

電磁場中の荷電粒子に対する非相対論的シュレー ディンガー方程式から双極子近似まで

シキノ *

May 11, 2022

Contents

1	本稿の目的と結論	3
2	電磁場中の荷電粒子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式	4
2.1	電場 $\mathbf{E}$, 磁場 $\mathbf{B}$ とベクトルポテンシャル ϕ , スカラーポテンシャル $\mathbf{A}$. . .	5
2.2	ゲージ変換 (Gauge transform)	6
2.2.1	クーロンゲージ (Coulomb gauge)	6
2.3	クーロンゲージに変換した結果, ベクトルポテンシャル, スカラーポテンシャルが示すもの	7
3	クーロンゲージにおける, 電磁場中の一電子原子の電子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式	9
3.1	弱電場近似 (電場強度が非常に小さいため一光子吸収しか起こらない場合)	10
3.2	双極子近似	10
3.2.1	速度ゲージ (Velocity gauge)	12
3.2.2	長さゲージ (Length gauge)	13
3.3	古典的なハミルトニアンからの導出	15
A	関数か演算子か	17
B	電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン	19
C	ゲージ変換の証明	20

*<https://slpr.sakura.ne.jp/qp/>, <https://twitter.com/sikinote>

D ローレンスゲージに変換した結果, ベクトルポテンシャル, スカラーポテンシャル が示すもの	22
E クーロンゲージかつ双極子近似下における $\phi, \mathbf{A}$	23
F 双極子近似への移行に関する数式	24
G ローレンスゲージ (Lorenz gauge)	25

1 本稿の目的と結論

本稿では電磁場中¹の荷電粒子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式の導出を行います。

自由粒子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

からスタートして、電磁場中の荷電粒子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

を導きます ($\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$).

その後、クーロングージ ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) を満たす $\chi(\mathbf{r}, t)$ を選び、かつ双極子近似 ($\mathbf{A} \approx \mathbf{A}(t)$) を採用した場合に電磁場中の一電子原子の電子 (電荷 $q = -e$) に対する、速度ゲージ (Velocity gauge), 長さゲージ (Length gauge) における真空中の非相対論的シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 + \frac{e}{\mu} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + e\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3b)$$

を導きます。ここで H_0 は電磁場のない空間における原子のポテンシャルです。Eq. (3a) は速度ゲージ, Eq. (3b) は長さゲージにおける非相対論的シュレーディンガー方程式と呼ばれています。双極子近似である Eq. (3a), Eq. (3b) は, $\mathbf{A}^2$ を含む非線形項を無視するので、一光子過程しか考えない (多光子過程が起こらない) という近似が入っています。

本稿の主な参考文献は、

B. H. Bransden and C. J. Joachain, 2003, "*Physics of Atoms and Molecules second edition*", Prentice Hall, ISBN 0-582-35692-X

の第4章 "Interaction of one-electron atoms with electromagnetic radiation" を元にしていますので、正確な文章を希望する方はこちらをご参照ください。

¹本稿において、"電磁波" は距離に応じで波の形で伝わる減衰のない電場/磁場を表す意味で、"電磁場" は"電磁波" を含む一般的な電場/磁場の意味で使用しています。

2 電磁場中の荷電粒子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式

歴史的には、電磁場中を動くスピンなしの自由な非相対論的な荷電粒子に対するハミルトニアンは、Goldstein によって導出されました (1980). ここではその結論だけ書きます. 電荷 q , 重さ m を持つ荷電粒子のが電磁場中を運動する場合, 電磁場中ではエネルギー E と運動量 $\mathbf{p}$ をそれぞれ

$$\begin{cases} E \rightarrow E - q\phi \\ \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \end{cases} \quad (4)$$

と変更して得ることができます. ここで, $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$ はスカラーポテンシャル, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ はベクトルポテンシャルを意味します.

エネルギーをハミルトニアンと見なせば,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad \text{電磁場無し} \quad (5a)$$

$$\downarrow H \rightarrow H - q\phi, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$

$$H - q\phi = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 \quad \text{電磁場有り} \quad (5b)$$

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (5c)$$

と得ることができます (詳しい導出は Appendix B へ). 量子力学のハミルトニアンへ移るためには, 運動量を運動量演算子に変えて $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ と解釈すれば良いので,

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (6a)$$

$$= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) + q\phi \quad (6b)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + i\hbar\frac{q}{2m}(\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 + q\phi \quad (6c)$$

となります. よって, 電磁場中における荷電粒子 (電荷 q , 重さ m) に対する非相対論的シュレーディンガー方程式は, 以下の方程式となります.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + i\hbar\frac{q}{2m}(\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

(再掲: $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$) この方程式は電磁場に対する近似は入っていない方程式です.

2.1 電場 $\mathbf{E}$, 磁場 $\mathbf{B}$ とベクトルポテンシャル ϕ , スカラーポテンシャル $\mathbf{A}$

電磁気学によると, 電場 $\mathbf{E}$, 磁場 $\mathbf{B}$ と, ベクトルポテンシャル ϕ , スカラーポテンシャル $\mathbf{A}$ の間には以下のような関係があります.

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad \begin{matrix} (8a) \\ (8b) \end{matrix}$$

Eq. (8) から, $\phi, \mathbf{A}$ が決まれば $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ は一意に決まりますが, $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ が決まっても $\phi, \mathbf{A}$ は一意に決まらないことが分かります. つまり, 適当な関数 $\chi(\mathbf{r}, t)$ を用いて

$$\begin{cases} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \\ \phi(\mathbf{r}, t) = \phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad \begin{matrix} (9a) \\ (9b) \end{matrix}$$

と $\phi \rightarrow \phi', \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}'$ 変換しても全く同一の $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ が作れてしまうという任意性が存在します. 実際に代入すると,

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left(\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t) \right) - \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t)) \\ \quad = -\nabla\phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times (\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t)) \\ \quad = \nabla \times \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad \begin{matrix} (10a) \\ (10b) \end{matrix}$$

となり, Eq. (8) と同じ形となります. つまり, $\phi, \mathbf{A}$ の表現で一意に決めたいのならば, 追加で $\chi(\mathbf{r}, t)$ を指定する必要がある (ゲージを決める) ということです.

静電場中の議論からスカラーポテンシャル ϕ はあっても不思議じゃないと思われますが, ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ という, 任意性を持つベクトル量が物理的に実在しているとはなかなか容認できないですね. 実際, $\mathbf{A}$ よりも $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ の表現が本質であり, $\mathbf{A}$ は単なる数学的なトリックに過ぎないのでは, と思われていました. つまり, 別に物理的に意味はないけど数学的に扱いやすいから $\mathbf{A}$ を登場させて考えてもいいよね, というだけに過ぎなかったのです. ですがその後, Aharonov-Bohm 効果 (詳細は延べません) が実験的に確認された (外村彰 (1986)[2]) ことにより, 現実の世界では $\mathbf{A}$ が無ければ説明できない現象が存在することが実証され, $\mathbf{A}$ は本当にあるんだ, となりました.

2.2 ゲージ変換 (Gauge transform)

電磁気学によると、マクスウェル方程式 (9) に見たように $\phi, \mathbf{A}$ には任意性であるゲージ $\chi(\mathbf{r}, t)$ が存在します。今、量子力学では $\phi, \mathbf{A}$ による表現がなされているので、電磁気学と矛盾しないようにシュレーディンガー方程式もゲージ変換による任意性が存在していて欲しいです。どちらも同じ世界にある法則ですからね。もし、シュレーディンガー方程式がゲージ変換可能でなければ、シュレーディンガー方程式かマクスウェル方程式の少なくとも一方に間違いがあることが示されます。

再掲しますと、磁場中における荷電粒子 (電荷 q , 重さ m) に対する非相対論的シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

です。非相対論的シュレーディンガー方程式の量子力学におけるゲージ変換は、波動関数の変更も加えて

$$\begin{cases} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) & (12a) \\ \phi(\mathbf{r}, t) = \phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) & (12b) \\ \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) \exp \left[i \frac{q}{\hbar} \chi(\mathbf{r}, t) \right] & (12c) \end{cases}$$

となります。ここで $\chi(\mathbf{r}, t)$ は任意の関数です。

つまり、Eq. (11) についてそれぞれゲージ変換 (12) を行い、プライムがついた関数で表現すると変換前の方程式と全く同一の形

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A}' \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}') + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}'^2 + q\phi' \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (13)$$

が現れるということです (計算過程は Appendix C をご覧ください)。

少しでもゲージ変換を理解するためにもっとも簡単な例を考えるならば、 $\chi(\mathbf{r}, t) = c$ と定数である場合を考えるとよいでしょう。これは波動関数の位相を定数分だけずらすことにしかならず、物理的な意味を変えないことは明らかです。²

2.2.1 クーロンゲージ (Coulomb gauge)

さて、ゲージ変換という任意性 $\chi(\mathbf{r}, t)$ が存在するということは、波動関数や電場・磁場を指定しても別のものを考えてしまう可能性があるという反面、任意性を利用してシュレー

² $\chi(\mathbf{r}, t)$ は至るところで正則な複素関数であれば大丈夫そうですね。明言している文献は見つけられなかったのが不安ではありますが…。

ディンガー方程式を解くのに都合の良い波動関数や電場・磁場の形を持つような $\chi(\mathbf{r}, t)$ を選択しても良いという利点とも捉えられます。

既に先人によっていろいろ便利な選び方が見つけられてきました。その中でローレンスゲージとクーロンゲージと呼ばれる選び方が有名です³。ローレンスゲージは電磁気学で良く使われ、対称性が良いゲージです。クーロンゲージはシュレーディンガー方程式を解くのに有用であり、本稿ではクーロンゲージにのみ絞って考えていきます。

2.3 クーロンゲージに変換した結果、ベクトルポテンシャル、スカラーポテンシャルが示すもの

クーロンゲージとは、

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (14)$$

を満たすように $\chi(\mathbf{r}, t)$ を選ぶゲージです。このクーロンゲージにおいて、電磁場がどのように表されているか調べましょう。

電磁ポテンシャルを用いたマクスウェル方程式を考えます。

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\varepsilon \mu \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = -\mu \mathbf{j} \end{cases} \quad (15a)$$

$$\quad (15b)$$

ここで、 $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ は空間の電荷密度であり、 $\mathbf{j} = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ は電流密度です。クーロンゲージにおいては、 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ になるように選ぶので、

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \varepsilon \mu \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\mu \mathbf{j} \end{cases} \quad (16a)$$

$$\quad (16b)$$

と書き換えられます。 ϕ の方程式 (16a) に注目しますと、これは静電気学で現れていた方程式です。つまり本来、時間に依存する電磁気現象を扱っていたはずなのに静電気学を考えて進めることができる利点があります。

つまり Eq. (15a), Eq. (15b) のまま電荷密度 ρ や電流密度 $\mathbf{j}$ から ϕ や $\mathbf{A}$ を求めてシュレーディンガー方程式に適用したいと考えて導出を試みても、なかなか大変です。たとえ真空中 $\rho(\mathbf{r}, t) = 0, \mathbf{j} = \mathbf{0}$ であっても、次のマクスウェル方程式

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\varepsilon \mu \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = 0 \end{cases} \quad (17a)$$

$$\quad (17b)$$

³ローレンス (Lorenz) さんとローレンツ (Lorentz) さんは別人です。Appendix G に少しまとめました。

を解くのはなかなか複雑です.

ですが, 真空中でクーロンゲージの場合であれば,

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi = 0 & (18a) \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \varepsilon\mu \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 & (18b) \end{cases}$$

となります. 少なくとも真空中では $\phi = \phi(t)$ はマクスウェル方程式の解であり, 空間にいきなり電荷が現れるわけではないのなら, $\phi = (\text{定数})$ としてすぐに求めることができます. これを用いてしまえば, $\mathbf{A}$ は完全に波の方程式であり, その解は $\mathbf{A} \propto \sin(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)$ の線形結合となり, 光速度で進む解となります.

3 クーロンゲージにおける，電磁場中の一電子原子の電子に対する非相対論的シュレーディンガー方程式

電磁場中のシュレーディンガー方程式の話に戻しましょう．Eq. (11)，もしくはEq. (13)ではゲージを指定していませんでしたが，クーロンゲージであることを指定するともう少し変形を進められます．プライムは冗長になりますので，プライム無しで書いていきます．

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (19)$$

まず，クーロンゲージの性質 $(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0$ を利用すれば，

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\Psi) = (\nabla \cdot \mathbf{A})\Psi + \mathbf{A} \cdot (\nabla \Psi) \quad (20a)$$

$$= \mathbf{A} \cdot (\nabla \Psi) \quad (20b)$$

となります⁴．よって，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (21)$$

と整理できます．

続いて原子との相互作用を考えてみます．原子ではクーロンポテンシャルが加わるのでこれをポテンシャルエネルギーとして追加させます．原子核と電子はもちろん電磁気力で引き合っているのですが，厳密には ϕ として入れなければなりませんが，そうはしません．なぜなら，最も軽い水素原子の場合でも電子の重さ m と原子核の重さ M が 1000 倍ほど違うので，原子核と電磁場の相互作用が無視できる状況を考えているからです．この状況ではその効果は，ハミルトニアンに原子核-電子のクーロンポテンシャルを $V(\mathbf{r})$ として追加するだけでよいです．また，電子に対するシュレーディンガー方程式を立てるので $q = -e$ ($e \approx 1.602 \times 10^{-19}[\text{C}]$ は電荷素量) として

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu} \mathbf{A}^2 - e\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (22)$$

と書き表せます．ここで電磁場のない時の原子のハミルトニアン $H_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ を定義しました．原子の場合，たいてい $V(\mathbf{r}) \propto -1/r$ です．また，質量を原子核と電子の換算質量 $\mu \equiv \frac{mM}{m+M}$ に変更しました⁵．

⁴クーロンゲージは $(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0$ であって，波動関数への作用を表す次の表記 $\nabla \cdot \mathbf{A}\Psi = \nabla \cdot (\mathbf{A}\Psi) \neq 0$ とは別物です．書き方が紛らわしいですが，注意してください．

⁵まだ私の中で分かっていない点として，原子核の方が重いから原子核と電磁場の相互作用は無視すると言いましたが，換算質量は考慮に入れているんですよね．これは参考文献 [1] がそうなのでそのまま書いているのですが…なぜでしょう．備忘録としてメモしておきます．

3.1 弱電場近似 (電場強度が非常に小さいため一光子吸収しか起こらない場合)

真空中に電磁波だけが存在する場合を、クーロンゲージで考えます。つまり、空間の電荷密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ が 0 だと分かっている場合、クーロンゲージにおけるポテンシャルは $\nabla^2\phi = 0$ を満たすので、無限遠を基準 ($\phi(\mathbf{r}, t)|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = 0$) として $\phi = 0$ にとることができます。もしも電磁波の強度 (つまりは振幅) が非常に弱い、つまり $|\mathbf{A}| < 1$ であれば、 $\mathbf{A}^2$ の値は $\mathbf{A}$ に比べて非常に小さくなるので無視できるようになります。すると Eq. (22) は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (23)$$

と $\mathbf{A}^2$ の項を落とす近似が成立します。この近似は、電場の強度が小さいけれども電場の空間変化量が無視できず、 $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ のまま書きすすめたい場合に有効です。 $\mathbf{A}^2$ の項は、例えば多光子過程であることが別の事から分かっている場合、この近似は適切ではありません。

3.2 双極子近似

続いて双極子近似を考えましょう。双極子近似は、電磁波の波長が原子に比べて非常に長い場合に有効な近似であり、一光子吸収しか起こらないことを想定する近似です。一応注意しますが、これは一度に 1 光子以上の光子が吸えない事を仮定する近似であって、1 光子は何回でも吸えます⁶。

前節 (3.1) の弱電場近似よりも条件 (電磁波の波長が原子に比べて非常に長い) が課されます。つまり、電磁波の波長が長く、強度が原子核-電子間のクーロン力に匹敵する強度 ($I \approx 3.5 \times 10^{16} \text{W/cm}^2$) に比べて非常に小さい場合⁷ に利用できます。

導出のスタートは Eq. (22) です。クーロンゲージから上記近似を利用することで、 $\mathbf{A}^2$ を含む項を消すことが目的です。

⁶つまり、中間状態が存在しなければ遷移が起こらない場合が存在するという事です。具体的にエネルギー E_0 を持つ状態と $E_0 + 2\hbar\omega$ を持つ状態を考え、この状態間を遷移する事を考えます。そして、電磁波のエネルギーは $\hbar\omega$ である場合を考えます。双極子近似の範囲では $E_0 \rightarrow E_0 + \hbar\omega \rightarrow E_0 + 2\hbar\omega$ という順々に一度 $E_0 + \hbar\omega$ の状態に遷移しなければなりません、近似なしの本当の量子力学では ($\mathbf{A}^2$ を含んでいれば) $E_0 \rightarrow E_0 + 2\hbar\omega$ という遷移が許されます。 $E_0 + \hbar\omega$ の状態への遷移確率がゼロであれば、双極子近似の範囲ではこの遷移は起こるはずがない、という結論になります。

⁷[3]にあるように、実際にはこの強度よりもずっと低い強度で双極子近似は有効ではなくなります。これは電磁波中の荷電粒子が、電磁波中にいるだけでその時間的な平均値分だけエネルギーを得るためです。これによって、そもそもの原子のエネルギーがあたかも追加されたようになり、光子の周波数によるエネルギーが低くてもイオン化が起きてしまいます。このエネルギーの追加量はポンデロモーティブエネルギーと呼ばれています。そのため、摂動論と非摂動論の境界は $\lambda \approx 500 \sim 1000 \text{nm}$ において強度 $I \approx 10^{13} \sim 10^{14} \text{W/cm}^2$ 程度の時となるようです。

一般的にはなかなか想像がつかなかったので、特定の電磁場について双極子近似がどのように導かれるかを示し、一般にも適応できると大雑把に考えましょう。

電磁場 $\mathbf{X}$ として波数ベクトル $\mathbf{k}$ の方向に進行し、角周波数 ω を持つ電磁波を考えます ($\mathbf{X}$ は $\mathbf{A}, \mathbf{E}, \mathbf{B}$ を代表して書いています). すると、 $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})$ と書くことができます. 双極子近似に適用するために、原点 (原子核) の近傍 $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$ において、以下のようにテーラー展開することができます (計算仮定は Appendix F をご覧ください).

$$\mathbf{X}(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}) = \mathbf{X}(\omega t) - \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{\omega} \frac{d\mathbf{X}(\omega t)}{dt} + O(|\mathbf{r}|^2) \quad (24)$$

この右辺第一項までを考えたものが双極子近似となります. つまり、

$$\mathbf{X}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{X}(\omega t) + O(|\mathbf{r}|) \quad (25)$$

と考えるしてしまうことが双極子近似です.

式の上では前述の通りですが、果たして具体的に問題を考えたときに双極子近似が使えるのでしょうか. 具体的に水素様原子を考えて適用可能か考えてみましょう. 電磁場のない時の水素様原子の $n = 2 \rightarrow n = 1$ に必要なエネルギー準位に相当する波長 λ は、

$$\lambda = \frac{1.2}{Z^2} \times 10^{-7} \text{ [m]} \quad (26)$$

となります⁸. また、原子を回る電子の位置の期待値 $\langle r \rangle$, つまり電子雲の広がり

$$\langle r \rangle = \frac{0.8n^2}{Z} \times 10^{-10} \text{ [m]}, \text{ (for } l = 0) \quad (27)$$

です. Eq. (26) と Eq. (27) を比較すると、繊維に必要な電磁波の波長は、電子雲の広がりに対して非常に大きいことが分かります. つまり、原子核上の電磁場の値を原子全体の値として考えても良いわけです.

双極子近似はおおよそ

$$\frac{\langle r \rangle}{\lambda} \approx Zn^2 \times 10^{-3} \ll 1 \quad (28)$$

が満たされるときに使える近似です. よって、水素様原子で離散状態間の遷移を考える場合、双極子近似は有効な近似法だと分かります. 主量子数 n が非常に大きいときや、原子核の電荷が大きくなるにつれて双極子近似は使えなくなります.

双極子近似下においては、電磁波 $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ の空間依存性が無くなります. このことから、 $\phi, \mathbf{A}$ も空間依存性がなくなり $\phi = \phi(t) = 0, \mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$ を選ぶことができます (詳細は Appendix E をご覧ください). ただし、 χ は $\mathbf{r}$ に関して一次までなら含む可能性があります.

⁸電磁場なので、光速 c が一定であることから、 $E = \hbar\omega = \frac{\hbar c}{\lambda}$ となりますので λ と ω は変換可能です.

ここまでの話をまとめます。

双極子近似下では、電磁波の空間依存性が無い場合を考えることができることを見てきました (Eq. (25)). 続いては具体的に双極子近似を課した際に、どういう便利な点がある近似なのか考えていきます。利点として挙げられるのは、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{A}(t)$ である時、クーロンゲージの条件である $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ は、空間依存性が無いために自動的に満たされるので、条件を意識する必要がなくなることです。

そして具体的にゲージ変換の任意性 $\chi(\mathbf{r}, t)$ について考えていきます。ゲージ変換の式 (12a) より、 χ に位置依存性が含まれる場合、 $\mathbf{r}$ に関して一次までであれば $\mathbf{A}$ が時間依存性しか含まない形にできることが分かります。つまり、

$$\chi(\mathbf{r}, t) \propto \chi(t) \quad (29)$$

もしくは

$$\chi(\mathbf{r}, t) \propto \mathbf{r} \cdot \mathbf{X}(t) \quad (30)$$

の形が想定されます。

結論として、Eq. (29) を想定すると速度ゲージ、Eq. (30) を想定すると長さゲージのシュレーディンガー方程式が導かれます。

3.2.1 速度ゲージ (Velocity gauge)

まずは χ も位置依存性を含まない Eq. (29) の場合を考えてみます。この形で、ゲージ変換 $\mathbf{A}^2$ の項をなくすことができる以下の $\chi(t)$ について考えてみましょう。

$$\chi(t) = \frac{e}{2\mu} \int^t \mathbf{A}^2(t') dt' \quad (31)$$

この $\chi(t)$ に従ってゲージ変換を行うと、Eq. (12) に従うプライムのついたポテンシャルと波動関数は以下の通りになります。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{A}(t) = \mathbf{A}'(t) \\ \rightarrow \mathbf{A}'(t) = \mathbf{A}(t) \end{array} \right. \quad (32a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \phi'(t) - \frac{e}{2\mu} \mathbf{A}^2(t) \\ \rightarrow \phi'(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{2\mu} \mathbf{A}^2(t) = \frac{e}{2\mu} \mathbf{A}'^2(t) \end{array} \right. \quad (32b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{e^2}{2\mu} \int^t \mathbf{A}^2(t') dt' \right] \end{array} \right. \quad (32c)$$

Eq. (11) から Eq. (13) に変形できたように, $\phi', \mathbf{A}', \Psi'$ で表現すると以下ようになります.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu} \mathbf{A}^2 - e\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (33a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A}' \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu} \mathbf{A}'^2 - e \left(\frac{e}{2\mu} \mathbf{A}'^2(t) \right) \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (33b)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A}'(t) \cdot \nabla \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (33c)$$

Eq. (33c) の表記からプライム無しのものに書き換えれば,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A}(t) \cdot \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (34)$$

と得られます. Eq. (34) が双極子近似における速度ゲージの表現です. ナブラは電子の質量の流れ $\mathbf{p}$ に比例しているので⁹,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 + \frac{e}{\mu} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (35)$$

とも考えることができます. 速度ゲージと呼ばれる所以は, 電磁場由来である $\mathbf{A}$ と電子の速度 (質量の流れ) $\mathbf{p}$ の内積が相互作用項として表れていることから名づけられています

3.2.2 長さゲージ (Length gauge)

次に Eq. (30) の場合を見てみます. ゲージ変換の任意性を

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(t) \quad (36)$$

としてゲージ変換を行うと, Eq. (12) に従うプライムのついたポテンシャル, 波動関数は以下の通りになります.

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{A}(t) = \mathbf{A}'(t) + \mathbf{A}(t) \\ \rightarrow \mathbf{A}'(t) = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (37a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \phi'(t) - \mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \\ \rightarrow \phi'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \end{array} \right. \quad (37b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) \exp \left[-\frac{ie}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(t) \right] \end{array} \right. \quad (37c)$$

⁹電磁場中の運動量は $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ であり, 電子の質量が流れていく速度 $\mathbf{p}$ とは異なってしまっているので運動量とは言えず, このような言い方になっています. 詳細は [4] をご覧ください.

これをシュレーディンガー方程式に代入して

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu} \mathbf{A}^2 - e\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (38a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - i\hbar \frac{e}{\mu} \mathbf{0} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu} \mathbf{0}^2 - e \left(\mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \right) \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (38b)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 - e \mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (38c)$$

を得ます. 非常に良くない点として, Eq. (40) の右辺第二項にプライムが付いていないゲージ変換を施す前の情報が入ってきています. しかし, 節 2.1 で見たようにベクトルポテンシャルの時間微分は電場に関係する量であることを思い出すと, もしかして電場で書けるのでは, と思ひ当たります. 電場はゲージ変換に対して不変ですので, ゲージ変換前であろうが後であろうが同じになるはずであり, 今の状況を解消してくれそうです. なので電場で書き換えてみましょう.

電場はゲージ変換に対して不変なのでどのように求めてもいいですが, ゆっくり計算すると

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (39a)$$

$$= -\nabla \phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \quad (39b)$$

$$= -\nabla \mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{0} \quad (39c)$$

$$= -\frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \quad (39d)$$

と書けます. そのため, Eq. (40) は $\mathbf{A}$ と $\mathbf{A}'$ が混在する形ではなく $\mathbf{E}$ を用いて

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (40)$$

と求めることができます. Eq. (40) が双極子近似における長さゲージ (Length gauge) の表現です. 長さゲージの由来は, 速度ゲージの時と似たように, 電磁場由来の $\mathbf{E}$ と, 電子の長さ (位置) $\mathbf{r}$ との内積が相互作用項として表れていることから, 名づけられています.

3.3 古典的なハミルトニアンからの導出

古典的な考えからシュレーディンガー方程式を考えていくことも物理的直観を養う上で大切です. いくつかの量子現象は, 古典的現象との対応を考えることができるので量子現象を理解しやすくなります¹⁰.

ここでは双極子近似の長さゲージに出てくる結果 Eq. (40) を古典的な考えから導いてみます.

まずはローレンツ力を考えたときに磁場よりも電場の方が大きな影響を及ぼすことを示しましょう. その後, ローレンツ力が保存力であることを利用してポテンシャルを求め, それをシュレーディンガー方程式のポテンシャルに代入することで双極子近似下における長さゲージのシュレーディンガー方程式を求めます.

電磁場中の電子に対するローレンツ力を考えます. 電場 $\mathbf{E}$ と磁場 $\mathbf{B}$ の中で, 電子が速度 $\mathbf{v}$ で運動するとき, 電子に働く力は

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -e(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)) \quad (41)$$

と書けます. 原子核の電荷が $+Ze$ であるボーアモデルを考えたときの, 1 電子原子の主量子数 n に属する電子の速度の大きさ v は

$$v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar n} = Z\alpha c \frac{1}{n} \quad (42)$$

です. ここで $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ は微細構造定数です. 最大の速度を持つ時は $n = 1$ の時で

$$v = Z\alpha c \approx \frac{Zc}{137} \quad (43)$$

です. また, 電磁波について

$$\frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|} = \frac{1}{c} \quad (44)$$

が成立します.

主量子数 $n = 1$ の電子に及ぼすローレンツ力について, $|\mathbf{E}|$ と $|\mathbf{v} \times \mathbf{B}|$ の大きさを比較してみます. 計算すると

$$|\mathbf{v} \times \mathbf{B}| \leq |\mathbf{v}||\mathbf{B}| \quad (45a)$$

$$\approx \frac{Zc}{137} \cdot \frac{|\mathbf{E}|}{c} \quad (45b)$$

$$= \frac{Z}{137} \cdot |\mathbf{E}| \quad (45c)$$

¹⁰特に解析力学で出てくるラグランジアン, ハミルトニアンは有用ですね.

となるので, $|\mathbf{v} \times \mathbf{B}|$ の項が無視できる時は, $\frac{Z}{137}$ が小さいと見なせる時ということが分かります. つまり, ローレンツ力は Z が小さい時, 第二項を無視して

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \approx -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (46)$$

と近似できます.

続いて波数ベクトル $\mathbf{k}$, 単一の角周波数 ω を持つ電磁波について考えてみます. つまり, 具体的に電場を

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0(\omega)\boldsymbol{\epsilon} \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (47)$$

と考えます. ここで $E_0(\omega)$ は角周波数 ω の振幅であり, $\boldsymbol{\epsilon}$ は偏向ベクトルで $|\boldsymbol{\epsilon}| = 1$ を満たします. 量子力学で考えた双極子近似 (原子の大きさ $\ll$ 電磁波の波長) が適用できるとして $\mathbf{r} = 0$ の点で代表すると

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0(\omega)\boldsymbol{\epsilon} \cos(\omega t - \delta_\omega) \rightarrow \mathbf{E}(t) \quad (48)$$

となります. ここで δ_ω は適当な位相です. よってローレンツ力は空間の依存性を無視して

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \approx -e\mathbf{E}(t) \quad (49)$$

と書けます. 右辺は位置に依存しないため, 保存力の条件である

$$\nabla \times \mathbf{F} = 0 \quad (50)$$

は自動的に満たされます. よって $\mathbf{F}$ には $\nabla W = \mathbf{0}$ を満たすスカラーポテンシャル W が存在することが分かるため, W を用いてローレンツ力を書き換えれば,

$$\mathbf{F} \approx -e\mathbf{E}(t) \quad (51a)$$

$$= -\nabla[e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)] \quad (51b)$$

$$= -\nabla W(t) \quad (51c)$$

となります. ここで, $W(t) = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)$ と置きました. ポテンシャルで書けているので, 量子力学においてはハミルトニアンに加えれば良さそうです. すなわち,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + W(t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (52a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (52b)$$

となり, Eq. (40) のように量子力学に従って導いた結果と一致します.

A 関数か演算子か

ハミルトニアンの中に

$$\nabla \cdot \mathbf{A} \quad (53)$$

という表記があった時, 実際に波動関数に作用させた場合に

$$(\nabla \mathbf{A}) \cdot \psi \quad (54a)$$

もしくは

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \psi) \quad (54b)$$

でどちらで考えればよいか迷う場合があると思います.

ハミルトニアン演算子はあくまで演算子ですので, 式の右側から順に作用させていく表記である Eq. (54b) の解釈が基本です. しかしながら, 波動関数には作用させず, 単に ∇ と $\mathbf{X}$ との内積 $\nabla \cdot \mathbf{X}$ を作用させたい場合の表記と区別がつかなくなってしまう. この事を区別するため, 面倒でも括弧を多用すると多少改善できます. つまり,

$$(\nabla \cdot \mathbf{A}) \quad (55)$$

と書いておきます. すると,

$$(\nabla \cdot \mathbf{A})\psi \quad (56)$$

となります. もし何も括弧が無い場合,

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) \quad (57)$$

を意味することになります.

具体的にハミルトニアンの中に

$$\frac{\partial}{\partial x} x \quad (58)$$

というものを考えてみましょう. これを波動関数に作用させると表記上は

$$\frac{\partial}{\partial x} x\psi \quad (59)$$

となるわけです. 何も思わず書いてしまうと,

$$\frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = \psi + \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (60)$$

を意味しますので,

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi = \psi \quad (61)$$

を意図したいときは括弧をつけてミスリードを防ぎましょう.

しかしながら, 電磁場中のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (62)$$

に出てきているように, 別の用途で $(\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A})$ とまとめられている場合に区別をすることはできません. この場合は

$$(\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A})\psi = \mathbf{A} \cdot (\nabla \psi) + \nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) \quad (63)$$

の意味ですので, 括弧は多少は改善できますが, 完全ではないことは注意しておきましょう. 基本的には演算子であるか, 関数であるかを理解して進めていかなければなりません. 不安でしたら, 面倒でも計算をしてどちらの表記が整合性が取れるかを確認しておけば安心です.

B 電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン

ここでは簡単に、電磁場中の荷電粒子のハミルトニアンがどのように考えられてきたか導きます。更なる詳細は [1] の Appendix 6 をご覧いただければと思います。以下の検算はしていません。

電場 $\mathbf{E}$ と磁場 $\mathbf{B}$ の中で、電荷 q を持つ荷電粒子が速度 $\mathbf{v}$ で運動するとき、荷電粒子に働くローレンツ力 $\mathbf{F}$ は

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)) \quad (64)$$

と書けます。スカラーポテンシャル ϕ とベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ を用いて書き換えれば、

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q \left[-\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right] \quad (65)$$

となりますので、荷電粒子の運動方程式は

$$m \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = q \left[-\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right] \quad (66)$$

です。このローレンツ力 $\mathbf{F}$ を作り出すラグランジアン L を考えてみると、

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (67)$$

となります。一般化座標 $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ をデカルト座標系の x, y, z に対応させて考えます。一般化運動量 $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3)$ は L の一般化座標に対する偏微分、つまり

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (68)$$

で与えられるので、実際に計算すると、

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \quad (69)$$

が得られます。あとはラグランジアンからハミルトニアン H への変換を行います。 H は、

$$H = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{q}_i - L \quad (70)$$

で与えられるので、これを計算すれば、

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (71)$$

が得られます。

C ゲージ変換の証明

ここでは Eq. (11) より, ゲージ変換 (12) を適用すると Eq. (13) になることを示します. 再掲しておく, シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (72)$$

です. ゲージ変換は

$$\begin{cases} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (73a)$$

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{r}, t) = \phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (73b)$$

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) \exp \left[i \frac{q}{\hbar} \chi(\mathbf{r}, t) \right] \end{cases} \quad (73c)$$

ですので, まず左辺を計算して, 右辺を計算します. 以降面倒ですので, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ などを $\mathbf{A}$ とだけで記述します.

左辺は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi' \exp \left(i \frac{q}{\hbar} \chi \right) \right] \quad (74a)$$

$$= i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} - q \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi' \exp \left(i \frac{q}{\hbar} \chi \right) \quad (74b)$$

となります. 右辺は一つずつ注目して解いていきます. 指数関数の中身は微分しても変わらないので, 式が長くなる時は $\exp\{\} \equiv \exp \left(i \frac{q}{\hbar} \chi \right)$ と書いて進みます. それぞれ,

$$\mathbf{A} \cdot (\nabla \Psi) = (\mathbf{A}' + (\nabla \chi)) \cdot \left(\nabla \left[\Psi' \exp \left(i \frac{q}{\hbar} \chi \right) \right] \right) \quad (75a)$$

$$= (\mathbf{A}' + (\nabla \chi)) \cdot \left[\exp\{\} \cdot (\nabla \Psi') + i \frac{q}{\hbar} \cdot \Psi' \cdot (\nabla \chi) \cdot \exp\{\} \right] \quad (75b)$$

$$= \mathbf{A}' \cdot (\nabla \Psi') \exp\{\} + i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) \Psi' \exp\{\} \\ + (\nabla \chi) \cdot (\nabla \Psi') \exp\{\} + i \frac{q}{\hbar} (\nabla \chi)^2 \Psi' \exp\{\} \quad (75c)$$

と

$$\nabla \cdot (\mathbf{A} \Psi) = \nabla \cdot \left[(\mathbf{A}' + (\nabla \chi)) \Psi' \exp \left(i \frac{q}{\hbar} \chi \right) \right] \quad (76a)$$

$$= \nabla \cdot \left(\mathbf{A}' \Psi' \exp\{\} + (\nabla \chi) \Psi' \exp\{\} \right) \quad (76b)$$

$$= \nabla \cdot (\mathbf{A}' \Psi') \exp\{\} + i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) \Psi' \exp\{\} \\ + (\nabla^2 \chi) \Psi' \exp\{\} + (\nabla \chi) \cdot (\nabla \Psi') \exp\{\} + i \frac{q}{\hbar} (\nabla \chi)^2 \Psi' \exp\{\} \quad (76c)$$

と求められます. よって右辺の以下の演算子は

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) \\
&= i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A}' \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}') + i\hbar \frac{q}{2m} (\nabla^2 \chi) + i\hbar \frac{q}{m} (\nabla \chi) \cdot \nabla - \frac{q^2}{m} (\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi)^2)
\end{aligned} \tag{77}$$

と計算できます. 更に, 運動エネルギーの項は

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 [\Psi' \exp(i\frac{q}{\hbar}\chi)] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \left((\nabla \Psi') \exp\{\} + i\hbar \frac{q}{m} (\nabla \chi) \Psi' \exp\{\} \right) \\
&= \exp\{\} \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' - i\hbar \frac{q}{m} (\nabla \Psi') (\nabla \chi) - i\hbar \frac{q}{2m} \Psi' (\nabla^2 \chi) + \frac{q^2}{2m} \Psi' (\nabla \chi)^2 \right]
\end{aligned} \tag{78a}$$

$$\tag{78b}$$

となります. 残りは $\mathbf{A}^2 \Psi$ ですので,

$$\mathbf{A}^2 \Psi = [\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + (\nabla \chi(\mathbf{r}, t))]^2 \Psi' \exp\{\} \tag{79a}$$

$$= [\mathbf{A}'^2 + \mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi) \cdot \mathbf{A}' + (\nabla \chi)^2] \Psi' \exp\{\} \tag{79b}$$

$$= [\mathbf{A}'^2 + 2\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi)^2] \Psi' \exp\{\} \tag{79c}$$

となります. ここで後ろにかかる演算子はないので,

$$\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi) \cdot \mathbf{A}' = 2\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) \tag{80}$$

を用いました.

全てまとめれば, Eq. (72) は, 左辺 Eq. (74a) と右辺 Eq. (78a), Eq. (77), Eq. (79a) より,

$$\left[i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} - q \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi' \right] \exp\{\} = \tag{81a}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' - i\hbar \frac{q}{m} (\nabla \Psi') (\nabla \chi) - i\hbar \frac{q}{2m} \Psi' (\nabla^2 \chi) + \frac{q^2}{2m} \Psi' (\nabla \chi)^2 \right] \exp\{\} \tag{81b}$$

$$+ \left[i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A}' \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}') \Psi' + i\hbar \frac{q}{2m} (\nabla^2 \chi) \Psi' + i\hbar \frac{q}{m} (\nabla \chi) \cdot (\nabla \Psi') - \frac{q^2}{m} (\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi)^2) \Psi' \right] \exp\{\} \tag{81c}$$

$$+ \frac{q^2}{2m} [\mathbf{A}'^2 \Psi' + 2\mathbf{A}' \cdot (\nabla \chi) \Psi' + (\nabla \chi)^2 \Psi'] \exp\{\} \tag{81d}$$

$$+ q \left[\phi' - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right] \Psi' \exp\{\} \tag{81e}$$

となり, うまい具合に消えてくれますので,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A}' \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}') + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}'^2 + q\phi' \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \tag{82}$$

となります. よって, ゲージ変換 (12) に対してシュレーディンガー方程式は不変です.

... $\chi(\mathbf{r}, t)$ は実関数だと思っておりましたが, 別にそんなことはなさそうですね. 証明の間に実関数だけであるという条件を見直したら使っていないので, 複素関数でも良さそうです.

D ローレンスゲージに変換した結果, ベクトルポテンシャル, スカラーポテンシャルが示すもの

ローレンスゲージとは,

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon\mu \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (83)$$

を満たすように $\chi(\mathbf{r}, t)$ を選ぶゲージです. このローレンスゲージにおいて, 電磁場がどのように表されているか調べます.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \end{array} \right. \quad (84a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\varepsilon\mu \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = -\mu \mathbf{j} \end{array} \right. \quad (84b)$$

次の式への導出は省きますが, Eq. (83) の $\mathbf{A}$ の含まれる項か ϕ を含む項かで式から消去します. すると, 対称性の良い以下の非斉次の方程式

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \phi - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon} \end{array} \right. \quad (85a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right. \quad (85b)$$

を得ます. さて, ローレンスゲージかつ真空中の場合に, シュレーディンガー方程式はどのようなになるでしょうか. 真空中 $\rho(\mathbf{r}, t) = 0, \mathbf{j} = \mathbf{0}$ を仮定すれば,

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \phi - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \end{array} \right. \quad (86a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \end{array} \right. \quad (86b)$$

となり, $\phi, \mathbf{A}$ の解は時間, 空間のそれぞれについて二階微分となります. これは古典的な波動方程式と同等であり, 解は $\sin, \cos$ の形の線形結合で書けるでしょう.

これを解いた結果 $\phi, \mathbf{A}$ を用いてシュレーディンガー方程式に代入すれば済むのですが, 真空中であっても簡単に書くことができませんので, 式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (87)$$

のままであり, ここで $\phi, \mathbf{A}$ は以下の方程式を満たすものとして定義されます.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \phi - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \end{array} \right. \quad (88a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \end{array} \right. \quad (88b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon\mu \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \end{array} \right. \quad (88c)$$

これ以上に簡単になることはありません。空間に電荷密度が無いからと言って、ここまでしか進められないのであればあまり嬉しくはありません。

なので、真空中の電磁場との相互作用を考えてシュレーディンガー方程式を立てたい場合は、クーロンゲージの方が簡便になるでしょう。クーロンゲージはローレンスゲージの特別な場合 ($\phi = \phi(\mathbf{r})$ となるような $\chi(\mathbf{r}, t)$ を選ぶ場合) ですが、これを選ぶ価値は多大にあります。

Eq. (88) を解く方法だけ述べておきますが、 $\phi, \mathbf{A}$ を求めてから、Eq. (88a), Eq. (88b) をまず解いて、得られた $\phi, \mathbf{A}$ が正しいかどうか Eq. (88c) で確認すればよいのです。そうして Eq. (88c) を満たす $\phi, \mathbf{A}$ であることが分かれば、それが解となります。

E クーロンゲージかつ双極子近似下における $\phi, \mathbf{A}$

電磁波 $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ の空間依存性が無いとき、 $\phi, \mathbf{A}$ も空間依存性がなくなることを示しましょう。これは $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ と各ポテンシャルの関係 (8) より分かります。つまり、 $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t)$, $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t)$ である時、

$$\begin{cases} \mathbf{E}(t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) & (89a) \\ \mathbf{B}(t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) & (89b) \end{cases}$$

なので、Eq. (89b) より $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t)$ でなければ $\mathbf{B}$ に位置依存性が現れてしまいます¹¹。

残るは ϕ に空間依存性は現れないのか? というのですが、Eq. (89a) で位置依存性が出てくるならば、 $\nabla\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ ですが、ポテンシャルの基準を無限遠でゼロ、つまり $\phi|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = 0$ の境界条件を加えれば、時間に依存するとしても $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ として良いことが分かります。以上から、 $\phi = \phi(t) = 0$, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$ と書けることが分かります。

¹¹ $\nabla \times \nabla f = 0$ なので、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t) + \nabla f(\mathbf{r})$ の可能性があります、この自由度はまさにゲージ変換の任意性 χ ですので、現在の対象 $\mathbf{A}$ とは別の話です。結局 $\mathbf{A}$ 自体には位置依存性は出てこないです。…いや嘘かもしれません。多くの場合で $\mathbf{A}, \phi$ に空間依存性はないような形式で書かれているため、最後の結論は正しいと自信を持っていますが、導出過程に間違いがあるかもしれません。

F 双極子近似への移行に関する数式

微分の連鎖律 (chain rule) より, 合成関数のテーラー展開は

$$f(g(x)) = f(g(a)) + (x - a) \frac{dg(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow a} \cdot \frac{df(g(x))}{d(g(x))} \Big|_{x \rightarrow a} + O((x - a)^2) \quad (90)$$

なので, $g(x) = \omega t - kx$, $a = 0$ の場合,

$$\frac{dg(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow a} = -k \Big|_{x \rightarrow a} = -k \quad (91)$$

$$\frac{df(g(x))}{d(g(x))} \Big|_{x \rightarrow a} = \frac{d}{d(\omega t)} f(\omega t) = \frac{1}{\omega} \frac{df(\omega t)}{dx} \quad (92)$$

となります. よって,

$$f(\omega t - kx) = f(\omega t) + x(-k) \left(\frac{1}{\omega} \cdot \frac{df(\omega t)}{dt} \right) + O(x^2) \quad (93)$$

$$= f(\omega t) - \frac{kx}{\omega} \frac{df(\omega t)}{dt} + O(x^2) \quad (94)$$

が得られます. 同様にベクトル関数 $\mathbf{X}(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})$ を $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$ で展開すると

$$\mathbf{X}(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}) = \mathbf{X}(\omega t) - \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{\omega} \frac{d\mathbf{X}(\omega t)}{dt} + O(|\mathbf{r}|^2) \quad (95)$$

となります.

G ローレンスゲージ (Lorenz gauge)

Lorentz と Lorenz さんがいます. 例えば, Lorentz-Lorenz equation なんて方程式があります.

- ルードヴィヒ・ローレンス (Ludvig Valentin Lorenz)

数学者・物理学者

デンマーク

ローレンスゲージ

ローレンス・ミー理論

(混同を避けるため, ローレンスと呼ばれることが割と多く, 本稿でもそれに倣っています.)

- ヘンドリック・アントーン・ローレンツ (Hendrik Antoon Lorentz)

物理学者, ノーベル物理学賞受賞 (1902 年)

オランダ

ローレンツ力

ローレンツ変換 (相対論でよく使用される座標変換)

ローレンツ不変

Reference

- [1] B. H. Bransden and C. J. Joachain, 2003, "*Physics of Atoms and Molecules second edition*", Prentice Hall, ISBN 0-582-35692-X
- [2] A. Tonomura *et. al.* , *Evidence for Aharonov-Bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave*, Physical Review Letters, 56(8), 792—795 (1986)
- [3] 石川顕一, 『高強度場現象・アト秒科学（１） 高強度レーザー場中の原子のイオン化』, https://www.nii.ac.jp/qis/first-quantum/symposium/2011/pdf/ishikawa01_summerSchool2011.pdf
- [4] 高橋康著, 『量子電磁気学を学ぶための電磁気学入門』, 講談社, ISBN 978-4-06-526456-0