\cos \theta + i \sin \theta) = re^{i\theta} \quad \bullet z^* = x - iy = re^{-i\theta}$$

B.11.2 オイラーの公式

$$\bullet e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad \bullet \begin{cases} \cos \theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \\ \sin \theta = \frac{1}{2i}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \end{cases}$$

B.11.3 解析関数

複素関数 $f(z)$ が $f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n z^n$ と展開出来る時, この関数は解析関数と呼ばれる. 但し, n は整数である. 従って $f(z) = \sqrt{z}$ は解析関数ではない. この時, 原点を中心とした半径 R の円を複素平面で考えて $\theta = 0$ から一周まわる積分路を C と呼ぼう. 今, 関数 $f(z)$ をこの積分路 C で積分しよう.

$$\oint_C f(z) dz = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \oint_C z^n dz \quad (\text{B.15})$$

ここで $z = Re^{i\theta}$ と変数変換すると $dz = iRe^{i\theta} d\theta$ となる. よって

$$\oint_C f(z) dz = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \oint_0^{2\pi} iR^{n+1} e^{i(n+1)\theta} d\theta = \begin{cases} 0 & (n \neq -1) \\ 2\pi i c_{-1} & (n = -1) \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

となる. $f(z)$ で $n = -1$ の部分を $z = 0$ のポール, c_{-1} をその留数と言う.

例題: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{x^2 + a^2} dx : (p > 0, a > 0)$ の計算

解答: $\oint_C \frac{e^{ipz}}{z^2 + a^2} dz$ の複素積分を上半面の半径 R の半円 (経路 C) で積分する.

$$\oint_C \frac{e^{ipz}}{z^2 + a^2} dz = \int_{-R}^R \frac{e^{ipx}}{x^2 + a^2} dx + \int_0^\pi \frac{e^{ipR \cos \theta - pR \sin \theta}}{R^2 e^{2i\theta} + a^2} iRe^{i\theta} d\theta \quad (\text{B.17})$$

ここで右辺第1項は $R \rightarrow \infty$ で問題の積分そのものである．第2項は θ の範囲が $0 < \theta < \pi$ なので $\sin \theta$ は常に正である．よって， $e^{ipR \cos \theta - pR \sin \theta}$ は $R \rightarrow \infty$ でゼロになる．一方，複素積分の公式から

$$\oint_C \frac{e^{ipz}}{z^2 + a^2} dz = 2\pi i \frac{e^{-pa}}{2ai} = \frac{\pi e^{-pa}}{a} \quad \text{と求まる.}$$

よって積分の答えは

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{x^2 + a^2} dx = \frac{\pi e^{-pa}}{a} \quad \text{となる.}$$

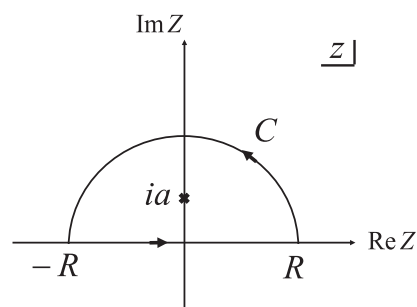


図 B.2: 複素平面の積分路

B.12 線積分と面積分

線積分と面積分の定義を書いておこう．

- 線積分： $\int_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \equiv \int_C (A_x dx + A_y dy + A_z dz)$
 C ：積分路（線に沿って積分：実際の積分は 直線 か 円 が可能）
- 面積分： $\int \int_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} \equiv \int \int_S A_n dS$ $d\mathbf{S}$ ：ベクトルの向きは面に垂直
 A_n ：法線方向の成分（球の場合は e_r 方向外向き）
 S ：積分の面積（実際の積分は 直方体 か 球 か 円筒 が可能）

B.13 ガウスの定理

ガウスの定理とは任意の閉じた体積に対してベクトル量 $\mathbf{A}$ の発散量 $\nabla \cdot \mathbf{A}$ を積分するとこの積分量はこの表面における A_n ($\mathbf{A}$ の法線方向の成分) について表面積分したものと一致しているというものである．

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{A} d^3r = \int_S A_n dS_n \equiv \int_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{B.18})$$

ここで， dS_n は表面積分を表している．方向は外向きを正としている．

B.13.1 立方体でのガウスの定理

ガウスの定理の証明をまず立方体で行う．一辺が a の立方体をその一つの頂点が原点にあり，また立方体の面が $x = y$, $y = z$, $z = x$ の各平面にあるようにして， $x > 0$, $y > 0$, $z > 0$ 象限に置こう．この場合，式 (B.18) の左辺の積分は

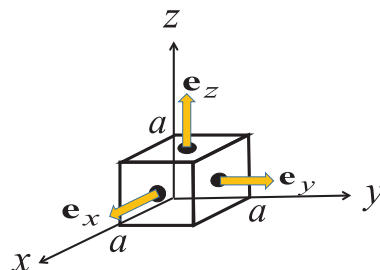


図 B.3: 立方体のガウスの定理

$$\begin{aligned} \int_{0 \leq x, y, z \leq a} \nabla \cdot \mathbf{A} \, d^3r &= \int \left[\int_0^a dx \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \right) \right] dydz + \int \left[\int_0^a dy \left(\frac{\partial A_y}{\partial y} \right) \right] dzdx \\ &+ \int \left[\int_0^a dz \left(\frac{\partial A_z}{\partial z} \right) \right] dxdy \quad \text{である.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{よって} \quad \int_{0 \leq x, y, z \leq a} \nabla \cdot \mathbf{A} \, d^3r &= \int (A_x(a, y, z) - A_x(0, y, z)) dydz \\ &+ \int (A_y(x, a, z) - A_y(x, 0, z)) dzdx + \int (A_z(x, y, a) - A_z(x, y, 0)) dxdy \end{aligned}$$

となり，この右辺は $\int_{[\text{表面}]} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}$ と書けていて立方体における表面積分である事がわかる．これより

$$\int_{0 \leq x, y, z \leq a} \nabla \cdot \mathbf{A} \, d^3r = \int_S A_n dS_n \quad \text{が証明されたのである.}$$

B.13.2 一般の場合のガウスの定理

ガウスの定理の証明が立方体でわかると後は簡単である．まず立方体を小さな 8 つの立方体切りそれぞれに対してガウスの定理を示す．この時，面が接している所は常に打ち消し合うため，残るのは外側の表面積分のみである事がチェックできる．この事がわかると，一般の場合も同じように無限小の立方体に分割して見れば明らかのように，接している所は必ず打ち消し合い，最終的に残る積分はすべて外側表面となっているのである．

B.14 ストークスの定理

ガウスの定理と同じくらい重要な数学の定理にストークスの定理

$$\int_S \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \int_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{B.19})$$

がある．ここで C は閉曲線を表し， S はその閉曲線で囲まれる面積を表し，この面積分は右手の法則に従って面積分の方角を決めている．

B.14.1 ストークスの定理の証明

まず長方形で行う．この長方形の一つの頂点を原点に取り， x -軸方向に a そして y -軸方向に b の長方形を考える．長方形が $x-y$ 平面にあるため， $d\mathbf{S}$ の方向は z -軸である．よって左辺は

$$\begin{aligned} \int_S \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) dx dy &= \int_0^b [A_y(a, y, 0) - A_y(0, y, 0)] dy \\ &+ \int_0^a [A_x(x, 0, 0) - A_x(x, b, 0)] dx \end{aligned}$$

となる．これは長方形の周囲を $OABCO$ と一周積分する事に対応している．すなわち上式の右辺は原点から x -軸に沿って a まで積分し，そこから y -軸方向に沿って b まで積分し，さらにそこから x -軸に沿って 0 まで積分し，そして最終的に y -軸方向に沿って原点まで積分したものである．これは長方形に対してストークスの定理が証明された事に対応している．よって

$$\int_S \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \int_{[OABCO]} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$$

が示された事になっている．

- 一般の場合のストークスの定理の証明はガウスの定理の証明と同様に分割することにより証明される．

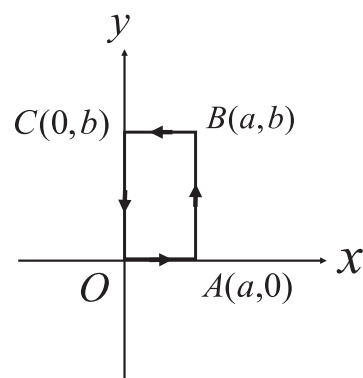


図 B.4: ストークスの定理

関連図書

- [1] 西島和彦, 「相対論の量子力学」, 培風館, 1973
- [2] Fields and Particles
K. Nishijima, W.A. Benjamin, INC, 1969
- [3] Symmetry and Its Breaking in Quantum Field Theory
T. Fujita, Nova Science Publishers, 2011 (2nd edition)
- [4] Fundamental Problems in Quantum Field Theory
T. Fujita and N. Kanda, Bentham Publishers, 2013
- [5] New Fundamentals in Fields and Particles
T. Fujita (editor), Transworld Research Network, 2008
- [6] 理科年表
国立天文台編 (丸善株式会社, 2015)
- [7] Theory of Financial Risk and Derivative Pricing
J.P. Bouchaud and M. Potters, Cambridge University Press, 2003