ゲージ変換と波動関数の位相：アハラノフ・ボーム効果

量子力学の対称は基本的にはすべてミクロスコピックな議論であり、おおむね原子や分子のスケールを念頭に置いて議論している。より大きな広がりをもった系、例えば固体中では、どうしても避けられない欠陥や原子の熱的振動による非弾性散乱のために電子の波動関数の位相は乱される。そのために位相が重要な働きをする量子力学的現象がマクロスコピックなスケールで現れる事は超伝導・超流動を別にして困難である。しかしミクロスコピックとマクロスコピックの中間であるいわゆるメゾスコピック領域（ミクロンあるいはサブ・ミクロンの長さの領域）の舞台では量子力学的現象を制御し観測する事ができる。粒子の位相が本質的役割をはたす現象の一つの典型としてアハラノフ・ボーム効果に付いて説明しよう。

電子波の干渉とアハラノフ・ボーム効果

空間的に一様な電磁場中の電子を考えよう。この系のハミルトニアンは次のように書く事ができる。（電子の電荷は $-e$ ）

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r}) - e\phi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

$\boldsymbol{A}$ とϕはそれぞれベクトル・ポテンシャル、スカラー・ポテンシャルであり、系の電場 $\boldsymbol{E}$ および磁束密度 $\boldsymbol{B}$ は

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \mathrm{grad}\phi \tag{2}$$

$$\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \tag{3}$$

という関係で与えられる。式 (1) を導くとき、出発点としたのはローレンツ力

$$\boldsymbol{F} = -e(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \tag{4}$$

であったから、普通は電磁場の実体は $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ であって、$\boldsymbol{A}$ やϕは単なる便宜的な補助手段であると考えるだろう。特に、ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ やスカラー・ポテンシャルϕは一意的に定まらず、$\chi(\boldsymbol{r},t)$ という任意のスカラー関数を用いて

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}' + \mathrm{grad}\chi \\ &\phi \to \phi = \phi' - \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned} \tag{5}$$

と変換しても同じ電場と磁束密度が与えられるのだからなおさらそのように考えたくなる。実際、(5) の新しい $\boldsymbol{A}'$ とϕ'を用いても

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{A}' + \mathrm{grad}\chi) - \mathrm{grad}(\phi' - \frac{\partial \chi}{\partial t}) = -\frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial t} - \mathrm{grad}\phi' = \boldsymbol{E}' \\ \boldsymbol{B} &= \mathrm{rot}(\boldsymbol{A}' + \mathrm{grad}\chi) = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}' + \mathrm{rot}\cdot\mathrm{grad}\chi = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{B}' \end{aligned}$$

である。変換 (5) をゲージ変換という。

電磁場について、ゲージ変換 (5) を行っても $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ は同じである事が確かめられた。それでは電子の波動関数についてはどうであろうか。(1) のハミルトニアンに対するシュレディンガー方程式の解を$\psi(\boldsymbol{r},t)$ としよう。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = [\frac{1}{2m}\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\}^2 + V(\boldsymbol{r}) - e\phi(\boldsymbol{r},t)]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{6}$$

一方、(5) の様なゲージ変換を行った後の解を$\psi'(\boldsymbol{r},t)$ とする。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(\boldsymbol{r},t) = [\frac{1}{2m}\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\}^2 + V(\boldsymbol{r}) - e\phi'(\boldsymbol{r},t)]\psi'(\boldsymbol{r},t) \tag{6'}$$

ψとψ'はゲージ変換によって結びついた波動関数である。試みに

$$\psi'(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r},t)u(\boldsymbol{r},t) \tag{7}$$

と表して $u(\boldsymbol{r},t)$ を導いてみよう。変換後の波動関数に関する量をψと u で書き直せば

$$\begin{aligned} \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e(\phi + \frac{\partial \chi}{\partial t})\}\psi' &= u\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi\}\psi + \psi\{i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} + eu\frac{\partial \chi}{\partial t}\}\ , \\ \{\frac{\hbar}{i}\nabla + e(\boldsymbol{A} - e\cdot\mathrm{grad}\chi)\}\psi' &= u\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}\psi + \psi\{\frac{\hbar}{i}(\nabla u) - eu(\nabla\chi)\} \end{aligned}$$

であり、さらに

$$
\begin{aligned}
&\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e(\boldsymbol{A} - e\cdot \mathrm{grad}\chi)\}^2\psi' \\
&\quad =\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}u\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}\psi + \{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}\psi\{\frac{\hbar}{i}(\nabla u) - eu(\nabla\chi)\} \\
&\qquad - e(\nabla\chi)\cdot u\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}\psi - e(\nabla\chi)\cdot\psi\{\frac{\hbar}{i}(\nabla u) - eu(\nabla\chi)\} \\
&\quad =u\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}^2\psi + 2(\{\frac{\hbar}{i}\nabla + e\boldsymbol{A}\}\psi)\cdot(\{\frac{\hbar}{i}\nabla - e(\nabla\chi)\}u) \\
&\qquad + \psi\{\frac{\hbar}{i}\nabla - e(\nabla\chi)\}^2 u\ ,
\end{aligned}
$$

である。上の式で $(\cdots)$ の中の ∇ は外にある関数には演算しない。これらを $(6')$ に代入すると

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} + eu\frac{\partial\chi}{\partial t} = 0 \\
&\frac{\hbar}{i}\nabla u - eu(\nabla\chi) = 0
\end{aligned}
\tag{8}
$$

を満たす解 $u(\boldsymbol{r},t)$ が求まれば、シュレディンガー方程式 $(6')$ の解が (7) のように求められる事になることが分かる。(8) の解は簡単に

$$
u = \exp\{+i\frac{e}{\hbar}\chi(\boldsymbol{r},t)\} \tag{9}
$$

と求められる。すなわち (7)(9) の意味するところは、ゲージ変換 (5) をほどこすとき、電子の波動関数は

$$
\psi'(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r},t)\exp\{+i\frac{e}{\hbar}\chi(\boldsymbol{r},t)\} \tag{10}
$$

と変換されるということである。シュレディンガー方程式は変換後のベクトル・ポテンシャル、スカラー・ポテンシャル、波動関数を用いて変換前の式と全く同じ形に書かれるのである。

元に戻って、電子は $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ を感じるのであろうか、それとも $\boldsymbol{A}$ や ϕを感じるのであろうか。この問題を明確に提起し、さらに実体は $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ではなくベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ とスカラー・ポテンシャルϕであることを明らかにしたのはアハラノフ (A.Aharanov) とボーム (D.Bohm) で

あった。$\boldsymbol{A}$ やϕを感じて波動関数の干渉が起こる現象をアハラノフ・ボーム効果（AB 効果）という。AB 効果を実験的に確かめるためには、電磁場 $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ が無く $\boldsymbol{A}$ やϕがある環境を作ってやればよい。図 1 のように無限に長いソレノイドを置いて中心に磁束を通し、その両側に電子線を通してやる。

//
/////////////図 1///////////////////////////////////////
//

ソレノイドの半径を r_0として、その中に一様な全磁束Φを閉じこめる。（磁束は $z-$方向を向いている。）この時ベクトル・ポテンシャルは

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} (-\dfrac{y}{2\pi {r_0}^2}\Phi, \dfrac{x}{2\pi {r_0}^2}\Phi, 0)\ ;\ r_0 \geq r \geq 0 \\ (-\dfrac{y}{2\pi r^2}\Phi, \dfrac{x}{2\pi r^2}\Phi, 0)\ ;\ r \geq r_0 \end{cases} \tag{11a}$$

である。$(r = \sqrt{x^2+y^2})$　磁束密度 $\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} (0, 0, \dfrac{\Phi}{2\pi {r_0}^2})\ ;\ r_0 \geq r \geq 0 \\ (0, 0, 0)\ ;\ r \geq r_0 \end{cases} \tag{11b}$$

となり、磁束はソレノイドの外に漏れ出さない。ここで電子の波動関数がソレノイドの領域にしみこまないようにしよう。ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は接線方向（θ方向：$\tan\theta = x/y$）を向いていて、実際その成分は $r > r_0$ で

$$A_\theta = -\sin\theta A_x + \cos\theta A_y = \frac{\Phi}{2\pi r} = \nabla_\theta \frac{\Phi\theta}{2\pi} \tag{12}$$

となる。$\nabla_\theta = (1/r)(\partial/\partial\theta)$ はナブラ ∇ の極座標表示におけるθ方向成分である。$\boldsymbol{A} = 0$ の時の波動関数をψ_0、$\boldsymbol{A}$ が (11) の時の波動関数をψ_Φと書こう。今与えられている $\boldsymbol{A}$ はゲージ変換

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}' + \nabla\chi\ ,\ \chi = \frac{\Phi}{2\pi}\arctan\frac{x}{y} = \frac{\Phi\theta}{2\pi} \tag{13}$$

によって消し去る ($\boldsymbol{A}' = 0$) ことができる。したがって (10) において$\psi' = \psi_0, \psi = \psi_\Phi$として

$$\begin{aligned} \psi_\Phi &= \psi_0 \mathrm{exp}(-\frac{ie\Phi\theta}{2\pi\hbar}) = \psi_0 \mathrm{exp}(-\frac{i\Phi\theta}{\phi_0}) \ , \\ \phi_0 &= \frac{h}{e} = 4.1 \times 10^{-15} \mathrm{Wb} \end{aligned} \tag{14}$$

となる。このことから、図 1 でソレノイドの上を通った電子は位相が進み（磁束は紙面の向こう方向を向いているとする。)、下を通った電子は位相が遅れる。電子線をスクリーン上で受ければ磁束に応じた干渉縞が観測されるのである。磁束の強さを変化させると干渉縞が動き、電子はベクトル・ポテンシャルを感じている事が確かめられる。

AB 効果が実験的に検証されたのは、真空中の電子の干渉であった。しかし最近では金属中においても同様な電子波の干渉が観測されている。高品度の導体の寸法を $1\mu\mathrm{m}$ あるいはそれ以下にすると、絶対温度 K 度以下では、電子の非弾性散乱がほとんどおきず、したがって波動関数の位相が乱される事が無い。そのような状態でリングを作り、リングに垂直な磁場中において電流を流す。磁場の強さを連続的に変化させ電気抵抗を測定すると、抵抗は磁束の強さの関数として$\phi_0 = h/e$ を周期として変動する。これは真空中での AB 効果と同様に、リングの中を時計回りに進んだ電子と反時計回りに進んだ電子が、磁場のために位相の差を生じ干渉を生じるのである。