

# 分子の運動方程式を表現する等価回路

永井 信夫

## 目次

- I. はじめに
- II. 微小振動はバネと同じ
  - 2.1 安定点のまわりの振動
  - 2.2 連成振動に波を見る
  - 2.3 N個の分子 (1次元結晶)
  - 2.4 連続体への極限操作 (連続極限)
- III. エネルギーの伝送を主体とする回路理論
  - 3.1 回路の基本構造
  - 3.2 過渡現象などの回路理論の特長
  - 3.3 分布定数回路は空間1次元の波動回路
- IV. LC伝送回路
  - 4.1 LC回路の基礎
  - 4.2 2つの閉路をもつLC回路
  - 4.3 集中定数素子LCのエネルギー
  - 4.4 無損失素子による周期構造系
- V. 連続な極限体に対する等価回路の方程式
  - 5.1 1つの波動方程式を満足する2つの波動関数
  - 5.2 連立偏微分方程式の解
- VI. むすび

## I. はじめに

情報科学で重要なのは、情報を「入力し、処理し、出力する」ことである。回路理論においても入出力ポートが重要な働きをし、それを活かすために、2ポートインピーダンス行列や縦続行列が生まれ、回路理論では特に縦続行列が重要な道具となっている。

回路理論では、振動や波動を用いてエネルギーを入力ポートから出力ポートへ伝えるこ

とを取り扱う。振動や波動のことを取り扱う分野に「連続体力学」[1]や「楽器の物理学」[2]があるが、それらの教科書ではエネルギーの伝わり方についての記述は極めて少なく、連続体力学では力学に力点が置かれているために固有振動の記述が多く、楽器の物理学では音の源になる振動の記述が多い。一方、回路理論では周期的な振動を利用してエネルギーや信号を伝えることに重点がおかれているために、インピーダンスマッチングが重要となる。

本文では、分子の運動方程式を適切に表現する等価回路を提案し、分子の振動に回路理論を応用することが可能なことを示す。

## II. 微小振動はバネと同じ

文献[1]によると、ポテンシャルの中に置かれた分子が、その最小点(安定点)のまわりでする運動で、そのポテンシャルが放物線の場合は、バネの運動と等価になることが示されている。そこで、本章ではその物理的意味を説明し、次章でそれと等価な回路表示を求めてみよう。

### 2.1 安定点のまわりの振動

分子1は原点に止めておいて、放物線ポテンシャル $\phi(r)$ の中の分子2の運動を調べてみよう。

分子2は $\phi(r)$ が最小値 $\phi_m$ をとる位置 $r=a$ の近くにとどまり、 $\phi(r)$ は $r=a$ を軸と

---

キーワード：分子の運動方程式，分子の運動を表す等価回路，運動の変位と等価な電荷  
連続体の振動の等価回路，等価回路の電圧と電流が満たす波動方程式

する放物線で与えられるから、

$$\phi(r) \cong \phi_m + \frac{K}{2}(r-a)^2 \quad (1)$$

ここに、 $K$  はバネによる力と等価のため、バネ係数と呼ぶ。

ポテンシャルが式(1)の形のとき、 $r$ にある分子2に働く力を $f(r)$ と置く。分子2が $r$ から微小 $dr$ だけ動いたとすると、分子1は、 $f(r)dr$ の仕事をする。一方、ポテンシャルはこの点から分子2を同じ距離だけ遠ざけるために外からなすべき仕事に等しいから、分子1のする仕事はポテンシャルの減り分に等しく、

$$f(r)dr = \phi(r) - \phi(r+dr) \cong -\frac{d\phi(r)}{dr} dr$$

$$\therefore f(r) = -\frac{d\phi(r)}{dr} \quad (2)$$

すなわち、ポテンシャルによる力は、その微係数の逆符号に等しい。式(1)のポテンシャルに対する力は、

$$f(r) = -K(r-a) \quad (3)$$

結局、分子2(質量 $M$ )に対する運動方程式は、

$$M \frac{d^2}{dt^2} r = f(r) = -K(r-a) \quad (4)$$

安定点からのずれ(変位)を

$$u = r - a \quad (5)$$

で定義すると、この運動方程式を

$$M \frac{d^2}{dt^2} u = -Ku \quad (6)$$

と簡単な形にできる。

なお、この系の全エネルギーは、運動エネルギーとポテンシャルとの和であり、次のように表される。

$$E \cong \phi_m + \frac{M}{2} \left( \frac{d}{dt} u \right)^2 + \frac{K}{2} u^2 \quad (7)$$

運動方程式(6)を解くにはラプラス変換を用いて、式(6)を次のように変換する。

$$s^2 U(s) + \frac{K}{M} U(s) = 0$$

$$\therefore s = \pm j\omega = \pm j\sqrt{\frac{K}{M}} \quad (8a)$$

と表すことができるので、次式を得る。

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{M}} \quad (8b)$$

## 2.2 連成振動に波を見る

ここでは、原点と $3a$ のところに分子を止めて置き、動きうる2個の分子(分子1と2)のときを考え、各分子の平衡位置をそれぞれ $a$ 、 $2a$ とし、それぞれの変位を $u_1 = x_1 - a$ 、 $u_2 = x_2 - 2a$ とすると、分子1と2の受ける全ポテンシャルは、

$$\Phi = \phi(a+u_1) + \phi(a+u_2-u_1) + \phi(a-u_2) + \phi(2a-u_1) + \phi(2a+u_2) \quad (9)$$

各分子の変位が間隔 $a$ に比べて十分小さいときは

$$\Phi = 3\phi_m + 2\phi(2a) + K(u_1^2 - u_1 u_2 + u_2^2) \quad (10)$$

分子1および2に働く力を $f_1$ および $f_2$ とすると、全エネルギーを用いて次のように書ける。

$$f_1 = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_1} = -K(2u_1 - u_2) \quad (11a)$$

$$f_2 = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_2} = -K(2u_2 - u_1) \quad (11b)$$

上式から、運動方程式が次のように得られる。

$$M \frac{d^2 u_1}{dt^2} = -2Ku_1 + Ku_2 \quad (12a)$$

$$M \frac{d^2 u_2}{dt^2} = Ku_1 - 2Ku_2 \quad (12b)$$

このように結合しあった振動子を連成(結合)振子と呼び、その全体としての振動を連成振動と呼ぶ。

上の運動方程式は連立微分方程式であり、行列の固有値問題として解くことができ、固有振動と固有モードとが得られる。この運動方程式に回路理論を適用するときは、上の運動方程式とは少し異なる方程式の固有値問題として解くために、2つの分子の連成振動の

問題はここまでにする。

### 2.3 N個の分子（1次元結晶）

こんどは、原点に1個の分子を止めて、 $x$ 軸上に次々に分子を置いてゆく。各分子は分子間ポテンシャルの最小位置に落ち着き、隣り合う分子が互いに同じ距離  $a$  だけ隔たって規則正しく並んだ結晶となる。こうしておいて、もう一方の端の分子も止めておき、間に挟まれた動きうる分子の数が  $N$  個であるとす。全体の分子の数は  $N+2$  個であり、結晶の全長は  $L=(N+1)a$  である。左端の分子を原点に置いたから、右端の分子は、 $(N+1)a$  の位置にくる。左端を0番目とし、続く分子に、1, 2, 3, ...と番号を付ける。こうすれば、 $k$  番目の分子の格子点  $X_k$  は、

$$\begin{aligned} X_0 &= 0, X_1 = a, X_2 = 2a, \dots, X_k = ka \\ \dots, X_{n+1} &= (N+1)a = L \end{aligned} \quad (13a)$$

である。任意の時刻における  $k$  番目の分子の位置を  $x_k$  としよう。この分子の格子点からの変位  $u_k$  は

$$u_k = x_k - X_k = x_k - ka \quad (13b)$$

で与えられる。

この結晶の全ポテンシャルは、隣り合う分子間の項だけを残せば、十分良い近似で、

$$\begin{aligned} \Phi &= \phi(x_1) + \phi(x_2 - x_1) + \dots + \phi(x_{k+1} - x_k) \\ &\quad + \dots + \phi(X_{N+1} - x_N) \end{aligned} \quad (14a)$$

としてよい。第1項は分子0と1の間のポテンシャル、第2項は分子1と2の間のポテンシャル、...である。そこで、各項の変数を式(13b)の変位で書き換えれば、

$$\begin{aligned} x_1 &= a + u_1, x_2 - x_1 = a + u_2 - u_1, \dots, \\ x_{k+1} - x_k &= a + u_{k+1} - u_k, \dots, \\ X_{N+1} - x_N &= a - u_N \end{aligned} \quad (14b)$$

であって、すべて  $a$  に近いから、各項を  $a$  のまわりでテイラー展開し、変位の2次までを残すと、

$$\begin{aligned} \Phi &= \phi_0 + (K/2)\{u_1^2 + (u_2 - u_1)^2 + \dots \\ &\quad + (u_{k+1} - u_k)^2 + \dots + (u_N - u_{N-1})^2 + u_N^2\} \end{aligned} \quad (14c)$$

$$K = \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x=a} \quad (14d)$$

となる。これが全ポテンシャルに対する調和近似である。また、 $\Phi_0$  は各分子を格子点に止めて置いたときの全ポテンシャルの値である。

$\Phi$  を微分すれば、 $k(2 \leq k \leq N-1)$  番目の分子に働く力  $f_k$  は、

$$f_k = -\frac{\partial}{\partial u_k} \Phi = -K(u_k - u_{k-1}) + K(u_{k+1} - u_k) \quad (15a)$$

となる。ただし、分子1に働く力は

$$f_1 = -Ku_1 + K(u_2 - u_1) \quad (15b)$$

で与えられ、分子  $N$  の  $f_N$  は

$$f_N = -K(u_N - u_{N-1}) + Ku_N \quad (15c)$$

である。

上に得られた力を用いれば、次の運動方程式が得られる。

$$M \frac{d^2}{dt^2} u_k = K(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}) \quad (16a)$$

$$\text{ただし, } u_0 = 0, u_{N+1} = 0 \quad (16b)$$

としておけば、式(16a)は  $(1 \leq k \leq N)$  を満たす全ての  $k$  で成り立つ。

式(16a)の解は

$$u_k(t) = C_k \exp(-i\omega t) \quad (17)$$

(ただし、 $i$  は虚数単位の  $i = \sqrt{-1}$  を表す。)

とにおいて、固有角振動数および固有ベクトルが求められる。

### 2.4 連続体への極限操作（連続極限）

前節で求めた1次元結晶を連続体と見なすためには、分子の平均間隔  $a$  に比べて十分長い尺度で見ればよい。これは  $a$  を十分小さな長さと考えすることに相当する。このことは、全体としての結晶の長さは巨視的なある値  $L$  に固定するので、分子の数  $N$  を非常に大きな数にすることに相当する。

さらに、平均密度  $\rho = M/a$  を固定する。1次元的な物質の密度は、単位長さあたりの質量を意味するので、線密度と呼ばれる。さら

に、力の代表として、伸びがちょうど格子間隔に等しいときの力

$$T = Ka = a \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) \Big|_{x=a} \quad (18)$$

を取ろう。以上をまとめて、結晶から連続体への極限操作は、

$$(1) a \text{ を小さく, } N \text{ を大きく} \quad (19a)$$

$$(2) \text{線密度 } \rho = M/a \text{ は固定} \quad (19b)$$

$$(3) \text{力 } T = Ka = a \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) \Big|_{x=a} \text{ は固定} \quad (19c)$$

によって考える。

この極限を取ると、分子は連続に配置するので、結晶は弦となり、分子の番号ごとにとびとびに考えた変位  $u_n(t)$  は、時間だけでなく位置の関数  $u(X_n, t)$ 、つまり、

$$u_n(t) \rightarrow u(X_n, t) \quad (19d)$$

と考えられるようになる。では、変位の関数に対する運動方程式はどのようなのであろうか。結晶の運動方程式(16a)は変位の関数で、

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(X_n, t) = K \{ u(X_{n-1}, t) - 2u(X_n, t) + u(X_{n+1}, t) \} \quad (20a)$$

と書き直せる。上で、加速度を時間の偏微分にしたのは、変位が時間だけでなく、場所にもよる関数となったためである。ところで、上式の右辺のカッコの中を、

$$\{ u(X_{n+1}, t) - u(X_n, t) \} - \{ u(X_n, t) - u(X_{n-1}, t) \} \quad (20b)$$

と、隣り合う分子の変位の差の形に書こう。連続体への極限(1)から、分子間距離  $a$  は微小量とみなせるから、テイラー展開の  $a$  の1次の項までを残せば、差分の各々は

$$u(X_{n+1}, t) - u(X_n, t) = a \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \Big|_{x=X_n} \quad (20c)$$

$$u(X_n, t) - u(X_{n-1}, t) = a \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \Big|_{x=X_{n-1}} \quad (20d)$$

と近似できる。これらを式(20b)に代入すれば、変位の1階導関数の差分となるが、それ

に対してもう一度テイラー展開を使えば、運動方程式(20a)は、

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(X_n, t) = Ka^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \Big|_{x=X_n} \quad (21a)$$

となる。両辺を  $a$  で割れば、連続極限(2), (3)より、

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = T \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \quad (21b)$$

が得られる。ただし、分子の場所  $X_n$  も、連続の変数  $x$  に書き換えられている。

こうして、分子の運動方程式が、すべて連続の場合の物理量の間の方程式に帰着した。変位は時間だけでなく、空間の各点の関数として、場になり、質量は弦の平均密度( $\rho$ )に、また、バネ定数は力の代表( $T$ , 張力)に置き換えられた。なお、式(21b)を(1次元の)波動方程式と呼ぶ。

従来、波動方程式は1次元の波動方程式も含めて三角関数を用い、フーリエ解析で解かれている。一方、分布定数回路では1次元の波動方程式に相当する無損失電信方程式を用いて、その方程式を指数関数で解いて、エネルギーの伝送などを制御している。この2つの取り扱いの違いはなんであろうか。この違いこそが回路理論の特長を表していると考えられるので、これまでに述べたバネの振動を回路理論で解析する試みをしてみよう。

### III. エネルギーの伝送を主体とする回路理論

物理学では、II章で引用した文献[1]ではバネの振動を基にした振動の現象あるいは周期的構造の格子振動から導かれる波の群速度[3]による移動などが考察されている。一方、回路理論では電気現象特有の電圧と電流とを用いて、任意の量を出力ポートに伝えることを制御するフィルタの設計ができる。その設計には電圧と電流との比であるイン

ピーダンスが用いられる。

ここでは、エネルギーの伝送を回路理論で考える基礎を述べ、バネを伝わるエネルギーのことを考える基を述べておく。

### 3.1 回路の基本構造

文献 [4] にも述べたが、筆者が考える回路理論における回路構造をここでも簡単に説明しておく。

エネルギーの伝搬を問題にする原点は文献 [5] のファインマンによる空気およびガラス中の光子の伝搬であり、空気層は光子を送り込むところと、光子を受け取るところに分かれていて、その間にガラスが挟まれている。この状態を回路理論のモデルで表すと、(1)光子を送り込むところが電源部であり、(2)回路理論の主要部は伝送回路と呼ばれる受動回路部分であり、ガラスがその受動回路部分を表す回路理論の主要部でありブラックボックスで表され、(3)光子を受け取るところが負荷であり、図 1 に示すモデルとなる。なお、図 1 にはスイッチが入っているが、それによって過渡応答や非定常応答が求まり、このスイッチによって「時間の矢」、すなわち、時間は逆流し得るのかどうかを考察することに用いる。

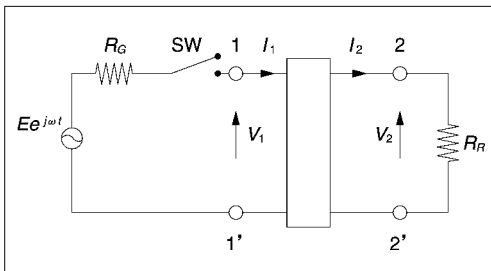


図 1 電源と負荷の間に回路としてのブラックボックスを接続した一般的な回路

Fig.1 Circuit representation containing a generator, a black box as a circuit and a load.

### 3.2 過渡現象などの回路理論の特長

ファインマン [5] は過渡応答を考えてはいないが、私は回路理論や信号処理を前提としているので、過渡応答を重要視している。そのため、電源や負荷を常に考え、「ラプラス変換」による波動の解析を考えている。また、文献 [5] に単色光の光子を取り扱うと仮定しているが、これから扱う波動も、単一周波数の波動を取り扱うことにする。すなわち、[仮定 1] 過渡応答も取り扱えるようにラプラス変換を用いる。

[仮定 2] 入力電源として電圧源を用い、単一角周波数  $\omega$  の波動  $Ee^{j\omega t}$  を取り扱う。

なお、ラプラス変換を用いた単一角周波数  $\omega$  の波動であるから、ラプラス変換された波動  $E_C(s)$  は次のように表される。

$$E_C(s) = \frac{E}{s - j\omega} \quad (22a)$$

また、ラプラス逆変換された時間の関数  $e_C(t)$  は次のように表され、スイッチの働きも入っている。

$$e_C(t) = \begin{cases} Ee^{j\omega t} & \dots t \geq 0 \\ 0 & \dots t < 0 \end{cases} \quad (22b)$$

回路理論で用いられる入射波は電源で定まる「最大有能電力」であるので、入出力ポートの状態を常に考えなければならない。また、波動に関する回路は信号がどのように伝わるかが主要な問題なのと、式の中にインピーダンスが表されているようにするために、縦続行列が適している。縦続行列は、電圧  $V_1$ ,  $V_2$  および電流  $I_1$ ,  $I_2$  を用いて、次のように表される。

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ I_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_2 \\ I_2 \end{pmatrix} \quad (23)$$

ただし、縦続行列では  $I_2$  の電流の流れる方向は左から右に流れる方向を正としている。

図 1 に示す回路のブラックボックスを伝送回路とするために、有効電力の伝送が主要な問題となる共鳴現象などでは、電圧源の内部抵抗を  $R_G$ 、負荷抵抗を  $R_R$  とし、次の条件が

満たされているとする。

$$0 < R_C < \infty \quad (24a)$$

$$0 < R_R < \infty \quad (24b)$$

なお、 $R_C$  や  $R_R$  がゼロや $\infty$ になる場合は、回路理論では特別な意味を持ち、固有値問題となる。

ところで、ブラックボックスの部分は理想的な状態では無損失回路を用いるべきであり、無損失回路の縦続行列は次のように与えられる [6]。

[無損失なるための縦続行列の条件] 2端子対回路が無損失なるための縦続行列の条件は次のように与えられる。

$$\begin{pmatrix} A^* & C^* \\ B^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

ただし、 $A^*$  などは  $A$  などの共役複素数を表す。上の条件は縦続行列が「J-ユニタリ行列」であると呼ばれる [6]。

### 3.3 分布定数回路は空間1次元の波動回路

常微分方程式で表される集中定数回路は、時間の関数で位置を表すパラメータ  $x$  を含んでいないから、ある1点の関係だけで、実はエネルギーの伝搬は考えに入れていない。一方、マクスウェル方程式や電信方程式などの偏微分方程式は時間  $t$  と位置  $x$  との関数であるから、重要な波動やエネルギーの伝搬を考えることができる。

偏微分方程式の回路理論であっても、信号が伝わるところが平面や立方体になると積分操作が必要となり、回路理論で取り扱われる過渡応答と定常応答との区別があいまいとなる可能性があり、本文では信号が伝わるのは点であり面ではないと仮定する。すなわち、[仮定3] 波動の進行方向は空間的に1次元のみとし、座標は  $x$  とする。

すなわち、空間的に2次元や3次元となり平面や立体的に波動が進む場合は、伝搬速度が位相速度と群速度という2つの速度を取り扱うこととなり、計算が複雑になるのに対し

て、空間的に1次元の場合は唯一つの伝搬速度で波動が伝わると考えることができる。

## IV. LC 伝送回路

II章で述べたバネの振動は、それを表す運動の方程式に基づいて、減衰することがなく永遠に振動を続けるものである。このような振動は無損失回路で生じるものであり、集中定数の電気回路ではLC(すなわち、理想的なコイルとコンデンサー)共振で得られる。そこで、集中定数回路で最も基本となるLCのみで構成される回路による固有振動について考えよう。

### 4.1 LC 回路の基礎

現在はデジタルの時代となっていて、アナログあるいは交流理論の勉強の必要がない時代となっているように感じる。しかしながら、マイクロ波回路や光回路にはアナログ回路の考えが必要であり、量子力学の波動性の取り扱いにもアナログ回路の考えが必要不可欠であると私は考えている。そこで、最も基本となる正弦波の回路で、最も基本となる直列LC回路から勉強しよう。

電気の回路は、電圧  $v(t)$  と電流  $i(t)$  とが定義されていて、交流回路の回路素子には抵抗  $R$ 、コンデンサ(キャパシタンス  $C$ ) およびコイル(インダクタンス  $L$ ) が用いられ、電圧と電流とは次の関係を満たす。

$$(1) \text{ 抵抗 } R \quad v(t) = Ri(t) \quad (26a)$$

$$(2) \text{ キャパシタンス } C \quad v_C(t) = \frac{1}{C} \int i(t) dt \quad (26b)$$

$$(3) \text{ インダクタンス } L \quad v_L(t) = L \frac{d}{dt} i(t) \quad (26c)$$

このように、交流回路では電圧と電流とは微分や積分で結ばれるという特徴がある。

ところで、式(26b)には積分が用いられて

いる。回路理論では、過渡現象を取り扱うので、できれば積分は用いずに、微分のみをしたい。そこで、キャパシタンス  $C$  は式(26b)を微分した次の式も用いられる。

$$i_c(t) = C \frac{d}{dt} v_c(t) \quad (26d)$$

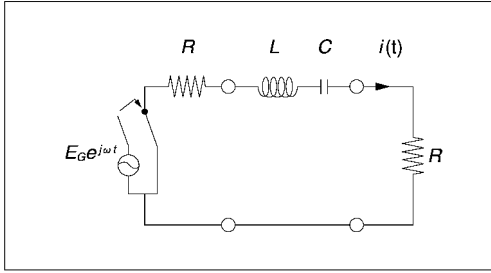


図2 直列 LC 共振をもつスイッチ回路

Fig.2 Series LC resonant switching circuit

図2にスイッチの付いた回路を示している、その伝送回路の部分 LC 直列回路であり、電源は  $t=0$  から電圧  $E_G e^{j\omega t}$ 、内部抵抗  $R$  の電圧源を用い、負荷の抵抗も  $R$  なる回路である。この回路を流れる電流  $i(t)$  は次式を満たす。

$$L \frac{d}{dt} i(t) + 2Ri(t) + \int C i(t) dt = E_G e^{j\omega t} \quad (27)$$

式(27)には微分と積分が共存していて解くのが困難である。回路素子の一つであるコンデンサには電荷  $q(t)$  という物理量があり、次の関係を満たす。

$$q(t) = \int i(t) dt \quad (28)$$

式(27)に式(28)を代入して、次の微分だけを持つ方程式が得られる。

$$L \frac{d^2}{dt^2} q(t) + 2R \frac{d}{dt} q(t) + \frac{1}{C} q(t) = E_G e^{j\omega t} \quad (29)$$

式(29)の微分方程式で表される集中定数回路の解は、過渡項と定常項との和で表される。この式の過渡項は右辺の入力の強制振動項  $E_G e^{j\omega t}$  を 0 とした解である。この解は抵抗分

$2R$  があるために、減衰する値である。

回路理論でより重要なのは定常状態の解であり、持続する入力に対応する強制振動項  $E_G e^{j\omega t}$  に対する解であり、この解によってエネルギーの伝えられ方がわかる。

ここで、式(29)において、抵抗分の  $R$  を 0 とし、強制振動項も 0 とした次式を考えよう。

$$L \frac{d^2}{dt^2} q(t) + \frac{1}{C} q(t) = 0 \quad (30)$$

上式と式(6)とを対応させれば、 $q(t)$  に  $u$  を、 $L$  に  $M$  を、 $1/C$  に  $K$  を対応させれば同じ式となることが確かめられる。

式(30)の解は式(8b)を満たす角周波数  $\omega$  をもつ固有振動が得られる。この場合、強制振動が 0 の解であり、入力がないのに、持続する振動が得られるのはどうしてであろうかという疑問が残る。この答えは集中定数回路のエネルギーの考察の後で述べる。

#### 4.2 2つの閉路をもつ LC 回路

分子1個の安定点のまわりの振動は、強制振動が 0 の LC 回路と等価な回路で表すことができることが前節で示された。ここでは、2.2 で述べた連成振動と等価になる回路を考えよう。

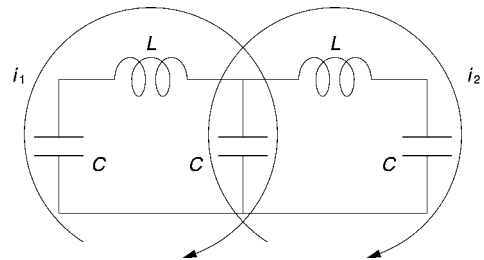


図3 連成振動と等価になる回路表示

Fig.3 Equivalent circuit representation for combinational oscillation of two molecules

図3に示す2つの閉路をもつ LC 回路を考えよう。この回路は2つの電流  $i_1(t)$  および

$i_2(t)$ にキルヒホッフの電圧法則を用いて、次のように表される。

$$L \frac{d}{dt} i_1(t) + \frac{2}{C} \int i_1(t) dt - \frac{1}{C} \int i_2(t) dt = 0 \quad (31a)$$

$$L \frac{d}{dt} i_2(t) - \frac{1}{C} \int i_1(t) dt + \frac{2}{C} \int i_2(t) dt = 0 \quad (31b)$$

上の連立方程式は微分と積分が共存している解くのが困難である。回路素子の一つであるコンデンサの電荷を用いて、次のように電流を電荷に変換しよう。

$$q_1(t) = \int i_1(t) dt \quad (32a)$$

$$q_2(t) = \int i_2(t) dt \quad (32b)$$

上式を用いて式(31)を変換すると次式が得られる。

$$L \frac{d^2}{dt^2} q_1(t) + \frac{2}{C} q_1(t) - \frac{1}{C} q_2(t) = 0 \quad (33a)$$

$$L \frac{d^2}{dt^2} q_2(t) - \frac{1}{C} q_1(t) + \frac{2}{C} q_2(t) = 0 \quad (33b)$$

上式と式(12)とを対応させれば、電荷に変位を、 $L$ に $M$ を、 $1/C$ に $K$ を対応させれば同じ式となることが確かめられる。したがって、分子の振動は回路理論を応用できる可能性があることと考えられる。

ところで、分子の振動現象には強制振動項が0のため、入力がないのに、持続する振動が得られるのはどうしてであろうかという疑問に次節で答えよう。

#### 4.3 集中定数素子 LC のエネルギー

回路理論はエネルギーの移動(伝送)をうまく取り扱っていると述べたが、実は電磁場におけるエネルギーや運動量はむずかしい問題である記述が文献[7]の119ページに述べてあるので、そのまま引用する。

『物質と同様に電磁場自身がエネルギーや運動量を担いうることや、それらの流れ(空

間的移動)が存在することを明らかにする。電磁場の保存則は場の2乗量の関係式である。すなわち、 $E_1 E_1$  ( $E$ は電場を表す)や  $B_1 H_1$  ( $B$ は磁束密度、 $H$ は磁場の強さを表す)といった量が登場する。このような2乗量は波動現象、特に波の干渉において、解釈しむずかしい問題を数多く提起しており、粒子的描像と波動的描像が衝突する場面でもある。その意味においても、電磁場における保存則はパラドックスの宝庫である。特に物質中での巨視的運動量の保存則は大層むずかしい問題である。』

上記に述べてあるように、波動現象における2乗量には注意が必要である。それを避けるためには、私はできるだけ2乗量を用いずにすまずことであって、幸いなことに電気現象には電圧と電流という2つの関数(成分)が存在するので、その2つの関数を有効に使用すべきであると考えている。すなわち、電気現象では、電圧と電流との積が電力であって、その時間での積算がエネルギーとなり、電圧も電流も複素量で与えられるため、電力も複素量となり、有効電力と無効電力とが求まり、有効電力部分のみがエネルギーに関係する。したがって、電気エネルギーは有効電力かどうか重要となる。

よく知られているように、コンデンサ(キャパシタンス  $C$ ) およびコイル(インダクタンス  $L$ )は無損失素子であって、静電エネルギーおよび電磁エネルギーとして蓄えられたり、電源に戻されたりすると説明され[8]、エネルギーを消費しないと説明されている[8]。

文献[8]の説明では、三角関数が用いられているために、電力が正になったり、負になったりし、それらを足して電力が0になるとき無効電力としている。

ここでは、複素電力でコンデンサおよびコイルの電力は無効電力となることを示そう。なお、電圧が  $v(t)$ 、電流が  $i(t)$  と与えられたときの複素電力は



$$v^*(t)i(t) \quad (34)$$

(ここに、 $v^*(t)$ は  $v(t)$ の複素共役数を表す)と定義され、その実数部が有効電力であり、その虚数部が無効電力を表す。

キャパシタンス  $C$  のコンデンサの場合、コンデンサの両端の電圧  $v_c(t)$ が次ぎのように与えられたとき、

$$v_c(t) = Ve^{j\omega t} \quad (V > 0) \quad (35a)$$

その電流  $i_c(t)$ は式 (26d) で求まるから、

$$i_c(t) = j\omega CVe^{j\omega t} \quad (35b)$$

この複素電力は

$$v_c^*(t)i_c(t) = j\omega CV^2 \quad (35c)$$

上式は虚数部しかもたないから、コンデンサの電力は無効電力のみであり、エネルギーは閉じ込められていることを示している。

同様に、インダクタンス  $L$  のコイルの複素電力を求めると、

$$j\omega LI^2 \quad (I > 0) \quad (36)$$

となり、無効電力のみとなる。

集中定数素子のコンデンサとコイルのみで構成される回路には抵抗を含んでいないため、有効電力にかかわる回路素子が存在しない。そのため、エネルギーの存在や受け渡しができないので、固有振動のみが問題となる回路となっている。

#### 4.4 無損失素子による周期構造系

2.3節には  $N$ 個の分子による振動が述べられていて、その運動方程式は式(16)で与えられる。この場合も、2つの分子の運動方程式(12)とその等価回路の図3の  $LC$  との比較により、運動方程式(16)の等価回路は図4に示す  $LC$  (運動方程式(16)に合わせる係数として、 $M$  および  $1/K$ ) 回路となる。

$N$ 個の分子の振舞いを表す回路は、周期構造の回路を表し、実は古典回路理論の中心的課題である「影像パラメータ理論」や「反復パラメータ理論」に深く関係する。すなわち、その等価回路は無損失回路素子のコンデンサとコイルのみで構成されているにもかかわらず

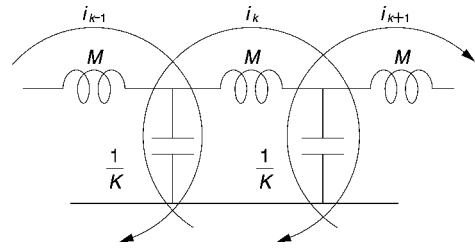


図4  $N$  個の分子の周期構造系の振動と等価な回路表示

Fig.4 Equivalent circuit representation for harmonic oscillation of periodic  $N$  molecules.

ず、エネルギーの受け渡しを表すという回路特有の理論を展開できる。その周期構造系は、文献[3]の43ページ以降に述べられている2種類の原子を含む格子振動やブリュアン・ゾーンとも深くかかわるもので、その説明には多くの紙面を必要とすると考えられるので、後で述べることにして、今回は述べない。

## V. 連続な極限体に対する等価回路の方程式

2.4節に述べてあるように、1次元結晶を連続体と見なすためには、分子の平均間隔  $a$  を十分小さい長さ  $\Delta x$  とすればよい。その関係を図4に示す等価回路に持ち込んで、等価回路を作り、その等価回路の電圧と電流の方程式を求めるというように、連続な極限体に対して回路理論を適用することを考えよう。

### 5.1 1つの波動方程式を満足する2つの波動関数

分子の平均間隔  $a$  を十分小さい長さ  $\Delta x$  とし、その関係を図4に示す等価回路に持ち込み、式(19)の線密度  $\rho$  および力  $T$  を用い、等価回路上に電圧  $v(x,t)$  および電流  $i(x,t)$  を定義すると、図5が得られる。

図5に基づけば、次の式が求められる。

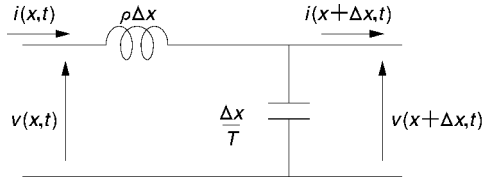


図5 連続体の振動を表す方程式と等価な振動を生じる回路表示

Fig.5 Equivalent circuit representation for satisfying the oscillation equation of continuous system.

$$v(x,t) = \rho \Delta x \frac{\partial}{\partial t} i(x,t) + v(x + \Delta x, t) \quad (37a)$$

$$i(x,t) = \frac{1}{T} \Delta x \frac{\partial}{\partial t} v(x,t) + i(x + \Delta x, t) \quad (37b)$$

上の2つの式の右辺第2項を移項した後、両辺を  $\Delta x$  で割り、 $\Delta x \rightarrow 0$  とすると、

$$-\frac{\partial}{\partial x} v(x,t) = \rho \frac{\partial}{\partial t} i(x,t) \quad (38a)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} i(x,t) = \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial t} v(x,t) \quad (38b)$$

上式を  $t$  で偏微分して、式(37)を代入すると、次式が得られる。

$$T \frac{\partial^2}{\partial x^2} i(x,t) = \rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} i(x,t) \quad (39a)$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} v(x,t) = \frac{1}{T} \frac{\partial^2}{\partial t^2} v(x,t) \quad (39b)$$

上の電圧  $v(x,t)$  および電流  $i(x,t)$  は共に次の波動方程式を満足する。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x,t) = \frac{\rho}{T} \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x,t) \quad (40)$$

すなわち、分子を連続体とみなしたときの振舞いでは変位  $u(x,t)$  のみが式 (21b) の波動方程式を満足する。それに対して、回路理論を応用して、その等価回路中の電圧  $v(x,t)$  と電流  $i(x,t)$  とが満たす方程式を求めると、電圧と電流共に1つの波動方程式を満足する。

4.3節で述べたように、この2つの関数(成

分)の電圧と電流とから、有効電力と無効電力とが求まる。この関係を用いると、文献[7]に述べてある2乗量の解釈上むずかしい数多くの問題が解決される希望が持てる。そのため、式(38)の連立偏微分方程式を満たす電圧と電流とを無損失電信方程式の解法に沿って簡単に解いておこう。

## 5.2 連立偏微分方程式の解

無損失電信方程式あるいは空間的に1次元のマクスウェル方程式の解法は文献[9]に示していて、 $z$ 変換法によるものと、変数分離法によるものとがある。 $z$ 変換法によれば、過渡現象も解析できるのに対して、変数分離法によると、定常状態の解析となる。ただし、時間に関しての偏微分にラプラス変換を行うと、ラプラス変換の変数  $s$  に変換されるが、それは変数分離法で、時間項として  $\exp(j\omega t)$  を取り出すことに相当する。そういう意味で変数分離法を適用する。すなわち、電圧  $v(x,t)$  と電流  $i(x,t)$  とを次のように表す。

$$v(x,t) = \exp(j\omega t) V(x) \quad (41a)$$

$$i(x,t) = \exp(j\omega t) I(x) \quad (41b)$$

式(41)を式(38)に代入して、次の位置  $x$  に関する微分方程式が得られる。

$$-\frac{d}{dx} V(x) = j\omega \rho I(x) \quad (42a)$$

$$-\frac{d}{dx} I(x) = \frac{j\omega}{T} V(x) \quad (42b)$$

上の式から、 $V(x)$  も  $I(x)$  も次の波動方程式を満たす。

$$\frac{d^2}{dx^2} V(x) = (j\omega)^2 \frac{\rho}{T} V(x) \quad (43a)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} I(x) = (j\omega)^2 \frac{\rho}{T} I(x) \quad (43b)$$

上式に対して、伝搬定数  $\gamma$  が求まる。

$$\gamma = j\omega \sqrt{\frac{\rho}{T}} = j\omega u^{-1} = j\beta \quad (44)$$

ここに、 $u$  は波動の伝搬速度を表し、 $\beta$  を位相定数と呼ぶ。

式(44)を用い、積分定数  $K_a$  および  $K_b$  を用いると、式(43)は次のように表される。

$$V(x) = K_a \exp(-j\beta x) + K_b \exp(j\beta x) \quad (45a)$$

$$I(x) = \frac{K_a}{Z_0} \exp(-j\beta x) - \frac{K_b}{Z_0} \exp(j\beta x) \quad (45b)$$

ここに、 $Z_0 = \sqrt{\rho T}$  と表され、波動の特性インピーダンスと呼ばれる。

このように、電気回路の理論を応用すると、電圧も電流も共に同一の波動方程式を満足する。また、変数分離法を用いても、電圧も電流も共に進行波と後進波とが求まり、進行波は

$$e^{j(\omega t - \beta x)} \quad (46a)$$

後進波は

$$e^{j(\omega t + \beta x)} \quad (46b)$$

と表されるから、この関係を式(38)に代入すると、電圧と電流との比は実数となり、集中定数回路とは異なって有効電力が求められることになる。そのことは特性インピーダンスが実数になることでも表されている。

## VI. むすび

文献 [7] によると、波動現象におけるエネルギーなどの 2 乗量は、解釈上むずかしい問題を数多く提起していると述べている。私は波動現象のエネルギーは 1 つの関数の 2 乗量ではなく、電気現象の電力のように電圧と電流という 2 つの関数 (成分) の積で表される量であるということを文献 [9] などに提案していて、「ヘヴィサイドー永井ー空間」と呼んでいる。

本文では、この考えを連続体力学に適用しようとして、分子の振動に回路理論を適用した結果、分子の振動を適切に表す等価回路を見つかることができた。注意すべきは、このときのエネルギーは無効電力に相当するものであり、その分子内に閉じ込められていると

考えられる。

一方、連続体に対しては、従来の物理学では波動方程式を満足する波動関数はただ一つの関数 (成分) とするため、2 乗量を扱わねばならず、解釈上むずかしい問題が生じる。本文で述べたように、連続体に回路理論を応用した結果、連続体の等価回路に定義される 2 つの関数の電圧も電流も共に同一の波動方程式を満足し、それに加わるに、電圧と電流との比である特性インピーダンスが求まり、しかもその特性インピーダンスは実数となるため、電圧と電流とが同相となり、連続体には有効電力が関係し、それはエネルギーに直接関係する。すなわち、連続体に対しては、回路理論での最重要課題であるエネルギーの移動が関わってくる。これは、実は古典回路理論の中心的課題である「影像パラメータ理論」や「反復パラメータ理論」に深く関係する。

この古典的回路理論の話題については、文献 [10] などに論じたことがあるが、改めて「ヘヴィサイドー永井ー空間」と関係させて考えてみたい。そこで、少し時間をいただいて、考察を続けたいと思っている。

## [参考文献]

- [1] 生井澤寛：キーポイント連続体力学，岩波書店，1995。
- [2] N. H. フレッチャー，T. D. ロッシング(岸，久保田，吉川訳)：楽器の物理学，シュプリングーフェアラーク東京，2002。
- [3] 坂田亮：物性科学，培風館，1989。
- [4] 永井信夫：回路理論の立場から観たマクスウェル方程式の特徴 — オリヴァー・ヘヴィサイドの見つけたこと —，北星学園大学経済学部北星論集，43，2，pp.1-17，2004年3月。
- [5] R. P. ファインマン著(釜江常好，大貫昌子訳)：光と物質のふしぎな理論 — 私の量子電磁力学 —，岩波書店，1987。
- [6] A. V. Efimov and V. P. Potapov: J-expanding matrix functions and their role in the analytical theory of electrical

- circuits, Usp. Mat. Nauk, pp.65-136, 1973.
- [7] 北野正雄：マクスウェル方程式（電磁気学のよりよい理解のために），SGCライブラリー39，サイエンス社，2005.
  - [8] たとえば，羽鳥孝三：基礎電気回路，コロナ社，1983.
  - [9] 永井信夫：電磁波のヘヴィサイドー永井ー空間による解析——量子波動解析の基礎理論——，北星学園大学経済学部北星論集，44，2，pp.41-56，2005年3月.
  - [10] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理 第12回 信号処理と映像パラメータ理論，Journal of Signal Processing（信号処理），Vol. 4，No. 4，pp.293-304，July 2000.

[Abstract]

## Equivalent Circuits Representing the Equation of Motion for Molecules

Nobuo NAGAI

The physics of continua for molecules deals with oscillation or wave motion, but the physics scarcely deals with the transmission of wave motion. The important thing in information science is “input, control and output.” The circuit theory deals with transmitting energy from an input port to an output port. The circuit theory is introduced into the equation of motion for molecules, and energy transmission is analyzed by using molecule motion. This paper obtains equivalent circuits for the equation of motion for molecules, and the circuit theory is used for the oscillation and wave motion of molecules.

---

Key words: Equation of Motion for Molecules, Equivalent Circuit Representing Motion of Molecules, Charge Equivalent to Displacement of Motion, Equivalent Circuit Presenting Oscillation of Continua, Voltage and Current of Equivalent Circuit Satisfying Wave Equation.