波動関数のゲージ変換

ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$, スカラーポテンシャル $\phi(\boldsymbol{r},t)$ が $\chi(\boldsymbol{r},t)$ によって

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A'} = \boldsymbol{A} - \nabla\chi \qquad \phi \to \phi' = \phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}$$

のようにゲージ変換されるとき, 波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は

$$\psi(\boldsymbol{r},t) \to \psi'(\boldsymbol{r},t) = \exp\left(-i\frac{q\chi}{h}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

という Unitary 変換が行われる

荷電粒子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + q\phi = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\phi$$

と表される。$\psi \to \psi'(\boldsymbol{r},t) = u(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ とすると、ゲージ変換後の波動関数 ψ' は

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}')^2\psi' + q\phi'\psi' \tag{1}$$

を満たさなければならない。

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi'\right)\psi' &= i\hbar\left(u\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial t}\psi\right) - q\left(\phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}\right)u\psi \\ &= u\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi + \left(i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} - qu\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A}')\,\psi' &= (i\hbar\nabla + q(\boldsymbol{A} - \nabla\chi))\,u\psi \\ &= i\hbar\psi\nabla u + i\hbar u\nabla\psi + q\boldsymbol{A}u\psi - q\nabla\chi u\psi \\ &= u(u\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi + \psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u\end{aligned} \tag{3}$$

荷電粒子のシュレディンガー方程式 (1) を式変形すると、

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi' = \frac{1}{2m}(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A}')^2\psi'$$

となる。(2)(3) を代入すると、

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi'\right)\psi' = u\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi + \left(i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} - qu\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)& \\ = \frac{1}{2m}(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A}')^2\psi'& \\ = \frac{1}{2m}((i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A} - q\nabla\chi)(u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi + \psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u))& \\ = \frac{1}{2m}((i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A}) - q\nabla\chi)(u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi)& \\ + \frac{1}{2m}((i\hbar\nabla - q\nabla\chi) + q\boldsymbol{A})(\psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u)& \\ = \frac{1}{2m}((i\hbar\nabla u)(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi + (u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})^2\psi) - (q\nabla\chi)(u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi))& \\ + \frac{1}{2m}((i\hbar\nabla\psi)(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u + (\psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)^2u) + (q\boldsymbol{A})(\psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u))& \\ = \frac{1}{2m}((u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})^2\psi) + (\psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)^2u) + 2(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)u(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi)&\end{aligned} \tag{4}$$

ゲージ変換前の波動関数でもシュレディンガー方程式

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi = \frac{1}{2m}(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})^2\psi$$

が成り立つので、(4) 式は任意の $\psi(\boldsymbol{r},t), \chi(\boldsymbol{r},t)$ に対して

$$\left(i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} - qu\frac{\partial \chi}{\partial t}\right) - \frac{1}{2m}((\psi(i\hbar\nabla - q\nabla\chi)^2 u) + 2(i\hbar\nabla u - qu\nabla\chi)(i\hbar\nabla + q\boldsymbol{A})\psi) = 0$$

でなければならない。よって、$u(\boldsymbol{r},t)$ の条件として

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} = qu\frac{\partial \chi}{\partial t} \qquad i\hbar\nabla u = qu\nabla\chi \tag{5}$$

が得られる。相対論的な表式 $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (t, x, y, x)$ を用いると,(5) は

$$i\hbar\partial_\mu u = qu\partial_\mu\chi \tag{6}$$

となる。(6) の両辺に dx^μ をかけると $\partial_\mu u\ dx^\mu = du$ より,

$$i\hbar\ du = qu\ d\chi \tag{7}$$

(7) を両辺積分すると、$u = C\exp\left(-i\dfrac{q\chi}{\hbar}\right)$ が得られる。

波動関数の規格化条件より $C = e^{i\theta}$ となり, $\chi = 0$ で $u = 1$ なので, $\theta = 0\ \ C = 1$ となる。

また、$\psi \to \psi'(\boldsymbol{r},t) = u(\boldsymbol{r},t)\psi + \Phi(\boldsymbol{r},t)$ という定数項 $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ があるとすると、任意の $\psi'(\boldsymbol{r},t)$ に対して規格化条件が成り立つためには $|\Phi(\boldsymbol{r},t)| = 0$ でなければならない。よって、$\Phi(\boldsymbol{r},t) = 0$ である。

以上より、ゲージ変換によって波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は

$$\psi(\boldsymbol{r},t) \to \psi'(\boldsymbol{r},t) = \exp\left(-i\frac{q\chi}{h}\right)\ \psi(\boldsymbol{r},t)$$

という Unitary 変換をうけることが示された。