「古典電気力學の基礎に就て」の補足

微視的電磁ベクトル$(\mathbb{e}, \mathbb{h})$を微視的四元ポテンシャル$(\varphi, \mathbb{a})$に依つて

$$\mathbb{e} = -\operatorname{grad}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{a}}{\partial t}, \qquad \mathbb{h} = \operatorname{curl}\mathbb{a} \tag{1}$$ 1

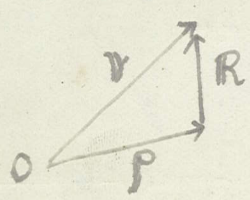
で定義すれば，場方程式は

$$\left.\begin{aligned} \Box\varphi = -4\pi\sigma, \qquad \Box\mathbb{a} = -\frac{4\pi}{c}\mathbb{i} \\ \operatorname{div}\mathbb{a} + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$ 2

で与へられる。

四元ポテンシャル$(\varphi, \mathbb{a})$をMøllerの方法に依つて求める。それは場の量子力學に從つて攝動論的に求めた結果と第一近似の範圍では一致する。場の量子力學の攝動計算は第二近似以上の高次の近似計算を行ふと無限大の困難が現れるので，我々の問題に關してはこの程度の近似で滿足して置く。

$$\left.\begin{aligned} \varphi(\mathbb{r},t) &= \iiiint \frac{\sigma}{R}\,\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \\ \mathbb{a}(\mathbb{r},t) &= \iiiint \frac{\mathbb{i}}{cR}\,\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \end{aligned}\right\} \tag{3}$$ 3



但し　$R = |\mathbb{r} - \rho|$
　　　$T = |t - \tau|$

$$\sigma = -e(\tilde{\psi}, \psi), \qquad \mathbb{i} = -ec(\tilde{\psi}\alpha\psi) \tag{4}$$ 4

$$\left.\begin{aligned} \psi &= \sum_{\alpha_i} a_{\alpha_i} u_{\alpha_i} + \sum_i b_i v_i \\ \tilde{\psi} &= \sum_{\alpha_i} a^*_{\alpha_i} \tilde{u}_{\alpha_i} + \sum_i b^*_i \tilde{v}_i \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

$$\sigma = \sigma_b + \sigma_f + \sigma_{fb} \tag{6}$$ 5

但し

$$\sigma_b \equiv -e\Big\{ \overbrace{\sum_{\alpha_i} n_{\alpha_i}(\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\alpha_i}) + \sum_{\alpha_i,\alpha_j}{}' a^*_{\alpha_i} a_{\alpha_j} (\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\alpha_j})}^{\sigma_\alpha} + \sum_{\alpha_i,\beta_j}{}' \underbrace{a^*_{\alpha_i} a_{\beta_j} (\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\beta_j})}_{\sigma_{\alpha\beta}} \Big\} \tag{7}$$

$$\sigma_f \equiv -e\Big\{ \underbrace{\sum_i n_i (\tilde{v}_i v_i)}_{\sigma_f} + \sum_{i,j}{}' b^*_i b_j (\tilde{v}_i v_j) \Big\} \tag{8}$$

$$\sigma_{fb} \equiv -e \sum_{\alpha_i, j} \Big\{ a^*_{\alpha_i} b_j (\tilde{u}_{\alpha_i} v_j) + b^*_j a_{\alpha_i} (\tilde{v}_j u_{\alpha_i}) \Big\} \tag{9}$$

$\alpha_i \sim j$ を ' で示す

$$\left.\begin{aligned} \sum_{\alpha_i,\alpha_j}{}' &\equiv \sum_{\alpha_i,\alpha_j} (i \neq j) \\ \sum_{\alpha_i,\beta_j}{}' &\equiv \sum_{\alpha_i,\beta_j} (\alpha \neq \beta) \\ \sum_{i,j}{}' &\equiv \sum_{i,j} (i \neq j) \end{aligned}\right\}$$

$$\varphi_b = \iiiint \frac{\sigma_b}{R} \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau \tag{10}$$

$$\sigma_b = \sum_\alpha \sigma_\alpha + \sum_{\alpha,\beta}{}' \sigma_{\alpha\beta} \tag{11}$$

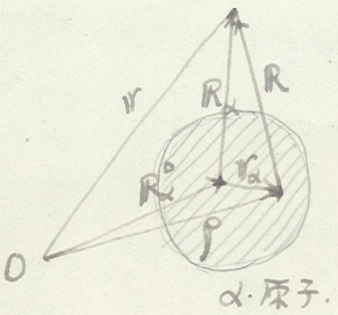
但し $\displaystyle \sum_{\alpha,\beta}{}' \equiv \sum_{\alpha,\beta} (\alpha \neq \beta)$

$$\sigma_\alpha = -e\Big\{ \sum_i n_{\alpha_i}(\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\alpha_i}) + \sum_{i,j}{}' a^*_{\alpha_i} a_{\alpha_j} (\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\alpha_j}) \Big\} \tag{12}$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e \sum_{i,j} a^*_{\alpha_i} a_{\beta_j} (\tilde{u}_{\alpha_i} u_{\beta_j}) \tag{13}$$

$$\varphi_b = \sum_\alpha \iiiint \frac{\sigma_\alpha}{R} \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau + \sum_{\alpha,\beta}{}' \iiiint \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R} \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau \tag{14}$$

σ_α は α 原子（乃至分子）の近傍でのみ大きな値を有する量であるから．(14)の右辺第一項の R を次の如く展開して



$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_\alpha} + r_\alpha \cdot \mathrm{grad}\,\frac{1}{R_\alpha} + \cdots\cdots$$

$$\varphi_b \cong \sum_\alpha \iiiint \sigma_\alpha \left(\frac{1}{R_\alpha} + r_\alpha \cdot \mathrm{grad}\,\frac{1}{R_\alpha} + \cdots\cdots \right) \delta(R_\alpha - cT)\, d\rho\, d\tau$$

$$+ \sum_{\alpha,\beta}{}' \iiiint \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R}\, \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau. \qquad (15)$$

$$\mathbb{P}_\alpha(r,t) \equiv \sigma_\alpha(r,t) \cdot r_\alpha \qquad (16)$$

8

に依つて α原子の電気双極子能率密度を定義すれば

$$\varphi_b \cong \sum_\alpha \iiiint \left(\frac{\sigma_\alpha}{R_\alpha} + \mathbb{P}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\,\frac{1}{R_\alpha} \right) \delta(R_\alpha - cT)\, d\rho\, d\tau$$

$$+ \sum_{\alpha,\beta}{}' \iiiint \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R}\, \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau \qquad (17)$$

自由電子に関する部分は

$$\varphi_f = \iiiint \frac{\sigma_f}{R}\, \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau$$

$$= \iiiint -e \left\{ \sum_i n_i (\tilde{v}_i v_i) + \sum_{i,j}{}' b_i^* b_j (\tilde{v}_i v_j) \right\} \frac{\delta(R - cT)}{R}\, d\rho\, d\tau \qquad (18)$$

右辺第二項は自由電子においては光円錐上の $b_i^* b_j (\tilde{v}_i v_j)$ の
位相が各点で振動することを考慮して零と見做すことができる。
物理的に云へば自由電子の状態間の轉移は我々の近似の
範囲では，エネルギー運動量の保存則から禁示される事を意味
する。さうすると第一項は時間的に常数と考へられる．

—— 此の点 φ_b の場と事情を異にする ——

$$\varphi_f = \varphi_f(r,t) = \iiiint \frac{\sigma_f'}{R}\, \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau = \iiint \frac{\sigma_f'}{R}\, d\rho \qquad (19)$$

$$\sigma_f' = -e \sum_i n_i (\tilde{v}_i v_i) \qquad (20)$$

8

次に φ_{fb} を求める。

$$\varphi_{fb} = \iiiint \frac{\sigma_{bf}}{R}\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau$$
$$\cong \iiiint \frac{\sigma_{bf}'}{R}\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \qquad (21)$$

$$\sigma_{bf}' \equiv -e\sum_{\alpha_i = i}\left\{a_{\alpha_i}^* b_i (\tilde{u}_{\alpha_i} v_i) + b_i^* a_{\alpha_i}(\tilde{v}_i u_{\alpha_i})\right\} \qquad (22)$$

⑧

何故なれば α 原子に強く束縛された状態では
u_{α_i} は α 原子の近傍でのみ大きな値を有するから，左様な電子
状態に関しては

$$\iiiint a_{\alpha_i}^* b_j (\tilde{u}_{\alpha_i} u_j)\frac{\delta(R-cT)}{R}\,d\rho\,d\tau$$

$$\cong \int \frac{\delta(R_\alpha - cT)}{R_\alpha} a_{\alpha_i}^* b_j\,d\tau \cdot \iiint (\tilde{u}_{\alpha_i} v_j)\,d\rho$$

となり，u_{α_i} と v_j の直交性のために大体零と見做される。
従って φ_{bf} に関しては既に湯川教授の指摘されて
をられる如く，非常に励起された束縛電子の状態のみ
が問題となる譯である

(17), (19), (21) に依って

$$\varphi = \varphi_b + \varphi_f + \varphi_{fb}$$
$$\cong \iiiint \left\{\sum_\alpha\left(\frac{\sigma_\alpha}{R_\alpha} + \mathbb{P}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) + {\sum_{\alpha,\beta}}' \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R}\right.$$
$$\left. + \frac{\sigma_f'}{R} + \frac{\sigma_{fb}'}{R}\right\}\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \qquad (23)$$

⑦

場方程式 (2) の準巨視的平均を行って巨視的
場方程式を導く譯であるが，この平均 $\langle f(x,y,z,t)\rangle$ を
適当に定義して置けば，常に平均の操作と空間，時間に
関する微分演算との順序を交換し得る。従って

$$\langle\varphi\rangle = \iiiint \left[\sum_\alpha\left\{\frac{\langle\sigma_\alpha\rangle}{R_\alpha} + \langle\mathbb{P}_\alpha\rangle\,\mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right\}\right.$$
$$\left. + \sum_{\alpha,\beta}\frac{\langle\sigma_{\alpha\beta}\rangle}{R} + \frac{\langle\sigma_f'\rangle}{R} + \frac{\langle\sigma_{bf}'\rangle}{R}\right]\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau. \qquad (24)$$

核の巨視的電荷も一緒に考慮して

$$\langle \sigma(\mathbf{r}) \rangle = \rho(\mathbf{r}) - \mathrm{div}\,\mathbf{P}(\mathbf{r}) + \cdots$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \left\{ \langle Z e \delta(\mathbf{R}_\alpha^0 - \mathbf{r}) \rangle + \langle \sigma_f \rangle \right\} + \langle \sigma_f' \rangle + \left[\sum_{\alpha,\beta}{}' \langle \sigma_{\alpha\beta}' \rangle + \langle \sigma_{bf}' \rangle \right] \qquad (25) \quad ⑦$$

但し $\sigma_{\alpha\beta}'$ は $\sigma_{\alpha\beta}$ の中 φ_b に有限の寄与を与へるもののみを表す。其様な部分は α, β が互に近傍にある原子から成るものである。

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \langle \mathbf{P}_\alpha(\mathbf{r}) \rangle \qquad (26) \quad ⑧$$

同様な計算を行つてベクトルポテンシャルを求める。

$$\mathbf{i} = \mathbf{i}_b + \mathbf{i}_f + \mathbf{i}_{bf} \qquad (27) \quad ⑨$$

$$\mathbf{i}_b = \sum_{\alpha} \mathbf{i}_\alpha + \sum_{\alpha,\beta}{}' \mathbf{i}_{\alpha\beta} \qquad (28)$$

$$\mathbf{i}_\alpha = -e \left\{ \sum_i n_{\alpha i} (\tilde{u}_{\alpha i} \alpha u_{\alpha i}) + \sum_{i,j}{}' a_{\alpha i}^* a_{\alpha j} (\tilde{u}_{\alpha i} \alpha u_{\alpha j}) \right\} \qquad (29)$$

$$\mathbf{i}_{\alpha\beta} = -e \sum_{i,j} a_{\alpha i}^* a_{\beta j} (\tilde{u}_{\alpha i} \alpha u_{\beta j}) \qquad (30)$$

$$\mathbf{a}_b \cong \frac{1}{c} \sum_{\alpha} \iiiint \mathbf{i}_\alpha \left(\frac{1}{R_\alpha} + \mathbf{r}_\alpha \cdot \mathrm{grad} \frac{1}{R_\alpha} \right) \delta(R_\alpha - cT)\, d\rho\, d\tau + \frac{1}{c} \sum_{\alpha,\beta}{}' \iiiint \frac{\mathbf{i}_{\alpha\beta}}{R} \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau \qquad (31)$$

α 原子の電気双極子能率を

$$\mathbf{P}^\alpha = \iiint \mathbf{P}_\alpha(\rho)\, d\rho \qquad (32)$$

で定義すれば

$$\frac{\partial \mathbf{P}^\alpha}{\partial t} = \iiint \frac{\partial \mathbf{P}_\alpha}{\partial t} d\rho = \iiint \frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial t} \mathbf{r}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\, \rho \qquad (33)$$

σ_α が α 原子の近傍のみで有限の値を有することを考慮すれば(33)の積分は近似的に α 原子の近傍だけについて行ふものと見做し得る。従つて其の近傍では電荷・電流密度の連續方程式は近似的に α 原子のみに属する電荷・電流密度だけで満足されてゐると考へる，即ち

$$\frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial t} + \mathrm{div}\, \mathbf{i}_\alpha \fallingdotseq 0 \qquad (34)$$

この假定の許されるためには，原子間の距離が相当大きく異る原子に属する電子の波動函数の重なりが無視出来，且つ自由電子の密度は各原子の近傍で十分小さい事が必要である。

(34)を許せば

$$\frac{\partial \mathbb{P}^\alpha}{\partial t} = \iiint \frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial t} \mathbf{r}_\alpha \cdot \cancel{\mathrm{grad}\,\rho} = -\iiint \mathrm{div}\, \mathbf{i}_\alpha\, \mathbf{r}_\alpha\, d\rho$$

$$= \iiint \mathbf{i}_\alpha\, d\rho \qquad (35)$$

更に

$$\mathbb{K}^\alpha = \iiint \mathbb{P}_\alpha \left(\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) d\rho$$

なる量を考へれば

$$\frac{\partial \mathbb{K}^\alpha}{\partial t} = \iiint \frac{\partial \mathbb{P}_\alpha}{\partial t} \left(\mathbf{r}_\alpha\, \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) d\rho$$

$$= -\iiint \mathrm{div}\, \mathbf{i}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\alpha \left(\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) d\rho$$

$$= -\iiint \left\{ \mathbf{i}_\alpha \left(\mathbf{r}_\alpha\, \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) + \mathbf{r}_\alpha \left(\mathbf{i}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) \right\} d\rho \qquad (36) \quad (11)_2$$

α 原子の磁気能率を

$$\mathbb{m}^\alpha = \frac{1}{2c} \iiint [\mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{i}_\alpha]\, d\rho = \iiint \mathbb{m}_\alpha\, d\rho \qquad (37) \quad (11)_1$$

で定義すれば

$$2c\left[\mathbb{m}^\alpha \times \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right]$$

$$= \iiint \left\{ \mathbf{i}_\alpha \left(\mathbf{r}_\alpha\, \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) - \mathbf{r}_\alpha \left(\mathbf{i}_\alpha \cdot \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right) \right\} d\rho \qquad (38)$$

(35)，(36)，(38)を使へば

$$\mathfrak{a}_b = \sum_\alpha \int \frac{1}{cR_\alpha} \frac{\partial \mathbb{P}^\alpha}{\partial t} \delta(R_\alpha - cT)\, d\tau + \sum_\alpha \int \left[\mathbb{m}^\alpha \times \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}\right] \delta(R_\alpha - cT)\, d\tau$$

$$+ \sum_\alpha \int \frac{1}{2c} \frac{\partial \mathbb{K}^\alpha}{\partial t} \delta(R_\alpha - cT)\, d\tau + \sum_{\alpha,\beta}{}' \iiiint \frac{\mathbf{i}_{\alpha\beta}'}{cR} \delta(R - cT)\, d\rho\, d\tau \qquad (39)$$

$$\mathfrak{a}_f = \iiiint \frac{\mathfrak{i}_f}{cR}\delta(R-cT)\,d\rho\, d\tau \simeq \iiiint \frac{1}{c}\frac{\mathfrak{i}_f'}{R}\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \qquad (40)$$

$$\mathfrak{i}_f' = \sum_i n_i(\tilde{v}_i\alpha v_i)$$

$$\mathfrak{a}_{fb} \doteqdot \iiiint \frac{\mathfrak{i}_{fb}'}{cR}\,\delta(R-cT)\,d\rho\,d\tau \qquad (41)$$

$$\mathfrak{i}_{fb}' = -e\sum_{\alpha_i=i}\left(a_{\alpha_i}^* b_i\,(\tilde{u}_{\alpha_i}\alpha v_i) + b_i^* a_{\alpha_i}\,(\tilde{v}_i\alpha u_{\alpha_i})\right)$$

故に

$$\begin{aligned}\langle \mathfrak{i}(\mathfrak{r})\rangle &= \langle -e(\tilde{\Psi}\alpha\Psi)\rangle \\ &= \sum_\alpha \left\langle \frac{\partial \mathbb{P}^\alpha}{\partial t}\delta(\mathbb{R}_\alpha^\circ-\mathfrak{r})\right\rangle \\ &\quad + \sum_\alpha \left\langle c[\mathbb{M}^\alpha \times \mathrm{grad}\frac{1}{R_\alpha}]\delta(\mathbb{R}_\alpha^\circ-\mathfrak{r})\right\rangle \\ &\quad + \sum_\alpha \left\langle \frac{1}{2}\frac{\partial \mathbb{K}^\alpha}{\partial t}\delta(\mathbb{R}_\alpha^\circ-\mathfrak{r})\right\rangle + \sum_{\alpha,\beta}{}' \langle \mathfrak{i}_{\alpha\beta}\rangle \\ &\quad + \langle \mathfrak{i}_f'\rangle + \langle \mathfrak{i}_{fb}'\rangle\end{aligned} \qquad (10)$$

但し $\left\langle \frac{1}{2}\frac{\partial \mathbb{K}^\alpha}{\partial t}\delta(\mathbb{R}_\alpha^\circ-\mathfrak{r})\right\rangle$ は無視してよい。 c.f. Van Vleck

$$\mathfrak{i}_f' = \mathfrak{i}_0 + \mathfrak{i}_1$$

$$\mathfrak{i}_0 = -\sum_i \left[\frac{i\hbar e n_i}{2m}\{\mathrm{grad}\,\tilde{u}_i^+ u_i - \tilde{u}_i\,\mathrm{grad}\,u_i\} - \frac{e^2}{mc}\tilde{u}_i^+ u_i A\right]$$

$$\mathfrak{i}_1 = -\left[\frac{i\hbar e n_i}{2m}\sum{}'\left\{\frac{\partial \tilde{u}_i^+}{\partial x_\alpha}\gamma_\alpha\gamma_\beta u_i - \tilde{u}_i^+\gamma_\beta\gamma_\alpha\frac{\partial u_i}{\partial x_\alpha}\right\}\right. = \underbrace{\sum_i \frac{i\hbar e n_i}{2m}}\sum{}' \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\tilde{u}_i^+\gamma_\alpha\gamma_\beta u_i$$

$$\left.\begin{aligned} M_{\alpha\beta} &= +\sum_i \frac{-i\hbar e n_i}{2mc} u_i^+\gamma_\alpha\gamma_\beta u_i \\ P_\beta &= \sum_i \frac{-e\hbar n_i}{2mc} u_i^+\gamma_4\gamma_\beta u_i\end{aligned}\right\} \text{とすれば}$$

$$\mathfrak{i}_1 = \mathrm{rot}\,M. + \frac{1}{c}\frac{\partial P}{\partial t}$$

$$\sigma_f = \rho_0 + \rho_1$$

$$\rho_0 = \sum_i\left[\frac{ie\hbar n_i}{2m_0c^2}\left(\frac{\partial u^+}{\partial t}u - u^+\frac{\partial u}{\partial t}\right) - \frac{e^2}{2m_0c^2}\varphi\, u_i^+ u_i\right]$$

$$\rho_1 = \cancel{\tfrac{1}{1}} - \frac{1}{c}\,\mathrm{div}\,\mathbb{P}$$

N18

古典電氣力學の基礎について I.

湯　川　秀　樹

京都帝國大學理學部物理學教室

(昭和 19 年 1 月講演，19 年 4 月 17 日受理)

§1. 緒　　言

古典電氣力學によれば，物質中の電磁場は電場 $\boldsymbol{E}$，電氣變位 $\boldsymbol{D}$，磁場 $\boldsymbol{H}$ 及び磁氣感應 $\boldsymbol{B}$ によつて記述される。$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{H}$ と $\boldsymbol{B}$ の間の關係は物質の種類及び狀態によつて異なる。それ等と電荷密度 ρ 及び電流密度 $\boldsymbol{I}$ との間にはよく知られた Maxwell の場方程式

$$\left.\begin{array}{ll}\mathrm{curl}\,\boldsymbol{E}=-\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}, & \mathrm{curl}\,\boldsymbol{H}=\dfrac{4\pi}{c}\boldsymbol{I}+\dfrac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t} \\ \mathrm{div}\,\boldsymbol{B}=0, & \mathrm{div}\,\boldsymbol{D}=4\pi\rho\end{array}\right\}\quad(1)$$

が成立する。

所で一方 Lorentz の古典電子論によれば，[1] 媒質中の電磁場乃至電荷，電流等は眞空中に於ける帶電粒子の運動に原因する微視的な電場 $\boldsymbol{e}$，磁場 $\boldsymbol{h}$，電荷密度 σ 電流密度 $\boldsymbol{i}$ の巨視的な平均値であると考へられる。例へば點 $\boldsymbol{r}$ に於ける巨視的電場 $\boldsymbol{E}$ は，この點を中心とする半徑 a なる球の內部に就ての微視的電場 $\boldsymbol{e}$ の平均値と定義し，これを

$$\boldsymbol{E}=\bar{\boldsymbol{e}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(2)$$

と書く。但し球の半徑 a は通常の觀測に於ては無限小と見做し得る程小さいが原子の半徑に比しては非常に大きいものとする。同樣にして磁氣感應 $\boldsymbol{B}$ は微視的磁場 $\boldsymbol{h}$ の平均値

$$\boldsymbol{B}=\bar{\boldsymbol{h}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(3)$$

で定義される。更に

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{4\pi}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{E}),\qquad \boldsymbol{M}=\frac{1}{4\pi}(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{H})\quad(4)$$

で定義される電氣偏極 $\boldsymbol{P}$ 及び磁氣偏極 $\boldsymbol{M}$ は，微視的な電荷及び電流の分布から

$$\boldsymbol{P}=N\bar{\boldsymbol{p}},\qquad \boldsymbol{M}=N\bar{\boldsymbol{m}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(5)$$

なる關係によつて導き出されるものとする。但し N は單位體積中の分子の數で，

$$\boldsymbol{p}=\iiint\sigma\boldsymbol{r}\,dv,\qquad \boldsymbol{m}=\frac{1}{2c}\iiint[\boldsymbol{r}\boldsymbol{i}]\,dv\quad\cdots\cdots(6)$$

で，積分は物質を構成する個々の分子に就て行ふ。すると微視的な電荷密度 σ 及び電流密度 $\boldsymbol{i}$ の平均値は

$$\left.\begin{array}{l}\bar{\sigma}=\rho-\mathrm{div}\,\boldsymbol{P}, \\ \bar{\boldsymbol{i}}=\boldsymbol{I}+c\,\mathrm{curl}\,\boldsymbol{M}+\dfrac{\partial\boldsymbol{P}}{\partial t}\end{array}\right\}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(7)$$

となることが證明される。その際電子の速度を v とした場合

$$\boldsymbol{i}=\sigma v\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(8)$$

が成立することをも考慮する。その詳細に關しては，例へば Lorentz,[1] 或は van Vleck, Becker[2] 等の著書を參照されたい。

そこで微視的電磁場に對する Lorentz の方程式

$$\left.\begin{array}{ll} \mathrm{curl}\,\boldsymbol{e}=-\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial t} & \mathrm{curl}\,\boldsymbol{h}=\dfrac{4\pi}{c}\boldsymbol{i}+\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial t} \\ \mathrm{div}\,\boldsymbol{h}=0 & \mathrm{div}\,\boldsymbol{e}=4\pi\sigma \end{array}\right\} \quad (9)$$

に (2) 乃至 (8) の關係を代入すると，Maxwell の場方程式が再現せられることになる。

以上の推論は今日の量子力學乃至量子電氣力學の立場から見ると甚だ不滿足なものである。何故かといへば先づ第一に，微視的電磁場自身は古典電子論で假定してゐる如き單なる數函數ではなく，交換不可能な演算子と考へなければならない。第二に微視的な電荷密度，電流密度としても，量子化された波動函數から作られた表式を採用しなければならない。その場合 (8) の如き關係をそのまゝ使ふことは出來ない。これ等の點を考慮して，古典電氣力學に新しい基礎づけをすると共に，それが如何なる近似に於て正しいかを明かにすることは無意義でないと思はれる。

§2. 巨視的電磁場の觀測可能性

量子電氣力學によれば，微視的な電場 $\boldsymbol{e}$，磁場 $\boldsymbol{h}$ は次の如き交換關係を滿足する演算子である。即ち

$$\left.\begin{array}{l} e_x e_y'-e_y' e_x=h_x h_y'-h_y' h_x=0 \\ e_x h_y'-h_y' e_x \\ =-4\pi i\hbar c\,\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \end{array}\right\} \quad (10)$$

等の關係式が成立する。但し e_x, h_x 等は時刻 t に於ける點 (x, y, z) の電場及び磁場の成分を意味し，e_x', h_x' 等は同じ時刻に於ける點 (x', y', z') の電場及び磁場の成分を意味する。$\delta(x-x')$ は Dirac の δ-函數で，$\delta'(x-x')$ はその導函數を表はす。(10) の如き交換關係は Heisenberg 及び Pauli によつて得られたが,[3] その場合 Heaviside 單位が用ひられてゐるために，(10) とは 4π なる因數だけ違つてゐる。

巨視的な電場 E 及び磁氣感應の定義として，前と同じく (2) 及び (3) の如き關係を假定する。但し以下の計算の便宜上，半徑 a なる球の內部に就ての平均の代りに，これと本質的には同等な

$$\bar{\bar{e}}_x(xyz)=\frac{1}{\Theta}\iiint e_x(\xi\eta\zeta)\exp\left(-\frac{R^2}{a^2}\right)d\xi\, d\eta\, d\zeta \quad (11)$$

の如き平均の仕方をすることにする。但し

$$\left.\begin{array}{l} \Theta=\displaystyle\iiint \exp\left(-\frac{R^2}{a^2}\right)d\xi\, d\eta\, d\zeta=(\sqrt{\pi}\,a)^3 \\ R=\sqrt{(\xi-x)^2+(\eta-y)^2+(\zeta-z)^2} \end{array}\right\} \cdots(12)$$

すると直ちに，座標に就ての微分と平均とはいつでも順序が變られることがわかる。例へば

$$\frac{\partial E_x}{\partial x}=\overline{\overline{\frac{\partial e_x}{\partial x}}} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(13)$$

等が成立する。次に (10) の各式の左邊に現はれる e_x, e_x' 等に就て (11) の如き平均を行ふと，先づ

$$E_x E_y'-E_y' E_x=B_x B_y'-B_y' B_x=0 \quad \cdots\cdots\cdots(14)$$

が得られる。これは巨視的な電場の各成分同士及び磁氣感應の成分同士は互ひに交換可能なことを示す。次に (11) の最後の式の兩邊に就て同樣な手續を施すと

$$E_x B_y'-B_y' E_x=i\hbar c\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{a^5}(z-z')$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{2a^2}\{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2\right] \cdots(15)$$

が得られる。これは互ひに直角な方向の電場と磁氣感應とが，同時に正確に測定し得ないことを示す。但しそれは電場を測る場所 (x, y, z) と磁氣感應を測る場所 (x', y', z') の間の距離が a の程度以內である場合にのみ著しく測定の精度を夫々 ΔE_x, $\Delta B'_y$ とすると，

$$\Delta E_x \Delta B_y' \gtrsim \frac{\hbar c}{a^4} \quad \cdots\cdots\cdots(16)$$

なる不確定性關係によつて制限されることになる。

併しこの制限は巨視的な測定に關する限り，何等の實質的な意味を持たない。何故かといへばそこで問題となるのは空間的に比較的に緩やかに變化する電磁場である。例へば

$$\left.\begin{array}{l} E_x \\ B_y \end{array}\right\}\sim A\sin n(x-ct) \quad \cdots\cdots\cdots(18)$$

なる形の電波を考へた場合，その波長

$$\lambda=\frac{2\pi}{n} \quad \cdots\cdots\cdots(18)$$

が a の程度以上の場合のみを考へればよい。一方に於て半徑 a なる球の中に含まれてゐる電波の勢力は

$$A^2a^3 \cdots\cdots\cdots(19)$$

の程度であり，他方に於てこの電波に伴ふ個々の光子の勢力は

$$\hbar nc \lesssim \frac{\hbar c}{a} \quad \cdots\cdots\cdots(20)$$

の程度である。從つて古典的な電波の概念が矛盾なく適用し得るためには，半徑 a なる球の中に多數の光子

が存在するといふ條件，即ち

$$A^2a^2 \geqslant hc \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(21)$$

が成立しなければならぬ。(20) によれば

$$A^2 \geqslant \frac{hc}{a^4} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(22)$$

ならば (21) の條件は滿足される。この樣な場合には ΔE_x, $\Delta B_y'$ を E_x, B_y' に比しては小さく，しかも $\frac{\sqrt{hc}}{a^2}$ に比しては大きく取り得る故，(16) は E_x, B_y' の同時測定に對する實際的な制限とはならないのである。

かくして，最初から殆んど自明でもあつた如く，巨視的電磁場 $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ は——それが通常の巨視的な測定に掛つて來る程度の強さを有する限り——通常のベクトル函數と見做して差支ないことがわかつたのである。

§ 3.′ 電荷密度の巨視的平均

次に吾々は微視的な電荷密度 σ 及び電流密度 $\boldsymbol{i}$ として，量子力學乃至量子電氣力學的な演算子を採用した場合に，果して (7) に相當する關係が得られるであらうか，得られるとすればそれは如何なる近似に於てであらうかといふ問題に答へなければならぬ。これに對する肯定的な答が存在するであらうことは當然豫想されはするが，第一の問題ほど自明ではない。

偖て微視的な電荷及び電流の主なる原因である多數の電子は，一つの量子化された場によつて記述される。非相對論的な近似に於て，更にスピンをも無視するならば，電子場を表はす變數は一つの波動函數 $\psi(xyzt)$ 及びこれに複素共軛な $\tilde{\psi}(xyzt)$ だけで足りる。そして電子が Fermi-Dirac 統計に從ふことに相當して

$$\left.\begin{array}{l}\psi\tilde{\psi}'+\tilde{\psi}'\psi=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')\\ \psi\psi'+\psi'\psi=\tilde{\psi}\tilde{\psi}'+\tilde{\psi}'\tilde{\psi}=0\end{array}\right\} \quad \cdots\cdots(23)$$

の如き交換關係が成立する。但し ψ, ψ' 等は夫々同じ時刻 t に於ける，點 (xyz) 及び點 $(x'y'z')$ の ψ 函數等を意味する。[3] 嚴密にいへばスピンを無視して置いて，直ちに (23) の如き交換關係を採用するのは正しくないのであるが，以下の推論には (23) の交換關係をそのまゝ使ふことはないから，本當の式の代りに見本として書いて置くことにする。電子の電荷を $-e$ とすると量子化された電荷密度は

$$\sigma=-e\tilde{\psi}\psi \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(24)$$

で與へられる。σ の平均値 $\bar{\sigma}$ を作るために，先づ ψ を次の如き近似的に直交する函數系で展開する。即ち $\boldsymbol{R}_\alpha$ なる點にある原子——正確にいへば原子核——に束縛され，i 番目の狀態にある電子に對する波動函數を $u_{\alpha i}(\boldsymbol{r})$ とすると，それは

$$\left.\begin{array}{l}u_{\alpha i}(\boldsymbol{r})=u_i(\boldsymbol{r}_\alpha)\\ \boldsymbol{r}_\alpha=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_\alpha\end{array}\right\} \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(25)$$

と書いてもよい。但し簡單のため媒質は全部同一種類の原子から出來てゐるものとし，單體問題的な取扱が許される程度の近似で滿足することにする。この他に——半徑 a に比して大きな長さを稜とする立方體内を動く——自由電子の波動函數 $v_i(\boldsymbol{r})$ $(i=1,2,\cdots\cdots)$ を附加へて置けば

$$u_{\alpha i}(\boldsymbol{r}),\ v_i(\boldsymbol{r}) \qquad i=1,2,\cdots\cdots \quad \alpha=1,2,\cdots\cdots(26)$$

が近似的に直交する函數系を形成するであらう。そこで

$$\psi=\sum_{\alpha,i}a_{\alpha i}u_{\alpha i}+\sum_i b_i v_i \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(27)$$

なる展開を行ひ，これに對應して

$$\tilde{\psi}=\sum_{\alpha,i}a^*_{\alpha i}u_{\alpha i}+\sum_i b^*_i\tilde{v}_i \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(28)$$

なる展開を行ふ。但し $a_{\alpha i}$, $a^*_{\alpha i}$ 及び b_i, b_i^* は夫々互ひに Hermite 共軛な演算子である。$u_{\alpha i}$, v_i なる狀態にある電子の數を表はす演算子

$$n_{\alpha i}=a^*_{\alpha i}a_{\alpha i} \qquad n_{fi}=b^*_i b_i \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(29)$$

の固有値はいづれも 0, 1, 2 に限られてゐるものとする。*

(27), (28), (29) を (24) に代入して σ の平均値を作ると

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}(\boldsymbol{r})=-\frac{e}{\Theta}\Big\{&\sum_{\alpha i}n_{\alpha i}\iiint\tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}')\tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}')\\ &\qquad\times\exp\Big(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\Big)dv'\\ &+\sum_i n_{fi}\iiint\tilde{v}_i(\boldsymbol{r}')v_i(\boldsymbol{r}')\exp\Big(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\Big)dv'\\ &+\sum_{\substack{\alpha\\ i}\Big\}\neq\Big\{\substack{\beta\\ j}}a^*_{\alpha i}a_{\beta j}\iiint\tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}')u_{\beta j}(\boldsymbol{r}')\\ &\qquad\times\exp\Big(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\Big)dv'\end{aligned}$$

---

* 交換關係 (23) から出發すれば $a_{\alpha i}$ 等に關して

$$a_{\alpha i}a^*_{\beta j}+a^*_{\beta j}a_{\alpha i}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(23)'$$

等の交換關係が得られ，$n_{\alpha i}$, n_{fi} の固有値は 0, 1 に限られることになる。併し實際はスピンの方向の違つた電子が二つ存在することに對應して，2 なる固有値も許される。

$$+\sum_{\alpha ij} a_{\alpha i}^{*} b_j \iiint \tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}') v_j(\boldsymbol{r}') \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dv'$$
$$+\sum_{\alpha ij} b_j^{*} a_{\alpha i} \iiint \tilde{v}_j(\boldsymbol{r}') u_{\alpha i}(\boldsymbol{r}') \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dv'$$
$$+\sum_{i \neq j} b_i^{*} b_j \iiint \tilde{v}_i(\boldsymbol{r}') v_j(\boldsymbol{r}') \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dv' \Bigg\} \quad \cdots\cdots(30)$$

が得られる。

この中で先づ吾々の問題となるのは右邊の第一項及び第二項である。所で第一項の積分に利いて來るのは $\boldsymbol{r}'$ が $\boldsymbol{R}_\alpha$ に近い所だけであるから，(25) 及び

$$\boldsymbol{r}_\alpha' = \boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_\alpha \quad \cdots\cdots(25)'$$

なる書きかへを行ひ，

$$\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) = \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}_\alpha'-\boldsymbol{r}_\alpha|^2}{a^2}\right)$$
$$\cong \exp\left(-\frac{\boldsymbol{r}_\alpha^2}{a^2}\right) - \boldsymbol{r}_\alpha' \operatorname{grad}_\alpha \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) \quad \cdots\cdots(31)$$

と置いて $\boldsymbol{r}_\alpha'^2$ 以上を無視すれば，第一項は

$$-\frac{e}{\Theta} \sum_{\alpha i} n_{\alpha i} \iiint |u_i(\boldsymbol{r}_\alpha')|^2 \exp\left(-\frac{\boldsymbol{r}_\alpha^2}{a^2}\right) dv_\alpha' + \frac{e}{\Theta}$$
$$\times \sum_{\alpha i} n_{\alpha i} \iiint |u_i(\boldsymbol{r}_\alpha')|^2 \boldsymbol{r}_\alpha' \operatorname{grad}_\alpha \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) dv_\alpha' \quad \cdots\cdots(32)$$

となる。但し dv_α' は $\boldsymbol{r}_\alpha'$ 空間の體積要素を意味する。そこで

$$\left.\begin{aligned} n(\boldsymbol{R}_\alpha) &= \sum_i n_{\alpha i} \iiint |u_i(\boldsymbol{r}_\alpha')|^2 dv_\alpha' = \sum_i n_{\alpha i} \\ \boldsymbol{p}(\boldsymbol{R}_\alpha) &= -e \sum_i n_{\alpha i} \iiint |u_i(\boldsymbol{r}_\alpha')|^2 \boldsymbol{r}_\alpha' dv_\alpha' \end{aligned}\right\} \quad (33)$$

と置くと，これ等は夫々 $\boldsymbol{R}_\alpha$ にある原子內の電子の數及び原子の電氣能率を表はしてゐる。これを (32) に代入し，$\sum\limits_\alpha$ なる和を積分で置きかへると，*

$$-\frac{e}{\Theta} \iiint N(\boldsymbol{R}) n(\boldsymbol{R}) \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dV$$
$$+\frac{e}{\Theta} \iiint N(\boldsymbol{R}) \boldsymbol{p}(\boldsymbol{R}) \operatorname{grad}_R \left(-\frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dV \quad \cdots\cdots(34)$$

となる。但し $N(\boldsymbol{R})dV$ は $\boldsymbol{R}$ 點附近の dV なる體積要素內にある原子の數で，grad_R は $\boldsymbol{R}$ に關する微分を意味する。(34) の第二項に部分積分を行へば，結局 (34) は——原子密度 $N(\boldsymbol{R})$ の場所的變化は極めて緩漫であるとすれば——

$$N(\boldsymbol{r})\{-e\bar{\bar{n}}(\boldsymbol{r})\} - \operatorname{div}\{N(\boldsymbol{r})\bar{\bar{\boldsymbol{p}}}(\boldsymbol{r})\} \quad \cdots\cdots(34)'$$

と書かれる。但し $\bar{\bar{n}}(\boldsymbol{r})$，$\bar{\bar{\boldsymbol{p}}}(\boldsymbol{r})$ は夫々 $\boldsymbol{r}$ 點にある原子に束縛された電子の數の巨視的平均及び原子の電氣能率の巨視的平均を意味する。

次に (30) の第二項

$$-\frac{e}{\Theta} \sum_i n_{fi} \iiint |v_i(\boldsymbol{r}')|^2 \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dv' \quad \cdots\cdots(35)$$

は明かに自由電子による電荷密度の $\boldsymbol{r}$ 點に於ける巨視的平均を意味する故，これを $-e\bar{\bar{n}}_f(\boldsymbol{r})$ と書くことにする。

倘この他に原子核——原子番號を Z とする——による巨視的電荷密度 $ZeN(\boldsymbol{r})$ を附加すると，電荷密度 σ の巨視的平均は結局

$$\bar{\bar{\sigma}}(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}) - \operatorname{div} \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) \quad \cdots\cdots(36)$$

となる。但し ρ, $\boldsymbol{P}$ の定義は

$$\left.\begin{aligned} \rho(\boldsymbol{r}) &= e\{Z - \bar{\bar{n}}(\boldsymbol{r})\} N(\boldsymbol{r}) - e\bar{\bar{n}}_f(\boldsymbol{r}) \\ \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) &= N(\boldsymbol{r}) \bar{\bar{\boldsymbol{p}}}(\boldsymbol{r}) \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots(37)$$

である。

この樣にして，(30) の右邊の第一項及び第二項だけを考へることによつて，古典電子論からの歸結たる (7) の前半と同樣な關係が得られたのであるが，これ等の項は時間的に變らない——所謂靜電氣的な——電荷の分布を表はしてゐるのである。これに對して第三項以下は主として，時間的に變化する電荷密度を表はしてゐる。例へば $u_{\alpha i}$, $u_{\beta j}$ なる狀態に對應する勢力の固有値を夫々 $E_{\alpha i}$, $E_{\beta j}$ とすると，第三項の中の $a_{\alpha i}^{*} a_{\beta j}$ は，$\exp\left\{\frac{i(E_{\alpha i}-E_{\beta j})t}{\hbar}\right\}$ なる時間因數を含んでゐる。これは

$$\nu = \frac{|E_{\alpha i}-E_{\beta j}|}{h} \quad \cdots\cdots(38)$$

なる振動數で週期的に變化する電荷を表はす。所で第三項の積分

$$\iiint \tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}') u_{\beta j}(\boldsymbol{r}') \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right) dv' \quad \cdots\cdots(39)$$

に於て，i 又は j が餘り大きくなければ $\tilde{u}_{\alpha i}(\boldsymbol{r}')$ 又は $u_{\beta j}(\boldsymbol{r}')$ が $\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{R}_\alpha$ の附近以外で急激に減少する函數となり，これに比して $\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)$ の變化は緩かであるから，後者を積分の外へ出せば，直交性の條

---

* n_α, $\boldsymbol{p}_\alpha$, $\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)$ は，一つの原子から隣の原子に移る程度の $\boldsymbol{R}_\alpha$ の變化に對して殆んど變らないから，離散的な $\boldsymbol{R}_\alpha$ の代りに連續變數 $\boldsymbol{R}$ を使つても差支ない。

件により(39)は近似的に 0 となる。從つて第三項の中で問題となるのは i 及び j が大きな場合，即ち原子內の電子の非常に高い勵起狀態間の轉移に基づく部分である。かゝる轉移は一般に波長が a の程度以上の——從つて振動數 ν が c/a 程度以下の——電磁波と關係を持つであらう。第四項及び第五項に就ても同樣で，i が充分大きな所だけが問題となる。併し實際問題として，i 乃至 i が非常に大きな場合には，電子の束縛は非常に弱く，從つて自由電子との區別は殆んどないから，さういふ部分はむしろ自由電子に關する部分に入れて了つて置く方が妥當であらう。すると第三項，第四項，第五項中で現に問題となつてゐる部分は，全部第六項中に含ませることが出來る。

そこで第六項に就て見るに，v_i, v_j が夫々 $\boldsymbol{p}_i$ 及び $\boldsymbol{p}_j$ なる運動量を持つた自由電子の 波動函數を表はすものとすると，

$$|\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_j| \gg \frac{\hbar}{a} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(39)$$

なる限り $\tilde{v}_i v_j$ は $\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)$ に比して急激に變化する函數となり，第六項中で斯樣な i, j に對應する部分は近似的に 0 となる。殘る部分は

$$\nu=\frac{|E_i-E_j|}{h}=\frac{c}{h}\left|\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{p}_i^2}-\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{p}_j^2}\right| \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(40)$$

なる振動數で時間的に比較的緩漫に變化する電荷分布を表はす。所が電荷の保存の法則によれば，時間的に變化する電荷密度は必ず——時間空間的に變化する——電流密度を伴ふ筈である。從つてこの項は次節で述べる電流密度の巨視的平均の際に一緖に取扱ふべきである。

尙以上の計算に於て出發點に取つた近似的な直交函數系 (26) は，第一に電磁場との相互作用を無視した場合の固有函數系であつた。その代りに外部電磁場として時間的に變化しない部分を取り出し，$u_{\alpha i}$, v_i はこの靜電磁場中での Schrödinger 方程式を滿足する固有函數に取ることによつて，近似は一歩進む。但しその場合電磁場としては，所謂局所電磁場を取らねばならぬのは勿論である。局所電磁場が微視的乃至巨視的電磁場と如何なる關係にあるかに就ては Lorentz 以來多くの論議が繰返されてゐる。これも矢張り量子力學乃至量子電磁力學の立場から見直さるべき問題であるが，立入つた考察は次の機會に讓りたいと思ふ。

次に電磁場の中でも時間的に變化する部分との相互作用を考慮しようとすると，攝動論の助けを借りる他ない。即ちKlein[4] や Heisenberg[5] の對應論的方法に從つて，

$$\psi=\sum_{\alpha i}(a_{\alpha i}^{(0)}+a_{\alpha i}^{(1)})u_{\alpha i}\exp\left(\frac{-iW_{\alpha i}t}{\hbar}\right)$$
$$+\sum_i(b_i^{(0)}+b_i^{(1)})v_i\exp\left(-\frac{iE_it}{\hbar}\right) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(41)$$

なる形に展開する。但し $W_{\alpha i}$, E_i は夫々 $u_{\alpha i}$, v_i なる狀態の勢力を表はす。$a_{\alpha i}^{(0)}$, $b_i^{(0)}$ は夫々攝動——即ち輻射場との相互作用——がない場合の量子化された振幅で，$a_{\alpha i}^{(1)}$, $b_i^{(1)}$ は攝動による振幅の變化をは表す。$a_{\alpha i}^{(0)}$, $b_i^{(0)}$ は時間的に變化せず，

$$n_{\alpha i}^{(0)}=a_{\alpha i}^{*(0)}a_{\alpha i}^{(0)} \qquad n_{fi}^{(0)}=b_i^{*(0)}b_i^{(0)} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(42)$$

の固有値は 0, 1, 2 に限られてゐるが，$a_{\alpha i}^{(1)}$, $b_i^{(1)}$ の方は時間と共に種々なる週期で變化する項を含んでゐる。これに伴つて $\bar{\imath}$ の表式も複雜になつて來る。

更に又，以上の取扱ひに於て原子乃至分子の電子間の相互作用は無視されてゐる。これをも考慮することも不可能ではないが,[5] 計算は大分面倒になる。これ等の問題の檢討も次の機會に讓ることにする。

§4. 電流密度の巨視的平均

非相對論近似に於て電子のスピンを無視すると，微視的電流密度は

$$\boldsymbol{i}=\frac{e\hbar i}{2m}(\tilde{\psi}\,\mathrm{grad}\,\psi-\mathrm{grad}\,\tilde{\psi}\cdot\psi)-\frac{e^2}{mc}\tilde{\psi}\boldsymbol{a}_l\psi \quad \cdots(43)$$

なる形となる。そこで前と同じく ψ, $\tilde{\psi}$ に (27), (28) なる展開を行ひ，巨視的平均値を取ると

$$\bar{\bar{\boldsymbol{i}}}=\sum_{\substack{\beta\\kl}}\bar{\bar{\boldsymbol{i}}}_{kl}^{\alpha\beta}+\sum_{\substack{\alpha\\kl}}\bar{\bar{\boldsymbol{i}}}_{kl}^{\alpha}+\sum_{\substack{\beta\\kl}}\bar{\bar{\boldsymbol{i}}}_{kl}^{\beta}+\sum_{kl}\bar{\bar{\boldsymbol{i}}}_{kl} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(44)$$

となる。但し

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{i}_{kl}^{\alpha\beta}&=\frac{e\hbar i}{2m}a_{\alpha k}^*a_{\beta l}(\tilde{u}_{\alpha k}\,\mathrm{grad}\,u_{\beta l}-\mathrm{grad}\,\tilde{u}_{\alpha k}\cdot u_{\beta l}\\
&\quad-\frac{e^2}{mc}a_{\alpha k}^*a_{\beta l}\tilde{u}_{\alpha k}u_{\beta l}\boldsymbol{a}_l\\
\boldsymbol{i}_{kl}^{\alpha}&=\frac{e\hbar i}{2m}a_{\alpha k}^*b_l(\tilde{u}_{\alpha k}\,\mathrm{grad}\,v_l-\mathrm{grad}\,\tilde{u}_{\alpha k}\cdot v_l)\\
&\quad-\frac{e^2}{mc}a_{\alpha k}^*b_l\tilde{u}_{\alpha k}v_l\boldsymbol{a}_l\\
\boldsymbol{i}_{kl}^{\beta}&=\frac{e\hbar i}{2m}b_k^*a_{\beta l}(\tilde{v}_k\,\mathrm{grad}\,u_{\beta l}-\mathrm{grad}\,\tilde{v}_k\cdot u_{\beta l})\\
&\quad-\frac{e^2}{mc}b_k^*a_{\beta l}\tilde{v}_ku_{\beta l}\boldsymbol{a}_l
\end{aligned}\right\} \quad (45)$$

$$i_{kl}=\frac{e\hbar i}{2m}b_k^* b_l(\tilde{v}_k\,\mathrm{grad}\,v_l-\mathrm{grad}\,\tilde{v}_k\cdot v_l)$$
$$-\frac{e^2}{mc}b_k^* b_l\tilde{v}_k v_l \boldsymbol{a}_l$$

である。) 又 $\boldsymbol{a}_l$ は局所電磁場に對するベクトル・ポテンシャルを表はす。一般の場合にこれを如何に取るべきかは難しい問題であるが，先づ靜電磁場の場合を考へ，外部電磁場のポテンシャルと $\boldsymbol{a}_l$ とが一致するものとしよう。そして (44) の和の中で $\alpha=\beta$, $k=l$ なる項のみを取出すことにすると

$$\bar{i}_{kk}^{\alpha\alpha}=\frac{1}{\Theta}\iiint i_{kk}^{\alpha\alpha}(\boldsymbol{r}')\exp\left(\frac{-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)dv' \cdots\cdots(46)$$

前と同樣に $u_{\alpha k}(\boldsymbol{r}')$ が $\boldsymbol{r}'\cong\boldsymbol{R}_\alpha$ なる點附近のみで大きな函數であることを考慮すると，近似的に

$$\bar{i}_{kk}^{\alpha\alpha}=\frac{1}{\Theta}\iiint i_{kk}^{\alpha\alpha}(\boldsymbol{r}_\alpha')\left\{\exp\left(\frac{-r_\alpha^2}{a^2}\right)\right.$$
$$\left.-\boldsymbol{r}_\alpha'\,\mathrm{grad}_\alpha\exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right)\right\}\cdots(47)$$

となる。この式の右邊に於て部分積分を繰返した結果は

$$\bar{i}_{kk}^{\alpha\alpha}=\left[c\,\mathrm{grad}_\alpha\exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right),\quad \boldsymbol{m}_{\alpha k}\right]\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(48)$$

となる。但し

$$\boldsymbol{m}_{\alpha k}=\frac{-e}{2mc}n_{\alpha k}\iiint u_k(\boldsymbol{r}_\alpha')$$
$$\times\left[\boldsymbol{r}_\alpha',\ -i\hbar\,\mathrm{grad}_\alpha'+\frac{e}{c}\boldsymbol{a}_l(\boldsymbol{r}')\right]u_k(\boldsymbol{r}_\alpha')dv'$$

は $u_{\alpha k}$ なる狀態にある電子による磁氣能率を表はす。これからして容易に

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{\alpha k}\bar{i}_{kk}^{\alpha\alpha}\cong c\,\mathrm{curl}\,\boldsymbol{M}\\&\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})=N(\boldsymbol{r})\bar{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{r})\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(49)$$

が得られる。但し $\bar{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ 點にある原子の磁氣能率の巨視的平均を意味する。

次に

$$\bar{i}_{kk}=\frac{1}{\Theta}\iiint i_{kk}(\boldsymbol{r}')\cdot\exp\left(\frac{-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)dv' \cdots\cdots(50)$$

であるから

$$\sum_k\bar{i}_{kk}=-\frac{e}{m}\sum_k\frac{n_{fk}}{\Theta}\iiint\tilde{v}_k(\boldsymbol{r}')\left\{-i\hbar\,\mathrm{grad}'\right.$$
$$\left.+\frac{e}{c}\boldsymbol{a}_l(\boldsymbol{r}')\right\}v_k(\boldsymbol{r}')\cdot\exp\left(\frac{-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)dv'$$
$$+\frac{e}{m}\cdot\frac{i\hbar}{2}\sum_k\frac{n_{fk}}{\Theta}\iiint\tilde{v}_k(\boldsymbol{r}')v_k(\boldsymbol{r}')$$
$$\times\mathrm{grad}'\cdot\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)dv'$$

$$=\boldsymbol{I}+\frac{e}{m}\cdot\frac{-i\hbar}{2}\,\mathrm{grad}\,\bar{n}_f\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(51)$$

となる。但し $-e\bar{n}_f$ は (35) で定義され

$$\boldsymbol{I}=-e\sum_k\frac{n_{fk}}{\Theta}\iiint\tilde{v}_k(\boldsymbol{r}')\left\{\frac{-i\hbar}{m}\mathrm{grad}'+\frac{e}{mc}\boldsymbol{a}_l(\boldsymbol{r}')\right\}$$
$$\times v_k(\boldsymbol{r}')\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^2}{a^2}\right)dv'\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(52)$$

は自由電子に原因する巨視的電流密度を意味する。

(49) 及び (52) を (44) の右邊に代入すると

$$\bar{\boldsymbol{i}}=\boldsymbol{I}+c\,\mathrm{curl}\,\boldsymbol{M}+\frac{e}{m}\frac{-i\hbar}{2}\mathrm{grad}\,\bar{n}_f+\cdots\cdots\quad(53)$$

が得られる。自由電子の巨視的な密度 $\bar{n}_f$ が場所によつて變らないとすれば，右邊の第三項はなくなり，第一項及び第二項が夫々古典電子論から導かれた關係式 (7) の右邊の第一項及び第二項に對應することになる。

以上の計算では定常的な電流乃至時間的に變化しない磁氣能率を結果する樣な項だけを取出したのであるから，(7) の右邊の第三項，即ち $\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}$ なる形の項は現はれなかつた。(44) の右邊に於て，$k\neq l$ なる部分は，(53) の右邊の……の中に含まれてゐるが，この中には時間的に變化する電流や磁氣能率の他に電氣能率の時間的變化――卽ち $\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}$ の形の項――も現はれて來る筈である。これ等の詳細は次の論文に讓ることにする。又電子のスピンの問題，個々の電子に働く局所電磁場と巨視的電磁場の關係，相對論的考察等，數多くの問題が殘されてゐるが，これ等も順次に論ずることにしたいと思ふ。

最後に計算を手傳つて頂いた野間進君に感謝すると共に，谷口工業奬勵會の援助に對し，この機會に謝意を表する次第である。

文　　獻

1) Lorentz: Theory of Electrons, Leipzig (1916), Chap. IV.
2) Van Vleck: Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities, Oxford (1932); Becker: Theorie der Elektrizität, Bd. II, Leipzig (1933).
3) Heisenberg und Pauli: ZS. f. Phys. 56 (1929), 1; 59 (1930), 168.
4) Klein: ZS. f. Phys. 41 (1927), 407.
5) Heisenberg: Ann. d. Phys. 9 (1931), 338.