

電磁場中の量子力学

文責：Physics Lab. 2021 物性班 井ノ上慎一

2021 年 5 月 15 日

1 電磁場中の Lagrangian とゲージ対称性

1.1 電磁場中の粒子を記述する Lagrangian

本項では電磁場中の粒子の Lagrangian を作用積分の観点から説明し、そのゲージ不変性をみることを目標とする。

電磁場中の粒子の作用は場と相互作用しない自由粒子の作用と場と相互作用する作用の 2 つの和で表せる。作用 S を $S = S_m + S_{mf}$ と書く。

■自由粒子の作用 非相対論的な自由粒子の Lagrangian は $L_{\text{classic}} = \frac{1}{2}mv^2$ と書ける。相対論的自由粒子の Lagrangian について、 $v \ll c$ の極限を取ったときに非相対論的 Lagrangian に一致するように自然に拡張することはできないかを考える。

相対論的自由粒子に対して使える Lorentz 不変量として固有時 $d\tau^{*1}$ を考え、実数の定数 α を用いて $S_m = \alpha \int d\tau$ と書いてみる。この $v \ll c$ 極限を v/c の最低次まで取ると、

$$S_m = \alpha \int d\tau \quad (1)$$

$$= \alpha \int c \sqrt{1 - (v/c)^2} dt \quad (2)$$

$$= \alpha \int c \left(1 - \frac{v^2}{2c^2}\right) dt \quad (3)$$

となる。従って、上のように作用を書いたとき、Lagrangian の非相対論的極限は $L = \alpha c \left(1 - \frac{v^2}{2c^2}\right)$ になる。定数は運動方程式に影響しないので除くことができる。 $\alpha = -mc$ とすれば非相対論的な自由粒子の Lagrangian $L_{\text{classic}} = \frac{1}{2}mv^2$ が得られるので、 $\alpha = -mc$ とすれば非相対論的な自由粒子の Lagrangian を拡張した、相対論的な自由粒子の Lagrangian が得られると期待される。

■粒子と電磁場の作用 古典的な電磁場と相互作用する荷電粒子を考えると、相互作用を特徴付ける、粒子に固有の量はその電荷 e だけである。^{*2}電磁場というものは 4 元ポテンシャル $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ によって記述され

^{*1} $x^\mu = (ct, x, y, z)$ として $d\tau = \sqrt{c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2} = c dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$

^{*2} 荷電粒子にはたらくローレンツ力 $\mathbf{f}$ の表式を思い出すと、(非相対論的な) 表式は $\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ であった ($\mathbf{E}, \mathbf{B}$ は電場、磁束密度で $\mathbf{v}$ は荷電粒子の速度)。荷電粒子の力学的な運動は運動方程式により記述されたことを思い出せば、電磁場との相互作用を特徴付ける粒子固有の定数は電荷 e のみであると議論できる。

る。これは、電場 $\mathbf{E}$ や磁束密度 $\mathbf{B}$ の概念を書き換えたもので、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (4)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5)$$

を満たすものとして定義され、それぞれ ϕ スカラーポテンシャル、 $\mathbf{A}$ をベクトルポテンシャルと呼ぶ。また、これらを合わせた 4 元ベクトル $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ を電磁ポテンシャルと言う。後述するように、 $\phi, \mathbf{A}$ の選び方には不定性が存在する。一つ目の式を見ると想像できるように、スカラーポテンシャル ϕ は電位を拡張した概念となっている。

電磁場中に置かれた粒子の持つポテンシャルは $V = e\phi$ であり、解析力学でのラグランジアンを思い出すと、この項の非相対論的作用積分への寄与は $-\int V dt = -q \int \phi dt$ のようになるだろう。これを相対論的 Lagrangian に拡張することを考えると、ポテンシャル ϕ の拡張として 4 元ポテンシャル A^μ を使うことが自然と考えられ、更に A^μ は 4 元位置 x^μ の関数であったから、この 2 項を内積を取って 4 元的な経路に沿って作用積分として書いてみると、

$$S_{mf} = -e \int A_\mu dx^\mu \quad (6)$$

となって、相対論的作用が満たすべき Lorentz 不変性を満たしていることがわかる。このときの作用 S は

$$S = \int -mcd\tau - eA_\mu dx^\mu \quad (7)$$

$$= \int \left(-mc \frac{d\tau}{dt} - eA_i \frac{dx^i}{dt} \right) dt \quad (8)$$

$$= \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - e\phi + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \right) dt \quad (9)$$

となって、電磁場の粒子について Lagrangian は次のような形となる。

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - e\phi + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \quad (10)$$

このときの Hamiltonian H は定義 $H = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L$ を使えば、

$$H = \mathbf{v} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} - L \quad (11)$$

$$= \mathbf{v} \left(e\mathbf{A} + mc^2 \frac{\mathbf{v}/c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \right) - L \quad (12)$$

$$= \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} + e\phi \quad (13)$$

となる。これは相対論的な運動エネルギーと電場のポテンシャルの和となっている。

この Lagrangian や Hamiltonian を使って運動方程式を計算することで、荷電粒子の運動方程式を導くことができる。ここでの Lagrangian の決定の議論は論理的には完全とは言えないが、すでに分かっている運動方程式を再現するという点では、正しいものであると言えるだろう。

1.2 $\phi, \mathbf{A}$ のゲージ不変性

前節で導入した 4 元ポテンシャル A^μ について、 A^μ が実は一意的に決まる物理量でないことを説明する。

まず注意しなければならないのは、場はその中に置かれた粒子がどう振る舞うかによって特徴づけられる。Lorentz 力の表式は $\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ であったが、ここに $\phi, \mathbf{A}$ は登場しない。実際 $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ と $\phi, \mathbf{A}$ は、上で説明したように

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (14)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (15)$$

の関係で結ばれている。

$\phi, \mathbf{A}$ が一意に決まらないことを見るために、時間と位置に依存する（十分滑らかな） f を任意に取る。まず $\mathbf{A}$ を $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \nabla f$ と変更してみる、このときベクトル解析の知識から $\nabla \times \nabla f = 0$ が言えるので、 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}$ が成立し、磁束密度 $\mathbf{B}$ は変更を受けない。同様に、式 (14) について $\tilde{\phi} = \phi - \frac{\partial f}{\partial t}$ と変更すると、 $\tilde{\phi}, \tilde{\mathbf{A}}$ で計算した $\tilde{\mathbf{E}}$ は、

$$\tilde{\mathbf{E}} = -\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{A} + \nabla f) - \nabla \left(\phi - \frac{\partial f}{\partial t} \right) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi = \mathbf{E} \quad (16)$$

となり、電場も変更を受けないことが確かめられる。^{*3}

つまり、あるポテンシャルの組 $(\phi, \mathbf{A})$ について、関数 f により移り変わる組 $(\phi, \mathbf{A}) = \left(\phi - \frac{\partial f}{\partial t}, \mathbf{A} + \nabla f \right)$ たちは同じ $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ を導く。運動方程式および Maxwell 方程式は $\mathbf{E}$ や $\mathbf{B}$ のみで書かれていたことを思い出すと、同じ $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ を与える電磁ポテンシャル $(\phi, \mathbf{A}), (\tilde{\phi}, \tilde{\mathbf{A}})$ は物理的には区別することができない。つまり一つの組 $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ に対していくつもの組 $(\phi, \mathbf{A})$ が対応するというのである。このような電磁ポテンシャルが持つ対称性は、**ゲージ対称性**と呼ばれる対称性である。

このためポテンシャルの組 $(\phi, \mathbf{A})$ については付加条件を一つだけ課することができる。慣例的に次の 2 つ条件がしばしば用いられる。

1. Lorentz ゲージ

4 元ポテンシャルの 4 元発散がゼロとなるようなゲージで、3 次元形式で書けば

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (17)$$

2. Coulomb ゲージ

ベクトルポテンシャルの発散がゼロとなるようなゲージ

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (18)$$

関数 f がポテンシャルの組を $(\phi, \mathbf{A}) \rightarrow \left(\phi - \frac{\partial f}{\partial t}, \mathbf{A} + \nabla f \right)$ のように変換させることを**ゲージ変換**と呼び、この変換に対して不変な量、即ち $\mathbf{E}$ や $\mathbf{B}$ などをゲージ不変量という。古典電磁気学の範囲ではベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ は電磁場を導くための仮想的な量に過ぎなかったが、量子力学の範囲に入ると $\mathbf{A}$ に対するゲージ変換は量子状態の位相変化を引き起こし、重要な位置を占めるようになる。次節ではこの量子状態の位相について解説する。^{*4}

^{*3} f は十分滑らかであるとしたので時間に関する微分と位置に関する偏微分を入れ替える事ができる。

^{*4} 別 pdf で Berry 位相を考える際に重要となる

2 量子論への拡張とゲージ変換性

式 (13) を少し書き換えて量子論に拡張しやすい形にする．以下，荷電粒子が持つ電荷を q とする．解析力学の知識から一般化運動量 $\mathbf{P}$ は

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = q\mathbf{A} + m \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \quad (19)$$

$$= q\mathbf{A} + \mathbf{p} \quad (20)$$

ここで $\mathbf{p}$ は粒子の通常の運動量である．粒子の運動エネルギーは $\frac{p^2}{2m} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$ だから式 (13) は次のように書ける．

$$H = \frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \quad (21)$$

この表式において $\mathbf{x} \rightarrow \hat{\mathbf{x}}$, $\mathbf{P} \rightarrow \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$ と置き換えることにより，荷電粒子の電磁場の Hamiltonian を

$$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \quad (22)$$

と定義する．位置表示の波動関数を $\psi(t, \mathbf{x})$ と置いて，ゲージ変換に伴う波動関数の位相変化を見よう．この関数が従う Schrödinger 方程式は次のように書かれる．

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \right\} \psi \quad (23)$$

ここで波動関数について $\psi(t, \mathbf{x}) \rightarrow e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})/\hbar} \psi(t, \mathbf{x})$ として位相因子を付け加えてみる．このとき，(23) 式は

$$e^{-iq\Lambda/\hbar} \cdot i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - i \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \psi = \left\{ \frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \right\} e^{-iq\Lambda/\hbar} \psi \quad (24)$$

$$= e^{-iq\Lambda/\hbar} \left\{ \frac{(-i\hbar\nabla - q\nabla\Lambda - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \right\} \psi \quad (25)$$

となり， $e^{i\Lambda}$ を払って整理すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left\{ \frac{(-i\hbar\nabla - q(\nabla\Lambda + \mathbf{A}))^2}{2m} + q \left(\phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \right\} \psi \quad (26)$$

となる．したがって，これはゲージ変換 $(\phi, \mathbf{A}) \rightarrow (\phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \mathbf{A} + \nabla\Lambda)$ のもとで波動関数が， $\psi \rightarrow e^{iq\Lambda/\hbar} \psi$ と各点ごとに位相が変わると考えると，ゲージ変換により Schrödinger 方程式が不変に保たれることが分かる．

参考文献

- [1] ランダウ，リフシッツ 著，恒藤敏彦，広重徹 訳『場の古典論（原著第 6 版）』（東京図書，東京，1978）．
- [2] 米谷民明 『初歩の相対論から入る電磁気学』（朝倉書店，東京，2018）．