古典電気力学の基礎に就て I.

湯川秀樹

(昭和19年 1月15日 講演)

§1. 緒言

古典電気力学によれば媒質中の電磁場は電場**E**, 電気変位**D**, 磁場**H**及び磁気感応**B**によって記述される. **E**と**D**, **H**と**B**の間の関係は媒質の種類及び状態によって異なる. それ等と電荷密度ρ及び電流密度**I**との間にはよく知られたMaxwellの場方程式

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

が成立する.

古典電気力学の基礎に就て I.

湯川秀樹

(昭和~~18~~19年 1月15日 講演)

§1. 緒言

古典電気力学によれば媒質中の電磁場は電場$\mathbf{E}$, 電気変位$\mathbf{D}$, 磁場$\mathbf{H}$及び磁気感度$\mathbf{B}$によって記述される. $\mathbf{E}$と$\mathbf{D}$, $\mathbf{H}$と$\mathbf{B}$の間の関係は媒質の種類及び状態によって異なる. それ等と電荷密度ρ及び電流密度$\mathbf{I}$との間にはよく知られたMaxwellの場方程式

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{curl}\mathbf{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{curl}\mathbf{H} &= \frac{4\pi}{c}\mathbf{I} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \operatorname{div}\mathbf{B} &= 0, & \operatorname{div}\mathbf{D} &= 4\pi\rho \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

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，電流等は真空中に於ける帯電粒子の運動に原因する微視的な電場 $\mathbf{e}$，磁場 $\mathbf{h}$，電荷密度 σ，電流密度 $\mathbf{i}$ の巨視的な平均値であると考へられる．例へば點 $\mathbf{r}$ に於ける巨視的電場 $\mathbf{E}$ は，この點を中心とせる半径 a なる球の内部に就ての微視的電場 $\mathbf{e}$ の平均値と定義しこれを

$$\mathbf{E} = \bar{\mathbf{e}} \qquad (2)$$

と書く．　但し球の半径 a は通常の観測に於ては無限小と見做し得る程小さいが原子の半径に比しては非常に大きいものとする．　同様にして磁気感應 $\mathbf{B}$ は微視的磁場 $\mathbf{h}$ の平均値

$$\mathbf{B} = \bar{\mathbf{h}} \qquad (3)$$

で定義される．　更に

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

で定義される電気偏極 $\mathbf{P}$ 及び磁気偏極 $\mathbf{M}$ は微視的な電荷及び電流の分布から

$$\mathbf{P} = N\bar{\bar{\mathbf{p}}} \qquad \mathbf{M} = N\bar{\bar{\mathbf{m}}} \qquad (5)$$

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数で

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

なる

で積分は媒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 $\mathbf{i}$ の平均値は

$$\left.\begin{aligned} \bar{\bar{\sigma}} &= \rho - \operatorname{div}\mathbf{P} \\ \bar{\bar{\mathbf{i}}} &= \mathbf{I} + c\,\operatorname{curl}\mathbf{M} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

となることが證明される。その際電子の速度を $\mathbf{v}$ とした場合

$$\mathbf{i} = \sigma \mathbf{v} \qquad (8)$$

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] 等の著書を参照されたい。

そこで微視的電磁場に対するLorentzの場方程式

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{curl}\ \mathbf{e} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} & \qquad \mathrm{curl}\ \mathbf{h} &= \frac{4\pi}{c}\mathbf{i} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} \\ \mathrm{div}\ \mathbf{h} &= 0 & \qquad \mathrm{div}\ \mathbf{e} &= 4\pi\sigma \end{aligned}\right\} \quad (9)$$

に(2)乃至(8)の関係を代入すると. 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学乃至量子電氣力学の立場から見ると,甚だ不満足なものである. 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単なる数函数ではなく,交換子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,電流密度などしても,量子化された波動函数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)の如き関係をそのまゝ使ふことは出来ない. これ等の點を考慮して,古典電氣力学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. 巨視的電磁場の観測可能性

量子電氣力学によれば,微視的な電場e, 磁場hは次の如き交換関係を満足する演算子である. 即ち

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

等の関係式が成立する. 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-函数で$\delta'(x-x')$はその導函数を表はす. (10)の如き交換関係はHeisenberg及びPauliによって得られたが,[3] その場合Heavide單位が用ひられてゐるために,(10)とは4πなる因数だけ違ってゐる.

巨視的な電場E及び磁束感應の定義として、前と同じく(2)及び(3)の如き関係を仮定する。但し以下の計算の便宜上半径aなる球の内部に於ての平均の代りに、これと本質的には同等な

$$\overline{e_x}(xyz) = \frac{1}{\textcircled{H}} \iiint e_x(\xi\eta\zeta)\ \exp\left(-\frac{R^2}{a^2}\right) d\xi\, d\eta\, d\zeta \qquad (11)$$

の如き平均の仕方をすることにする。但し

$$\left.\begin{aligned} \textcircled{H} &= \iiint \exp\left(-\frac{R^2}{a^2}\right) d\xi\, d\eta\, d\zeta = (\sqrt{\pi}\, a)^3 \\ R &= \sqrt{(\xi-x)^2+(\eta-y)^2+(\zeta-z)^2} \end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

すると直ちに座標に就ての微分と平均とはいつまでも順序が変られることがわかる。例へば

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

等が成立する。次に(10)の各式の左辺に現はれるe_x, e_x', 等に就て

(11)の如き平均を行ふと，先づ

$$E_x E'_y - E'_y E_x = B_x B'_y - B'_y B_x = 0 \tag{14}$$

が得られる．これは巨視的な電場の各成分同士及び磁気感應の成分同士は互ひに交換可能なことを示す．次に(10)の最後の式の両辺に就て同様な手続を施すと

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

が得られる．これは互ひに直角な方向の電場と磁気感應とが，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$(x\ y\ z)$と磁気感應を測る場所$(x'\ y'\ z')$の間の距離がaの程度以内である場合にのみ著しく．測定の積度を夫々ΔE_x，$\Delta B'_y$とすると，

精？

$$\Delta E_x \Delta B'_y \gtrsim \frac{\hbar c}{a^4} \tag{16}$$

なる不確定性関係によっ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関する限り，何等の實際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変化する電磁場である．例へば

$$\left.\begin{matrix} E_x \\ B_y \end{matrix}\right) \sim A \sin \kappa (x - ct) \qquad (17)$$

なる形の電波を考へた場合その波長

$$\lambda = \frac{2\pi}{\kappa} \qquad (18)$$

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

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

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

$$\hbar \kappa c \lesssim \frac{\hbar c}{a} \qquad (20)$$

の程度である．従って古典的な電波の概念が矛盾なく適用し得るためには，半径 a なる球の中に多数の光子が存在するといふ條件，即ち

$$A^2 a^3 \gg \hbar n c \qquad (21)$$

が成立しなければならぬ．(20)によれば

$$A^2 \gg \frac{\hbar c}{a^4} \qquad (22)$$

ならば(21)の條件は滿足される．この様る場合にはΔE_x, $\Delta B_y'$をE_x, B_y'に比しては小さく，しかも$\frac{\sqrt{\hbar c}}{a^2}$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，最初から殆ど自明でもあった如く，巨視的電磁場$\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$はそれが通常の巨視的な測定に掛っ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ったのである．

§ 3. 電荷密度の巨視的平均

次に吾々は微視的な電荷密度ρ及び電流密度$\mathbf{i}$として，量子力学乃至量子電気力学的な演算子を採用した場合に，果して(7)に相当する関係が得られるであろうか，得られるとすればこれは如何なる近似に於てゞ

あらうかといふ問題に答へなければならぬ　これに対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~~[illegible]~~主なる原因である多数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、電子場を表はす変数は一つの波動函数 $\psi(xyzt)$ 及びこれに~~共~~複素共軛な $\tilde{\psi}(xyzt)$ だけで足りる。そして電子がFermi-Dirac統計に従ふことに相當して

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

の如き交換関係が成立する。(3) 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 函数等を意味する。

(23)の交換関係をそのまゝ使ふことはないから、本當の式の~~裏~~代りに見なと

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

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

で与へられる。σ の平均値 $\overline{\overline{\sigma}}$ を作るために先づ ψ を次の如き近似的に直交する函数系で展開する。即ち $\mathbf{R}_\alpha$ なる點にある原子――正確にいへば原子核――に束縛され、i 番目の状態にある電子に対する波動函数を ~~$u_{\alpha i}(\mathbf{r})$~~ $u_{\alpha i}(\mathbf{r})$ とすると、それは

$$\left.\begin{aligned} u_{\alpha i}(\mathbf{r}) &= u_i(\mathbf{r}_\alpha) \\ \mathbf{r}_\alpha &\equiv \mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha \end{aligned}\right\} \qquad (25)$$

と書いてもよい。但し簡単のため媒質は全部同一種類の原子から出来てゐるものとし、單体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――半径 a に比して大きな長さを稜とする立方体内を動く――自由電子の波動函数 $v_i(\mathbf{r})$ $(i = 1, 2, \cdots)$ を附加して置けば

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

が近似的に直交する函数系を形成するであらう。そこで

$$\psi = \sum_{\alpha,i} a_{\alpha i}\, u_{\alpha i} + \sum_i b_i v_i \tag{27}$$

なる展開を行ひこれに対應して

$$\tilde{\psi} = \sum_{\alpha,i} a^*_{\alpha i}\, \tilde{u}_{\alpha i} + \sum b^*_i \tilde{v}_i \tag{28}$$

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 なる状態にある電子の数を表はす演算子

$$n_{\alpha i} = a^*_{\alpha i}\, a_{\alpha i} \qquad n_{fi} = b^*_i b_i \tag{29}$$

の固有値はいづれも 0, 1, 2. に限られてゐるものとする。†

† 交換関係(23)から出発すれば $a_{\alpha i}$ 等に関して

$$a_{\alpha i}\, a^*_{\beta j} + a^*_{\beta j}\, a_{\alpha i} = \delta_{\alpha\beta}\,\delta_{ij} \tag{23'}$$

等の交換関係が得られ、$n_{\alpha i}$, $n_{f i}$ の固有値は 0, 1 に限られることになる。（係1 実際はスピンの方向の違った電子が二つ存在することに対応して, 2 なる固有値も許される。）

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

$$\bar{\bar{\sigma}}(r) = -\frac{e}{Ⓗ}\Big\{\sum_{\alpha i} n_{\alpha i}\iiint \tilde{u}_{\alpha i}(r')u_{\alpha i}(r')\exp\Big(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\Big)dv'$$

$$+\sum_{i} n_{f i}\iiint \tilde{v}_i(r')v_i(r')\exp\Big(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\Big)dv'$$

$$+\sum_{\substack{\alpha \\ i} \neq \substack{\beta \\ j}} a^*_{\alpha i}a_{\beta j}\iiint \tilde{u}_{\alpha i}(r')u_{\beta j}(r')\exp\Big(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\Big)dv'$$

$$+\sum_{\alpha i j} a^*_{\alpha i}b_j\iiint \tilde{v}_j(r')u_{\alpha i}(r')\exp\Big(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\Big)dv'$$

$$+\sum_{\alpha i j} b^*_j a_{\alpha i}\iiint \tilde{v}_j(r')u_{\alpha i}(r')\exp\Big(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\Big)dv'$$

$$+\sum_{i\neq j} b_i^* b_j \iiint \bar{v}_i(\mathbf{r}') v_j(\mathbf{r}') \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2}{a^2}\right) dv' \Big\} \qquad (30)$$

が得られる。

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

$$\mathbf{r}'_\alpha \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{R}_\alpha \qquad (25)'$$

なる書きかへを行ひ

$$\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2}{a^2}\right) = \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}'_\alpha-\mathbf{r}_\alpha|^2}{a^2}\right)$$

$$\cong \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) - \mathbf{r}'_\alpha \,\mathrm{grad}_\alpha \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) \qquad (31)$$

と置いて r'^2_α 以上を無視すれば、第一項は

$$-\frac{e}{Ⓗ}\sum_{\alpha i} n_{\alpha i} \iiint |u_i(\mathbf{r}'_\alpha)|^2 \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) dv'_\alpha + \frac{e}{Ⓗ}\sum n_{\alpha i} \iiint |u_i(\mathbf{r}'_\alpha)|^2\, \mathbf{r}'_\alpha \;\mathrm{grad}_\alpha \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right) dv'_\alpha \qquad (32)$$

となる．但し dv'_α は r'_α 空間の体積要素を意味する．そこで

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

と置くと，これ等は夫々 R_α にある原子内の電子の数及び原子の電気能率を表はしてゐる．これを(32)に代入し，$\sum_\alpha$ なる和を積分で置きかへると†

$$-\frac{e}{Ⓗ}\iiint N(R)\,n(R)\exp\left(-\frac{|R-r|^2}{a^2}\right)dv$$

$$+\frac{e}{Ⓗ}\iiint N(R)\,P(R)\,\mathrm{grad}_R\left(-\frac{|R-r|^2}{a^2}\right)dv \qquad (34)$$

† n_α, p_α, $\exp\left(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\right)$ は一つの原子から隣の原子に移る程度の R_α の変化に対して殆んど変らないから，離散的な R_α の代りに連續変数 R を使っても差支へない．

となる．但し $N(\mathbf{R})\,dv$ は $\mathbf{R}$ 點附近の dv なる體積要素内にある原子の数で，grad_R は $\mathbf{R}$ に関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 $N(\mathbf{R})$ の場所的変化は極めて緩漫であるとすれば ——

$$N(r)\{-e\,\bar{\bar{n}}(r)\} - \mathrm{div}\{N(r)\,\bar{\bar{\mathbf{P}}}(r)\} \qquad (34)'$$

と書かれる．但し $\bar{\bar{n}}(r)$, $\bar{\bar{\mathbf{P}}}(r)$ は夫々 r 點にある原子に束縛された電子の数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

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

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

尚この他に原子核 —— 原子番号を Z とする —— による巨視的電荷密度 $ZeN(r)$ を附加すると，電荷密度の巨視的平均は結局

$$\bar{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}) \qquad (36)$$

となる．但し ρ, $\mathbf{P}$ の定義は

$$\left.\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= e\{Z - \bar{\bar{n}}(\mathbf{r})\} N(\mathbf{r}) - e\,\bar{\bar{n}}_f(\mathbf{r}) \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}) &= N(\mathbf{r})\,\bar{\bar{\mathbf{P}}}(\mathbf{r}) \end{aligned}\right\} \qquad (37)$$

である．

この様にして，(30)の右辺の第一項及び第二項だけを考へることによって古典電子論からの歸結たる(7)の前半と同様な関係が得られたのであるが，これ等の項は時間的に変らない —— 所謂静電気的な —— 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変化する電荷密度を表してゐる．例へば $u_{\alpha i}$, $u_{\beta j}$ なる状態に対応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 $\exp\left\{\frac{i(E_{\alpha i} - E_{\beta j})t}{\hbar}\right\}$ なる時間因数を含んでゐる．これは

$$\nu = \frac{|E_{\alpha i} - E_{\beta j}|}{\hbar} \qquad (38)$$

なる振動数で周期的に変化する電荷を表はす．所で第三項の積分

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

に於て，i又はjが餘り大きくなければ$u_{\alpha i}(r')$又は$u_{\beta j}(r')$が$r'=R_\alpha$附近以外で急激に減少する函数となり，これに比して$\exp\left(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\right)$の変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件により(39)は近似的に0となる．従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，即ち原子内の電子の非常に高い励起状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 —— 従つて振動数νが$\frac{c}{a}$程度以~~上~~下の —— 電磁波と関係を持つであらう．

第四項及び第五項に就ても同様でiが充分大きな所だけが問題となる．併し実際問題としてi乃至jが非常に大きな場合には，電子の束縛は非常に弱く，従つて自由電子との区別は殆んどないから，さういふ部分はむしろ自由電子に関する部分に入れて了つて置く方が妥当であらう．す

ると第三項、第四項、第五項中で既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来る。

そこで第六項に就て見るに、ψ_i, ψ_j が夫々 p_i 及び 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、

$$|p_i - p_j| \gg \frac{\hbar}{a} \qquad (39)$$

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

$$\nu = \frac{|E_i - E_j|}{h} = \frac{c}{h}\left|\sqrt{m^2c^2+p_i^2} - \sqrt{m^2c^2+p_j^2}\right| \qquad (40)$$

なる振動数で時間的に比較的緩慢に変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変化する電荷密度は必ず時間空間的に変化する電流密度を伴ふ筈である。従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緒に取扱ふべきである。

　尚以上の計算に於て出発点に取った近似的な直交函数系(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数系であった。その代りに外部電磁場として時間的に変化しない部分を取り出し、$u_{\alpha i}$, u_i 等はこの静電磁場中での ~~Schrö~~ Schrödinger 方程式を満足する固有函数に取ることによって、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。有効電磁場が微視的乃至巨視的電磁場と如何なる関係にあるかに就ては Lorentz 以来多くの論議が繰返されてゐる。これも矢張り量子力学乃至量子電磁力学の立場から見直さるべき問題であるが、立入った考察は次の機会に譲りたいと思ふ。

　次に電磁場の中でも時間的に変化する部分との相互作用を考慮しようとすると、摂動論の助けを借りる他ない。即ち Klein(4) や Heisenberg(5) の対應論的方法に従って

$$\Psi = \sum_{\alpha i} \left(a^{(0)}_{\alpha i} + a^{(1)}_{\alpha i} \right) u_{\alpha i} \exp\left(\frac{-iW_{\alpha i}t}{\hbar} \right) + \sum_{i} \left(b^{(0)}_{i} + b^{(1)}_{i} \right) v_i \exp\left(-\frac{iE_i t}{\hbar} \right) \qquad (41)$$

なる形に展開する。但し$W_{\alpha i}$, E_iは夫々$u_{\alpha i}$, v_iなる状態の勢力を表はす。$a^{(0)}_{\alpha i}$, $b^{(0)}_i$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、$a^{(1)}_{\alpha i}$, $b^{(1)}_i$は攝動による振幅の変化を表はす。$a^{(0)}_{\alpha i}$, $b^{(0)}_i$は時間的に変化せず、

$$n_{\alpha i} = a^{*(0)}_{\alpha i}\, a^{(0)}_{\alpha i} \qquad n_{fi} = b^{*(0)}_{i}\, b^{(0)}_{i} \qquad (42)$$

の固有値は0, 1, 2に限られてゐるが、$a^{(1)}_{\alpha i}$, $b^{(1)}_i$の方は時間と共に種々なる周期で変化する項を含んでゐる。これに伴って$\overline{\overline{\sigma}}$の表式も複雑になって来る。

更に又、以上の取扱ひに於て原子乃至分子間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。これ等の問題の検討も次の機会に譲ることにする。

§4. 電流密度の巨視的平均

非相対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

$$i = \frac{e\hbar i}{2m}\left(\tilde{\psi}\,\mathrm{grad}\,\psi - \mathrm{grad}\,\tilde{\psi}\cdot\psi\right) - \frac{e^2}{mc}\tilde{\psi}\,a_e\,\psi \qquad (43)$$

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

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

となる。但し

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

である。又 a_l は局所電磁場に対するベクトル・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静電磁場の場合を考へ外部電磁場のポテンシャルと 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

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

前と同様に $u_{\alpha k}(r')$ が $r' \cong R_\alpha$ なる点附近のみで大きな函数であることを考慮すると、近似的に

$$\bar{\bar{i}}^{\alpha\alpha}_{kk} \cong \frac{1}{Ⓗ}\iiint i^{\alpha\alpha}_{kk}(r'_\alpha)\left\{\exp\left(\frac{-r'^2_\alpha}{a^2}\right) - r'_\alpha \operatorname{grad}_\alpha \exp\left(-\frac{r_\alpha^2}{a^2}\right)\right\}dv' \qquad (47)$$

となる. この式の右辺に於て部分積分を~~実行~~施した結果は

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

となる. 但し

$$\mathfrak{m}_{\alpha k} = \frac{-e}{2mc} n_{\alpha k} \iiint \tilde{u}_k(r'_\alpha) \left[\mathbf{r}'_\alpha, -i\hbar \ \mathrm{grad}'_\alpha + \frac{e}{c} a_e(r') \right] u_k(r'_\alpha) dv'$$

は $u_{\alpha k}$ なる状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

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

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

次に

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

であるから

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

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

となる。但し $-e = n_f$ は (35) で定義され

$$I = -e\sum_k \frac{n_{fk}}{\textcircled{H}}\iiint \tilde{v}_k(r')\left\{\frac{i\hbar}{m}\,\mathrm{grad}' + \frac{e}{mc}a_l(r')\right\} v_k(r')\exp\left(-\frac{|r'-r|^2}{a^2}\right)dv' \qquad (52)$$

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) の右辺に代入すると

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

が得られる。自由電子の巨視的な密度 $\bar{n}_f$ が場所によって変らないとすれば、右辺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関係式(7)の右辺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変化しない磁氣能率を結果する様な項だけを取出したのであるから、(7)の右辺の第三項、即ち $\frac{\partial P}{\partial t}$ なる形の項は現れなかった。(44)の右辺に於て、$k \neq l$ なる部分は、(53)の右辺の……の中に含まれてゐるが、この中には時間的に変化する電流や磁氣能率の他に、電氣能率の時間的変化——即ち $\frac{\partial P}{\partial t}$ の形の項——も現はれて来る筈である。これ等の詳細は次の論文に譲ることに

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、相対論的考察等、数多くの問題が残されてゐるが、これ等も順次に論ずることにしたいと思ふ。

最後に計算を手伝つて頂いた野間進君に感謝すると共に、谷口工業奨勵會の援助に對し、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.

6頁

補遺及び訂正

i) §3に於て電子のスピンをも考慮すれば、ψ, $\tilde{\psi}$ の代りに当然2個乃至それ以上の成分を持った波動函数 ψ_i, $\tilde{\psi}_i$ 等をとらねばならぬ。従って交換関係も(23)の代りに

$$\psi_i \tilde{\psi}_j' + \tilde{\psi}_j' \psi_i = \delta_{ij}\,\delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z') \qquad (23)'$$

等となる。~~のはいふまでもない~~

ii) 13頁 (51)の表式は

$$\sum_k \bar{\bar{i}}_{kk} = -\frac{e}{2m}\sum_k \frac{n_{fk}}{\Theta}\iiint \Big[\tilde{v}_k(r')\Big\{-i\hbar\,\mathrm{grad}' + \frac{e}{c}a_e(r')\Big\} v_k(r') - v_k(r')\Big\{-i\hbar\,\mathrm{grad}' - \frac{e}{c}a_e(r')\Big\}\tilde{v}_k(r')\,dv'$$

$$\equiv \mathbf{I} \qquad (51)$$

と書き改める。従って(52)式は不必要で、(53)式も

$$i = \mathbf{I} + c\,\mathrm{curl}\,\mathbf{M} + \cdots \qquad (52)$$

と書きかへられる。