

分子の運動方程式への反復パラメータ理論の応用

永井 信夫

目次

- I. はじめに
- II. 3種類の原子が結晶基となる分子
- III. 定Kフィルタの再考
 - 3.1 基本区間の映像パラメータ回路
 - 3.2 基本区間の反復パラメータ回路
- IV. 集中定数回路と反復パラメータ理論
 - 4.1 回路の相反性および無損失性
 - 4.2 無損失相反回路の固有値と固有ベクトル
 - 4.3 通過帯域での反復パラメータ
 - 4.4 遮断帯域での反復パラメータ
- V. 反復パラメータ回路のエネルギーの伝送
 - 5.1 Pasteur線路
 - 5.2 Pasteur線路での共鳴現象
 - 5.3 Pasteur線路の無反射条件
- VI. 結晶基が3種類の分子
- VII. むすび

I. はじめに

1種類の原子からなる1次元結晶の分子の運動方程式は集中定数回路素子のインダクタとキャパシタとが周期的に縦続接続した回路の方程式と等価になることが示され、分子の振動は電気回路で表されることが示された[1]。また、その分子の配列を連続体へ極限操作すれば、その等価回路を利用することにより、分子の運動方程式はマクスウェル方程式あるいはそれと同等な無損失電信方程式で表現されることも示された[1]。

ところで、2種類の原子で構成される結晶基をもつ分子の運動方程式は極限操作できな

い。したがって、その分子の運動方程式に対する等価回路は、分布定数回路ではなく、周期構造系の集中定数回路となる。

集中定数回路におけるエネルギーの伝送は古典回路理論で考えられた映像パラメータ理論および反復パラメータ理論で解析できる。そのため、結晶基が1個および2個の分子の等価回路を考えたところ、対称回路が周期的に縦続接続した回路に分解できるため、映像パラメータ理論で解析できることを文献[2]で示している。

本文では、3種類の原子が結晶基となる分子の等価回路をまず示し、その等価回路は対称回路が周期的に縦続接続した回路に分解できないために、反復パラメータ理論で解析する試みを行い、反復パラメータ理論の特長、および3種類の原子が結晶基となる分子の運動の特長などを示す。

II. 3種類の原子が結晶基となる分子

文献[2]に示したように、結晶基が1個および2個の分子の運動方程式は差分方程式となり、その差分方程式は集中定数回路素子を用いた等価回路で表すことができる。すなわち、それは変位を変数とする差分方程式であるが、等価回路に対しては電圧と電流とが定義できるため、変数として変位の他に電圧と電流とが存在することになる。また、その等価回路は周期構造系であるため、古典回路理論の映像パラメータ理論や反復パラメータ理論が適用できて、エネルギーが伝わるものが

キーワード：3種類原子の結晶基の分子、分子の運動を表す等価回路、反復パラメータ理論、Pasteur線路、特性インピーダンスが複素数の無損失回路

示される。文献[2]では結晶基が1個および2個のため、その周期的な等価回路の1周期分の等価回路を対称回路に選べるため、映像パラメータ理論が適用できた。

本文では、結晶基が3個の原子で構成される分子の等価回路を求めることから始めよう。3種類の原子の質量が

$$M_1 > M_2 > M_3 \quad (1)$$

と与えられていて、それらの原子をつなぐバネ定数は、ここではすべて等しくKと与えられているとする。この分子の等価回路は文献[2]の等価回路を参考にすれば、図1に示すものが得られる。

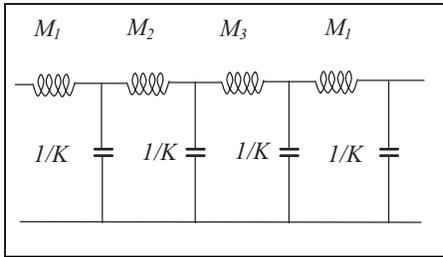


図1 質量が M_1, M_2, M_3 の3原子結晶の周期構造系の等価回路
Fig.1 Equivalent periodical circuit for three atoms crystal.

図1に示す回路で、1周期分の3種類の原子 M_1, M_2, M_3 および3個のバネ定数で対称回路を得ることができない。したがって、この等価回路に対しては映像パラメータ理論を適用できないので、反復パラメータ理論を用いなければならない。そこで、次章以降では反復パラメータ理論を縦続行列の固有値問題として解析することを考える。

Ⅲ. 定Kフィルタの再考

文献[3]で映像パラメータ理論の特長をいくつか述べたが、特長の一つに位相量を求めることができ、それによって信号やエネルギーが伝わるのがわかる。すなわち、集中定数回路であっても、その回路を信号が伝わるこ

とが示され、伝送線路や分布定数回路のように働くことが示される。ここでは、映像パラメータ理論で最も重要な定Kフィルタを基にして反復パラメータ理論の特長を考えることにする。

3.1 基本区間の映像パラメータ回路

図2に示す回路は回路素子 L および C が周期的に並んでいて、最も簡単で基本となる周期構造であり、映像パラメータ理論の定Kフィルタを取り出せる基本区間として知られている。ここではまず、定Kフィルタに関する映像パラメータ理論の特長を文献[3]から引用する。次節では、図2の1周期分の回路の切り取り方によっては対称回路にならないので、図2から1周期分の非対称回路を取り出し、その非対称回路に反復パラメータ理論を適用し、図2に示す同一の周期構造系から得られる反復パラメータ回路と映像パラメータ回路とを比較して、反復パラメータ理論の特長を考えることにする。

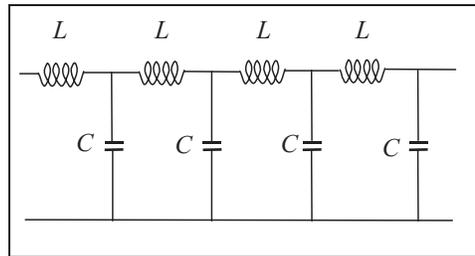


図2 集中定数素子による伝送線路
Fig.2 Transmission line composed of lumped-constant elements

図2に示す周期的構造系の回路には2種類の映像パラメータ回路があり、ここでは、図3に示す回路を取り上げよう。

図3に示す回路の縦続行列は次のように求まる。

$$\begin{pmatrix} 1 + s^2 \frac{LC}{2} & sL + s^3 \frac{L^2 C}{4} \\ sC & 1 + s^2 \frac{LC}{2} \end{pmatrix} \quad (2)$$

この行列に対する固有値および映像インピーダンスは次のように求まる。ただし、二つの固有値は2種類の基本区間に共通なので、次のように Λ_1 および Λ_2 と表しておく。

$$\Lambda_1 = \left(1 + s^2 \frac{LC}{2}\right) + s\sqrt{LC} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (3a)$$

$$\Lambda_2 = \left(1 + s^2 \frac{LC}{2}\right) - s\sqrt{LC} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (3b)$$

その映像インピーダンスは次のように与えられる。

$$Z_{k1} = \sqrt{\frac{L}{C}} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (4)$$

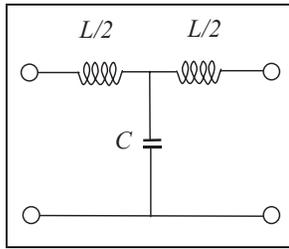


図3 一つの映像パラメータ回路
Fig.3 One of image parameter circuits

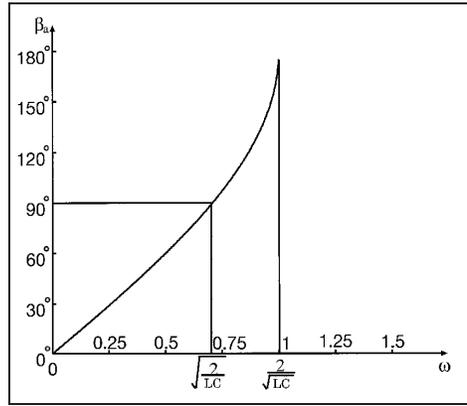
図2に示す回路で信号が伝送されるのは、縦続行列の固有値 Λ がベクトルとなるところである。ところで、式(3)の s に $s = j\omega$ を代入して、 Λ_1 および Λ_2 がベクトルを表す複素数になるのは

$$-1 < 1 - \omega^2 \frac{LC}{2} \leq 1 \quad (5a)$$

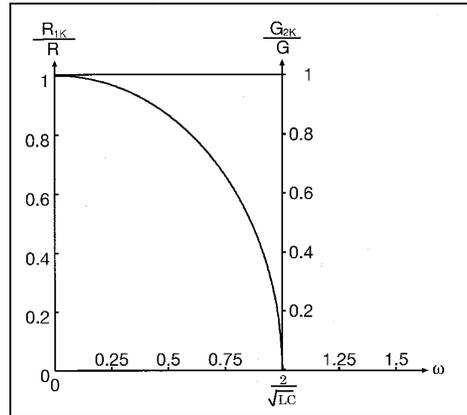
を満足する ω であり、 ω を正の角周波数とすれば、次のように表される。

$$0 \leq \omega < \frac{2}{\sqrt{LC}} \quad (5b)$$

ω が上の範囲内であれば



(a)



(b)

図4 通過帯域における (a)映像位相量, (b)映像抵抗

Fig.4 (a) Image phase and (b) image resistance in a pass band for the circuit depicted in Fig. 3

$$\Lambda_1 = \exp(j\beta_a), \quad \Lambda_2 = \exp(-j\beta_a) \quad (6a)$$

ここに

$$\cos \beta_a = 1 - \omega^2 \frac{LC}{2} \quad (6b)$$

$$\sin \beta_a = \omega \sqrt{LC} \sqrt{\left(1 - \omega^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (6c)$$

となり、確かに固有値 Λ はベクトルで表される。そのときの式(4)で表される映像インピーダンス Z_{k1} は実数となる。ここで、映像インピーダンスが実数となると、映像抵抗と呼

ぶことにし、 R_{K1} と表しておこう。

映像パラメータ理論においては、公称インピーダンスを定義するが、それは抵抗値なのでここでは公称抵抗 R と呼び、次のように定義する。

$$R = \sqrt{\frac{L}{C}} \quad (7a)$$

この公称抵抗を用いると、映像抵抗 R_{K1} は次の関係を満足する。

$$0 < R_{K1} \leq R \quad (7b)$$

ここで、式(5)を満たす ω の通過帯域における、式(6)で表される映像位相 β_a および映像抵抗 R_{K1} を図4に示す。

3.2 基本区間の反復パラメータ回路

3.1では対称回路のみを考えたが、図2に示す無限回路には対称回路ではないが周期的構造をもった基本区間が存在する。そのような例として、図5に示す回路がある。

図5に示した回路は対称回路ではないので、反復パラメータで表現される。ただし、この反復パラメータは映像パラメータと深い関係がある。そこで、この回路の縦続行列から考えることにする。この回路の縦続行列は次式となる。

$$\begin{bmatrix} 1+s^2LC & sL \\ sC & 1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

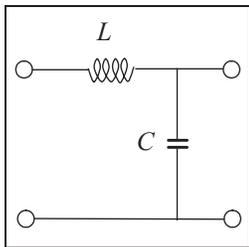


図5 非対称の基本区間の一例
Fig.5 An example of a basic section

この行列に対する固有値も式(3)と同一となる。ところで、この回路は対称回路ではないので、映像パラメータとは呼ばれないで、これらは反復パラメータと呼ばれている[3]。二つの固有値に対する固有ベクトルは異なるインピーダンスで表され、次のように求まる。固有値 Λ_1 に対する固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} Z_{JL} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (9a)$$

で、一つの反復インピーダンス Z_{JL} は次のように求まる。

$$\begin{aligned} Z_{JL} &= s\frac{L}{2} + \sqrt{\frac{L}{C}} \sqrt{\left(1 + s^2\frac{LC}{4}\right)} \\ &= Z_{K1} + sL/2 \end{aligned} \quad (9b)$$

固有値 Λ_2 に対する固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} Z_{JC} \\ -1 \end{bmatrix} \quad (10a)$$

で、もう一つの反復インピーダンス Z_{JC} は次のように求まる。

$$\begin{aligned} &= -s\frac{L}{2} + \sqrt{\frac{L}{C}} \sqrt{\left(1 + s^2\frac{LC}{4}\right)} \\ &= Z_{K1} - sL/2 \end{aligned} \quad (10b)$$

式(9b)および式(10b)に示したように、この回路の反復インピーダンスは映像インピーダンス Z_{K1} に $sL/2$ が付け加わったり、取り除かれたりしたものと考えられ、映像インピーダンスにそのリアクタンス分を加えたり、引いたりして表される。したがって、映像インピーダンスが求まる回路には反復インピーダンスをわざわざ求める必要がないとも言える。

ここで、映像および反復パラメータの通過帯域の物理的意味を考えてみよう。3.1で述べたように、通過帯域においては L および C が無限に接続されていて、同一の実数の映像抵抗を背中合わせに接続するから、無反射条件を満足することになる。ところで、周期構造の切り口が映像抵抗とは異なる、例えば図5のところだとどうであろうか。この場合、

式(9b)および式(10b)に示したように、その反復インピーダンスは影像抵抗に同じリアクタンス分を加えたり、引いたりしたもので、互いに共役複素数となるから、定常状態では共役整形反射係数を用いる関係から、その切り口における反射が0になり、やはり定常状態では無反射回路である。このように、無限回路に対しては定常状態において通過帯域内のすべての周波数について、無反射回路となっている。

IV. 集中定数回路と反復パラメータ理論

周期構造の集中定数回路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」に深く関係し、1周期分の回路が対称回路に選ぶことができれば、影像パラメータ理論が適用できることを文献[2]で述べた。II章では、結晶基が3個の分子を考えたところ、1周期分の回路を対称回路に選ぶことができない。そこで、反復パラメータ理論を考えねばならない。そこで、III章では、影像パラメータ理論および反復パラメータ理論を同時に取り扱える定Kフィルタを例題に選び、反復パラメータ回路の基本的な性質を述べた。以上のことを考えながら反復パラメータ理論を考察しよう。

反復パラメータ理論は古典的な回路理論の教科書に述べられているが、入出力端の無反射のインピーダンスとして述べられていて、エネルギーの伝送としては考えられていない。文献[3],[4]では、縦続行列の固有値問題として反復パラメータ理論を考えていて、その方法が反復パラメータ理論の特長を捉えていると確信しているので、文献[3],[4]の説明を再び述べる。

4.1 回路の相反性および無損失性

回路理論の基本性質の一つにエネルギーの移動があるが、それは古典回路理論の反復お

よび影像パラメータ理論で考えられている。その再考が文献[3]などに述べたので、ここでは反復パラメータ理論で必要となる事項を簡単に述べておく。

回路には電圧と電流という二つの関数(成分)が定義されていて、2ポート(端子対)回路は縦続行列で次のように表わされる。

$$\begin{bmatrix} V_1 \\ I_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ I_2 \end{bmatrix} \quad (11)$$

ただし、ここでは I_2 の電流方向も左から右を正の方向としている。

R, L, C を用いた集中定数回路は微分方程式を満たし、電圧、電流を用いる縦続行列は式(11)のように表され、しかも次式を満たす「相反性」が示されている。

$$AD - BC = 1 \quad (12)$$

分子の振動は集中定数回路素子の L, C で等価回路表示できたが、 L, C は無損失素子である。そこで、無損失回路を考える。ところで、無損失回路の条件が文献[5]に述べられているので、その条件を再記する。

[無損失なるための縦続行列の条件] 二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。

$$\begin{bmatrix} A^* & C^* \\ B^* & D^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (13a)$$

上の条件は縦続行列が「J-ユニタリ行列」と呼ばれる[5]。なお、無損失の集中定数回路の条件は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} A \text{ および } D & \text{ は実数であり,} \\ B \text{ および } C & \text{ は純虚数} \end{aligned} \quad (13b)$$

4.2 無損失相反回路の固有値と固有ベクトル

ここで、上に示した無損失回路の縦続行列の固有値と固有ベクトルを求めておこう。固有値は次の行列式から導かれる Λ の2次方程式の根である。

$$\begin{vmatrix} A - \Lambda & B \\ C & D - \Lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (14a)$$

$$\therefore \Lambda^2 - (A+D)\Lambda + AD - BC = 0 \quad (14b)$$

上式には、行列要素の A などの共役複素数 A^* などが現れていないので、無損失回路の条件だけでは回路の特徴が表わされているわけではない。そこで、相反回路であり、式(12)が成り立っているとしよう。そうすれば、上の方程式の根である固有値は次のように表される。

$$\Lambda = \frac{(A+D)}{2} \pm \sqrt{\frac{(A+D)^2}{4} - 1} \quad (15a)$$

上式を次のように表しておこう。

$$\Lambda_1 = \frac{A+D}{2} + \sqrt{\frac{(A+D)^2 - 4}{4}} \quad (15b)$$

$$\Lambda_2 = \frac{A+D}{2} - \sqrt{\frac{(A+D)^2 - 4}{4}} \quad (15c)$$

式(15b)で与えられる固有値 Λ_1 に対する固有ベクトルは次のように表される。

$$\begin{bmatrix} Z_{j1} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (16a)$$

ここに、

$$Z_{j1} = \frac{\sqrt{(A+D)^2 - 4}}{2C} + \frac{A-D}{2C} \quad (16b)$$

上式の Z_{j1} を右向き波動の反復インピーダンスと呼ぶ。

式(15c)で与えられる固有値 Λ_2 に対する固有ベクトルは次のように表される。

$$\begin{bmatrix} Z_{j2} \\ -1 \end{bmatrix} \quad (17a)$$

ここに、

$$Z_{j2} = \frac{\sqrt{(A+D)^2 - 4}}{2C} - \frac{A-D}{2C} \quad (17b)$$

上式の Z_{j2} を左向き波動の反復インピーダンスと呼ぶ。

ここで考えている反復パラメータ理論においては、式(16)と式(17)とで与えられる Z_{j1} と Z_{j2} とが異なることに注意しよう。

ここで、式(11)で与えられる縦続行列を反復パラメータで表現しておこう。

式(11)の行列の固有値とそれに対応する固

有ベクトルは式(15) - (17)で与えられているので、式(11)で表される縦続行列は反復パラメータを用いて、次のように表される。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} Z_{j1} & Z_{j2} \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_1 & 0 \\ 0 & \Lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_{j1} & Z_{j2} \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{Z_{j1} + Z_{j2}} \begin{bmatrix} Z_{j1}\Lambda_1 + Z_{j2}\Lambda_2 & Z_{j1}Z_{j2}(\Lambda_1 - \Lambda_2) \\ \Lambda_1 - \Lambda_2 & Z_{j2}\Lambda_1 + Z_{j1}\Lambda_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (18)$$

4.3 通過帯域での反復パラメータ

式(13)の無損失性から、式(15)における A および D は実数であるから、 $(A+D)/2$ は実数であり、

$$-1 < \frac{A+D}{2} < 1 \quad (19a)$$

ならば、

$$\sqrt{\frac{(A+D)^2 - 4}{4}} \quad (19b)$$

は純虚数であり、

$$\left| \frac{A+D}{2} \right|^2 + \left| \frac{\sqrt{(A+D)^2 - 4}}{2} \right|^2 = 1 \quad (19c)$$

を満たすから、次のようにおける。

$$\frac{A+D}{2} = \cos \beta_j \quad (19d)$$

$$\frac{\sqrt{(A+D)^2 - 4}}{2} = j \sin \beta_j \quad (19e)$$

したがって、式(15)の Λ_1 および Λ_2 は次のように表すことができる。

$$\Lambda_1 = \exp(j\beta_j) \quad (20a)$$

$$\Lambda_2 = \exp(-j\beta_j) \quad (20b)$$

式(20)のベクトルは、文献[2]の影像パラメータ理論で述べたように回転ベクトルに似た性質を持つベクトルを表して、単位素子で説明したように(ただし定常状態で)波が伝送されることが示されていて、ここでも式(20)のベクトルを「擬似回転ベクトル」と呼ぶ。

固有値が式(20)で与えられる場合、式(16)および(17)で与えられる反復インピーダンス

Z_{j1} および Z_{j2} をみると、縦続行列の第2行1列目の要素 C は式(13b)によって純虚数であるから、次のように実数 R_j と虚数 jX_j とで表すことができるものがある。

$$\frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2C} = R_j \quad (21a)$$

$$\frac{A-D}{2C} = jX_j \quad (21b)$$

上式を用いれば、式(16)および(17)で与えられる反復インピーダンス Z_{j1} および Z_{j2} は、次のように表すことができ、

$$Z_{j1} = R_j + jX_j \quad (22a)$$

$$Z_{j2} = R_j - jX_j = Z_{j1}^* \quad (22b)$$

互いに共役複素数の関係を満たしている。上に示したように、反復パラメータ理論で取り扱う回路は対称回路ではないので、非対称性は左右の反復インピーダンスが同一ではなく、共役複素数となることで表される。

ここで、式(11)で与えられる縦続行列を式(19)および(21)で与えられる反復パラメータで書き直しをしておこう。そのために、次のように表しておこう。

$$\frac{A+D}{2} = \cos \beta_j = c \quad (23a)$$

$$\frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2} = j \sin \beta_j = js \quad (23b)$$

$$\frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2C} = R_j \quad (23c)$$

$$\frac{A-D}{2C} = jX_j \quad (23d)$$

そうすれば、式(19a)を満たす通過帯域を持つフィルタの場合の縦続行列は次式のように表される。

$$\frac{1}{R_j} \begin{bmatrix} R_j c - X_j s & js(R_j^2 + X_j^2) \\ js & R_j c + X_j s \end{bmatrix} \quad (24)$$

4.4 遮断帯域での反復パラメータ

影像パラメータ理論で通過帯域と遮断帯域があったように、反復パラメータ理論においても遮断帯域があるので、遮断帯域の性質をここで考えよう。そこでまず、次の場合を考えよう。

$$\frac{A+D}{2} < -1 \quad (25a)$$

この場合、式(15)の固有値の間の関係として、次の関係が得られる。

$$\left| \frac{A+D}{2} \right|^2 - \left| \frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2} \right|^2 = 1 \quad (25b)$$

したがって、次のようにおくことができる。

$$\cosh \gamma_j = \frac{A+D}{2} \quad (26a)$$

$$\sinh \gamma_j = \frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2} \quad (26b)$$

$$\Lambda_1 = \exp(\gamma_j) \quad (26c)$$

$$\Lambda_2 = \exp(-\gamma_j) \quad (26d)$$

ところで、式(25a)の関係から、固有値 Λ_1 および Λ_2 は負の実数であるから、 γ_j は次の虚数項を持つ。

$$j(2\pi n + \pi) \quad (27a)$$

ただし、 n は整数

したがって、 γ_j は次のように表される。

$$\gamma_j = j(2\pi n + \pi) + \alpha_j \quad (27b)$$

式(25a)を満たすときの反復インピーダンスは、式(16)および式(17)の Z_{j1} および Z_{j2} ともに純虚数になるので、次のように表しておく。

$$Z_{j1} = jX_{j1} \quad (28a)$$

$$Z_{j2} = jX_{j2} \quad (28b)$$

今度は次の場合を考える。

$$1 < \frac{A+D}{2} \quad (29a)$$

この場合、式(15)の固有値の間の関係として、次の関係が得られる。

$$\left| \frac{A+D}{2} \right|^2 - \left| \frac{\sqrt{(A+D)^2-4}}{2} \right|^2 = 1 \quad (29b)$$

したがって、次のようにおくことができる。

$$\cosh \gamma_j = \frac{A+D}{2} \quad (30a)$$

$$\sinh \gamma_j = \frac{\sqrt{(A+D)^2 - 4}}{2} \quad (30b)$$

$$\Lambda_1 = \exp(\gamma_j) \quad (30c)$$

$$\Lambda_2 = \exp(-\gamma_j) \quad (30d)$$

ところで、式(29a)の関係から、固有値 Λ_1 および Λ_2 は正の実数であるから、 γ_j の虚数部はゼロでもよいが、式(20)および式(27)において虚数項を持つので、この場合も次の虚数項を持つものとする。

$$j(2\pi n) \quad (31a)$$

ただし、 n は整数

したがって、 γ_j は次のように表される。

$$\gamma_j = j(2\pi n) + \alpha_j \quad (31b)$$

式(29a)を満たすときの反復インピーダンスは、式(16)および式(17)の Z_{j1} および Z_{j2} ともに純虚数になるので、次のように表しておく。

$$Z_{j1} = jX_{j1} \quad (32a)$$

$$Z_{j2} = jX_{j2} \quad (32b)$$

V. 反復パラメータ回路のエネルギーの伝送

影像パラメータの回路は対称回路となるから、それを連続体に移せばマクスウェル方程式や無損失電信方程式から得られる線路となり、その線路内のエネルギーの伝送については文献[6]などに述べた。それに対して、反復パラメータの回路は対称回路とはならないので、エネルギーの伝送については改めて考える必要がある。

また、Ⅲ章で示したように、図2に示すような集中定数素子で構成される周期構造系では、その切り口の違いにより、インピーダンスが異なる値となるから、一定の特性インピーダンスの線路上を信号やエネルギーが反射なしに伝わるわけではない。そこで、一定の特

性インピーダンスを持つけれども、左右の特性インピーダンスが異なる伝送線路を取り上げることにしよう。

すなわち、通過帯域を持つ反復パラメータ回路の縦続行列を表す式(24)と同一特性を持つ一般化線路として、文献[7]において“Pasteur線路”が得られていて、長さ l の Pasteur線路の縦続行列は次のように表される。

$$\begin{bmatrix} \frac{R_p \cos \beta l - X_p \sin \beta l}{R_p} & \frac{j \sin \beta l (R_p^2 + X_p^2)}{R_p} \\ \frac{j \sin \beta l}{R_p} & \frac{R_p \cos \beta l - X_p \sin \beta l}{R_p} \end{bmatrix} \quad (33)$$

式(33)は集中定数回路ではなく、Pasteur線路という伝送線路の縦続行列であり、伝送線路によってエネルギーがどのように運ばれるかを考察するのに都合が良い。そこで反復パラメータ回路に代わってPasteur線路でエネルギーの伝わり方を考えよう。

5.1 Pasteur 線路

文献[7]に一般化波動方程式が述べられていて、その中にPasteur線路がある。Pasteur線路の波動方程式は、次の連立微分方程式で表される。

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} V(x) \\ I(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \omega \kappa_a & j \omega \mu \\ j \omega \varepsilon & -\omega \kappa_a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V(x) \\ I(x) \end{bmatrix} = 0 \quad (34)$$

この波動方程式の主対角要素は逆符号なので、リカッチ微分方程式の関係から $V(x)$ のみ、および $I(x)$ のみの波動方程式が得られる。すなわち、この方程式では、 $V(x)$ も $I(x)$ も同一の次の方程式を満足する。

$$\frac{d^2}{dx^2} V(x) = -\omega^2 (\varepsilon \mu - \kappa_a^2) V(x) = \gamma^2 V(x) \quad (35a)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} I(x) = \gamma^2 I(x) \quad (35b)$$

伝搬定数 γ が純虚数のとき位相定数となり、信号が伝わることを表す。したがって、

$$\varepsilon \mu - \kappa_a^2 > 0 \quad (36)$$

のとき、次の位相定数 β が求まる。

$$\gamma = j \omega \sqrt{\varepsilon \mu - \kappa_a^2} = j \beta \quad (37)$$

この線路の二つの波動関数は次のように表される。

$$V(x) = N_1 Z_{of} e^{-j\beta k} + N_2 Z_{ob} e^{j\beta k} \quad (38a)$$

$$I(x) = N_1 e^{-j\beta k} - N_2 e^{j\beta k} \quad (38b)$$

ここに、

$$Z_{of} = \frac{\sqrt{\varepsilon\mu - \kappa_a^2} - j\kappa_a}{\varepsilon} = R_P + jK_P \quad (39a)$$

$$Z_{ob} = \frac{\sqrt{\varepsilon\mu - \kappa_a^2} + j\kappa_a}{\varepsilon} = Z_{of}^* = R_P - jK_P \quad (39b)$$

すなわち、マクスウェル方程式の解は右に進行する波も左に後進する波の特性インピーダンスも等しく特性抵抗 R_0 であった。それに対して、Pasteur線路の波動では左右に進む波の特性インピーダンスは異なっていて、 Z_{of} は右に進行する進行波の特性インピーダンスを表し、 Z_{ob} は左に後進する後進波の特性インピーダンスを表す。その原因は式(34)で表されるように主対角要素が互いに逆符号になっていて、対称回路となっていないためである。それにもかかわらず、この回路が無損失であるために、左右に進行する波の特性インピーダンスは複素数となっていて互いに共役複素数になっている。

式(38)を用いれば、回路的に表わされた線路の長さ l の縦続行列は、次のように表される。

$$\frac{1}{Z_{of} + Z_{ob}} \begin{bmatrix} Z_{of} e^{j\beta l} + Z_{ob} e^{-j\beta l} & Z_{of} Z_{ob} (e^{j\beta l} - e^{-j\beta l}) \\ e^{j\beta l} - e^{-j\beta l} & Z_{ob} e^{j\beta l} + Z_{of} e^{-j\beta l} \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} \frac{R_P \cos \beta l - X_P \sin \beta l}{R_P} & \frac{j \sin \beta l (R_P^2 + X_P^2)}{R_P} \\ \frac{j \sin \beta l}{R_P} & \frac{R_P \cos \beta l + X_P \sin \beta l}{R_P} \end{bmatrix} \quad (40)$$

式(40)の縦続行列の要素を用いると、

$$AD - BC = 1 \quad (41)$$

が求まり、相反性を満たす。

5.2 Pasteur線路での共鳴現象

文献[8]にはPasteur線路での共鳴現象が述べられているので、その共鳴現象に基づいてPasteur線路のエネルギーの伝わり方を考えよう。

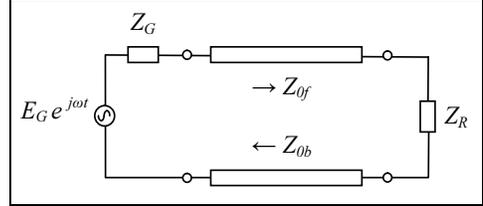


図6 複素数の電源の内部インピーダンス Z_G と複素数の負荷インピーダンス Z_R の間に長さ l のPasteur線路がはさまれた回路
Fig.6 The Pasteur line among an inner complex impedance Z_G of generator and a load complex impedance Z_R .

図6には一般に複素数の電源の内部インピーダンス Z_G と複素数の負荷インピーダンス Z_R の間に長さ l のPasteur線路がはさまれた回路を示している。

ここで、Pasteur線路で運ばれるエネルギーを考えるために、電源の内部インピーダンスが純抵抗 R_R であり、電圧が $E_G > 0$ の電圧源としよう。この電圧源の最大有能電力は

$$\frac{E_G^2}{4R_G} \quad (42)$$

と与えられるから、この最大有能電力がPasteur線路ではどのように表されるかをまず考えよう。

文献[8]にはPasteur線路での共鳴現象は、電源の内部インピーダンスと負荷インピーダンスとが抵抗値で等しい場合で、次のように表され、

$$R_G = R_R \quad (43a)$$

しかも次の関係が成り立つときである。

$$\sin \beta l = 0 \quad (43b)$$

上式は次のように表される。

$$\beta l = 2n\pi \quad (n \text{ は整数}) \quad (43c)$$

式(43)を満たす回路表示は図7に示すものとなる。

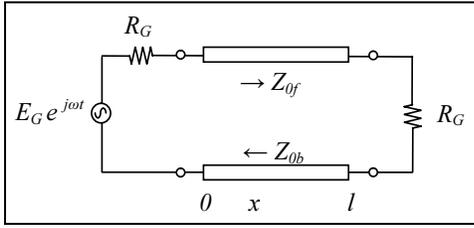


図7 共鳴しているPasteur線路
Fig.7 Being resonance on a Pasteur line.

図7に示す回路において、式(38)における定数 N_1 および N_2 を求めよう。定数 N_1 および N_2 の終端条件は $x = 0$ および $x = l$ で次のように与えられる。

$$E_G = V(0) + R_G I(0) \quad (44a)$$

$$V(l) = R_G I(l) \quad (44b)$$

$x = 0$ と $x = l$ における電圧および電流は次のように与えられる。

$$V(0) = N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} \quad (45a)$$

$$I(0) = N_1 - N_2 \quad (45b)$$

$$V(l) = N_1 Z_{0f} e^{-j2n\pi} + N_2 Z_{0b} e^{j2n\pi} \quad (45c)$$

$$I(l) = N_1 e^{-j2n\pi} - N_2 e^{j2n\pi} \quad (45d)$$

したがって、式(44)を用いて、

$$E_G = N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} + R_G (N_1 - N_2) \quad (46a)$$

$$N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} = R_G (N_1 - N_2) \quad (46b)$$

$$\therefore E_G = 2R_G (N_1 - N_2) \quad (46c)$$

上の式から、

$$N_1 - N_2 = \frac{E_G}{2R_G} \quad (47a)$$

$$N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} = \frac{E_G}{2} \quad (47b)$$

式(39)を用いて上式を解くと、

$$N_1 = \frac{E_G}{2R_G} \cdot \frac{R_G + R_P - jX_P}{2R_P} \quad (48a)$$

$$N_2 = \frac{E_G}{2R_G} \cdot \frac{R_G - R_P - jX_P}{2R_P} \quad (48b)$$

上式のように、 $N_2 \neq 0$ であるから、Pasteur線路には後進波が存在し、定在波が線路内に存在する。文献[9]で考えたように定在波が存在するときは有効電力が線路内に存在する。そこで、Pasteur線路内の有効電力を求めよう。すなわち、式(38)の N_1 、 N_2 に式(48)を

代入して、 $Re(V(x)I^*(x))$ として線路上の有効電力を求めると、線路上の任意の点での有効電力はすべて等しく、

$$Re(V(x)I^*(x)) = \frac{E_G^2}{4R_G} \quad (49)$$

と求まり、電源の最大有能電力に等しいことが求まる。

5.3 Pasteur線路の無反射条件

図7に示す式(43)の条件では定在波が立っているので、反射があることを示している。そこで、Pasteur線路の無反射の条件をここで考えよう。

IV章の反復パラメータ理論の固有値と固有ベクトルの考察から、図6に示す回路における負荷インピーダンスを Z_{0f} とすれば、電源側のポートからPasteur線路を見込んだインピーダンスも Z_{0f} となる。そこで、電源の内部インピーダンスも Z_{0f} としてみよう。この場合の定数 N_1 および N_2 の終端条件は $x = 0$ および $x = l$ で次のように与えられる。

$$E_G = V(0) + Z_{0f} I(0) \quad (50a)$$

$$V(l) = Z_{0f} I(l) \quad (50b)$$

$x = 0$ と $x = l$ における電圧および電流は次のように与えられる。

$$V(0) = N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} \quad (51a)$$

$$I(0) = N_1 - N_2 \quad (51b)$$

$$V(l) = N_1 Z_{0f} e^{-j2n\pi} + N_2 Z_{0b} e^{j2n\pi} \quad (51c)$$

$$I(l) = N_1 e^{-j2n\pi} - N_2 e^{j2n\pi} \quad (51d)$$

したがって、式(50)を用いて、

$$E_G = N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} + Z_{0f} (N_1 - N_2) \quad (52a)$$

$$N_1 Z_{0f} + N_2 Z_{0b} = Z_{0f} (N_1 - N_2) \quad (52b)$$

上式を解くと、

$$N_1 = \frac{E_G^2}{2Z_{0f}} \quad (53a)$$

$$N_2 = 0 \quad (53b)$$

この場合の有効電力を求めると、

$$Re(V(x)I^*(x)) = \frac{E_G^2}{4} \cdot \frac{R_p}{R_p^2 + X_p^2} \quad (54a)$$

$$\text{ただし、任意の } x(0 \leq x \leq l) \text{ で} \quad (54b)$$

この場合の電源の最大有能電力は $E_G^2/4R_P$ であるから、Pasteur線路内には反射波はないが、入力端から最大有能電力が入力されているわけではなく、入力端で反射があることを示している。そこで、入力端で反射をなくす電源の内部インピーダンスを求めてみよう。

Pasteur線路の考察から、後進波の特性インピーダンスは

$$Z_{0b} = Z_{0f}^* = R_P - jX_P \quad (55)$$

であるから、電源の内部インピーダンスを Z_{0b} とすることを考え、式(50a)を次のように書き換える。

$$E_G = V(0) + Z_{0b}I(0) \quad (56)$$

そうすれば、任意の x ($0 \leq x \leq l$) での有効電力を求めると、電源の最大有能電力の $E_G^2/4R_P$ が求まる。したがって、Pasteur線路に対する電源の内部インピーダンスと負荷のインピーダンスとは互いに複素共役にする必要があることがわかる。

VI. 結晶基が3種類の分子

図1に示す3種類の原子が結晶基となる分子の等価回路の1周期分として、図8に示す回路を取り上げよう。

図8に示す回路の縦続行列を求めると次のものが得られる。

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ I_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_2 \\ I_2 \end{pmatrix} \quad (57a)$$

$$A = 1 + s^2 \frac{3M_1 + 2M_2 + M_3}{K} + s^4 \frac{2M_1M_2 + 2M_1M_3 + M_2M_3}{K^2} + s^6 \frac{M_1M_2M_3}{K^3} \quad (57b)$$

$$B = s(M_1 + M_2 + M_3) + s^3 \frac{(M_1M_2 + 2M_1M_3 + M_2M_3)}{K} + s^5 \frac{M_1M_2M_3}{K^2} \quad (57c)$$

$$C = s \frac{3}{K} + s^3 \frac{2M_2 + 2M_3}{K^2} + s^5 \frac{M_2M_3}{K^3} \quad (57d)$$

$$D = 1 + s^2 \frac{M_2 + 2M_3}{K} + s^4 \frac{M_2M_3}{K^2} \quad (57e)$$

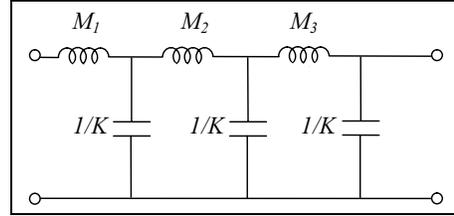


図8 3種類の原子が結晶基となる分子の等価回路

Fig.8 An equivalent circuit for three atoms crystal.

この回路は縦続行列のAとDとが異なるから、II章で述べたように対称回路ではないので、映像パラメータは求めることができないので、反復パラメータ理論を適用しよう。反復パラメータ理論では $(A+D)/2$ が重要な働きをするのでそれを求めると

$$\frac{A+D}{2} = 1 + s^2 \frac{3(M_1 + M_2 + M_3)}{2K} + s^4 \frac{M_1M_2 + M_1M_3 + M_2M_3}{K^2} + s^6 \frac{M_1M_2M_3}{2K^3} \quad (58)$$

上式は3つの M_1 , M_2 , M_3 について対称となっているので、3つの M の順序には関係ない。このことは、この回路の反復パラメータの位相角が順序には関係なく決まるので、反復位相の一例を図9に示す。

図9からわかるように、この回路は3つの通過帯域、すなわち、第1、第2、および第3ブリュアン領域を持ち、通過帯域と遮断帯域とを分けるカットオフ角周波数は、 ω_1 , ω_2 , ω_3 , ω_4 , ω_5 の5つがあり、次のように表される。

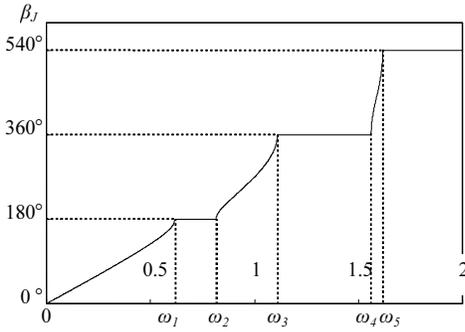


図9 図8に示す回路の反復パラメータ回路の位相量
Fig.9 Phase characteristic for iterative parameter circuit for the circuit shown in Fig.8.

第1ブリュアン領域： $0 \leq \omega < \omega_1$ (59a)

第2ブリュアン領域： $\omega_2 < \omega < \omega_3$ (59b)

第3ブリュアン領域： $\omega_4 < \omega < \omega_5$ (59c)

上の5つの ω のうち ω_3 と ω_4 とが、次のように求まる。

$$\omega_3 = \sqrt{\frac{K}{M_1 M_2 M_3} \left\{ (M_1 M_2 + M_1 M_3 + M_2 M_3) - \sqrt{f(M)} \right\}} \quad (60a)$$

$$\omega_4 = \sqrt{\frac{K}{M_1 M_2 M_3} \left\{ (M_1 M_2 + M_1 M_3 + M_2 M_3) + \sqrt{f(M)} \right\}} \quad (60b)$$

ここに、

$$f(M) = M_1^2 M_2^2 + M_1^2 M_3^2 + M_2^2 M_3^2 - M_1 M_2 M_3 (M_1 + M_2 + M_3) \quad (60c)$$

図8に示す回路をフィルタとして利用することを考えよう。このフィルタは図9に示す位相量が 180° の整数倍となる角周波数以外の角周波数で通過帯域となり得る。そこで、図8に示す回路の通過帯域内の反復インピーダンスを求めてみよう。

各 M の値の大小で特性を求めると、間に挟まった M_2 の値が最も大きいとき特性がフィルタに適していると考えられるので、一例として、

$$M_1 = 2, M_2 = 3, M_3 = 1, K = 1 \quad (61)$$

としたときの反復インピーダンスを図10に示す。

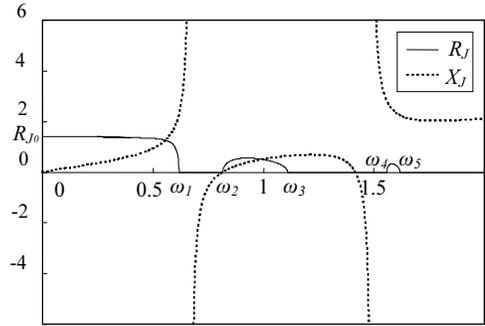


図10 図8に示す回路に式(61)の値を代入した回路の反復インピーダンス
Fig.10 Impedance representation for iterative parameter circuit in pass-band for the circuit shown in Fig.8.

図10には、通過帯域内の反復インピーダンスを示すのが主目的なので、通過帯域内の抵抗分 R_J を実線で求めている。なお、 R_J の $\omega = 0$ における値は次のように求まる。

$$R_{J0} = \sqrt{\frac{(M_1 + M_2 + M_3)K}{3}} \quad (62)$$

図10には反復インピーダンスの虚数部 jX_J を点線で示している。図10の点線から分かるように、それが0になるのは $\omega = 0$ 以外にはないと考えられる。

したがって、図8に示す回路を多段に用いてフィルタを構成する場合には、文献[2]の図7の回路構成を参考にする。すなわち、電源の内部抵抗と負荷の抵抗とを同じ値 R_G とし、図8に示す回路を N 段接続し、位相量が $n\pi$ となる角周波数が共鳴となることを利用する。その場合、図9から分かるように、位相量が図9の π および 2π に合った角周波数では遮断角周波数となってしまふ。それを避けるために、 N 段接続した回路の端に M_1 を接続して位相量を $\pi/2$ 増やし、遮断角周波数 ω_5 における位相量を

$$\left(3N + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (63)$$

とする。このようにすれば共鳴する角周波数は文献[2]に示した手法で求められる。すなわち、図8に示す回路の位相量は図9に示し

ているので、共鳴する位相量は次の位相量で表される角周波数として求められる。

$$\beta_j = \frac{540^\circ}{3N+1/2} \cdot 3k, \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (64)$$

VII. むすび

古典的な回路理論である映像パラメータ理論と反復パラメータ理論を用いると、集中定数回路であってもエネルギーを伝えることを示す位相量を求めることができる。

本文では、3種類の原子が結晶基となる分子の運動方程式からその分子の振動を表す等価回路をまず求めた。その等価回路の1周期分の回路を表す結晶基では対称回路が求められないので、この回路には映像パラメータ理論を適用することができないので、改めて反復パラメータ理論について考察した。

無損失の反復パラメータ回路の特長は定常状態における入出力インピーダンスが互いに複素共役になっていて、複素共役のインピーダンス整合をしている。すなわち、定常状態でインピーダンス整合であって、伝搬速度は求まらないで、定常状態で伝わる位相量が求まるものである。したがって、離散的に表される分子を用いたフィルタの解は定常状態に対してのみである。

量子力学は量子化という離散的な現象を対象としているから、その波動性に関しては定常状態の解が主となり、時間的に瞬時の現象が解となるとは考えられない。

このように考えると、量子力学は改めて考える必要があると思うがいかがなものであろうか。

参考文献

- [1] 永井信夫：分子の運動方程式を表現する等価回路，北星学園大学経済学部北星論集，45，2，pp.13-25，2006年3月
- [2] 永井信夫：結晶基が2個までの分子の振動を

表す離散的な等価回路，北星学園大学経済学部北星論集，46，2，pp.63-76，2007年3月

- [3] 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
- [4] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理 第13回 信号処理とリカッチ微分方程式，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.4，No.5，pp.357-368，Sept. 2000
- [5] 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
- [6] 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
- [7] 永井信夫：マクスウェル方程式に基づく波動方程式の一般化—回路理論的考察—，北星学園大学経済学部北星論集，42，2，pp.43-58，2003年3月
- [8] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理 第18回 一般化無損失波動方程式の共鳴および固有値問題，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.6，No.4，pp.219-228，July 2002
- [9] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理 第9回 分布定数回路に対するエネルギーの保存則，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.3，No.4，pp.249-258，July 1999

[Abstract]

An Application of the Iterative Parameter Theory of Classical Circuit Theory to Molecule Oscillations

Nobuo NAGAI

In the case when the motion equation for molecules supposed as represented by difference equations for the arrangement of atoms with three crystal basis, lumped-constant circuits of periodic systems are obtained as equivalent circuits for the equation of motion for molecules. Since an equivalent circuit of a periodic element of three crystal basis is not presented by a symmetric circuit, the periodical element is analyzed by the iterative parameter theory instead of the image parameter theory for lumped-constant circuits. This paper shows energy transmission for the oscillation and wave motion of molecules by using the circuit theory.

key words : Molecules with Three Crystal Basis, Equivalent Circuits for Motion of Molecules, Iterative Parameter Theory, Pasteur Line, Lossless Circuit with Characteristic Impedance of Complex Number.