

次に局所ゲージ変換を議論する。波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を,

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\psi(\mathbf{r}, t) =: \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.1)$$

のように変換することを局所ゲージ変換という。局所ゲージ変換では、 α が \mathbf{r} と t に依存することに注意する。簡単な考察により、局所ゲージ変換に Schrödinger 方程式は影響を受けることが分かる。

例えば波動関数の勾配を計算すると,

$$\nabla\psi'(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\nabla e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} + e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\nabla(\psi(\mathbf{r}, t)) \quad (0.0.2)$$

$$= i(\nabla\alpha(\mathbf{r}, t))e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\psi(\mathbf{r}) + e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\nabla\psi(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.3)$$

$$= e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}(\nabla + i\nabla\alpha(\mathbf{r}, t))\psi(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.4)$$

となり、 $\nabla\psi$ と $\nabla\psi'$ が一致しない。時間発展する Schrödinger 方程式と物理量 \hat{A} の期待値についても同様に計算を行えば,

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi' \neq -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi' \\ \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \neq \langle\psi'|\hat{A}|\psi'\rangle \end{cases} \quad (0.0.5)$$

である。したがって、局所ゲージ変換に対して物理は不変ではない。そこで、**局所ゲージ不変性を基本原理とする物理を再構築する。**

今まで用いていた物理の模型の欠点は、積の微分をおこなったときに余分な項が出てきてしまうことであった。そこで、局所ゲージ不変性を満たすような物理の模型を構成するために、微分の定義を変更することを考える。以下では、今まで考えていた模型において空間に対する微分であった勾配を、共変微分 \hat{D} で、時間微分を \hat{D}_t で書き換えることによって、局所ゲージ不変な物理の模型を作る。 \hat{D} と \hat{D}_t を,

$$\hat{D} := \nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \quad (0.0.6)$$

$$\hat{D}_t := \frac{\partial}{\partial t} - i\frac{e}{\hbar}\phi \quad (0.0.7)$$

と定義する。また、 \mathbf{A} と ϕ の局所ゲージ変換則を,

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \frac{\hbar}{e}\nabla\alpha(\mathbf{r}, t) =: \mathbf{A}' \quad (0.0.8)$$

$$\phi \rightarrow \phi + \frac{\hbar}{e}\frac{\partial}{\partial t}\alpha(\mathbf{r}, t) =: \phi' \quad (0.0.9)$$

と定義する。 \hat{D} と \hat{D}_t を局所ゲージ変換すると,

$$\hat{D} \rightarrow \hat{D}' = \nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}' = \nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} - i\nabla\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.10)$$

$$\hat{D}_t \rightarrow \hat{D}'_t = \frac{\partial}{\partial t} - i\frac{e}{\hbar}\phi' = \frac{\partial}{\partial t} - i\frac{e}{\hbar}\phi - i\frac{\partial}{\partial t}\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.11)$$

となる。このように微分を定義すると,

$$\hat{D}'\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\hat{D}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.12)$$

$$\hat{D}'^2\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\hat{D}^2\psi(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.13)$$

$$\hat{D}'_t\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\hat{D}_t\psi(\mathbf{r}, t) \quad (0.0.14)$$

となることが確かめられる。

式 (0.0.13) や式 (0.0.14) を使いながら、元の Schrödinger 方程式において、勾配を、 \hat{D} で、時間微分を \hat{D}_t で書き換えると,

$$i\hbar\hat{D}'_t\psi' = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{D}'^2\psi' \quad (0.0.15)$$

$$\Leftrightarrow e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}i\hbar\hat{D}_t\psi = -e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}\frac{\hbar^2}{2m}\hat{D}^2\psi \quad (0.0.16)$$

となり、局所ゲージ変換に対して不変な Schrödinger 方程式となった。また、式 (0.0.16) において式 (0.0.6) と式 (0.0.7) を式 (0.0.16) に代入すると、

局所ゲージ変換に対して不変な Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \right] \psi \quad (0.0.17)$$

を得る¹。

以上の流れをまとめると、局所ゲージ不変性を要請することにより、ゲージ場 \mathbf{A} が導入された。逆に、電磁場の起源は局所ゲージ不変性であるといえる。

練習問題 0.1: 電磁場中の Schrödinger 方程式

1. 共変微分

$$\hat{\mathbf{D}} = \nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \quad (0.0.18)$$

において、

$$\hat{\mathbf{D}} \times \hat{\mathbf{D}} = i\frac{e}{\hbar}\mathbf{B} \quad (0.0.19)$$

が成り立つことを示せ。

2. 電磁場中の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \right] \psi \quad (0.0.20)$$

においては

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (0.0.21)$$

が成り立たない。ここで、

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla\psi)], \quad \rho = \psi^*\psi \quad (0.0.22)$$

である。式 (0.0.21) が成り立つように確率の流れを再定義せよ。

1.

$$(\hat{\mathbf{D}} \times \hat{\mathbf{D}})\psi = \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \right) \times \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \right) \psi \quad (0.0.23)$$

$$= \left(\nabla \times \nabla + i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \times \nabla + i\frac{e}{\hbar}\nabla \times \mathbf{A} - \frac{e^2}{\hbar^2} \right) \psi \quad (0.0.24)$$

$$= i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} \times (\nabla\psi) + i\frac{e}{\hbar}(\nabla\psi) \times \mathbf{A} + i\frac{e}{\hbar}(\nabla \times \mathbf{A})\psi \quad (0.0.25)$$

$$= \mathbf{B}\psi \quad (0.0.26)$$

2. まず、確率密度の時間微分は

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) + \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) \quad (0.0.27)$$

¹2023 年度期末試験第 2 問 (1)

である。次に、電磁場中の Schrödinger 方程式より、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi - e\phi\psi \quad (0.0.28)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi^* - e\phi\psi^* \quad (0.0.29)$$

を得る。ここで、

$$\left(\nabla - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi^* = \nabla^2 \psi^* - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\nabla \psi^*) - i\frac{e}{\hbar} (\nabla \psi^*) \cdot \mathbf{A} - i\frac{e}{\hbar} (\nabla \times \mathbf{A}) \psi^* - \frac{e^2}{\hbar^2} \psi^* \quad (0.0.30)$$

$$= \nabla^2 \psi^* - 2i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\nabla \psi^*) - i\frac{e}{\hbar} (\nabla \times \mathbf{A}) \psi^* - \frac{e^2}{\hbar^2} \psi^* \quad (0.0.31)$$

$$\left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi = \nabla^2 \psi + 2i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\nabla \psi) + i\frac{e}{\hbar} (\nabla \times \mathbf{A}) \psi - \frac{e^2}{\hbar^2} \psi \quad (0.0.32)$$

である。よって、

$$2mi \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \times \left[\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi - 2i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \psi^* \psi \right] \quad (0.0.33)$$

$$= -\nabla \times \left[\psi^* \left(\nabla - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi - \left(\left(\nabla - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi \right)^* \psi \right] \quad (0.0.34)$$

となるため、

$$\mathbf{j} = \frac{i}{2m} [\psi^* (\mathbf{D}\psi) - (\mathbf{D}^* \psi^*) \psi] \quad (0.0.35)$$

と定義すればよいことがわかる。