§16 電磁場での荷電粒子の運動：Lagrangian と Hamiltonian

真空電磁場における荷電粒子の運動方程式から，荷電粒子の運動に対する Lagrangian と Hamiltonian がどのような形になるかを考える．そして，正準量子化による量子力学への移行には，ベクトル・ポテンシャル（**A**）が付随することを確認する．

(16-1) 荷電粒子の運動に対する Lagrangian

質量 m と電荷 e の一個の荷電粒子が真空の電磁場内を運動する場合，その Newton の運動方程式,

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = e\mathbf{E} + e\mathbf{v}\times\mathbf{B} \tag{1}$$

を考えよう．荷電粒子の電荷を e としているので，もし電子を考える場合は(-e)で置き換えねばならない. これはSI単位系(MKSA単位系)での表現である．CGS−ガウス単位系では，右辺第二項に光速度の逆数 (1/c) の因子が付いた以下の式

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = e\mathbf{E} + (\frac{e}{c})\mathbf{v}\times\mathbf{B}. \tag{1'}$$

となる．電磁気学の法則を，CGS−ガウス単位系と SI 単位系(MKSA 単位系)で相互変換する場合，上記のような係数が付随する．これは§13 にまとめたので，ここでは，SI 単位系(MKSA 単位系)での表現（1）を前提に議論する．

（1）の右辺側はローレンツ力で，**B** は**磁束密度**， **E** は**電場**を表す．$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ は荷電粒子の速度ベクトルである．真空電磁場の荷電粒子は，電場 **E の方向に**加速され，さらに，**磁束密度 B** と $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ のなす平面に垂直な方向に加速される．この磁場による加速方向は，粒子の運動方向 **v** にも **B** の方向にも直交している．

スカラー・ポテンシャル（φ）とベクトル・ポテンシャル（**A**）を用いる電磁ポテンシャル（φ, **A**）によって，磁束密度と電場を表現すると，

$$\mathbf{B} = rot\,\mathbf{A}, \qquad \mathbf{E} = -grad\varphi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$$

である．これを使うと，以下に述べるように，(1)はゲージ変換に不変であることが判る．

任意のスカラー関数を f として，恒等式　$rot\,grad\,f = \nabla\times(\nabla f) = 0$ を使うと，これを $\mathbf{B}(\mathbf{x},t) = rot\,\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ に加えても　何も変化しないから，

$$\mathbf{B} = rot\,\mathbf{A} + rot\,grad\,f = rot\,(\mathbf{A} + grad\,f)$$

が成立する．これはベクトル・ポテンシャル$\mathbf{A}$を以下のように変更している．

$$\mathbf{A} \quad \rightarrow \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + grad\, f\,, \quad \mathbf{B}' = rot\, \mathbf{A}'$$

この**変更**は，ベクトル・ポテンシャルの**変換**と見なすことが出来る． そこで，このベクトル・ポテンシャルの変換に対応させて，スカラー・ポテンシャルも，

$$\varphi \quad \rightarrow \quad \varphi' = \varphi - \frac{\partial f}{\partial t}$$

と変更してみる．この変換された電場,

$$\mathbf{E}' = -grad\varphi' - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} = -grad(\varphi - \frac{\partial f}{\partial t}) - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t}$$

を使って，電磁誘導の Maxwell 方程式左辺の $rot\, \mathbf{E}' + \dfrac{\partial \mathbf{B}'}{\partial t}$ を求めてみる．

$$rot\, \mathbf{E}' + \frac{\partial \mathbf{B}'}{\partial t} = rot(\mathbf{E}' + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t}) = rot\{-grad(\varphi - \frac{\partial f}{\partial t})\} = -rot\, grad(\varphi - \frac{\partial f}{\partial t}) = 0$$

となる．確かに電磁誘導の式は，変更後も成立している．

$$div\, \mathbf{B}' = 0\,,\ \text{かつ，}\quad rot\, \mathbf{E}' + \frac{\partial \mathbf{B}'}{\partial t} = rot(\mathbf{E}' + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t}) = 0$$

であり，上記の変換後も，二つの Maxwell 方程式は満足されている．即ち，$\varphi - \dfrac{\partial f}{\partial t}$ がどんなスカラー関数であっても，$rot\, grad\, (\varphi - \dfrac{\partial f}{\partial t}) = 0$ が成立するから， $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + grad\, f$， $\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \dfrac{\partial f}{\partial t}$ と電磁ポテンシャルが変換されても，Maxwell 方程式は成立し，電磁場 **E**, **B** もこの変換に不変である．

電磁ポテンシャルを

$$\mathbf{A} \rightarrow \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + grad\, f\,, \qquad \varphi \quad \rightarrow \quad \varphi' = \varphi - \frac{\partial f}{\partial t}$$

と書き換えることを**ゲージ変換**と言う．「ゲージ」とは「物差しの尺度」の意味で，尺度を変えても電磁場の記述は不変である．電磁場のこのような性質を，「電磁場の$(\varphi, \mathbf{A})$は**ゲージ場**である」と表現する．電磁場 **E, B** がゲージ変換で不変であるから，**ローレンツ力もゲージ変換に不変**である．従って，荷電粒子に対する Newton の方程式もゲージ変換に不変である．

以上の点に留意して，電磁ポテンシャルを(1)右辺に代入してみると，

$$e\mathbf{E}+e\mathbf{v}\times\mathbf{B}=-grad\,(e\cdot\varphi)-e\cdot(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t})+e\cdot\mathbf{v}\times(rot\,\mathbf{A}) \tag{2}$$

となる．次の関係を使って(2)右辺を更に書き換える．

$$\frac{d\mathbf{A}(x,y,z,t)}{dt}=\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t}+\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial t}+\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t}$$

$$=\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\mathbf{v}_x\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial x}+\mathbf{v}_y\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial y}+\mathbf{v}_z\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial z}=\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+(\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{A}$$

これより，

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=\frac{d\mathbf{A}}{dt}-(\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{A} \tag{3}$$

また，ベクトル三重積の公式$\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})=\mathbf{B}(\mathbf{A}\bullet\mathbf{C})-\mathbf{C}(\mathbf{A}\bullet\mathbf{B})$を使い，
$\mathbf{A}\to\mathbf{v},\ \mathbf{B}\to\nabla,\ \mathbf{C}\to\mathbf{A}$ と置き換えて， $\mathbf{v}\times(\nabla\times\mathbf{A})=\nabla(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})-\mathbf{A}(\mathbf{v}\bullet\nabla)$だから，

$$\mathbf{v}\times(rot\,\mathbf{A})=\mathbf{v}\times(\nabla\times\ \mathbf{A})=\nabla(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})-(\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{A} \tag{4}$$

である．故に，

$$e\mathbf{E}+e\mathbf{v}\times\mathbf{B}=-grad\ \varphi e-e\{(\frac{d\mathbf{A}}{dt})-(\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{A}-\nabla(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})+(\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{A}\}$$

$$=-\nabla\ \varphi e-e(\frac{d\mathbf{A}}{dt})+e\nabla(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})$$

となる．質量 m．電荷 e の荷電粒子の電磁場における Newton の運動方程式は，

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}=-\nabla\{\ \varphi e-e(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})\}-e(\frac{d\mathbf{A}}{dt}) \tag{5}$$

であり，右辺は電磁ポテンシャルによる表現になっている．特に注目すべきは$\{\ \varphi e-e(\mathbf{v}\bullet\mathbf{A})\}$のスカラー量は，通常のポテンシャル（U）に対応するものであるが，速度が関与しており，座標だけの関数ではないことである．

$$\mathbf{r}=(x,y,z)=(q_1,q_2,q_3),\quad \mathbf{v}=(\dot{x},\dot{y},\dot{z})=(\dot{q}_1,\dot{q}_2,\dot{q}_3) \tag{6}$$

として，(5)を書き直してみる．

$$m\frac{d\dot{q}_i}{dt}=-\frac{\partial}{\partial q_i}\{\ \varphi e-e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_kA_k)\}-e(\frac{dA_i}{dt})$$

最後の項は， $A_i=\frac{\partial}{\partial\dot{q}_i}(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_kA_k)$ と書くことが出来るから

$$\frac{dA_i}{dt}=\frac{d}{dt}\{\frac{\partial}{\partial\dot{q}_i}(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_kA_k)\}$$

である． 従って，Newton の運動方程式(5)右辺は，次のようになる．

$$m\frac{d\dot{q}_i}{dt} = -\frac{\partial}{\partial q_i}\{\ \varphi e - e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k)\} - e\frac{d}{dt}\{\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k)\}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial q_i}\{\ \varphi e - e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k)\} + \frac{d}{dt}\{\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(\varphi e - e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k))\} \tag{7}$$

最後の等式では，φはスカラー・ポテンシャルであり，$\partial(\varphi e)/\partial\dot{q}_i = 0$ であることを使った．そこで，

$$U = \varphi e - e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k) \tag{8}$$

とすると，Newton の運動方程式(5)は，次のような簡素な式になる．

$$m\frac{d\dot{q}_i}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial q_i} + \frac{d}{dt}(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i}) \tag{9}$$

従って，Lagrangian, L は

$$L = T - U = (1/2)m\{(\dot{q}_1)^2 + (\dot{q}_2)^2 + (\dot{q}_2)^2\} - U \tag{10}$$

で与えられるから， Lagrange の運動方程式は，

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = \frac{d}{dt}(m\dot{q}_i - \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i})$$

$$= m\frac{d\dot{q}}{dt} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i}) = -(\frac{\partial U}{\partial q_i}) = (\frac{\partial L}{\partial q_i}) \tag{11}$$

となることが判る．二行目の等号は Newton の運動方程式(9)が成立することに依る．即ち，Newton の運動方程式 (9)が成立することは，(10)の Lagrangian に対して，(11)の Lagrange の運動方程式が成立することである．

以上のように，電磁場における荷電粒子の運動の Lagrangian は，(8), (10)から

$$L = T - e\varphi + e(\mathbf{v} \bullet \mathbf{A}) \tag{12}$$

であることがわかる．q_iに共役な運動量は， $p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ の関係から得られ，

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i - \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i + eA_i \tag{13}$$

となる．運動量ベクトルの形で書けば，

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}} + e\mathbf{A} \tag{14}$$

である．**通常の粒子運動量$m\dot{\mathbf{q}}_i$とは異なり，** ベクトル・ポテンシャル **A** が付随する．荷電粒子が，質量 m の単なる質点ではなく，電荷 e を持つことによる．

$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}} + e\mathbf{A}$ の**正準運動量**は，粒子の運動量$m\dot{\mathbf{q}}_i$と区別する為に，特に**力学的運動量**と呼ばれる．

(16-2) 荷電粒子の運動に対する Hamiltonian

(13)により力学変数は$(q_i,\dot{q}_i) \to (q_i,p_i)$と変換できる．しかし，(14)より$\dot{q}_i = (1/m)(p_i - eA_i)$であるので，L の Legendre 変換から Hamiltonian(H)を求める際に注意が必要である．

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

$$= \sum_{i=1}^{3} p_i\dot{q}_i - (1/2)m\sum_{i=1}^{3}(\dot{q}_i)^2 + U = \sum_{i=1}^{3} p_i\dot{q}_i - (1/2)m\sum_{i=1}^{3}(\dot{q}_i)^2 + \varphi e - e(\sum_{k=1}^{3}\dot{q}_k A_k)$$

$$= \sum_{i=1}^{3}(p_i - eA_i)\dot{q}_i - (1/2)m\sum_{i=1}^{3}(\dot{q}_i)^2 + \varphi e$$

ここでの$\dot{q}_i$は旧変数であるから，$\dot{q}_i = (1/m)(p_i - eA_i)$を代入して，

$$= \sum_{i=1}^{3}(\frac{1}{m})(p_i - eA_i)^2 - (1/2)m\sum_{i=1}^{3}(\frac{1}{m})^2(p_i - eA_i)^2 + \varphi e$$

となる．従って，電磁場における質量 m，電荷 e の荷電粒子の運動の H は，

$$H = \sum_{i=1}^{3}(\frac{1}{2m})(p_i - eA_i)^2 + \varphi e = (\frac{1}{2m})(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \varphi e \qquad (15)$$

となる．

一方，電磁場と無関係な非電磁的ポテンシャル V，例えば原子の電子に作用する核の引力ポテンシャル，の下で，質量 m の粒子が運動する時，その H は，全エネルギー（運動エネルギーとポテンシャル・エネルギーの和）であるから，

$$H = \sum_{i=1}^{3}(\frac{1}{2m})(p_i)^2 + V = (\frac{1}{2m})(\mathbf{p})^2 + V \qquad (16)$$

である．(15) と(16)を比べれば，通常のこの運動量とポテンシャル V を，

$$\mathbf{p} \quad \to \quad (\mathbf{p} - e\mathbf{A}), \qquad V \quad \to \quad V + \varphi e \qquad (17)$$

と**形式的に置き換える**ことで，質量 m，電荷 e の荷電粒子が真空電磁場で運動する場合の Hamiltonian, H が得られる． V は前述の非電磁的なポテンシャルである．即ち,質量 m，電荷 e の荷電粒子が，今考えている電磁場とは直接関係しないポテンシャル V も考えると，その Hamiltonian, H は

$$H = (\frac{1}{2m})(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V + \varphi e \qquad (18)$$

となる．これは，**力学的運動量** $\mathbf{p}=m\dot{\mathbf{q}}+e\mathbf{A}$ を陽に書いたものである．荷電粒子の運動では，**力学的運動量** $\mathbf{p}=m\dot{\mathbf{q}}+e\mathbf{A}$ が**正準運動量**なので，量子論に移行する時には，この力学的運動量による(18)の H を使わねばならない．§7–2 で磁場が存在する場合のシュレディンガー方程式について述べた際に，ベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}$ が現れることを述べた．これは(18)による．(18)は荷電粒子と電磁場の相互作用を記述する最も簡単なものであり，minimal な相互作用と呼ばれる．

一方，$(\mathbf{p}-e\mathbf{A})=m\dot{\mathbf{q}}$ として．**通常の運動量(** $m\dot{\mathbf{q}}=m\dot{\mathbf{r}}$ **)に戻して表現** すると，

$$H=(\frac{1}{2})(m\dot{\mathbf{q}})^2+V+\varphi e=(\frac{1}{2})(m\dot{\mathbf{r}})^2+V+\varphi e \tag{19}$$

となる，運動の全エネルギーとしての Hamiltonian である． 通常の力学的エネルギ–$[(1/2)(m\dot{\mathbf{r}})^2+V]$に，電場が関わるエネルギー（$\varphi e$）が加わったものである．**磁場が関わるエネルギ–項は含まれない** ．荷電粒子の運動における磁場による仕事は, 粒子の運動方向と磁場による力が直交する為, 常に 0 だからである．(19)は古典論的全エネルギ–を表す Hamiltonian としては正しい．しかし，荷電粒子の場合，$m\dot{\mathbf{q}}=m\dot{\mathbf{r}}$ はもはや正準運動量ではないので，量子論に移行する際は，(19)ではなく (18)を使う必要があり，(18)で $\mathbf{p}\rightarrow\frac{\hbar}{i}\nabla=\frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$ の置き換えを行えばシュレディンガー方程式に移行するが，(18)のベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}$ も演算子に変わる．$\mathbf{A}$ はどのような演算子になるかも含めて考えねばならない．

古典的電磁気学の Maxwell 方程式は電場と磁場を用いて表現されるが，以上で見たように電磁ポテンシャル$(\varphi,\mathbf{A})$を用いて書き換えることも出来る．量子論の出現以前では，電場と磁場が測定される物理量であるのに対し，電磁ポテンシャル$(\varphi,\mathbf{A})$はゲージ変換の不定性を持つことから，$(\varphi,\mathbf{A})$による Maxwell 方程式は単なる数学的技巧に依る表現と見なされるのが普通であった．しかし， 量子論の出現以後では，ベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}$ が量子論のシュレディンガー方程式に直接現れるので，$\mathbf{A}$ なしには議論が出来ないことになった．この状況を端的に示すが，アハラノフ・ボーム効果 (Aharonov-Bohm effect) の存否をめぐる議論である．外村 (とのむら) (2010)の「目で見る美しい量子力学」の第 8, 9, 10 章，益川(1998)「いま，もう一つの素粒子論入門」の第 8 章，はこの問題を取り上げているので参照されたい．また，電磁ポテンシャル$(\varphi,\mathbf{A})$のゲージ変換の不定性の意味についても，益川の著書に述べられている．

(16-3) Schrodinger 方程式への移行と荷電粒子と輻射場の相互作用

(18)の $H=(\frac{1}{2m})(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2+V+\varphi e$ で，$\mathbf{p}\to\frac{\hbar}{i}\nabla=\frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$ の置換を行い，量子論に移行するが，$\mathbf{p}$ は演算子に変ったことを表す為にハット印を付ける．右辺の残りの項も事情は同じだがハット印は付けない．

$$\hat{H}=(\frac{1}{2m})(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})^2+V+\varphi e \tag{20}$$

とする．この演算子 $\hat{H}$ を，

$$\hat{H}\phi=E\phi \tag{21-1}$$

とおけば，定常状態のシュレディンガー方程式が，あるいは，

$$\hat{H}\phi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi \tag{21-2}$$

とおけば，時間にも依存する一般の場合の結果が得られる．

真空電磁場は，ベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}$ の平面波展開により，「波数ベクトル $\mathbf{k}$ と振動方向 σ を異にする無数の光子（＝調和振動子）の集合」と同等となったので，**A の各 (k,σ)** 成分には量子化された調和振動子をあてはめれば良い．量子化された調和振動子の Hamiltonian は生成・消滅演算子で記述され，**A の各 (k,σ)** 成分は生成・消滅演算子になる(§15-6-3).

以上のことに留意して，以下では(20)について考える．途中から挿入した非電磁的なポテンシャル V は $V=0$ としばらく元に戻して考え，また，クーロン・ゲージの条件では $\varphi=0$ とできるので，スカラー・ポテンシャルの項も落とす. (20)は

$$\hat{H}\phi=(\frac{1}{2m})(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})^2\phi=(\frac{1}{2m})[(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})\cdot(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})]\phi \tag{22}$$

となる．まず，演算子としての $(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})\cdot(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})$ を考える．

$$(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})\cdot(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})=(\hat{\mathbf{p}})^2-(e)(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A})+(e\mathbf{A})^2 \tag{23}$$

である．演算子だから演算順序が異なれば一般には異なる演算子である．ここで $(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A})$ を考えるが，$\hat{\mathbf{p}}=\frac{\hbar}{i}\nabla=\frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$，$\mathbf{A}=\mathbf{A}(\mathbf{x})$ であることに注意し，任意の位置関数 $g(\mathbf{x})$ に作用する演算子として $[\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})]g(\mathbf{x})$ を考える．

$$[\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})]g(\mathbf{x})=\mathrm{A}(\mathbf{x})\{\hat{\mathbf{p}}\cdot g(\mathbf{x})\}+\hat{\mathbf{p}}\{\mathrm{A}(\mathbf{x})\cdot g(\mathbf{x})\} \tag{24}$$

である．第一項では，$\hat{\mathbf{p}}\cdot g(\mathbf{x})=(\hbar/i)\nabla g(\mathbf{x})$ に $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ を左から作用させる．第二項で

は, $\hat{\mathbf{p}}$ は $\mathbf{A}(\mathbf{x})g(\mathbf{x})$ の積に左から作用するので, $g(\mathbf{x})\cdot(\hbar/\mathrm{i})\nabla\mathbf{A}(\mathbf{x})+\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot(\hbar/\mathrm{i})\nabla g(\mathbf{x})$ となる．しかし，クーロン・ゲージの条件から，$\nabla\mathbf{A}(\mathbf{x})=div\mathbf{A}(\mathbf{x})=0$ であり，上記の第一項は消える．従って，

$$(24)=(\hbar/i)\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\nabla g(\mathbf{x})+\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot(\hbar/\mathrm{i})\nabla g(\mathbf{x})=[2(\hbar/i)\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\nabla]g(\mathbf{x})=[2\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot\hat{\mathbf{p}}]g(\mathbf{x})$$

である．即ち，

$$\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}=2(\hbar/i)\mathbf{A}\cdot\nabla=2\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} \tag{25}$$

である．この関係は

$$\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}-\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}=0=[\mathbf{A},\hat{\mathbf{p}}] \tag{26}$$

となるので，演算子としての $\mathbf{A}$ と $\hat{\mathbf{p}}$ は交換可能であることを意味する．従って(22)は,

$$\hat{H}\phi=(\frac{1}{2m})(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})^2\phi=(\frac{1}{2m})\{(\hat{\mathbf{p}})^2-2(e)(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}})+(e\mathbf{A})^2\}\phi \tag{27-1}$$

となる．$\hat{\mathbf{p}}=\frac{\hbar}{i}\nabla=\frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$ を使うと，

$$\hat{H}\phi=(\frac{1}{2m})\{-\hbar^2\nabla^2\phi-2\frac{\hbar}{i}e(\mathbf{A}\cdot\nabla\phi)+(e)^2\mathbf{A}^2\phi\} \tag{27-2}$$

である． ハミルトン演算子だけを書くと，(27-1, 2)から，

$$\hat{H}=(\frac{1}{2m})\hat{\mathbf{p}}^2-\frac{e}{m}(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}})+\frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 \tag{28-1}$$

$(1/i)=-i$ だから，

$$\hat{H}=-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla^2+\frac{i\cdot\hbar}{m}e\cdot\mathbf{A}\bullet\nabla+\frac{1}{2m}(e\mathbf{A})^2 \tag{28-2}$$

となる．

荷電粒子の電荷はｅとしているので，この粒子を電子とする場合は全てｅ→(−e)の置き換えが必要である．(28-1)又は(28-2)は，電磁場の下にある一個の荷電粒子に対する非相対論的近似でのシュレディンガー方程式を与える．右辺の第一項以外は，**電磁場とその一個の荷電粒子間の相互作用**を表現している．電磁場と直結しない非電磁的ポテンシャル V を復活されば,

$$\hat{H}=[(\frac{1}{2m})\hat{\mathbf{p}}^2+V]-\frac{e}{m}(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}})+\frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 \tag{29-1}$$

$$\hat{H}=[-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla^2+V]+\frac{i\cdot\hbar}{m}e\cdot\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2m}(e\mathbf{A})^2 \tag{29-2}$$

となる．第一項を電磁場がない場合の粒子の Hamiltonian($\hat{H}_0$), これ以外のベクトル･ポテンシャル **A** の一次と二次の項は, 粒子と電磁場の相互作用と理解し, $\hat{H}_0$対する小さな摂動($\hat{H}'$)とみなす：

$$\hat{H}_0 \equiv (\frac{1}{2m})\hat{\mathbf{p}}^2 + V = -(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla^2 + V \tag{30-1}$$

$$\hat{H}' \equiv -\frac{e}{m}(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 = \frac{i\cdot\hbar}{m}e\cdot\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{e^2}{2m}(\mathbf{A})^2 \tag{30-2}$$

であり，(29-1, 2) は

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \tag{31}$$

となる．しかし，(29-1, -2)の Hamiltonian($\hat{H}$)は，荷電粒子が無い場合の電磁場(輻射場)それ自体の Hamiltonian($\hat{H}_R$)を含んでいないことに注意すべきである．

＜電磁場(輻射場)の $\hat{H}_R$ とベクトル・ポテンシャル＞

本来は, 粒子と電磁場（輻射場）の相互作用を含めた系全体の Hamiltonian($\hat{H}_S$)を考えねばならないから，(30)に$\hat{H}_R$を加えた

$$\hat{H}_S = \hat{H}_0 + \hat{H}' + \hat{H}_R \tag{32}$$

を問題にしなければならない． $\hat{H}_R$は電磁場（輻射場）のエネルギーで,「無数の調和振動子」と見なした光子のエネルギーに相当する．この古典的ハミルトニアンは，§14-6 で論じたように,

$$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma}[\mathbf{P}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2\mathbf{Q}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}(t)] = 2V\varepsilon_0\sum_{\mathbf{k}\,\sigma}(\omega_{\mathbf{k}})^2\cdot\mathbf{a}^2{}_{\mathbf{k}\sigma}(t) = H \qquad \S 14\text{-}6\text{-}\ (57)$$

である．調和振動子の量子論（§15-6-3）での議論に従えば，古典電磁気学の正準変数$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\,\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\,\sigma}$は，交換関係,

$$[\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\,\sigma}\,,\,\mathbf{P}_{\mathbf{k}',\,\sigma'}] = i\hbar\cdot\delta_{\mathbf{k},\,\mathbf{k}'}\cdot\delta_{\sigma,\,\sigma'} \tag{33-1}$$

$$[\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\,\sigma}\,,\,\mathbf{Q}_{\mathbf{k}',\,\sigma'}] = 0, \qquad [\mathbf{P}_{\mathbf{k},\,\sigma}\,,\,\mathbf{P}_{\mathbf{k}',\,\sigma'}] = 0 \tag{33-2}$$

を設定することで量子力学の演算子に変わる． §15-6-3 の議論では一個の調和振動子を考えたので，交換関係は$[Q, P] = i\hbar$であったが,「無数の調和振動子」からなる輻射場では一つの振動子を特定するのに($\mathbf{k}$, σ)を指定する必要があり, (33-1,-2)の形で交換関係を与えねばならない． §15-6-3 で述べたように，正準変数の§14-6- (57)の関係は，量子化の後でも，そのままで演算子としても成立するので,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma}[\mathbf{P}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2\mathbf{Q}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}(t)] = \hat{H}_R \tag{34}$$

である．

＜**Heisenberg 表示から Schrödinger 表示への変更**＞

§14-6 の議論では，正準変数 $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$ は，振幅 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ が，

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)\cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}|\cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t}\cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = \{|\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}|\cdot e^{-i\omega_k t}\cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\}\cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \qquad \S 14\text{-}6\text{-}(22)$$

である以下のベクトル・ポテンシャル **A** で与えられるとした．従って，

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}|\cdot e^{-i\omega_k t}\cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = |\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}|\cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot e^{-i\omega_k t} \qquad \S 14\text{-}6\text{-}(22')$$

と，$e^{-i\omega_k t}$ を含む右辺側を簡便に表現にする為に $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ を使っている．また，絶対値記号は，単位ベクトル $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ が同時に使われているから，単に複素振幅の大きさを表しているだけである．これらの点は以下の注意と関連する．

$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ をそのまま演算子と理解すると，時間変化する演算子を考えることになる．これは Heisenberg 流の力学変数の考え方（**Heisenberg 表示**）である．この表示では，古典力学の正準変数で与えられる物理量は，量子力学に移行した後も，(34)のように形式を変えないので，そのまま t を含む演算子と見なすことができる．一方，Schrödinger 流の波動力学の考え方(**Schrödinger 表示**)では，時間変化は全て固有関数（波動ベクトル）が担い，演算子は時間変化しないと考える．両者はユニタリー変換で移り変わり得るので，§14-6- (22')の左辺で $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)\to\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ と t を落とすことは，右辺の $e^{-i\omega_k t}$ を固有関数（波動ベクトル）側に移すことに対応する．　この立場から Schrödinger 表示の時間変化しない演算子 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ を考えることが出来る．古典電磁気学のベクトル・ポテンシャル **A** を量子論の演算子と考える際には，この種の問題が生じる．Heisenberg らの「行列力学」と Schrödinger の「波動方程式」を相互に変換する問題である．これについては，ディラック(1958)「量子力学（原書第 4 版），朝永　他，共訳(1968)」III~V, 小出(1969)「量子力学(I)」第 6 章，砂川(1991)「量子力学」§8，などを参照されたい．

以後の記述では，古典論のベクトル・ポテンシャル **A** を議論する際には $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ をそのまま使用するが，量子化した後には，**Schrödinger 表示**の演算子 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ として t を落とした表現を使う．他の演算子も同様に t を落とした表現とする．

そこで，再び古典論のベクトル・ポテンシャル **A** の議論に戻る．

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = \sum_k \sum_{\sigma=1,2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)\cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \mathbf{a}^*_{\mathbf{k}\sigma}(t)\cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}] \qquad \S 14\text{-}6\text{-}(23)$$

ここで，$\mathbf{a}^*_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ は $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ の複素共役である．これから，$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$ の正準変数，

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \equiv (V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}(t)] \qquad \text{§ 14-6- (56-1)}$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \equiv \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = -i\omega_{\mathbf{k}}(V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) - \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}(t)] \qquad \text{§ 14-6-(56-2)}$$

が得られる．もし，係数$(V\varepsilon_0)^{1/2}$が現れないようにしたければ，振幅$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$を

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \rightarrow (V\varepsilon_0)^{-1/2} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t)$$

としておけば良い．その場合は，

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = (V\varepsilon_0)^{-1/2} \sum_{k} \sum_{\sigma=1,2} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}] \qquad (35)$$

と **A** の各成分は$(V\varepsilon_0)^{-1/2}$倍されるが，§14-6- (56-1, 2)の$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$右辺での係数$(V\varepsilon_0)^{1/2}$は消え，

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \equiv \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \qquad (36)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}(t) \equiv \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = -i\omega_{\mathbf{k}}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) - \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}(t)] \qquad (37)$$

となる．

そこで，(35)の$\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$を採用し，正準変数$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$を演算子と理解することを表する為に，ハットを付けて書けば，

$$\hat{H}_R = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma}[\hat{\mathbf{P}}^2{}_{\mathbf{k},\sigma} + (\omega_{\mathbf{k}})^2\hat{\mathbf{Q}}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}] \qquad (38)$$

である． (36)と(37)の$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$を生成・消滅演算子にするには，§15-6-3 で議論したように，

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega Q + i \cdot P), \qquad \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega \cdot Q - i \cdot P) \qquad \text{§ 15-6-3 (82)}$$

を§15-6-3 (84),

$$\hat{\mathrm{a}}_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}(\omega_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma} + i \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}), \quad \hat{\mathrm{a}}^{\dagger}{}_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}(\omega_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma} - i \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma})$$

に改める．そして，$\mathbf{Q}_{\mathbf{k},\sigma}$，$\mathbf{P}_{\mathbf{k},\sigma}$ をベクトル・ポテンシャル A の成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$，$\mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}$で表現すると，生成・消滅演算子とベクトル・ポテンシャル成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$，$\mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}$の直接的関係は

$$\hat{\mathrm{a}}_{\mathbf{k},\sigma} = \sqrt{V\varepsilon_0} \cdot \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \qquad \hat{\mathrm{a}}^{\dagger}{}_{\mathbf{k},\sigma} = \sqrt{V\varepsilon_0} \cdot \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k},\sigma} \qquad (39\text{-}1)$$

となる．しかし，ここでは(35),（36）, (37)を採用することにしたので，ベクトル・ポテンシャル成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$，$\mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\sigma}$には係数$(\mathrm{V}\varepsilon_0)^{-1/2}$が付き，上記§15-6-3-(85)の係数$(\mathrm{V}\varepsilon_0)^{1/2}$は 1 となり，生成・消滅演算子は

$$\hat{\mathrm{a}}_{\mathbf{k},\sigma} = \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \qquad \hat{\mathrm{a}}^{\dagger}{}_{\mathbf{k},\sigma} = \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k},\sigma} \qquad (39\text{-}2)$$

となる． ベクトル・ポテンシャル A の成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\boldsymbol{\sigma}}$は消滅演算子に，その複素共役である $\mathbf{a}^*{}_{\mathbf{k}\boldsymbol{\sigma}}$は生成演算子に，それぞれ直接対応する．生成・消滅演算子が作用すると，量子数に (±1) の変化を与えるから，フォトンを一個増やすか一個減らすかの効果を持つ． 従って，(30-2)の摂動項にある $\mathbf{A}$ の一次項は，このフォトンを一個増やすか一個減らすかの変化を表すが，$\mathbf{A}$ の二次項は，(±1) の変化を二回行引き続き起こすことを意味する．

＜複合系に対する非定常状態の摂動＞

我々が問題にしたいのは，粒子（電子）系に対する電磁場の影響（光の吸収，放出，静磁場によるゼーマン分裂，など）であり，その擾乱効果は小さな摂動として近似的に扱われる．従って，(32)で $\hat{H}_R$ と $\hat{H}_0$ と合わせたものを無摂動の Hamiltonian とみなし，相互作用の $\hat{H}'$を摂動として扱う．即ち，

$$\hat{H}_S \equiv \hat{H} = (\hat{H}_0 + \hat{H}_R) + \hat{H}' \tag{40}$$

と考える．

現実物質の原子に存在する電子系を考えるには， e →(−e)の置き換えを行い，複数の(−e)の荷電粒子系を考えねばならない．従って，(30-1,-2)の両辺は，j を電子のラベルとして和を取る形に変更する必要がある．m は電子の質量である．また，荷電粒子（電子）は複数になったから， $\mathbf{A}(\mathbf{x}) \to \mathbf{A}(\mathbf{x}_j)$と各電子の位置座標でベクトル・ポテンシャルもラベルする必要がある．

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_R \equiv \sum_j [(\frac{1}{2m})\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{j}}{}^2 + V_j] + \hat{H}_R$$

$$= \sum_j [-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla_j{}^2 + V_j] + \hat{H}_R \tag{41-1}$$

$$\hat{H}_R = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma} [\hat{\mathbf{P}}^2{}_{\mathbf{k},\sigma} + (\omega_{\mathbf{k}})^2 \hat{\mathbf{Q}}^2{}_{\mathbf{k},\sigma}] \tag{41-2}$$

$$\hat{H}' \equiv \sum_j [\frac{e}{m}(\mathbf{A}(\mathbf{x}_j)\cdot\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{j}}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}_j)]$$

$$= \sum_j [-\frac{i\cdot\hbar}{m} e\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}_j)\nabla_j + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}_j)] \tag{41-3}$$

$$\hat{H} = (\hat{H}_0 + \hat{H}_R) + \hat{H}' \tag{41-4}$$

の結果となる．

$(\hat{H}_0 + \hat{H}_R)$を無摂動 Hamiltonian とみなすので，この合成系の固有関数は二つの

部分系固有関数の積となり，固有値は二つの部分系固有値の和となる．この考え方により，原子の電子系の光の吸収・放出の現象は**非定常状態の摂動論**として扱われる．この内容は次節以降で議論する．