

相対論的量子力学 ノート

LongRiver

2021 年 8 月 25 日

目次

第 I 部	諸理論の復習	3
第 1 章	特殊相対性理論	4
1.1	相対性原理	4
1.2	ミンコフスキー時空	4
1.3	特殊相対論的力学	7
1.4	電磁気学	9
第 2 章	量子力学	13
2.1	量子力学の基本的な考え方	13
2.2	Schrödinger 方程式の解	18
2.3	水素様原子	18
2.4	Pauli 方程式	20
第 II 部	相対論的量子力学	22
第 3 章	Dirac 方程式の導出	23
3.1	Klein-Gordon 方程式	23
3.2	Dirac 方程式	24
3.3	Dirac 方程式の非相対論的極限	26
第 2 章	Dirac 方程式のローレンツ共変性	28
2.1	γ 行列による Dirac 方程式の表示	28
2.2	ローレンツ共変性に関する条件式	29
2.3	ディラックスピノルのローレンツ変換性	30
2.4	ローレンツ変換の具体例	31
2.5	4 元確率流密度のローレンツ変換性	34
2.6	空間反転	36
第 3 章	γ 行列に関する基本定理, Chiral 表示	37
3.1	γ 行列に関する基本定理	37
3.2	双一次形式のローレンツ共変量	38

3.3	Chiral 表示	39
第 4 章	Dirac 方程式の解	42
4.1	Dirac 方程式の再導出	42
4.2	自由粒子解の性質	45
4.3	スピン状態	46
4.4	エネルギーとスピンの射影演算子	47
4.5	自由粒子解と波束の物理的意味	50
4.6	Klein paradox	54
第 5 章	Dirac 方程式の非相対論的極限	57
5.1	自由粒子に関する Foldy-Wouthuysen 変換	57
5.2	電磁場の存在下での FWT 変換	59
5.3	各項の物理的意味	63

第Ⅰ部

諸理論の復習

第 1 章

特殊相対性理論

1.1 相対性原理

物理現象を考えるにあたって、相対性というのは重要である。Newton の運動法則においても暗に相対性は含まれている。これは第 1 法則から、全ての慣性系が等価であると言える。すなわち全ての慣性系で物理法則は不変である。Newton 力学では**ガリレイの相対性原理**が成り立つ。これは物理法則が**ガリレイ変換**において不変であることを言っている。ある慣性系 I に対して一定速度 $\boldsymbol{v}$ で運動する慣性系 I' を考える。慣性系 I の座標 $\boldsymbol{r}$ から慣性系 I' の座標 $\boldsymbol{r}'$ へのガリレイ変換は、

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t \quad (1.1)$$

となる。Newton の運動方程式は

$$m \frac{d^2 \boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F} \quad (1.2)$$

である。これが 2 つの慣性系で同じ形をとることを示す。

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \boldsymbol{r}}{dt^2} &= \frac{d^2}{dt^2}(\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{v}t) \\ &= \frac{d^2 \boldsymbol{r}'}{dt^2} \end{aligned} \quad (1.3)$$

となるため、運動方程式はガリレイ変換のもと不変であることがわかる。

しかし実は Newton 力学は光速に対して十分に小さい範囲でしか成り立たない。物体の速度が光速に近くなる系では別の変換を考える必要がある。この変換が**ローレンツ変換 (Lorentz transformation)**である。

1.2 ミンコフスキー時空

なぜ光速近くでは Newton の運動方程式がうまく行かないのか。あまり深く立ち入ることは避けるが、これは電磁気学に由来する。光は電磁波であり、電磁気学を用いて考察すべきである。電磁気学の基本方程式が Maxwell 方程式であることはすでに知っていることだろう。実は Maxwell 方程式はガリレイ変換のもと不変ではない。ガバガバな考察ではあるが、慣性系の間で Maxwell 方程式が変わると、紆余曲折をへて慣性系ごとに光速度が変わると結論づけられる。これは少し不自然なように思える。従って、電磁気学を中心に相対性を考慮した方が良さそうである。ここで登場するのがローレンツ変換である。Maxwell 方程式はローレンツ変換のもと不変となっている。このことは次の 2 つの原理にまとめられる。

- 光速不変の原理: 全ての慣性系で光速 c は一定である。
- 特殊相対性原理: 全ての慣性系は等価である。

物理的なイメージはここまでにして、数学的な性質を学んでいこう。数学的にはローレンツ変換とは、**ミンコフスキー空間 (Minkowski space)** 上の等長変換としている。等長変換とは、ある空間上で定義された“長さ”を変換前後で変えない変換を指す。なじみ深いユークリッド空間上で自然に導入される長さ (の2乗) は、

$$dr^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (1.4)$$

この長さを変えない変換は、直交行列による変換である。これをちょっとしたイメージとして持っていて、ミンコフスキー空間へと移っていこう。ミンコフスキー空間上での長さを**世界間隔**という。ミンコフスキー空間内の座標は4つの数 $x^\mu = (ct, \mathbf{r})$, $\mu = 0, 1, 2, 3$ で指定する。直交座標における世界間隔の2乗を、

$$\begin{aligned} ds^2 &= c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \\ &= \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \end{aligned} \quad (1.5)$$

アインシュタインの和の規約を用いていることに注意しよう。ここで、突然出てきた $\eta_{\mu\nu}$ は**計量テンソル**と呼ばれ、ミンコフスキー空間においては、

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

である。ユークリッド空間においては、

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

が計量テンソルである。すなわち、計量テンソルとは、内積から長さを導くようなテンソルであると言える。計量という言葉からも類推できよう。

さて、ではローレンツ変換について触れていこう。空間が等方的、均一であるとする。Maxwell 方程式を不変に保つ変換はローレンツ変換に加えて並進操作も存在する。これらを合わせたものは**ポアンカレ変換 (Poincaré transformation)** と呼ばれる。さらに、ローレンツ変換は、ローレンツブースト、空間回転、空間反転、時間反転を合わせたものを言う。この内空間に関する操作はユークリッド空間内に定義されるようなものと同じように定義できる。この4操作を合わせて**ローレンツ群**と呼び、 $O(3, 1)$ と表記する。ⁱ 慣性系 $\{x^\mu\}$ から慣性系 $\{x'^\mu\}$ への変換は、

$$\eta_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta = \eta_{\alpha\beta} \quad (1.8)$$

を満たすような1次変換で、

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (1.9)$$

ⁱ 一般に、 $-(x^1)^2 - (x^2)^2 - \dots - (x^p)^2 + (x^{p+1})^2 + \dots + (x^{p+q})^2$ が不変に保たれるような変換の成す群は $O(p, q)$ と表記するらしい。

としてつながれる。

ただし、空間や時間反転については物理法則が必ず不変に保たれる訳ではないため、ローレンツブーストと空間回転の成す変換のみについて考える。これらの変換は併せて、**本義ローレンツ変換**と呼ばれ、以降はこれをローレンツ変換と呼ぶ。ⁱⁱ本義ローレンツ変換が成す群を本義ローレンツ群 $O_+^\uparrow(3,1)$ と呼ぶ。この群の元は $\det \Lambda = 1, \Lambda^0_0 \geq 1$ を満たす。

ローレンツ変換の具体的な表示を考えていこう。 x 軸方向に相対速度 v で運動する慣性系への変換行列は、

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

で与えられる。ただし、

$$\beta = \frac{v}{c}, \quad \tanh \omega = \beta \quad (1.11)$$

を満たす。もっと具体的に表記すると、

$$ct' = \frac{ct - \frac{v}{c}x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad x' = \frac{x - \frac{v}{c}ct}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z \quad (1.12)$$

双曲線関数の性質から、この変換が世界間隔を不変に保つことは明らかだろう。今は x 軸方向へのローレンツブーストを扱ったが、任意の方向に運動している場合には、適当に空間座標について回転操作をしてやれば良い。ⁱⁱⁱ

これまでは座標変換について考えたが、座標が変わればそれに伴って場も変換を受けるべきである。以下数種類の場の変換性を紹介する。ただし、全ての場がこれらいずれかの性質を有するわけではないことに注意すること。以下全てプライムの有無で変換前後を区別する。

(1) スカラー場 $\Theta(x)$

$$\Theta'(x') = \Theta(x) \quad (1.13)$$

スカラー場は座標変換前後で不変である、

(2) 反変ベクトル場 $V^\mu(x)$

$$V'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu V^\nu(x) \quad (1.14)$$

これからわかるように、反変ベクトル場は通常の座標と同じ変換性を有する。

(3) 共変ベクトル場 $W_\mu(x)$

$$W'_\mu(x') = W_\nu(x)(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \equiv \Lambda_\mu{}^\nu W_\nu(x) \quad (1.15)$$

少し考察すればわかるが、共変ベクトル場は $\partial/\partial x^\mu$ と同じ変換性を有する。

ⁱⁱ 群論の言葉を用いれば、本義ローレンツ群はローレンツ群の部分群をなす。また、本義ローレンツ群から連続変換で空間反転、時間反転を含む変換へとつながることはない。

ⁱⁱⁱ これが許されるのは $O_+^\uparrow(3,1)$ の元に空間回転が含まれるためである。

(4) i 階反変 j 階共変テンソル場 $T^{\mu_1 \cdots \mu_i}_{\nu_1 \cdots \nu_j}(x)$

$$T'^{\mu_1 \cdots \mu_i}_{\nu_1 \cdots \nu_j}(x') = \Lambda^{\mu_1}_{\alpha_1} \cdots \Lambda^{\mu_i}_{\alpha_i} \Lambda_{\nu_1}^{\beta_1} \cdots \Lambda_{\nu_j}^{\beta_j} T^{\alpha_1 \cdots \alpha_i}_{\beta_1 \cdots \beta_j}(x) \quad (1.16)$$

以上からわかるように、反変成分を表す添え字は右上に、共変成分を表す添え字は右下に表記することが一般的である。また、反変成分と共変成分は簡単に変換することができて、 $V_\mu(x) = \eta_{\mu\nu} V^\nu(x)$ 、 $W^\mu(x) = \eta^{\mu\nu} W_\nu(x)$ とすれば良い。また、 $V^\mu(x) W_\mu(x)$ と定義される**スカラー積**はスカラー場となり、ローレンツ変換で不変な量となる。

ミンコフスキー空間内でもベクトルの長さを世界間隔と同様にとることができる。ここで、世界間隔の定義からわかるように、通常のユークリッドノルムと違ってこの値は負にもなるし、成分が非零でも零になり得る。従って、ベクトルは3種類に分類できる。 $A^2 \equiv \eta_{\mu\nu} A^\mu A^\nu$ とする。 $A^2 > 0$ のとき、 A^μ は**時間的ベクトル**、 $A^2 = 0$ のときは**光的ベクトル** (ヌルベクトル)、 $A^2 < 0$ のときは**空間的ベクトル**と呼ばれる。

このことをミンコフスキー空間内の異なる2点について考えてみよう。 $(x - y)^2$ を分類すれば良い。 $(x - y)^2 < 0$ のとき、これら2点は空間的である。このとき、これら2点には因果関係がない。 $(x - y)^2 > 0$ のとき、2点は時間的である。このときには2点の間で因果関係が成立する。以上を整理すると、空間的な2点は**同時に**存在できる。裏を返せば時間的に到達できない。逆に時間的な2点は同時に存在できないが、時間的に到達できる。これらは**因果律**として知られ、物理現象は因果律を満たさなくてはならない。

因果律:原因から生じる影響は、光の速さより速くは伝わらない。

1.3 特殊相対論的力学

特殊相対論に基づき、力学を修正していこう。物理現象を理解するために、粒子の時間発展を知りたいのだが、ローレンツ変換によってただの時間はこの尺度として用いることは不適とわかるだろう。ここで、ローレンツ不変な時間パラメータを次のように定義する。

$$d\tau^2 = \frac{ds^2}{c^2} = \frac{dx^\mu dx_\mu}{c^2} \quad (1.17)$$

このような τ を**固有時**と呼ぶ。定義からわかるようにしっかりとローレンツ不変な量となっていよう。また、固有時とは物体が静止しているように見える座標系での時間を表すことも同様にわかるはずだ。定義から、

$$d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)^2} dt = \sqrt{1 - \beta^2} dt \quad (1.18)$$

と、固有時と時間の関係を表せる。ただし、 $\mathbf{v}$ は、3次元空間の意味での速度である。固有時を用いて Newton 力学から類推される量を定義する。まず運動量を4元ベクトルとして、

$$p^\mu \equiv m \frac{dx^\mu}{d\tau}, \quad p_\mu \equiv m \frac{dx_\mu}{d\tau} \quad (1.19)$$

これは**4元運動量**と呼ばれる。また、 $dx^\mu/d\tau$ は**4元速度**である。 p^μ の大きさは、

$$p^\mu p_\mu = m^2 \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau} = m^2 c^2 \quad (1.20)$$

すなわち、4 元運動量の大きさは定数とわかる.^{iv}

力も Newton 力学から自然に導入できて、

$$f^\mu = \frac{dp^\mu}{d\tau} \quad (1.21)$$

として **4 元力**, $f^\mu = (f^0, \mathbf{f})$ を定義できる. 4 元運動量と力には、

$$\frac{d}{d\tau}(p^\mu p_\mu) = 2f^\mu p_\mu = 0 \quad (1.22)$$

の関係がある.

4 元運動量と、非相対論的な運動量の関係を見ていこう.

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{p}}{dt} &= \frac{d\mathbf{p}}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} \\ &= \mathbf{f} \frac{d\tau}{dt} \\ &= \mathbf{f} \sqrt{1 - \beta^2} \equiv \mathbf{F} \end{aligned} \quad (1.23)$$

として、非相対論的な力 $\mathbf{F}$ との関係がわかる. また、(1.22) より

$$f^\mu \frac{dx_\mu}{d\tau} = 0 \quad (1.24)$$

$$f^0 c = \mathbf{f} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \quad (1.25)$$

これより、

$$\begin{aligned} p^0 c &= \int f^0 c d\tau \\ &= \int \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} d\tau \\ &= \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (1.26)$$

すなわち 4 元運動量の第 0 成分はエネルギーを意味するとわかる.

以上から、4 元運動量についての以下の関係式が導かれる.

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.27)$$

また、

$$\begin{aligned} E &= p^0 c \\ &= m \frac{dx^0}{d\tau} c \\ &= \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \\ &= mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \frac{3}{8}m\frac{v^4}{c^2} + O(\beta^6) \end{aligned} \quad (1.28)$$

^{iv} 物理的にこれがどんな意味を持っているかは、物体が静止しているような系での運動を考えてみるとわかる.

と計算できる．非相対論的極限は $\beta \rightarrow 0$ とすればよく，この極限では第3項以降は無視でき，第2項がよく知る運動エネルギーとなっているとわかる．4元運動量の空間成分については，

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \frac{m}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (1.29)$$

と変形でき，非相対論的な運動量を $\sqrt{1-\beta^2}$ を補正として付け加わっているとわかる．

自由粒子の運動を相対論的に考察してみよう．今は運動方程式を出発点にせず，作用積分から解析してみる．自由粒子の作用積分は，

$$\begin{aligned} S &= -mc \int ds \\ &= -mc \int \sqrt{\eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu} \\ &= -mc \int \sqrt{\eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx^\nu}{d\lambda}} d\lambda \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$= -mc^2 \int \sqrt{1 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2} dt = \int L dt \quad (1.31)$$

ここで， L はラグランジアン， λ は一般パラメータである．一般座標を x^μ として，一般運動量を求めよう．

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2} \right) \\ &= \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \end{aligned} \quad (1.32)$$

として，(1.29) が導かれる．一般運動量が求まったので，ハミルトニアンを求めてみよう．

$$\begin{aligned} H &= \mathbf{p} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} - L \\ &= c\sqrt{m^2 c^2 + \mathbf{p}^2} \end{aligned} \quad (1.33)$$

$H = E$ のとき，これは4元運動量についての関係式に一致する.^v

1.4 電磁気学

前述の通り，電磁気学はローレンツ共変な理論であり，よく知られているように基本方程式は次のMaxwell方程式である．

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.34)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.35)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.36)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.37)$$

^v この項は加筆する可能性あり

また、相対論における因果律を満たすために連続の方程式が課される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.38)$$

非相対論的には連続の方程式はあまりきれいな形では内容に思える。この方程式を相対論的に記述してみよう。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} &= 0 \\ \frac{\partial(c\rho)}{\partial(ct)} + \nabla \cdot \mathbf{j} &= 0 \\ \frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} &= 0 \end{aligned} \quad (1.39)$$

ここで、 $j^\mu = (c\rho, \mathbf{j})$ と定義した **4 元電流密度** である。4 元電流密度は 4 元ベクトルである。この式だと、明確に発散が 0 と解釈できる。

(1.34) から、磁場 $\mathbf{B}$ はあるベクトル場 $\mathbf{A}$ があって、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.40)$$

と書ける。これを (1.36) に代入して変形することで、電場 $\mathbf{E}$ はあるスカラー場 ϕ があって、

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.41)$$

と書ける。これらを使っていない方程式に代入することで、 $\phi, \mathbf{A}$ に関する方程式を得られる。(1.41) を (1.35) に代入すると、

$$\begin{aligned} -\nabla^2\phi - \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \mathbf{A}) &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \left(\frac{\phi}{c}\right) - \frac{\partial}{\partial(ct)} \left(\frac{\partial}{\partial(ct)} \left(\frac{\phi}{c}\right) + \nabla \cdot \mathbf{A}\right) &= \mu_0 c \rho \end{aligned} \quad (1.42)$$

ただし途中で $c^2 = 1/\epsilon_0\mu_0$ を用いている。次に (1.40), (1.41) を (1.37) に代入すると、

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(-\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) \\ -\nabla^2 \mathbf{A} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}(\nabla\phi) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= \mu_0 \mathbf{j} \\ \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \mathbf{A} + \nabla \left(\frac{\partial}{\partial(ct)} \left(\frac{\phi}{c}\right) + \nabla \cdot \mathbf{A}\right) &= \mu_0 \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.43)$$

以上の結果はまとめて表記することができる。

$$A^\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, \mathbf{A}\right), \quad A_\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, -\mathbf{A}\right) \quad (1.44)$$

と 4 元電磁ポテンシャルを定義すると、

$$\partial^\nu \partial_\nu A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu = \mu_0 j^\mu \quad (1.45)$$

ただし省略表記として、 $\partial^\mu = \partial/\partial x_\mu = (\partial^0, -\nabla)$, $\partial_\nu = \partial/\partial x^\nu = (\partial_0, \nabla)$ を用いた。この方程式はもう少し書き直すことができ、2 階テンソル $F^{\mu\nu}$ を

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \quad (1.46)$$

を用いると,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu \quad (1.47)$$

と書ける. ただし $F^{\mu\nu}$ は定義から完全反対称テンソルとわかり,

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

である. またローレンツ変換性は,

$$F'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta F^{\alpha\beta}(x) \quad (1.49)$$

であるため, 電場と磁場は2階反変テンソル場であるとわかる. その他に $F^{\mu\nu}$ が満たす方程式として,

$$\partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} + \partial^\lambda F^{\mu\nu} = 0 \quad (1.50)$$

がある. これは (1.34) と (1.36) に対応する.

この方程式は変分原理からも求めることができる. ラグランジアン密度を

$$\mathcal{L}_{EM} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - A_\mu j^\mu \quad (1.51)$$

として, 作用積分を

$$S = \frac{1}{c} \int \mathcal{L}_{EM} d^4x \quad (1.52)$$

としてやればよい.

電荷 q を持つ荷電粒子の運動方程式は,

$$m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = q F^{\mu\nu} \frac{dx_\nu}{d\tau} \quad (1.53)$$

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{d\tau^2} = \frac{q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (1.54)$$

である. 作用積分は, 自由粒子に電磁場との相互作用の項が加わり,

$$S = \int \left(-mc \sqrt{\eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx^\nu}{d\lambda}} - q A_\mu \frac{dx^\mu}{d\lambda} \right) d\lambda \quad (1.55)$$

$$= \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2} - q\phi + \mathbf{A} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) dt = \int L dt \quad (1.56)$$

となる. これより共役な運動量は,

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \\ &= \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}} + q\mathbf{A} \end{aligned} \quad (1.57)$$

となる. 非相対論的極限をとるとよく知るような結果になるため妥当だろう. 従ってハミルトニアンは,

$$H = \mathbf{p} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} - L = c \sqrt{m^2 c^2 + (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2} + q\phi \quad (1.58)$$

となる, これは自由粒子のハミルトニアンにおいて,

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - qA^\mu, \quad H \rightarrow H - q\phi \quad (1.59)$$

としたものであるとわかる.

第2章

量子力学

2.1 量子力学の基本的な考え方

Newton 力学やそれを拡張した相対論的力学では、働く力と初期条件さえわかればその後の物体の運動は完全に予測できた。しかし原子や電子などの微視的な対象の運動を記述する際にはこれらの力学は不適である。このような微視的な対象を記述する際に用いられるのが量子力学である。量子力学における基礎的な概念をいくつか紹介する。

- 物理状態: Hilbert 空間ⁱの元
- 物理量: Hermite 演算子
- 測定値: 物理量の固有値

古典力学との決定的な違いは、物理量が演算子で表されるということである。以上の概念についておさらいしておこう。

物理状態 $|\psi\rangle$ は Hilbert 空間の元であり、定義からその線形結合もまた Hilbert 空間の元である。Schrödinger 表示において、物理状態の時間発展は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

ただし、 $\hat{H}$ はハミルトニアンである。ハットは演算子であることを示すが、付けたり付けなかったりする。文脈で判断しよう。さて、ハミルトニアンが時間に依存しない場合、(2.1) の形式的な解は以下のよう to 書ける。

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle, \quad \hat{U}(t, 0) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \quad (2.2)$$

ここで $\hat{U}(t, 0)$ は時間発展演算子という。

(2.1) では抽象的な状態ベクトルを用いた表示であるため、もう少し直感的な形へと表示を変えよう。座標表示へと切り替える方法として、両辺に $\langle \mathbf{r} |$ を作用させれば良い。すると (2.1) は次のようになる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.3)$$

ⁱ 数学的な Hilbert 空間の定義は、完備距離空間 (= ノルムが収束する、距離が必ず定義できる) である内積空間である。内積空間はベクトル空間の中に定義される

$\psi(\mathbf{r}, t)$ は**波動関数**ⁱⁱであり、ハミルトニアンは $\hat{H} = \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$ のように、位置演算子と運動量演算子の関数である。座標表示においては位置演算子は $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ 、運動量演算子は $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ である。ⁱⁱⁱ質量 m である粒子のハミルトニアンは、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ として、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

であった。これらをそれぞれ演算子に置き換えて (2.3) に代入すれば量子力学へと移行できる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

(2.5) は **Schrödinger 方程式**であり、非相対論的な量子力学の基礎方程式である。

その他の物理量の演算子として、エネルギーは

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.6)$$

とすれば良い。

(2.5) の解は一般に複素関数となる。観測可能な物理量は実数であるべきなため、波動関数自体は直接観測できない。実際に観測されるのは波動関数の絶対値の2乗である。ではこの量は何を意味するのか。波動関数の絶対値の2乗に対する標準的な考え方は、**確率解釈**と**波束の収縮**である。

確率解釈では、

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \quad (2.7)$$

で定められる $\rho(\mathbf{r}, t)$ は粒子が $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ に観測される**確率密度**を表すと考える。従って、波動関数は以下のように規格化されるべきである。

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \quad (2.8)$$

これを状態ベクトルで表すと、

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \quad (2.9)$$

$$\langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle = 1 = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle$$

$$\hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{U}(t, 0) = \hat{1}$$

$$\hat{U}^\dagger(t, 0) = \hat{U}^{-1}(t, 0) \quad (2.10)$$

のように変形できることから、時間発展演算子はユニタリ演算子であることがわかる。これによりもう一つわかることがある。それは**波動関数の全体に定数 (複素数でも良い) がかかってもそれは同じ状態をあらわす**ことである。ノルムが変わっても規格化で意味を成さないことはもとより、全体に $e^{i\theta}$ がかかって位相がずれても同じ状態ということである。すなわち波動関数の位相は観測量ではない。ただし、2つの状態を重ね合わせた際の**位相差**は観測可能量である。

また、確率密度関数は以下のように**確率の保存**を満足しなくてはならない。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.11)$$

ⁱⁱ 個人的にこの呼び方はあんまり好きではない。波というイメージでは限界が生じる。状態関数なんかがいいんじゃないかと思う。

ⁱⁱⁱ わざわざ座標表示において、と書いたのは表示が変わればこれらの演算子の形式も変わるためである。

ここで $j(\mathbf{r}, t)$ は確率流密度であり,

$$j(\mathbf{r}, t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \{\nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)\} \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (2.12)$$

で与えられる。これは確率密度関数を時間で偏微分し、それに対して Schrödinger 方程式を適用してやれば導出できる。ただしポテンシャルが実関数であるときのみであることに注意しよう。

波束の収縮とは、観測していない状態では波動関数は空間に広がって存在しているが、観測した時点で重ね合わせの状態から局在した一つの状態へと移行することである。

はじめに量子力学では物理量は演算子として表され、測定値はその固有値として表れることを説明した。ある物理量の演算子が $\hat{\Omega}$ で与えられ、固有値が ω_n であるとき、固有方程式は次のようになる。

$$\hat{\Omega}|\phi_n\rangle = \omega_n|\phi_n\rangle \quad (2.13)$$

ただし $|\phi_n\rangle$ は ω_n に対する固有状態である。量子力学における物理量は Hermite 演算子の中でも特に**オブザーバブル**と言われ、オブザーバブルの固有状態は一般に以下を満たす。固有状態の組を $\{|\psi_n\rangle\}$ と表すと、

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn} \quad (2.14)$$

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{1} \quad (2.15)$$

第1式は、異なる固有値に属する固有状態は直交する、ある固有値に属する固有状態が複数ある場合は、その部分空間内で直交基底をとることができる。第2式は、固有状態が Hilbert 空間の完全系となることを示す。以上から一般の物理状態はある物理量に関する固有状態で展開することができて、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\phi_n\rangle \quad (2.16)$$

$$a_n(t) = \langle\phi_n|\psi(t)\rangle \quad (2.17)$$

として表せる。^{iv} また、規格化条件から、

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_m \sum_n \langle\phi_m|a_m^*(t)a_n(t)|\phi_n\rangle = \sum_n |a_n(t)|^2 = 1 \quad (2.18)$$

これより、物理量 $\hat{\Omega}$ を測定したとき、 ω_n が観測される確率は $|a_n(t)|^2$ であることが結論づけられる。また、物理量 $\hat{\Omega}$ の期待値は、

$$\langle\psi(t)|\hat{\Omega}|\psi(t)\rangle = \sum_n |a_n(t)|^2 \omega_n \equiv \langle\hat{\Omega}\rangle \quad (2.19)$$

Hermite 演算子の一般的な性質として、その固有値は必ず実数となる。従って期待値も実数である。これは観測可能な量が実数であることに一致する。固有値が連続的な値をとる場合は総和は積分に置き換わる。

次にハミルトニアンが時間に依存する場合を考えよう。このとき、(2.1) の両辺を時間で積分すると、

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') |\psi(t')\rangle dt \quad (2.20)$$

^{iv} Fourier 級数展開と同じような考え方である。

これを (2.1) の右辺に代入し逐次積分していくと次のようになる.

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, 0) &= I + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) \\ &= T \left[I + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) \right] \\ &\equiv T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt' \right] \end{aligned} \quad (2.22)$$

ここで T は時間順序積であり, 演算子の積を時間の遅い方順に左から右へと並べ替える操作である. ハミルトニアンが時間ごとで非可換の場合は時間順序積が必要だが, 異なる時刻のハミルトニアンが可換である場合は, 時間発展演算子は

$$\hat{U}(t, 0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt' \right] \quad (2.23)$$

となる.

ここまでは物理状態が時間に依存して変化するとして考えてきたが, 異なる方法で量子力学を記述することもできる. **Heisenberg 表示**においては物理状態は時間に依存せず常に一定である. 代わりに演算子を,

$$\hat{\Omega}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{\Omega} \hat{U}(t, 0) \quad (2.24)$$

$\hat{\Omega}$ は Schrödinger 表示における演算子であり, それをユニタリ変換したような形となっている. ハミルトニアンが陽に時間依存しない場合, $\hat{\Omega}_H(t)$ は,

$$i\hbar \frac{d\hat{\Omega}_H(t)}{dt} = [\hat{\Omega}_H(t), \hat{H}] \quad (2.25)$$

である **Heisenberg の運動方程式**に従って時間発展する. Heisenberg 表示は Schrödinger 表示に比べて直感的であり, 古典力学との対応もしやすい.

時間依存の摂動を扱う場合には**相互作用表示**を用いたほうが記述しやすい. ハミルトニアンが

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (2.26)$$

で与えられているとする. ただし $\hat{H}_0$ は無摂動ハミルトニアンで時間に非依存, $\hat{V}(t)$ は摂動ハミルトニアンで $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \hat{V}(t) = 0$ を満たすとする. 相互作用表示における物理状態は,

$$|\psi(t)_I\rangle \equiv \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \right) |\psi(t)\rangle \quad (2.27)$$

とする. また,

$$V_I(t) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \right) V(t) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \right) \quad (2.28)$$

として, 物理状態の時間発展を

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)_I\rangle = V_I(t) |\psi(t)_I\rangle \quad (2.29)$$

この形式解は,

$$|\psi(t)_I\rangle = \hat{U}_I(t, 0)|\psi(0)_I\rangle, \quad \hat{U}_I(t, 0) \equiv T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_I(t') dt' \right] \quad (2.30)$$

となる. これより, 摂動ハミルトニアンのみを考慮すれば良くなる.

S 行列というものを

$$\hat{S} \equiv \hat{U}_I(\infty, -\infty) = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_I(t') dt' \right) \quad (2.31)$$

と定義する. これを用いると, ある始状態 $|\psi_i\rangle$ から終状態 $|\psi_f\rangle$ への遷移確率振幅は,

$$S_{fi} = \langle \psi_f | \hat{S} | \psi_i \rangle \quad (2.32)$$

で与えられ, **S 行列要素**と呼ぶ.

相互作用表示における演算子は,

$$\Omega_I(t) \equiv \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \right) \Omega \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \right) \quad (2.33)$$

で定義し,

$$i\hbar \frac{d\Omega_I(t)}{dt} = [\Omega_I(t), \hat{H}_0] \quad (2.34)$$

に従って時間発展する.

ここまで様々な表示を紹介したが, これらは全て物理的に等価であり, 得られる結論は全て同じである.

N 個の粒子が存在する系への拡張は, N 個の波動関数についての Schrödinger 方程式を考えれば良いわけではなく, あくまでも $3N$ 次元の空間上での一つの波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ で記述される. この波動関数の従う Schrödinger 方程式は,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \left[-\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (2.35)$$

となる. ただし ∇_i は $\mathbf{r}_i$ に作用する微分演算子である. 同種粒子系を考えると, 量子力学的に2つの粒子を区別することは原理的に不可能である. これを**不可弁性**と言う. 便宜的に粒子に番号を振り, i 番目と j 番目の位置を入れ替える演算子を $\hat{P}_{ij}$ と定義すると, $\hat{P}_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ は不可弁性から元と同じ状態を表す. 従って定数 α を用いて,

$$\hat{P}_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \alpha \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (2.36)$$

となる. これより, 入れ替えの演算子を2回作用させると元と同じ状態になることから,

$$\hat{P}_{ij}^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \alpha^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (2.37)$$

となることから, $\alpha = \pm 1$ ということがわかる. 2粒子の入れ替えに対しての固有値によって粒子は2種類に分類でき, $\alpha = +1$ の粒子を **Bose 粒子**, $\alpha = -1$ の粒子を **Fermi 粒子**という. この違いにより粒子の従う統計性が異なる.

2.2 Schrödinger 方程式の解

ハミルトニアンが時間に依存しないとき、(2.5) は変数分離法で解くことができる。従って、ハミルトニアンについての固有値方程式を解けばよく、

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (2.38)$$

を考えればよい。ただし実際に解く際は適切な境界条件を定めることで解を得る。

(2.38) の解が求まれば、その線形結合で任意の非定常状態を得ることができる。従って、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (2.39)$$

となる。エネルギー固有値が連続的な場合は和を積分に置き換えれば良い。

ある物理量 $\hat{\Omega}$ がハミルトニアンと可換なとき、すなわち

$$[\hat{H}, \hat{\Omega}] = 0 \quad (2.40)$$

を満たすとき、ハミルトニアンの固有関数 $\varphi_n(\mathbf{r})$ に対して、

$$\hat{H}\hat{\Omega}\varphi_n(\mathbf{r}) = \hat{\Omega}\hat{H}\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n\hat{\Omega}\varphi_n(\mathbf{r}) \quad (2.41)$$

となり、 $\hat{\Omega}\varphi_n(\mathbf{r})$ もまたハミルトニアンの固有関数となる。これが $\varphi_n(\mathbf{r})$ と異なる状態を表すとき、この固有値には縮退が存在するという。保存量の存在 (対称性の存在) が縮退の起源となる。また、一般に可換なオブザーバブルには同時固有状態が存在する。

ハミルトニアンと物理量 $\hat{\Omega}$ が可換であるようなとき、 $\hat{\Omega}$ を生成子とする変換でハミルトニアンは、

$$\hat{H}' = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{\Omega}\right) \hat{H} \exp\left(\frac{i}{\hbar} a \hat{\Omega}\right) \quad (a \text{ は実定数}) \quad (2.42)$$

へと移される。しかし、 $[\hat{H}, \hat{\Omega}] = 0$ であるため、ハミルトニアンは変換の下で不変となる。すなわち保存量となっている。

以下いくつか具体的な例について復習しよう。

2.3 水素様原子

原点に電荷 Ze を持つ原子核が存在し、その周りに電子がクーロンポテンシャルを受けて運動している系での時間に依存しない Schrödinger 方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}\right) \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (2.43)$$

ただし電子の質量は原子核に比較して十分重いので、電子の質量を換算質量と見なしても問題ない。この方程式の解法については別資料にまとめてあるので参考にしてもらいたい。

ハミルトニアンに可換な演算子として、

$$\hat{\mathbf{R}} \equiv \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}) + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (2.44)$$

がある。\$\hat{\mathbf{R}}\$ はランゲ-レンツ-パウリベクトル (Runge-Lenz-Pauli Vector) と言う。角運動量演算子 \$\hat{\mathbf{L}}\$ と併せて以下の交換関係を満たす。

$$[\hat{L}^i, \hat{L}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} L^k \quad (2.45)$$

$$[\hat{R}^i, \hat{R}^j] = -\frac{2i\hbar}{m_e} \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} L^k H \quad (2.46)$$

$$[\hat{L}^i, \hat{R}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} R^k \quad (2.47)$$

ただし \$\varepsilon^{ijk}\$ は完全反対称テンソルで \$\varepsilon^{123} = 1\$ である。いま, \$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0, [\hat{H}, \hat{\mathbf{R}}] = 0\$ であるため, \$\hat{H}\$ を \$E\$ に置き換えて考えて良い。

\$\tilde{\mathbf{R}} \equiv \sqrt{-m_e/2E} \hat{\mathbf{R}}\$ とすると,

$$[\tilde{R}^i, \tilde{R}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} L^k \quad (2.48)$$

$$[\hat{L}^i, \tilde{R}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \tilde{R}^k \quad (2.49)$$

と簡単な関係となる。この上 \$\hat{\mathbf{M}} \equiv (\hat{\mathbf{L}} + \tilde{\mathbf{R}})/2, \hat{\mathbf{N}} \equiv (\hat{\mathbf{L}} - \tilde{\mathbf{R}})/2\$ を定義すると,

$$[\hat{M}^i, \hat{M}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \hat{M}^k \quad (2.50)$$

$$[\hat{N}^i, \hat{N}^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \hat{N}^k \quad (2.51)$$

$$[\hat{M}^i, \hat{N}^j] = 0 \quad (2.52)$$

となり, \$\hat{\mathbf{M}}\$ と \$\hat{\mathbf{N}}\$ は独立に角運動量代数に従うことがわかる。従って, \$\hat{\mathbf{M}}^2\$ と \$\hat{\mathbf{N}}^2\$ の固有値はそれぞれ \$\mu(\mu+1)\hbar^2, (\mu=0, 1/2, 1, \dots), \nu(\nu+1)\hbar^2, (\nu=0, 1/2, 1, \dots)\$ となるが,

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{\mathbf{N}}^2 = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2 + \tilde{\mathbf{R}}^2}{4} \quad (2.53)$$

となることから, \$\mu = \nu\$ である。一方,

$$\tilde{\mathbf{R}}^2 = -\hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar^2 - \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e}{2E} \quad (2.54)$$

が成り立つため, 固有状態に対して

$$\mu(\mu+1)\hbar^2 = -\frac{1}{4} \left(\hbar^2 + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e}{2E} \right) \quad (2.55)$$

これよりエネルギー固有値は,

$$E = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 (2\mu+1)^2} \quad (2.56)$$

となり, \$2\mu+1\$ が主量子数に相当するとわかる。

2.4 Pauli 方程式

質量 m 、電荷 q を持つ荷電粒子が電磁場中に存在するとき、運動を記述するハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi \quad (2.57)$$

ただし $\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャル、 Φ はスカラーポテンシャルである。従って、系を記述する Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\nabla - i\frac{q}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + q\Phi \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.58)$$

また、ポテンシャルは不定性があり、適当なスカラー場 $f(\mathbf{r}, t)$ を用いて

$$\Phi' = \Phi - \frac{\partial f}{\partial t} \quad (2.59)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f \quad (2.60)$$

と変換しても同じ電磁場を与えるため、波動関数は、

$$\psi' = e^{i\frac{q}{\hbar}f} \psi \quad (2.61)$$

と位相だけずれる。このような変換は **Gauge 変換** と呼び、この局所的な変換に関する不変性は **局所 Gauge 不変性** と呼ばれる。

電磁場中の電子に関する Schrödinger 方程式に、**Pauli 項** と呼ばれる磁場に依存する項を追加すると、電磁場中の電子に関する方程式を得られる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}_{\text{Pauli 項}} - e\Phi \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.62)$$

この方程式は **Pauli 方程式** と呼ばれる。ここで $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列であり、

$$\sigma^i \sigma^j + \sigma^j \sigma^i = 2\delta^{ij} \quad (2.63)$$

$$\sigma^i \sigma^j - \sigma^j \sigma^i = 2i \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \sigma^k \quad (2.64)$$

($i, j, k = 1, 2, 3$)

を満たす 3 つの 2×2 行列である。従って、Pauli 方程式から得られる $\psi(\mathbf{r}, t)$ は 2 成分の波動関数となっており、スピンの自由度を含んでいる。

スピンを $\mathbf{S}$ とすると、 $\mathbf{S}$ は角運動量代数の元であり、

$$[S^i, S^j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} S^k \quad (2.65)$$

を満たす。軌道角運動量とスピン角運動量を合成した全角運動量は $\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S}$ で定義され、こちらも角運動量代数を満たす。自由度 2 のスピンは Pauli 行列を用いて、

$$\mathbf{S} = \hbar \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \quad (2.66)$$

で与えられる。Pauli 行列の取り方にはユニタリ変換分の自由度があるが、ここでは

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

として与える。このときスピンの z 成分は、

$$S_z = \hbar \frac{\sigma^3}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

であり、固有値と固有関数は、

$$\text{固有値: } S_z = \frac{\hbar}{2}, \quad \text{固有関数: } u_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

$$\text{固有値: } S_z = -\frac{\hbar}{2}, \quad \text{固有関数: } u_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

となる。

Pauli 項は **Bohr 磁子** $\mu_B \equiv e\hbar/2m_e$ と、**磁気回転比** (g 因子) を用いて、 $(g\mu_B/\hbar)\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ と書ける。電子のスピンに対しては g 因子は $g = 2$ となる。

$\mathbf{A} = (1/2)\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ で与えられる弱い一様な磁場 $\mathbf{B}$ が印加されたときの Pauli 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.71)$$

となる。($\mathbf{B}$ の 2 次以降は無視している)

スピン自由度が 2 であるような自由粒子の Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla)^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.72)$$

に従うとする。この段階では、 $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla)^2 = \nabla^2 I$ であるため単なる書き換えに過ぎない。ここで、粒子が電磁場中に存在するとき、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \right\}^2 - e\Phi \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.73)$$

ここで、Pauli 行列に関する公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (2.74)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \right]^2 &= \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \times \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \\ &= \left(\nabla + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (2.75)$$

となり、Pauli 項が出現する。すなわち、2 成分波動関数を導入することが Pauli 項の出現と関わりがあることがわかる。

第 II 部

相对論的量子力学

第 3 章

Dirac 方程式の導出

3.1 Klein-Gordon 方程式

非相対論的な領域での量子力学の基礎方程式は Schrödinger 方程式であり、一般的には以下の形で与えられる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

Schrödinger 方程式は時間に関して 1 階、空間に関して 2 階の微分方程式であるため、明らかにローレンツ不変性を有していない。従って、相対論的な領域での量子力学を記述することはできないため、より一般的な理論を構成するために特殊相対論的な量子論を構成する必要がある。この (電子に関する相対論的な) 基礎方程式を導出するため、以下の要請を課す。

- 【要請 1】 特殊相対性原理に従う。(本義ローレンツ変換について不変)
- 【要請 2】 自由粒子は 4 元運動量の関係式 ($E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$) に従う。
- 【要請 3】 確率解釈ができる。
- 【要請 4】 非相対論的極限で Pauli 方程式へと帰着する。

ローレンツ共変な方程式として最も単純に求めることができそうなのは、4 元運動量の関係式をそのまま演算子へと置き換えて波動関数に作用させるものである。4 元運動量に対応する演算子はそれぞれ、

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \Rightarrow \hat{p}^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, -i\hbar \nabla \right) \quad (3.2)$$

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p} \right) \Rightarrow \hat{p}_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, i\hbar \nabla \right) \quad (3.3)$$

これを 4 元運動量の関係式に適用することで、演算子

$$-\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \equiv -\hbar^2 \square \quad (3.4)$$

を得られる。ただし、 $\square$ は **d'Alembertian** と呼ばれる微分演算子で、ローレンツ変換で不変である。d'Alembertian は $\square = \partial^\mu \partial_\mu$ と表記できる。従って、要請を満たすような基礎方程式として、

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi(x^\mu) = 0 \quad (3.5)$$

を考えることができる。(3.5) は **Klein-Gordon 方程式**と呼ばれる相対論的な波動方程式となっている。 $\phi(x^\mu)$ はスカラー場とするとローレンツ変換で不変となるため、(3.5) はローレンツ変換の下での不変性を有し、要請 1 を満たす。しかし、Klein-Gordon 方程式から導かれる波動関数では確率解釈ができない。その理由を見ていこう。(3.5) の複素共役を考えると、

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi^*(x^\mu) = 0 \quad (3.6)$$

(3.5) の左から ϕ^* をかけてたものから、(3.6) の左から ϕ をかけたものを引くと、

$$\begin{aligned} \phi^* \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi - \phi \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi^* &= 0 \\ \phi^* \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \phi - \phi \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \phi^* &= 0 \\ \frac{1}{c^2} \left(\phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial t^2} \phi \right) - (\phi^* \nabla^2 \phi - (\nabla^2 \phi^*) \phi) &= 0 \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) - \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) &= 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

と変形できる。ここで第 2 項は Schrödinger 方程式から求められる確率流密度に定数倍の違いを除いて一致しているため、確率流密度を

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) \quad (3.8)$$

で定義すると、確率密度関数にあたるものは

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) \quad (3.9)$$

と定義できる。しかしこのように定義された確率密度関数は非負とは限らないため、確率解釈はできなくなってしまう。 ϕ がエネルギーの固有状態で負の固有値を持つとき、 ρ は負の値をとる。

確率解釈が破綻する原因は、時間に関する 2 階の微分方程式であるためである。この問題を解決するために、正のエネルギー解だけを取り扱えば良いかと言われれば問題はそんなに単純ではなく、勝手に負エネルギー解を捨てると因果律が成り立たなくなってしまう。

3.2 Dirac 方程式

確率密度を波動関数の絶対値の 2 乗として得られれば確率解釈が可能となる。 $\rho = |\psi|^2$ が波動方程式から連続の式を満たすようにするには、方程式が時間に関する 1 階になっているとうまくいきそうである。ローレンツ不変性から時間が 1 階ならば空間も 1 階となる。そのような方程式として、

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \psi(x^\mu) = 0 \quad (3.10)$$

を仮定しよう。ただし、 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$, β は場の変数に依存しないとする。この方程式が要請 2 を満たすには、この解が Klein-Gordon 方程式の解となっていればよい。従って、演算子の関係として

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{m_e c}{\hbar} \right)^2 \right] = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \quad (3.11)$$

のような関係になっていれば良いことになる．右辺を丁寧に展開してやると，この関係が成り立つためには，

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij}, \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (3.12)$$

を同時に満たしている必要がある．従って， α, β はただの数ではなく行列でなくてはならなくなる．このことから直ちに波動関数は多成分になることがわかる．多成分に拡張されたことから自然にスピンの自由度も導入される．

さて，条件を満たすような α, β はどのような行列になるか考察しよう．はじめに，ハミルトニアンは Hermite 演算子であるため， α, β も Hermite 行列である．また，(3.12) から，

$$(\alpha^i)^2 = I, \quad \beta^2 = I \quad (3.13)$$

となる．線形代数の知識から，Hermite 行列は Unitary 行列によって対角化可能である．これより，2乗して単位行列になるということは α や β の固有値は ± 1 に限られる．ⁱ

また，(3.12) より，

$$\alpha^i = -\beta \alpha^i \beta, \quad \beta = -\alpha^i \beta \alpha \quad (3.14)$$

となる．各式について両辺トレースをとってやると，トレースの性質 $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA)$ を用いると，

$$\text{Tr} \alpha^i = -\text{Tr}(\beta \alpha^i \beta) = -\text{Tr}(\beta^2 \alpha^i) = -\text{Tr} \alpha^i \quad (3.15)$$

$$\text{Tr} \beta = -\text{Tr}(\alpha^i \beta \alpha^i) = -\text{Tr}((\alpha^i)^2 \beta) = -\text{Tr} \beta \quad (3.16)$$

これらより， $\text{Tr} \alpha^i = \text{Tr} \beta = 0$ とわかる．トレースは固有値の和であるため， α, β は偶数次の正方行列である必要がある 2×2 行列で互いに反交換なのは Pauli 行列の3つしかないため不適である．従って(3.12)を満たす最小次元は 4×4 の正方行列となる．この一つの組として，

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

ただし σ^i は Pauli 行列， I は 2×2 の単位行列である．このよう表示は **Dirac 表示 (標準表示)** と呼ばれ，非相対論的極限の考察がしやすい．ただし，Dirac 表示に Unitary 同値な行列も(3.12)を満たしかつその限りである．ⁱⁱ

(3.10) を整理してやると，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \psi(x^\mu) \quad (3.18)$$

を得られる．(3.18) は **Dirac 方程式** と呼ばれる，自由な電子に関する相対論的な方程式である．Dirac 表示では，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = \begin{pmatrix} m_e c^2 & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} & -m_e c^2 \end{pmatrix} \psi(x^\mu) \quad (3.19)$$

ⁱ 適当な Unitary 行列によって対角化してやり，それを2乗してやったものが単位行列に等しくなることから示される．

ⁱⁱ 物理的に重要なのは条件(3.12)であり，その具体的な表示にはよらない．すなわち実際に解析を行う際は都合のよい行列を選んでやれば良い．

となる。

Dirac 方程式から得られる波動関数は確率解釈が可能だろうか。Dirac 方程式より、

$$i\hbar\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -i\hbar c \sum_{k=1}^3 \left(\psi^\dagger \alpha^k \frac{\partial\psi}{\partial x^k} + \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^k} \alpha^k \psi \right) \quad (3.20)$$

となる。これを整理すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} (\psi^\dagger \alpha^k \psi) = 0 \quad (3.21)$$

となるため、確率密度 ρ と確率流密度 $\mathbf{j}$ は

$$\rho = \psi^\dagger \psi = |\psi|^2, \quad \mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (3.22)$$

実は電荷密度と電流密度のように一つの 4 元ベクトルにまとめることができ、4 元確率流密度 j^μ を

$$j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}) = (c\psi^\dagger, c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (3.23)$$

としてやればローレンツ変換に対する性質が分かりやすくなる。

Dirac 方程式は電子以外にもスピン 1/2 の Fermi 粒子を記述することができる。Dirac 方程式に従う粒子は Dirac 粒子と呼ばれる。

3.3 Dirac 方程式の非相対論的極限

Dirac 方程式を解くことで得られるエネルギー固有値は正のものと負のものがある。一旦負エネルギーは無視して正エネルギー解に注目する。

電磁相互作用を受けた荷電粒子に対する Dirac 方程式を考える。この系の Dirac 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = \left[-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) + \beta m_e c^2 - e\Phi \right] \psi(x^\mu) \quad (3.24)$$

$\psi(x^\mu)$ から静止エネルギー $m_e c^2$ を分離させた

$$\psi(x^\mu) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t \right) \begin{pmatrix} \varphi(x^\mu) \\ \chi(x^\mu) \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

を Dirac 表示の下で変形すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - e\Phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2m_e c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

上の 2 成分についての方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \chi - e\Phi \varphi \quad (3.27)$$

下の 2 成分については非相対論的極限で、

$$0 = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi - 2m_e c^2 \chi \quad (3.28)$$

ただし, $i\hbar(\partial\chi/\partial t)$ は全エネルギーから静止エネルギーを差し引いた残りのエネルギーを表し, 非相対論極限において大きさは $2m_e c^2 \chi$ に比較して十分に小さいため無視した. $e\Phi\chi$ も同様に無視している. これより,

$$\chi = -\frac{i\hbar}{2m_e c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi \ll \varphi \quad (3.29)$$

となるため, 非相対論的極限において下 2 成分は上 2 成分に対して極めて小さいことがわかる. また (3.29) を (3.27) に代入して Pauli 行列の公式を用いて変形すると,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x^\mu) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e\Phi \right] \varphi(x^\mu) \quad (3.30)$$

となり Pauli 方程式が導かれ, 要請 4 を満たす.

従って電磁相互作用を含む電子に関する相対論的な方程式は (3.24) で与えられ, なおかつスピンの自由度が内蔵されており, 非相対論的極限において自然に Pauli 項が導かれることがわかった.

第 2 章

Dirac 方程式のローレンツ共変性

2.1 γ 行列による Dirac 方程式の表示

(3.18) の両辺に左から $(1/c)\beta$ をかけ、 $\gamma^0 \equiv \beta, \gamma^i \equiv \beta\alpha^i$ をまとめて γ^μ 、 $x^\mu = (ct, x, y, z)$ とすると Dirac 方程式は、

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m_e c \right) \psi(x) = 0 \quad (2.1)$$

とまとめられる。ここで γ^μ は γ 行列と呼ばれる **Clifford 代数**で、反交換関係

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} I \quad (2.2)$$

を満たすような 4×4 行列である。また、以降は特に断りがなければ引数 x は x^μ を表すものとする。

γ^0 は Hermite 行列であり、 γ^i は反 Hermite 行列である。これは α^i と β の間の反交換関係から導かれ、

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta\alpha^i)^\dagger = (\alpha^i)^\dagger \beta^\dagger = \alpha^i \beta = -\beta\alpha^i = -\gamma^i \quad (2.3)$$

となり確かに反 Hermite 行列とわかる。また、Dirac 表示における γ 行列は、

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = I \otimes \sigma^3, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} = \sigma^i \otimes i\sigma^2 \quad (2.4)$$

と表示される。ⁱ

電磁相互作用のある系においても、微分演算子を今までと同様に置き換えてやれば良い。ただしここで用いるべきは 4 元電磁ポテンシャルであり、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - qA_\mu(x) = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} + i\frac{q}{\hbar} A_\mu(x) \right] \quad (2.5)$$

と表せる。従って Dirac 方程式は、

$$\left[i\hbar\gamma^\mu \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} + i\frac{q}{\hbar} A_\mu(x) \right) - m_e c \right] \psi(x) = 0 \quad (2.6)$$

となる。

ⁱ ここで、 $\otimes$ は直積であり、次のように定義される。 A, B を 2×2 行列として、

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} Ab_{11} & Ab_{12} \\ Ab_{21} & Ab_{22} \end{pmatrix}$$

2.2 ローレンツ共変性に関する条件式

γ 行列を用いて方程式のローレンツ変換性を考察する．まずは本義ローレンツ変換についての変換性を考えていこう．

慣性系 I と慣性系 I' が $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ で結びつけられているとき，それぞれの慣性系における Dirac 方程式は，

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m_e c \right) \psi(x) = 0 \quad (2.7)$$

$$\left(i\hbar\gamma'^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - m_e c \right) \tilde{\psi}(x') = 0 \quad (2.8)$$

となる．ただし， γ'^μ は Clifford 代数で 4×4 の行列である．また，(2.2) を満たすような行列は互いに Unitary 同値であるため，適当な Unitary 行列 U を用いて

$$\gamma'^\mu = U^\dagger \gamma^\mu U \quad (2.9)$$

という関係が成り立つ．ここで， $\psi'(x') \equiv U\tilde{\psi}(x')$ と定義する．(2.8) に左から U を作用させることで，

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - m_e c \right) \psi'(x') = 0 \quad (2.10)$$

を得られる．

$\psi(x)$ が本義ローレンツ変換の下で

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) \quad (2.11)$$

と線形変換されることを仮定しよう． $S(\Lambda)$ は $\Lambda^\mu{}_\nu$ に依存する 4×4 の行列である．また，ローレンツ変換は群を為すことから必ず逆変換が存在することから，

$$\psi(x) = S^{-1}(\Lambda)\psi'(x') = S^{-1}(\Lambda)\psi'(\Lambda x) \quad (2.12)$$

が成り立つ．一方，ローレンツ変換の逆変換を用いることで，

$$\psi(x) = S(\Lambda^{-1})\psi'(x') = S(\Lambda^{-1})\psi'(\Lambda x) \quad (2.13)$$

ともかける．従って $S^{-1}(\Lambda) = S(\Lambda^{-1})$ が成り立つ．

まずは $S(\Lambda)$ の満たすべき条件を求める．(2.7) に左から $S(\Lambda)$ を作用させると，

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar S(\Lambda)\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - S(\Lambda)m_e c \right) \psi(x) = 0 \\ & \left(i\hbar S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)S(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - S(\Lambda)m_e c \right) \psi(x) = 0 \\ & \left(i\hbar S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - m_e c \right) \psi'(x') = 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

これより，(2.10) と (2.14) が一致するためには，

$$S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu = \gamma^\nu, \quad \Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu = S^{-1}(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda) \quad (2.15)$$

が成り立つ必要がある。注意すべきは、ここでは $S(\Lambda), \gamma^\mu$ は行列であるが Λ^ν_μ は数であることである。そのため可換である。ⁱⁱ

2.3 ディラックスピノルのローレンツ変換性

次に $S(\Lambda)$ の具体形を求めていこう。任意のローレンツ変換は無限小変換を逐次行っていくことで構成することができる。そこで、無限小ローレンツ変換を無限小パラメータ $\Delta\omega^\nu_\mu$ を用いて

$$\Lambda^\nu_\mu = \delta^\nu_\mu + \Delta\omega^\nu_\mu \quad (2.16)$$

とする。ただし、ローレンツ変換の満たすべき性質を用いることで、

$$\begin{aligned} \eta_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta &= \eta_{\mu\nu} (\delta^\mu_\alpha + \Delta\omega^\mu_\alpha) (\delta^\nu_\beta + \Delta\omega^\nu_\beta) \\ &= \eta_{\mu\nu} (\delta^\mu_\alpha \delta^\nu_\beta + \delta^\mu_\alpha \Delta\omega^\nu_\beta + \delta^\nu_\beta \Delta\omega^\mu_\alpha + O(\Delta\omega^2)) \\ &= \eta_{\alpha\beta} + \eta_{\alpha\nu} \Delta\omega^\nu_\beta + \eta_{\mu\beta} \Delta\omega^\mu_\alpha + O(\Delta\omega^2) \\ &= \eta_{\alpha\beta} + \Delta\omega_{\alpha\beta} + \Delta\omega_{\beta\alpha} + O(\Delta\omega^2) \end{aligned} \quad (2.17)$$

これが $\eta_{\alpha\beta}$ に一致すべきであるため、2次以降は無視して $\Delta\omega_{\alpha\beta} = -\Delta\omega_{\beta\alpha}$ となり完全反対称テンソルとなる。ⁱⁱⁱ

$S(\Lambda)$ は $\Delta\omega^{\mu\nu}$ で展開される。1次までで、

$$S(\Lambda) = I - \frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}, \quad S^{-1}(\Lambda) = I + \frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \quad (2.18)$$

となるとする。ここでは $\sigma_{\mu\nu}$ は 4×4 の行列である。これを求めた関係式に代入すると、左辺右辺はそれぞれ1次までで

$$\Lambda^\nu_\mu \gamma^\mu = \gamma^\nu + \Delta\omega^\nu_\mu \gamma^\mu \quad (2.19)$$

$$S^{-1}(\Lambda) \gamma^\nu S(\Lambda) = \gamma^\nu + \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu - \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu \quad (2.20)$$

となるため、

$$\Delta\omega^\nu_\mu \gamma^\mu = \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] \quad (2.21)$$

が導かれる。これを満たすような $\sigma_{\alpha\beta}$ として

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{i}{2} [\gamma_\alpha, \gamma_\beta] \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) = i(\gamma_\alpha \gamma_\beta - \eta_{\alpha\beta} I) \end{aligned} \quad (2.22)$$

ⁱⁱ 和こそってはいいが、やはりただの数は行列と可換である。もちろん γ^ν と $S(\Lambda)$ は一般に可換とは言えないため、その順番に気をつけるべきである。

ⁱⁱⁱ 上付きのときも同様の関係が成り立つ

がある.^{iv}これを条件式に代入すると,

$$\begin{aligned}
 \frac{i}{4} \Delta \omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] &= -\frac{1}{4} [\gamma_\alpha \gamma_\beta, \gamma^\nu] \\
 &= -\frac{1}{4} \Delta \omega^{\alpha\beta} (\gamma_\alpha \gamma_\beta \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma_\alpha \gamma_\beta) \\
 &= -\frac{1}{4} \Delta \omega^{\alpha\beta} \{ \gamma_\alpha (-\gamma^\nu \gamma_\beta + 2\delta^\nu_\beta I) - (-\gamma_\alpha \gamma^\nu + 2\delta^\nu_\alpha) \gamma_\beta \} \\
 &= -\frac{1}{4} \Delta \omega^{\alpha\beta} 2(\gamma_\alpha \delta^\nu_\beta - \delta^\nu_\alpha \gamma_\beta) \\
 &= -\frac{1}{2} (\Delta \omega^{\alpha\nu} \gamma_\alpha - \Delta \omega^{\nu\beta} \gamma_\beta) \\
 &= \frac{1}{2} (\Delta \omega^{\nu\alpha} \gamma_\alpha + \Delta \omega^{\nu\beta} \gamma_\beta) \\
 &= \Delta \omega^{\nu\alpha} \gamma_\alpha \\
 &= \Delta \omega^\nu_\mu \gamma^\mu
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

となり条件を満たす.^v

以上の結果を踏まえて, 無限小変換から導かれる本義ローレンツ変換の公式は,

$$\begin{aligned}
 x'^\mu &= \Lambda^\mu_\nu x^\nu \\
 \Lambda^\mu_\nu &= \lim_{N \rightarrow \infty} (\delta^\mu_{\mu_1} + \Delta \omega^{\mu}_{\mu_1}) (\delta^{\mu_1}_{\mu_2} + \Delta \omega^{\mu_1}_{\mu_2}) \cdots (\delta^{\mu_{N-1}}_\nu + \Delta \omega^{\mu_{N-1}}_\nu) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\left(I + \frac{\omega}{N} \right)^N \right]^\mu_\nu = (e^\omega)^\mu_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\omega^n}{n!} \right)^\mu_\nu
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

ただし, $\omega^\mu_\nu = \Delta \omega^\mu_\nu / N$ とした. 一方 $\psi(x)$ に関する変換は,

$$\begin{aligned}
 \psi'(x') &= S(\Lambda) \psi(x) \\
 S(\Lambda) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{4} \Delta \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{4} \frac{\omega^{\mu\nu}}{N} \sigma_{\mu\nu} \right)^N \\
 &= \exp \left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right)^n
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

本義ローレンツ変換の下で $\psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x)$ のように変換される量は**ディラックスピノル (Dirac spinor)**と呼ぶ.

2.4 ローレンツ変換の具体例

以下いくつかの具体例を考えていこう.

^{iv} 最後の式変形に, (2.2) を用いた.

^v 式変形の途中で, アインシュタインの省略記法の添え字の変更, $[\eta_{\alpha\beta} I, \gamma^\nu] = 0$ と (2.2) から導かれる以下の関係式を用いた.

$$\begin{aligned}
 \gamma^\alpha \gamma^\beta + \gamma^\beta \gamma^\alpha &= 2\eta^{\alpha\beta} I \\
 \eta_{\mu\beta} \gamma^\alpha \gamma^\beta + \eta_{\mu\beta} \gamma^\beta \gamma^\alpha &= 2\eta_{\mu\beta} \eta^{\alpha\beta} I \\
 \gamma^\alpha \gamma_\mu + \gamma_\mu \gamma^\alpha &= 2\delta^\alpha_\mu I \\
 \gamma_\alpha \gamma^\beta + \gamma^\beta \gamma_\alpha &= 2\delta^\beta_\alpha I
 \end{aligned}$$

最後の変形は添え字を変えただけである.

2.4.1 x 軸方向のローレンツブースト

$\Delta\omega^{01} = -\Delta\omega^{10} = \Delta\beta^1$ ($\Delta\omega^0_1 = \Delta\omega^1_0 = -\Delta\beta^1$) 以外の $\Delta\omega^{\mu\nu}$ が 0 であるような場合を考える。
 $\Delta\beta^1 = \omega/N$ として, $\Delta\omega^\mu{}_\nu$ は,

$$\Delta\omega^\mu{}_\nu = \frac{\omega}{N}(I_L)^\mu{}_\nu, \quad I_L = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

と行列表示される。また,

$$I_L^{2k+1} = I_L, \quad I_L^{2k} = I_L^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

となる。

従って, ローレンツ変換の表示は,

$$\begin{aligned} \Lambda^\mu{}_\nu &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\omega^n}{n!} (I_L^n)^\mu{}_\nu \\ &= \delta^\mu{}_\nu - (I_L^2)^\mu{}_\nu + (I_L^2)^\mu{}_\nu \cosh \omega + (I_L)^\mu{}_\nu \sinh \omega \\ &= \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.28)$$

となる。^{vi} 一方スピノルの変換は,

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}\right) \equiv S(\Lambda)_L \quad (2.29)$$

Dirac 表示では,

$$\sigma_{0i} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^i \\ -i\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

となり, $\sigma_{0i}^\dagger = \sigma_{0i}$ より,

$$\begin{aligned} S(\Lambda)_L^\dagger &= \exp\left(\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}^\dagger\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}\right) = S(\Lambda)_L \end{aligned} \quad (2.31)$$

となるため $S(\Lambda)_L$ は Hermite 行列である。

vi

$$\cosh x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!}, \quad \sinh x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

2.4.2 z 軸周りの空間回転

$\Delta\omega^{12} = -\Delta\omega^{21} = -\Delta\varphi^3$ ($\Delta\omega^1{}_2 = -\Delta\omega^2{}_1 = \Delta\varphi^3$) 以外の $\Delta\omega^{\mu\nu}$ が 0 であるような場合を考える。
 $\Delta\varphi^3 = \varphi/N$ として,

$$\Delta\omega^\mu{}_\nu = \frac{\varphi}{N}(I_R)^\mu{}_\nu, \quad I_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

と表示される。また,

$$\begin{aligned} (I_R^{4k+1})^\mu{}_\nu &= (I_R)^\mu{}_\nu, & (I_R^{4k+2})^\mu{}_\nu &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ (I_R^{4k+3})^\mu{}_\nu &= -(I_R)^\mu{}_\nu, & (I_R^{4k})^\mu{}_\nu &= -(I_R^2)^\mu{}_\nu \end{aligned} \quad (2.33)$$

となる。

従ってローレンツ変換の表示は,

$$\begin{aligned} \Lambda^\mu{}_\nu &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi^n}{n!} (I_R^n)^\mu{}_\nu \\ &= \delta^\mu{}_\nu + (I_R^2)^\mu{}_\nu - (I_R^2)^\mu{}_\nu \cos \varphi + (I_R)^\mu{}_\nu \sin \varphi \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.34)$$

となる。これが z 軸周りの角度 φ の空間回転を表していることは明白だろう。^{vii}

スピノルの変換は,

$$S(\Lambda) = \exp\left(\frac{i}{2}\varphi\sigma_{12}\right) \equiv S(\varphi)_R \quad (2.35)$$

Dirac 表示では,

$$\sigma_{12} = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} = \Sigma^3, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

である。

このような $S(\varphi)_R$ の性質として,

$$S(0)_R = I, \quad S(2\pi)_R = -I \quad (2.37)$$

となるため、波動関数の変換性は次のようになる。

$$\psi'(\phi + 2\pi) = S(2\pi)_R \psi(\phi) = -\psi(\phi), \quad \psi'(\phi + 4\pi) = \psi(\phi) \quad (2.38)$$

^{vii} 座標軸を φ 回転させるのは、点が $-\varphi$ 回転移動することと同じである。

従って波動関数は 4π 回転で元に戻る.^{viii}

一般の空間回転については,

$$\boldsymbol{\Sigma} = (\Sigma^1, \Sigma^2, \Sigma^3), \quad \Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

を用いると, $\mathbf{s}$ 方向を軸とする角度 φ の空間回転を起こす演算子は,

$$S(\varphi)_R = \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\varphi} \cdot \boldsymbol{\Sigma}\right) = \exp\left(i\boldsymbol{\varphi} \cdot \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{2}\right) \quad (2.40)$$

と表される. これより, 回転の生成子が $\boldsymbol{\Sigma}/2$ であり, 上下2成分に対する回転の生成子は $\boldsymbol{\sigma}/2$ で, 電子のスピンが $1/2$ である事実と合致する. また, $\boldsymbol{\Sigma}$ は Hermite 行列であるため,

$$S(\varphi)_R^\dagger = \exp\left(-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \frac{\boldsymbol{\Sigma}^\dagger}{2}\right) = \exp\left(-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{2}\right) = S^{-1}(\varphi)_R \quad (2.41)$$

となるため, $S(\varphi)_R$ は Unitary 行列である.

2.5 4 元確率流密度のローレンツ変換性

以上をまとめると, 無限小の速度 $\Delta\mathbf{v} = (\Delta v^1, \Delta v^2, \Delta v^3)$ によるローレンツブーストに対しては $\Delta\omega^{0i} = \Delta v^i/c$ である. また, 単位ベクトル $\mathbf{s} = (s^1, s^2, s^3)$ を軸とする無限小回転 $\Delta\varphi$ に対しては $\Delta\omega^{ij} = -\sum_{k=1}^3 \Delta\varphi \epsilon^{ijk} s^k$ である.

一般の本義ローレンツ変換は, ローレンツブーストと空間回転の合成で得られる. γ^0 と $\sigma_{\mu\nu}$ の間には,

$$\begin{aligned} \gamma_0 \sigma_{0i} \gamma_0 &= \frac{i}{2} \gamma_0 [\gamma_0, \gamma_i] \gamma_0 \\ &= \frac{i}{2} \gamma_0 (\gamma_0 \gamma_i - \gamma_i \gamma_0) \gamma_0 \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_0 \gamma_0 \gamma_i \gamma_0 - \gamma_0 \gamma_i \gamma_0 \gamma_0) \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_i \gamma_0 - \gamma_0 \gamma_i) \\ &= -\frac{i}{2} [\gamma_0, \gamma_i] \\ &= -\sigma_{0i} \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \gamma_0 \sigma_{ij} \gamma_0 &= \frac{i}{2} \gamma_0 (\gamma_i \gamma_j - \gamma_j \gamma_i) \gamma_0 \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_0 \gamma_i \gamma_j \gamma_0 - \gamma_0 \gamma_j \gamma_i \gamma_0) \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_i \gamma_0 \gamma_0 \gamma_j - \gamma_j \gamma_0 \gamma_0 \gamma_i) \\ &= \frac{i}{2} (\gamma_i \gamma_j - \gamma_j \gamma_i) \\ &= \sigma_{ij} \end{aligned} \quad (2.43)$$

^{viii} 電子のスピンが $1/2$ であることに関係する.

が成り立つ。これを用いると,

$$\begin{aligned}
 \gamma_0 S(\Lambda)^\dagger \gamma_0 &= \gamma_0 \exp\left(\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}^\dagger\right) \gamma_0 \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \gamma_0 \left(\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}^\dagger\right)^n \gamma_0 \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{4} \gamma_0 \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}^\dagger \gamma_0\right)^n \\
 &= \exp\left(\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \gamma_0 \sigma_{\mu\nu}^\dagger \gamma_0\right) \\
 &= \exp\left(\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}\right) \\
 &= S^{-1}(\Lambda)
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

となる.^{ix}

ここで,

$$\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x) \gamma_0 \tag{2.45}$$

をディラック共役 (Dirac adjoint) と定義する.

$\bar{\psi}(x)$ はローレンツ変換の下,

$$\begin{aligned}
 \bar{\psi}'(x') &= \psi'^\dagger(x') \gamma_0 \\
 &= \psi^\dagger(x) S(\Lambda)^\dagger \gamma_0 \\
 &= \psi^\dagger(x) \gamma_0 \gamma_0 S(\Lambda)^\dagger \gamma_0 \\
 &= \psi^\dagger(x) \gamma_0 S(\Lambda)^{-1} \\
 &= \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda)
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

と変換される。これより,

$$\bar{\psi}'(x') \psi'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) S(\Lambda) \psi(x) = \bar{\psi}(x) \psi(x) \tag{2.47}$$

となり, $\bar{\psi}(x) \psi(x)$ はスカラー量である.

次に $\bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x)$ はローレンツ変換で,

$$\begin{aligned}
 \bar{\psi}'(x') \gamma^\mu \psi'(x') &= \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) \gamma^\mu S(\Lambda) \psi(x) \\
 &= \bar{\psi}(x) \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \psi(x) \\
 &= \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi}(x) \gamma^\nu \psi(x)
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

^{ix} 途中で $\sigma_{0i}^\dagger = -\sigma_{0i}$, $\sigma_{ij}^\dagger = \sigma_{ij}$ から導かれる次式を用いた.

$$\begin{aligned}
 \gamma_0 \sigma_{0i}^\dagger \gamma_0 &= \sigma_{0i} \\
 \gamma_0 \sigma_{ij}^\dagger \gamma_0 &= \sigma_{ij}
 \end{aligned}$$

となるため、ベクトル量である。また、 $\alpha^i = \gamma^0 \gamma^i$ であるため、

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) &= (\psi^\dagger(x)\gamma_0\gamma^0\psi(x), \psi^\dagger(x)\gamma_0\gamma^i\psi(x)) \\ &= (\psi^\dagger(x)\psi(x), \psi^\dagger(x)\alpha^i\psi(x))\end{aligned}\tag{2.49}$$

であるため、4 元確率流密度は $j^\mu = c\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ が導かれる。

2.6 空間反転

ローレンツ変換に含まれる変換は本義ローレンツ変換以外にも**空間反転**がある。空間反転は次のように与えられる。

$$\mathbf{r}' = -\mathbf{r}, \quad t' = t\tag{2.50}$$

すなわち

$$x'^\mu = (\Lambda_S)^\mu{}_\nu x^\nu, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{2.51}$$

となる。空間反転での $\psi(x)$ の変換性を

$$\psi'(x') = P\psi(x)\tag{2.52}$$

とすると、本義ローレンツ変換のときと同様にして

$$\left[i\hbar P\gamma^\mu P^{-1}(\Lambda_S)^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - m_e c \right] \psi'(x') = 0\tag{2.53}$$

これより、

$$P\gamma^\mu P^{-1}(\Lambda_S)^\nu{}_\mu = \gamma^\nu, \quad (\Lambda_S)^\nu{}_\mu \gamma^\mu = P^{-1}\gamma^\nu P\tag{2.54}$$

このような条件を満たす P は

$$P = \eta_P \gamma^0\tag{2.55}$$

ただし η_P は位相因子で $\eta_P = e^{i\varphi_P}$ で、 P は Unitary 行列となる。

Dirac 表示では γ^0 は対角行列であるため、 $\psi(x)$ は P の固有状態となっている。静止した正エネルギー解は固有値 $P = \eta_P$ の固有状態、負エネルギー解は固有値 $P = -\eta_P$ の固有状態となっている。ここで、 P の固有値は**固有パリティ**と呼ばれる。また、空間反転は2回作用させると $(\Lambda_S)^\mu{}_\lambda (\Lambda_S)^\lambda{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu$ と元に戻るべきであるため、 $P^2 = I$ となるべきである。従って固有パリティは ± 1 に限られる。

$\bar{\psi}(x)$ 空間反転で、

$$\bar{\psi}'(x') = \psi'^\dagger(x')\gamma_0 = \psi^\dagger(x)P^\dagger\gamma_0 = \psi^\dagger\gamma_0 P^\dagger = \psi^\dagger\gamma_0 P^{-1} = \bar{\psi}(x)P^{-1}\tag{2.56}$$

従って $\bar{\psi}(x)\psi(x)$ は空間反転で不変である。一方 $\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ は

$$\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \bar{\psi}(x)P^{-1}\gamma^\mu P\psi(x) = (\Lambda_S)^\mu{}_\nu \bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x)\tag{2.57}$$

と変換される。

以上から、Dirac 方程式は本義ローレンツ変換と空間反転の下で共変性があることがわかった。

第 3 章

γ 行列に関する基本定理, Chiral 表示

3.1 γ 行列に関する基本定理

4×4 行列の単位行列 I と γ 行列から構成される以下の 5 種類 16 個の 4×4 行列

$$\begin{aligned} \Gamma_S &= I, & \Gamma_V^\mu &= \gamma^\mu, & \Gamma_T^{\mu\nu} &= \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \\ \Gamma_P &= i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma_5, & \Gamma_A^\mu &= \gamma_5\gamma^\mu \end{aligned} \quad (3.1)$$

について考察する. これらをまとめて $\Gamma_n = \{\Gamma_S, \Gamma_V^\mu, \Gamma_T^{\mu\nu}, \Gamma_P, \Gamma_A^\mu\}$ と表記する. Γ_n^2 は I か $-I$ となる. これらを統一した方が扱いが良いため, $-I$ となるものについては i をかけてこれらをまとめて $\tilde{\Gamma}_n$ とする. 具体的には,

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_1 &= \Gamma_S = I, & \tilde{\Gamma}_2 &= \Gamma_V^0 = \gamma^0, & \tilde{\Gamma}_3 &= i\Gamma_V^1 = i\gamma^1, & \tilde{\Gamma}_4 &= i\Gamma_V^2 = i\gamma^2 \\ \tilde{\Gamma}_5 &= i\Gamma_V^3 = i\gamma^3, & \tilde{\Gamma}_6 &= i\Gamma_T^{01} = -\gamma^0\gamma^1, & \tilde{\Gamma}_7 &= i\Gamma_T^{02} = -\gamma^0\gamma^2, & \tilde{\Gamma}_8 &= i\Gamma_T^{03} = -\gamma^0\gamma^3 \\ \tilde{\Gamma}_9 &= \Gamma_T^{12} = i\gamma^1\gamma^2, & \tilde{\Gamma}_{10} &= \Gamma_T^{23} = i\gamma^2\gamma^3, & \tilde{\Gamma}_{11} &= \Gamma_T^{31} = i\gamma^3\gamma^1, & \tilde{\Gamma}_{12} &= \Gamma_P = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \\ \tilde{\Gamma}_{13} &= i\Gamma_A^0 = \gamma^1\gamma^2\gamma^3, & \tilde{\Gamma}_{14} &= \Gamma_A^1 = -i\gamma^0\gamma^2\gamma^3, & \tilde{\Gamma}_{15} &= \Gamma_A^2 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^3, & \tilde{\Gamma}_{16} &= \Gamma_A^3 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

である.

一般に, $\tilde{\Gamma}_n$ には次のような性質がある.

- (1) 全ての n に対して $(\tilde{\Gamma}_n)^2 = I$ である.
- (2) 任意の $\tilde{\Gamma}_n, \tilde{\Gamma}_m$ に対して, $\tilde{\Gamma}_n\tilde{\Gamma}_m = \xi_{nm}\tilde{\Gamma}_l$ となるような $\tilde{\Gamma}_l$ が存在する. ここで ξ_{nm} は $\pm 1, \pm i$ のいずれかである. また, $n \neq m$ のときは $\tilde{\Gamma}_l \neq \tilde{\Gamma}_1 = I$ である. さらに, n を固定して m を 1 から 16 まで走らせると, l は 1 から 16 まで一度ずつとる.
- (3) $\tilde{\Gamma}_n$ と $\tilde{\Gamma}_m$ は可換か反可換のいずれかである.
- (4) $\tilde{\Gamma}_1$ を除く $\tilde{\Gamma}_n$ について, 反可換な $\tilde{\Gamma}_m$ が少なくとも 1 つ存在する.
- (5) $\tilde{\Gamma}_1$ を除く $\tilde{\Gamma}_n$ のトレースは 0 である.
- (6) $\tilde{\Gamma}_n$ は 1 次独立である.
- (7) $\tilde{\Gamma}_n$ は 4×4 行列を生成する.
- (8) 全ての γ^μ と可換な行列は単位行列の定数倍に限る.

また, 以下に示す定理が成り立つ.

γ 行列に関する基本定理

反交換関係

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad \{\gamma'^\mu, \gamma'^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \quad (3.3)$$

を満たす2種類の γ 行列 $\{\gamma^\mu\}$ と $\{\gamma'^\mu\}$ は 4×4 の正則行列 S による相似変換

$$\gamma'^\mu = S\gamma^\mu S^{-1} \quad (3.4)$$

によって結ばれる。ただし S は定数倍の任意性を除き一意に定まる。

また、上記の条件に加えて $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i$ が成り立つならば、 S は Unitary 行列に選べる。従ってこの場合には $\{\gamma^\mu\}$ と $\{\gamma'^\mu\}$ は 4×4 は Unitary 同値となる。

3.2 双一次形式のローレンツ共変量

$\Gamma_n = \{\Gamma_S, \Gamma_V^\mu, \Gamma_T^{\mu\nu}, \Gamma_P, \Gamma_A^\mu\}$ を $\bar{\psi}(x)$ と $\psi(x)$ で挟むことでローレンツ共変量を構成することができる。

前に考察したように $\bar{\psi}(x)$ と $\psi(x)$ は本義ローレンツ変換の下、

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x) \exp\left(\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right), \quad \psi'(x') = \exp\left(-\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right)\psi(x) \quad (3.5)$$

空間反転の下、

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)P^{-1}, \quad \psi'(x') = P\psi(x) \quad (3.6)$$

と変換される。これらを用いて次に挙げるようなローレンツ共変量のローレンツ変換性を理解出来る。

- (1) スカラー: $\bar{\psi}(x)\psi(x)$
- (2) ベクトル: $\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$
- (3) 2 階テンソル: $\bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi(x)$
 $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ であることを用いれば

$$\bar{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x') = \Lambda^\mu{}_\alpha\Lambda^\nu{}_\beta\bar{\psi}(x)\sigma^{\alpha\beta}\psi(x) \quad (3.7)$$

と変換されることが示される。

- (4) 擬スカラー: $\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$ (本義ローレンツ変換で不変, 空間反転で符号が変化)
 γ_5 の定義と γ 行列の反交換性から,

$$\exp\left(\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right)\gamma_5\exp\left(-\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right) = \gamma_5 \quad (3.8)$$

$$P^{-1}\gamma_5P = -\gamma_5 \quad (3.9)$$

が示される。また、ローレンツ変換が空間反転を含むと $\text{div}A = -1$ となるため、

$$\bar{\psi}'(x')\gamma_5\psi'(x') = \text{div}A\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x) \quad (3.10)$$

と変換される。

- (5) 擬ベクトル: $\bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\mu\psi(x)$ (本義ローレンツ変換の下ベクトル変換性, 空間反転の下符号が変化)

擬スカラーの時と同様に考えることで,

$$\exp\left(\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right)\gamma_5\gamma^\mu\exp\left(-\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right) = \Lambda^\mu{}_\nu\gamma_5\gamma^\mu \quad (3.11)$$

$$P^{-1}\gamma_5\gamma^\mu P = -(\Lambda_S)^\mu{}_\nu\gamma_5\gamma^\mu \quad (3.12)$$

が成り立つことから,

$$\bar{\psi}'(x')\gamma_5\gamma^\mu\psi'(x') = \text{div}\Lambda \cdot \Lambda^\mu{}_\nu\bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\mu\gamma^\nu\psi(x) \quad (3.13)$$

と変換される.

3.3 Chiral 表示

Chiral 表示 (chiral representaton)(または Weyl 表示)ⁱ

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \bar{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^\mu \equiv (I, \boldsymbol{\sigma}), \quad \bar{\sigma}^\mu \equiv (I, -\boldsymbol{\sigma}) \quad (3.14)$$

を用いると, 質量 m の自由粒子に関する Dirac 方程式は,

$$\begin{pmatrix} -mc & i\hbar\sigma^\mu\partial_\mu \\ i\hbar\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu & -mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi(x) \\ \eta(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

より詳細に書くと,

$$i\hbar\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\xi(x) - mc\eta(x) = 0 \quad (3.16)$$

$$i\hbar\sigma^\mu\partial_\mu\eta(x) - mc\xi(x) = 0 \quad (3.17)$$

と $\xi(x)$ と $\eta(x)$ に関する連立微分方程式が得られる. ここで, $\xi(x)$ と $\eta(x)$ はそれぞれ $\psi(x)$ の上 2 成分と下 2 成分を表している.

Chiral 表示を用いて具体的に $\sigma_{\mu\nu}$ を計算すると,

$$\begin{aligned} \sigma_{0i} &= i\gamma_0\gamma_i = -i\gamma^0\gamma^i \\ &= -i\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} i\sigma^i & 0 \\ 0 & -i\sigma^i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.18)$$

ⁱ 日本語ではカイラルとかキラルとか読まれる. 物理ではカイラルと呼ばれることが多いが, 化学では慣習的にキラルと呼ぶらしい.

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} &= i\gamma_i\gamma_j = i\gamma^i\gamma^j \\
&= i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \\
&= i \begin{pmatrix} -\sigma^i\sigma^j & 0 \\ 0 & -\sigma^i\sigma^j \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \sigma^k \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

となる. ローレンツブーストのパラメータ $\omega = (\omega^{01}, \omega^{02}, \omega^{03})$, 空間回転のパラメータ $\varphi = (\varphi^1, \varphi^2, \varphi^3) = (-\omega^{23}, -\omega^{31}, -\omega^{12})$ $\left(\varphi^k = -\sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} \omega^{ij} \right)$ を用いると, 本義ローレンツ変換の下での $\psi(x)$ に関する変換行列は,

$$\begin{aligned}
S(\Lambda) &= \exp\left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}\right) \\
&= \begin{pmatrix} \exp\left(i\varphi \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} + \omega \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(i\varphi \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} - \omega \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

と表され, 表現空間が既約分解される. これにより, $\xi(x)$ と $\eta(x)$ は本義ローレンツ変換性が異なる.

ここで, $\xi(x)$ と $\eta(x)$ はどちらも **ワイルフェルミオン (ワイルスピノル)** または **カイラルフェルミオン, ファンデルウェルデンスピノル (van der Waerden spinor)** と呼ばれる基本量である. また, 空間反転 $P = \eta_0\gamma_0$ によって $\xi(x), \eta(x)$ が入れ替わるため, 空間反転まで含めた変換に関しては $\psi(x)$ が既約である. $\psi(x)$ は **ディラックスピノル (Dirac spinor)** と呼ぶ.

(3.15) から, 質量 0 の場合には $\xi(x)$ と $\eta(x)$ は独立に振舞い, **Weyl 方程式** に従う. $\xi(x)$ が従う Weyl 方程式は,

$$i\hbar\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\xi(x) = 0 \tag{3.21}$$

である. (3.21) に従うワイルフェルミオンは, **ヘリシティ (helicity)** の固有状態でもある. helicity は

$$\hat{\lambda} \equiv \mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \tag{3.22}$$

で与えられる. ここで $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ である. 質量 0 の場合, $p_0 = |\mathbf{p}|$ が成り立つため,

$$i\hbar\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu \Rightarrow \bar{\sigma}^\mu p_\mu = p_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \frac{2p_0}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \right) \tag{3.23}$$

となるため, (3.21) に代入することで

$$\begin{aligned}
\frac{2p_0}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \right) \xi(x) &= 0 \\
\frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \xi(x) &= -\frac{\hbar}{2} \xi(x)
\end{aligned} \tag{3.24}$$

となることから, helicity の固有値は $-\hbar/2$ である. helicity の定義から物理的意味はスピンの運動方向への射影と考えられる. 従ってこの状態はスピンの方向と運動の方向が反平行ということになる. この状態を**左巻きの状態**と呼ぶ.

質量 0 の粒子は真空中を光速で運動するため、ローレンツブーストで粒子の運動方向が反転して見える慣性系に移ることはできない。従って、ワイルフェルミオンのヘリシティは本義ローレンツ変換の下不変である。一方左巻きの状態に対し空間反転を施すとスピンと運動方向が平行な**右巻きの状態**へと移る.ⁱⁱ従って、ワイルフェルミオンが単体で存在する場合には空間反転での不変性は成立しない。

右巻きの状態 $\eta(x)$ が従う Weyl 方程式は,

$$i\hbar\sigma^\mu\partial_\mu\eta(x) = 0 \quad (3.25)$$

である。

$\gamma_5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ は**カイラリティ (chirality)** とよび、Chiral 表現では

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} -I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

となる。カイラリティは次に定義される状態 ψ_L と ψ_R のそれぞれ固有値 -1, 1 の固有状態である。

$$\psi_L \equiv \frac{1 - \gamma_5}{2}\psi = \begin{pmatrix} \xi(x) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

$$\psi_R \equiv \frac{1 + \gamma_5}{2}\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta(x) \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

以上から、質量 0 の粒子についてはヘリシティとカイラリティの固有状態は同一である。

ⁱⁱ 運動量はベクトルだがスピンは擬ベクトルであるため、ヘリシティは擬スカラーである。

第 4 章

Dirac 方程式の解

4.1 Dirac 方程式の再導出

静止した自由粒子解にローレンツブーストを施すことで、Dirac 方程式を再導出する。静止した質量 m 、スピン $1/2$ の自由粒子は $E = mc^2$ のエネルギーを持つため、 $u^r(0) \exp(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t)$ で記述される。ただし $u^r(0)$ ($r = 1, 2$) は 2 成分波動関数で、

$$u^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

とする。これらはそれぞれスピンの z 成分 S_z の固有状態で、固有値 $\hbar/2, -\hbar/2$ を持つ。

これに負エネルギー解を加えることで S_z の固有状態を 4 つ構成でき、

$$\psi^s(x) = w^s(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_s mc^2 t\right) \quad (4.2)$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1, \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = -1 \quad (4.3)$$

$$w^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^4(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

とする。このうち $s = 3, 4$ の下 2 成分が負エネルギー状態を表し、それぞれ S_z の固有値 $\hbar/2, -\hbar/2$ の固有状態である。また、 $w^s(0)$ の従う方程式は

$$\gamma_0 w^s(0) = \varepsilon_s w^s(0), \quad \gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

である。以降は Dirac 表示を用いる。

粒子が静止して見える慣性系 I_0 (座標を x_0^μ) に対して、速度 $-\mathbf{v}$ で等速直線運動する慣性系 I (座標を x^μ) に基づき粒子の運動を考える。I から見ると粒子は速度 $\mathbf{v} = v\mathbf{n}$ で運動している。ここで $\mathbf{n}$ は粒子の運動方向を表す単位ベクトルである。

ローレンツブーストにより、固有状態は

$$\psi^s(x) = w^s(\mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_s p_\mu x^\mu\right), \quad w^s(\mathbf{p}) = S(\Lambda) w^s(0) \quad (4.6)$$

と変換される。ここで、 $S(\Lambda)$ はスピノルの変換行列で、 p_μ の関数である。従って、 $\psi^s(x)$ の従う方程式を求めれば良いといえる。

(4.5) の両辺に左から $S(\Lambda)$ を作用させて,

$$S(\Lambda)\gamma_0 S^{-1}(\Lambda)S(\Lambda)w^s(0) = \varepsilon_s S(\Lambda)w^s(0) \quad (4.7)$$

$$\Gamma(p_\mu)w^s(\mathbf{p}) = \varepsilon_s w^s(\mathbf{p}) \quad (4.8)$$

と, $w^s(\mathbf{p})$ の従う方程式が表示できる. ただし $\Gamma(p_\mu) = S(\Lambda)\gamma_0 S^{-1}(\Lambda)$ とした. $\hat{p}_\mu = i\hbar\partial_\mu$ であることを用いると $\psi^s(x)$ の従う方程式は,

$$[\Gamma(\varepsilon_s i\hbar\partial_\mu) - \varepsilon_s]\psi^s(x) = 0 \quad (4.9)$$

以上から, $\Gamma(p_\mu)$ の具体的な形を求めていくことが目標となる.

ローレンツブーストのパラメータを $\boldsymbol{\omega} = \omega\mathbf{n} = (\omega^{01}, \omega^{02}, \omega^{03})$ とすると, σ_{0i} は,

$$\omega_{0i} = i\gamma_0\gamma_i = i\alpha_i = -i\alpha^i \quad (4.10)$$

であるため,

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^3\omega^{0i}\alpha^i\right) = e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\alpha}} = e^{-\frac{\omega}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}} \quad (4.11)$$

となる. また, ω と $\beta \equiv v/c$ の間の関係として, 慣性系 I_0 から I へは速度 $-\mathbf{v}$ のローレンツブーストで移ることに気をつけると,

$$\tanh\omega = -\beta, \quad \cosh\omega = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \sinh\omega = -\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (4.12)$$

が成り立つ.

以上から,

$$\begin{aligned} (\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha})^2 &= (n^1\alpha^1 + n^2\alpha^2 + n^3\alpha^3)^2 \\ &= (n^1)^2(\alpha^1)^2 + (n^2)^2(\alpha^2)^2 + (n^3)^2(\alpha^3)^2 \\ &\quad + n^1n^2(\alpha^1\alpha^2 + \alpha^2\alpha^1) + n^2n^3(\alpha^2\alpha^3 + \alpha^3\alpha^2) + n^3n^1(\alpha^3\alpha^1 + \alpha^1\alpha^3) \\ &= I \end{aligned} \quad (4.13)$$

であることを用いて,

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= e^{-\frac{\omega}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}} = \cosh\frac{\omega}{2} - \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}\sinh\frac{\omega}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh\frac{\omega}{2} & -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\frac{\omega}{2} \\ -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\frac{\omega}{2} & \cosh\frac{\omega}{2} \end{pmatrix} \\ &= \cosh\frac{\omega}{2} \begin{pmatrix} I & -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\frac{\omega}{2} \\ -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\frac{\omega}{2} & I \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} I & \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} \\ \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} & I \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.14)$$

ここで, $E > 0$ として,

$$\begin{aligned}
 \tanh \frac{\omega}{2} &= \frac{e^{\frac{\omega}{2}} - e^{-\frac{\omega}{2}}}{e^{\frac{\omega}{2}} + e^{-\frac{\omega}{2}}} \\
 &= \frac{e^{\omega} - e^{-\omega}}{(e^{\frac{\omega}{2}} + e^{-\frac{\omega}{2}})^2} \\
 &= \frac{e^{\omega} - e^{-\omega}}{e^{\omega} + e^{-\omega} + 2} \\
 &= \frac{\sinh \omega}{\cosh \omega + 1} \\
 &= \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \\
 &= \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} + 1} \\
 &= \frac{-\frac{mc^2\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}}{\frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + mc^2} \\
 &= \frac{-pc}{E + mc^2}
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

$$\begin{aligned}
 1 - \tanh^2 \frac{\omega}{2} &= 1 - \left(\frac{-pc}{E + mc^2} \right)^2 \\
 &= \frac{(E + mc^2)^2 - p^2 c^2}{(E + mc^2)^2} \\
 &= \frac{2mc^2}{E + mc^2} \\
 \cosh \frac{\omega}{2} &= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}}
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

を用いた. 一方,

$$S^{-1}(\Lambda) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} I & -\frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} \\ -\frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} & I \end{pmatrix} \tag{4.17}$$

である.

以上から, $S(\Lambda)\gamma_0 S^{-1}(\Lambda)$ は,

$$\begin{aligned}
 &S(\Lambda)\gamma_0 S^{-1}(\Lambda) \\
 &= \frac{E + mc^2}{2mc^2} \begin{pmatrix} I & \frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} \\ \frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -\frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} \\ -\frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} & I \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{mc^2} \begin{pmatrix} E & -c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -E \end{pmatrix} = \frac{1}{mc} \gamma^\mu p_\mu = \frac{1}{mc} \not{p}
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

と表される. $p_\mu = (E/c, -\mathbf{p})$, γ^ν は Dirac 表示を用いている.ⁱ

ⁱ γ^μ と a_μ の内積を $\gamma^\mu a_\mu = \not{a}$ と表記し, Feynman のスラッシュ記法と呼ばれる.

従って, $w^s(\mathbf{p})$ の従う方程式は,

$$(\not{p} - \varepsilon_s mc)w^s(\mathbf{p}) = 0, \quad (\varepsilon_s \not{p} - mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (4.19)$$

これより, $\psi^s(x) = w^s(\mathbf{p})e^{-i\varepsilon_s p_\mu x^\mu / \hbar}$ の従う方程式は,

$$(i\hbar \not{\partial} - mc)\psi(x) = 0 \quad (4.20)$$

となり, 自由粒子に関する Dirac 方程式が導かれる.

4.2 自由粒子解の性質

$w^s(\mathbf{p}), w^{s\dagger}(\mathbf{p}), \bar{w}^s(\mathbf{p}) \equiv w^{s\dagger}(\mathbf{p})\gamma_0 = w^{s\dagger}(0)S^\dagger(\Lambda)\gamma_0 = w^{s\dagger}(0)\gamma_0\gamma_0 S^\dagger(\Lambda)\gamma_0 = \bar{w}^s(0)S^{-1}(\Lambda)$ は次に挙げるような性質が成り立つ.

1. 運動量空間における Dirac 方程式

$$(\not{p} - \varepsilon_s mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (4.21)$$

この両辺の Hermite 共役を取り, 右から γ_0 をかけると,

$$\begin{aligned} w^{s\dagger}(\mathbf{p})((\gamma^\mu)^\dagger p_\mu - \varepsilon_s mc)\gamma_0 &= 0 \\ w^{s\dagger}(\mathbf{p})(\gamma^0 p_0 + \gamma^i p_i - \varepsilon_s mc)\gamma_0 &= 0 \\ w^{s\dagger}(\mathbf{p})\gamma_0(\gamma^\mu p_\mu - \varepsilon_s mc) &= 0 \\ \bar{w}^s(\mathbf{p})(\not{p} - \varepsilon_s mc) &= 0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

が導かれる.

2. 直交性と規格化条件

$$\begin{aligned} \bar{w}^s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p}) &= \bar{w}^s(0)S^{-1}(\Lambda)S(\Lambda)w^{s'}(0) \\ &= \bar{w}^s(0)w^{s'}(0) \\ &= w^{s\dagger}(0)\gamma_0 w^{s'}(0) = \varepsilon_s \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (4.23)$$

となるため, $\bar{w}^s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p})$ はローレンツ不変量であり,

$$\bar{w}^s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p}) = \varepsilon_s \delta_{ss'} \quad (4.24)$$

となる.

3. 完全性

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^4 \varepsilon_s w_\alpha^s(\mathbf{p})\bar{w}_\beta^s(\mathbf{p}) &= \sum_{s=1}^4 \sum_{\alpha', \beta'} \varepsilon_s S(\Lambda)_{\alpha\alpha'} w_{\alpha'}^s(\mathbf{0})\bar{w}_{\beta'}^s(\mathbf{0})S^{-1}(\Lambda)_{\beta\beta'} \\ &= \sum_{\alpha', \beta'} S(\Lambda)_{\alpha\alpha'} \delta_{\alpha'\beta'} S^{-1}(\Lambda)_{\beta\beta'} \\ &= \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (4.25)$$

より,

$$\sum_{s=1}^4 \varepsilon_s w_\alpha^s(\mathbf{p}) \bar{w}_\beta^s(\mathbf{p}) = \delta_{\alpha\beta} \quad (4.26)$$

と完全性条件が成り立つ.

4. 確率密度に関する関係式運動量空間における Dirac 方程式から,

$$\begin{aligned} \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \gamma_0 (\tilde{\not{p}}' - \varepsilon_{s'} mc) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) &= 0 \\ \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{\gamma_0 \tilde{\not{p}}'}{\varepsilon_{s'} mc} w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \gamma_0 w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) (\tilde{\not{p}} - \varepsilon_s mc) \gamma_0 w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) &= 0 \\ \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{\tilde{\not{p}} \gamma_0}{\varepsilon_s mc} w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \gamma_0 w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (4.28)$$

が成り立つ. ただし, $\tilde{p}^\mu \equiv (p^0, \varepsilon_s \mathbf{p})$, $\tilde{p}'^\mu \equiv (p^0, \varepsilon_{s'} \mathbf{p})$ とした. これより,

$$\begin{aligned} w^{s\dagger}(\varepsilon_s \mathbf{p}) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) &= \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \gamma_0 w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \\ &= \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\not{p}} \gamma_0}{\varepsilon_s mc} + \frac{\gamma_0 \tilde{\not{p}}'}{\varepsilon_{s'} mc} \right) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \\ &= \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma_\mu \tilde{p}^\mu \gamma_0}{\varepsilon_s mc} + \frac{\gamma_0 \gamma_\mu \tilde{p}'^\mu}{\varepsilon_{s'} mc} \right) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \\ &= \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma_0 \gamma_0 p_0}{\varepsilon_s mc} + \sum_{i=1}^3 \frac{\gamma_i \gamma_0 p^i}{mc} + \frac{\gamma_0 \gamma_0 p^0}{\varepsilon_{s'} mc} - \sum_{i=1}^3 \frac{\gamma_0 \gamma_i p^i}{mc} \right) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \\ &= \bar{w}^s(\varepsilon_s \mathbf{p}) \frac{1}{2} \frac{(\varepsilon_s + \varepsilon_{s'}) p^0}{mc} w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) \\ &= \frac{E}{mc^2} \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (4.29)$$

より,

$$w^{s\dagger}(\varepsilon_s \mathbf{p}) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) = \frac{E}{mc^2} \delta_{ss'} \quad (4.30)$$

4.3 スピン状態

次にスピンについて考えよう. 静止系でスピンの“向き”が $\mathbf{s}$ の方向に向いた状態 w は, $\boldsymbol{\Sigma}$ を用いて

$$(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) w = w \quad (4.31)$$

として定義される. $\mathbf{s}$ はスピン状態ⁱⁱを指定する単位ベクトルである. $\mathbf{s}$ 方向を軸とする角度 φ の回転を引き起こす演算子は $S(\varphi)_R = \exp(i\varphi \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma}/2)$ である.

4 元運動量 p^μ , スピン状態 s^μ を有する正エネルギー解のディラックスピノルを $u(p, s)$ と表記する. $u(p, s)$ は方程式 $(\not{p} - mc)u(p, s) = 0$ を満たす.

ⁱⁱ スピンそのものではないことに注意.

静止系で $p_0^\mu = (mc, \mathbf{0})$ であり, スピン状態は $s_0^\mu = (0, \mathbf{s})$ であり,

$$(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma})u(p_0, s_0) = u(p_0, s_0) \quad (4.32)$$

を満たす. 任意の慣性系は静止系からローレンツ変換で移ることができるため, $p^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu p_0^\nu$, $s^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu s_0^\nu$ が成り立つ. また, $p^\mu p_\mu = p_0^\mu p_{0\mu} = m^2 c^2$, $s^\mu s_\mu = s_0^\mu s_{0\mu} = -1$, $p^\mu s_\mu = p_0^\mu s_{0\mu} = 0$ が成り立つ.

同様に負エネルギー解を $v(p, s)$ と表記する. $v(p, s)$ は方程式 $(\not{p} + mc)v(p, s) = 0$ を満たす. スピン状態については

$$(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma})v(p, s) = -v(p, s) \quad (4.33)$$

が成り立つとする.ⁱⁱⁱ

$w^s(\mathbf{p})$ と $u(p, s), v(p, s)$ の間には,

$$w^1(\mathbf{p}) = u(p, u_z), \quad w^2(\mathbf{p}) = u(p, -u_z) \quad (4.34)$$

$$w^3(\mathbf{p}) = v(p, -u_z), \quad w^4(\mathbf{p}) = v(p, u_z) \quad (4.35)$$

が成り立つ.^{iv}

4.4 エネルギーとスピンの射影演算子

自由粒子の状態は p^μ, s^μ によって指定できる. ローレンツ共変性を保ったまま, 任意の状態から状態 $w^s(\mathbf{p})$ を取り出す操作, 射影演算子を考えよう. 射影演算子 $P_s(\mathbf{p}) \equiv P_s(p, u_z, \varepsilon)$ は,

$$P_s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p}) = \delta_{ss'}w^s(\mathbf{p}), \quad P_s(\mathbf{p})P_{s'}(\mathbf{p}) = \delta_{ss'}P_s(\mathbf{p}) \quad (4.36)$$

を満たす. また, エネルギーとスピンは独立な量であるため, $P_s(\mathbf{p})$ はエネルギーに関する射影演算子と, スピンに関する射影演算子の積になっていると考えられる.

運動量空間における Dirac 方程式から, 正エネルギー解は $\not{p}w^s(\mathbf{p}) = mcw^s(\mathbf{p})$, 負エネルギー解は $-\not{p}w^s(\mathbf{p}) = mcw^s(\mathbf{p})$ を満たす. 従って,

$$\left. \begin{aligned} \frac{\not{p} + mc}{2mc}w^s(\mathbf{p}) &= w^s(\mathbf{p}) & (s = 1, 2) \\ \frac{-\not{p} + mc}{2mc}w^s(\mathbf{p}) &= w^s(\mathbf{p}) & (s = 3, 4) \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

が成り立つため, 正 (負) エネルギー解を取り出す射影演算子 $\Lambda_+(p)(\Lambda_-(p))$ は,

$$\Lambda_\pm(p) = \frac{\pm\not{p} + mc}{2mc} \quad (4.38)$$

で与えられる. 実際に, a, a' は $+, -$ を表すものとして

$$\begin{aligned} \Lambda_a(p)\Lambda_{a'}(p) &= \frac{\varepsilon_a\not{p} + mc}{2mc} \frac{\varepsilon_{a'}\not{p} + mc}{2mc} \\ &= \frac{m^2c^2(1 + \varepsilon_a\varepsilon_{a'}) + mc\not{p}(\varepsilon_a + \varepsilon_{a'})}{4m^2c^2} = \left(\frac{1 + \varepsilon_a\varepsilon_{a'}}{2} \right) \Lambda_a(p) \end{aligned} \quad (4.39)$$

ⁱⁱⁱ 負符号が付いていることに注意.

^{iv} このような取り方は不自然かもしれないが, 後で効いてくる.

が成り立つため,

$$\Lambda_{\pm}^2(p) = \Lambda_{\pm}(p), \quad \Lambda_{\pm}(p)\Lambda_{\mp}(p) = 0 \quad (4.40)$$

が成立する.^v また, エネルギーの射影演算子は

$$\Lambda_+(p) + \Lambda_-(p) = I \quad (4.41)$$

が成り立つ.

スピン状態を取り出す射影演算子について考察する. 非相対論的な量子力学において, スピンの方向を z 軸に選んだときのスピン上向き下向きを取り出す演算子は,

$$P_+ = \frac{1 + \sigma_z}{2}, \quad P_- = \frac{1 - \sigma_z}{2} \quad (4.42)$$

で与えられる. これは z 軸方向の単位ベクトル $\mathbf{u}_{Oz} = (0, 0, 1)$ を用いて,

$$P_{\pm} = \frac{1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}_{Oz}}{2}, \quad P_{\mp} = \frac{1 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}_{Oz}}{2} \quad (4.43)$$

として表すことができる.

これの相対論的なバージョンとして, ローレンツ共変なものを求めたい. ここで,

$$\begin{aligned} \gamma_5 \gamma_3 \gamma_0 &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \\ &= \sigma_z \otimes I \end{aligned} \quad (4.44)$$

という関係を用いる. また, $u_{Oz}^{\mu} = (0, \mathbf{u}_{Oz}) = (0, 0, 0, 1)$ を用いると,

$$\gamma_5 \gamma_3 \gamma_0 = \gamma_5 \gamma_{\mu} u_{Oz}^{\mu} \gamma_0 = \gamma_5 \not{u}_{Oz} \gamma_0 \quad (4.45)$$

となる. ここで, γ_0 がついているとローレンツ共変性が怪しくなるため, スピンの射影演算子として

$$\Sigma(u_z) \equiv \frac{1 + \gamma_5 \not{u}_z}{2} \quad (4.46)$$

を与えて考察する. ただし $\not{u}_z \equiv \gamma_{\mu} u_z^{\mu}$, $u_z^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} u_{Oz}^{\nu}$ としている. また, $p^{\mu} s_{\mu} = 0$ を満たす一般的なスピン状態 s_{μ} に対する射影演算子は

$$\Sigma(s) \equiv \frac{1 + \gamma_5 \not{s}}{2} \quad (4.47)$$

とする.

^v 途中で,

$$\not{p}^2 = (\gamma^{\mu} p_{\mu})^2 = m^2 c^2$$

を用いた.

静止系において,

$$\begin{aligned}
 \Sigma(u_{Oz})w^1(0) &= \frac{1 + \gamma_5 \not{u}_{Oz}}{2} w^1(0) \\
 &= \frac{1 + \gamma_5 \gamma_3 \varepsilon_1}{2} w^1(0) \\
 &= \frac{1 + \gamma_5 \gamma_3 \gamma_0}{2} w^1(0) \\
 &= \frac{1 + \sigma_z \otimes I}{2} w^1(0) \\
 &= w^1(0)
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned}
 \Sigma(-u_{Oz})w^2(0) &= \frac{1 - \gamma_5 \gamma_3 \varepsilon_2}{2} w^2(0) \\
 &= \frac{1 - \gamma_5 \gamma_3 \gamma_0}{2} w^2(0) \\
 &= \frac{1 - \sigma_z \otimes I}{2} w^2(0) \\
 &= w^2(0)
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\begin{aligned}
 \Sigma(-u_{Oz})w^3(0) &= \frac{1 - \gamma_5 \gamma_3}{2} w^3(0) \\
 &= \frac{1 + \gamma_5 \gamma_3 \varepsilon_3}{2} w^3(0) \\
 &= \frac{1 + \gamma_5 \gamma_3 \gamma_0}{2} w^3(0) \\
 &= \frac{1 + \sigma_z \otimes I}{2} w^3(0) \\
 &= w^3(0)
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
 \Sigma(u_{Oz})w^4(0) &= \frac{1 + \gamma_5 \gamma_3}{2} w^4(0) \\
 &= \frac{1 - \gamma_5 \gamma_3 \varepsilon_4}{2} w^4(0) \\
 &= \frac{1 - \gamma_5 \gamma_3 \gamma_0}{2} w^4(0) \\
 &= \frac{1 - \sigma_z \otimes I}{2} w^4(0) \\
 &= w^4(0)
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

が成立する. これより $\Sigma(u_z)$ は射影演算子となっており, 負エネルギー解のスピン状態を (4.33) のように選んだこととも両立している. また, 途中で $w^s(0)$ が γ_0 の固有状態で固有値が ε_s であることも用いた.^{vi}

スピノル u, v を用いると,

$$\left. \begin{aligned} \Sigma(\pm u_z)u(p, \pm u_z) &= u(p, \pm u_z) & \Sigma(\pm u_z)v(p, \pm u_z) &= v(p, \pm u_z) \\ \Sigma(\mp u_z)u(p, \pm u_z) &= 0 & \Sigma(\mp u_z)v(p, \pm u_z) &= 0 \end{aligned} \right\} \tag{4.52}$$

あるいは

$$\left. \begin{aligned} \Sigma(\pm s)u(p, \pm s) &= u(p, \pm s) & \Sigma(\pm s)v(p, \pm s) &= v(p, \pm s) \\ \Sigma(\mp s)u(p, \pm s) &= 0 & \Sigma(\mp s)v(p, \pm s) &= 0 \end{aligned} \right\} \tag{4.53}$$

^{vi} ここでスピン射影演算子をあのような不自然にとったことが効いてくる.

以上から射影演算子 $P_s(\mathbf{p})$ は, $\Lambda_{\pm}(p), \Sigma(\pm u_z)$ の積として,

$$\left. \begin{aligned} P_1(\mathbf{p}) &= \Lambda_+(p)\Sigma(u_z) & P_2(\mathbf{p}) &= \Lambda_+(p)\Sigma(-u_z) \\ P_3(\mathbf{p}) &= \Lambda_-(p)\Sigma(-u_z) & P_4(\mathbf{p}) &= \Lambda_-(p)\Sigma(u_z) \end{aligned} \right\} \quad (4.54)$$

演習問題

1. $\Sigma(\pm u_z)$ が射影演算子としての性質を満たしていることを確認せよ.

4.5 自由粒子解と波束の物理的意味

Schrödinger 方程式は線形方程式であるため, 平面波解の重ねあわせにより波束を構成できた. このことと同様に, Dirac 方程式も線形方程式であるため平面波解の重ねあわせにより波束を構成することができ, この波束もまた Dirac 方程式の解となる.

4.5.1 正エネルギー解のみから成る波束

はじめに正エネルギー解から構成された波束,

$$\psi^{(+)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sum_s b(p, s) u(p, s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_{\mu} x^{\mu}\right) \quad (4.55)$$

積分は運動量の空間成分についてのみしている.^{vii} また, $b(p, s)$ は重み関数である.

スピノルの直交性を用いると,

$$\begin{aligned} \int \psi^{(+)\dagger}(x) \psi^{(+)}(x) d^3x &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sqrt{\frac{mc^2}{E'}} \\ &\quad \times \sum_{s'} \sum_s b^*(p', s') b(p, s) u^{\dagger}(p', s') u(p, s) \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p'_{\mu} - p_{\mu}) x^{\mu}\right] d^3x \\ &= \int d^3p \int d^3p' \sqrt{\frac{m^2 c^4}{EE'}} \sum_{s'} \sum_s b^*(p', s') b(p, s) u^{\dagger}(p', s') u(p, s) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\ &= \int d^3p \frac{mc^2}{E} \sum_s \sum_{s'} b^*(p, s') b(p, s) u^{\dagger}(p, s') u(p, s) \\ &= \int d^3p \frac{mc^2}{E} \sum_s \sum_{s'} b^*(p, s') b(p, s) \frac{E}{mc^2} \delta_{ss'} \\ &= \int d^3p \sum_s |b(p, s)|^2 \end{aligned} \quad (4.56)$$

が導かれる. ただし途中で, δ 関数の公式^{viii}, 4 元運動量は $p^{\mu} p_{\mu} = m^2 c^2$ で一定であることから $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$

^{vii} $\sqrt{mc^2/E}$ をなぜ付ける必要があるのかわからない場合は, 自由粒子解の性質に戻って理由を考えよう.

ヒント: 確率密度はローレンツ不変量ではない

^{viii}

$$\delta(p - p') = 2\pi\hbar \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p' - p)x\right] dx$$

ならば $E = E'$ であることを用いた. $\int \psi^{(+)\dagger}(x)\psi^{(+)}(x)dx = 1$ であるとする, $|b(p, s)|^2$ は運動量が p , スピン状態が s であるような確率密度を表す.

次に, 速度演算子 $c\alpha^i$ の $\psi^{(+)}(x)$ についての期待値

$$J^{(+i)} \equiv \int \psi^{(+)\dagger}(x)c\alpha^i\psi^{(+)}(x)d^3x = \int \bar{\psi}^{(+)}(x)c\gamma^i\psi^{(+)}(x)d^3x \quad (4.57)$$

について考える.^{ix} 式変形には以下の **Gordon 分解**と呼ばれる恒等式を用いる.

$$c\bar{\psi}_2\gamma^\mu\psi_1 = \frac{1}{2m}\{\bar{\psi}_2\hat{p}^\mu\psi_1 - (\hat{p}^\mu\bar{\psi}_2)\psi_1\} - \frac{i}{2m}\hat{p}_\nu(\bar{\psi}_2\sigma^{\mu\nu}\psi_1) \quad (4.58)$$

Gordon 分解は次のようにして証明できる. ψ_1, ψ_2 がともに Dirac 方程式の解とすると,

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi_1 = 0, \quad (i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi_2 \quad (4.59)$$

ψ_2 の方程式の Dirac 共役をとると,

$$i\hbar\partial_\mu\bar{\psi}_2\gamma^\mu + mc\bar{\psi}_2 = 0 \quad (4.60)$$

以上から次の2式を得る.

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2\phi(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_1 - mc\psi_1) &= 0 \\ i\hbar\partial_\mu\bar{\psi}_2\gamma^\mu\phi\psi_1 + mc\bar{\psi}_2\phi\psi_1 &= 0 \end{aligned}$$

ただし a^μ は任意の4元ベクトルとする. 以上から,

$$\begin{aligned} -i\hbar(\partial_\mu\bar{\psi}_2)\gamma^\mu\gamma^\nu a_\nu\psi_1 + i\hbar\bar{\psi}_2 a_\mu\gamma^\mu\gamma^\nu(\partial_\nu\psi_1) - 2mc\bar{\psi}_2 a_\nu\gamma^\nu\psi_1 &= 0 \\ -i\hbar(\partial_\mu\bar{\psi}_2)\left(\frac{1}{2}\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} + \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]\right)a_\nu\psi_1 + i\hbar\bar{\psi}_2 a_\mu\left(\frac{1}{2}\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} + \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]\right)(\partial_\nu\psi_1) &= 2mc\bar{\psi}_2 a_\nu\gamma^\nu\psi_1 \\ -i\hbar(\partial_\mu\bar{\psi}_2)(\eta^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu})a_\nu\psi_1 + i\hbar\bar{\psi}_2 a_\mu(\eta^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu})(\partial_\nu\psi_1) &= 2mc\bar{\psi}_2 a_\nu\gamma^\nu\psi_1 \\ a_\nu[\bar{\psi}_2\hat{p}^\nu\psi_1 - (\hat{p}^\nu\bar{\psi}_2)\psi_1 - i\hat{p}_\mu(\bar{\psi}_2\sigma^{\mu\nu}\psi_1)] &= 2mca_\nu\bar{\psi}_2\gamma^\nu\psi_1 \end{aligned} \quad (4.61)$$

ここで, a_μ は任意の4元ベクトルであるため, 上記の等式が a_μ によらず成立するためには,

$$c\bar{\psi}_2\gamma^\mu\psi_1 = \frac{1}{2m}[\bar{\psi}_2\hat{p}^\mu\psi_1 - (\hat{p}^\mu\bar{\psi}_2)\psi_1] - \frac{i}{2m}\hat{p}_\nu(\bar{\psi}_2\sigma^{\mu\nu}\psi_1) \quad (4.62)$$

が成立しなくてはならない. (証明終)

^{ix} なぜこれが速度演算子を表すのかはハミルトン形式に戻って考えればわかる.

$$\begin{aligned} \frac{dp^i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q^i}, & \frac{dq^i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p^i} \\ H &= c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2 \end{aligned}$$

これを用いて速度演算子の期待値を計算すると,

$$\begin{aligned}
J^{(+i)} &= \frac{1}{2m} \int \left[\left\{ \bar{\psi}^{(+)} \hat{p}^i \psi^{(+)} - (\hat{p}^i \bar{\psi}^{(+)}) \psi^{(+)} \right\} - i \hat{p}_\nu (\bar{\psi}^{(+)} \sigma^{i\nu} \psi^{(+)}) \right] d^3x \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sqrt{\frac{mc^2}{E'}} \sum_s \sum_{s'} b^*(p', s') b(p, s) \\
&\quad \times \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p'_\mu - p_\mu) x^\mu \right] d^3x \frac{1}{2m} \bar{u}(p', s') [(p'^i + p^i) + i\sigma^{i\nu} (p'_\nu - p_\nu)] u(p, s) \\
&= \int d^3p \int d^3p' \sqrt{\frac{m^2 c^4}{EE'}} \sum_s \sum_{s'} b^*(p', s') b(p, s) \\
&\quad \times \frac{1}{2m} \bar{u}(p', s') [(p'^i + p^i) + i\sigma^{i\nu} (p'_\nu - p_\nu)] u(p, s) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\
&= \int d^3p \frac{p^i c^2}{E} \sum_s \sum_{s'} b^*(p, s') b(p, s) \bar{u}(p, s') u(p, s) \\
&= \int d^3p \frac{p^i c^2}{E} \sum_s \sum_{s'} b^*(p, s') b(p, s) \delta_{ss'} \\
&= \int d^3p \frac{p^i c^2}{E} \sum_s |b(p, s)|^2
\end{aligned} \tag{4.63}$$

従って,

$$\mathbf{J}^{(+)} = \langle c\boldsymbol{\alpha} \rangle_+ = \left\langle \frac{\mathbf{p}c^2}{E} \right\rangle_+ = \langle \mathbf{v}_g \rangle_+ \tag{4.64}$$

と表すことができる. $\langle \rangle_+$ は $\psi^{(+)}(x)$ に関する期待値を表す.

相対論的量子力学において, $[c\boldsymbol{\alpha}, H] \neq 0$ であるため速度演算子はハミルトニアンと可換ではない.* 従って, 自由粒子に対しても $\mathbf{J}^{(+)}$ は保存しない. 実際, Heisenberg の運動方程式より,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{J}^{(+)} = \frac{d}{dt} \langle c\boldsymbol{\alpha} \rangle_+ = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, c\boldsymbol{\alpha}] \right\rangle_+ \neq 0 \tag{4.65}$$

となるため, 時間変化する. また, $c\alpha^i$ の固有値は $\pm c$ であるため, 固有状態は正エネルギー解では構成できない.

さらに,

$$|\langle c\boldsymbol{\alpha} \rangle_+| = \left| \left\langle \frac{\mathbf{p}c^2}{E} \right\rangle_+ \right| = \left| \left\langle \frac{\mathbf{p}c^2}{\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}} \right\rangle_+ \right| = \left| \left\langle \frac{c}{\sqrt{1 + \frac{m^2 c^2}{\mathbf{p}^2}}} \right\rangle_+ \right| < c \tag{4.66}$$

より, $\mathbf{J}^{(+)}$ の大きさは常に c よりも小さい.

* 証明は容易.

4.5.2 正エネルギー解と負エネルギー解から成る波束

次に正エネルギー解と負エネルギー解で構成された波束,

$$\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sum_s \left[b(p, s) u(p, s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu\right) + d^*(p, s) v(p, s) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu\right) \right] \quad (4.67)$$

を考える.

スピノルの直交性と確率解釈により,

$$\int \psi^\dagger(x) \psi(x) d^3x = \int d^3p \sum_s [|b(p, s)|^2 + |d(p, s)|^2] = 1 \quad (4.68)$$

が成り立つ. 速度演算子の $\psi(x)$ に関する期待値は, 再び Gordon 分解を用いて,

$$\begin{aligned} J^i &= \langle c\alpha^i \rangle \\ &= \int d^3p \left\{ \sum_s [|b(p, s)|^2 + |d(p, s)|^2] \frac{p^i c^2}{E} \right. \\ &\quad + ic \sum_s \sum_{s'} b^*(-p, s') d^*(p, s) \exp\left(\frac{2i}{\hbar} p_0 x^0\right) \bar{u}(-p, s') \sigma^{i0} v(p, s) \\ &\quad \left. - ic \sum_s \sum_{s'} b(-p, s') d(p, s) \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} p_0 x^0\right) \bar{v}(p, s') \sigma^{i0} u(-p, s) \right\} \end{aligned} \quad (4.69)$$

となる. (4.69) には, 時間に依存しない項の他に, 正エネルギー解と負エネルギー解が干渉して激しく振動する項が存在する. 電子に関してはこの振動数を以下のように見積もることができる.

$$\omega_z \equiv \frac{2p_0 c}{\hbar} > \frac{2m_e c^2}{\hbar} \approx 2 \times 10^{21} \text{s}^{-1} \quad (4.70)$$

このような激しい振動は **Zitterbewegung** (ジグザグ運動) と呼ばれている. これによって, c/ω_z 程度の位置揺らぎが生じる.

外力が働かない限り, 正エネルギー解と負エネルギー解は独立に時間発展する. すなわち, 正エネルギー解のみで構成された波束は時間経過で負エネルギー解を含まない. しかし, 有限領域に粒子を局在させるためには一般には正エネルギー解と負エネルギー解の両方が必要である.

時刻 $t = 0$ において原点付近に Gauss 分布をした波束,

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = (\pi\Delta^2)^{-\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{2\Delta^2}\right) w^1(0) \quad (4.71)$$

を例に考える. 平面波の重ねあわせにこの分布を構成できるため,^{xi}

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sum_s \left[b(p, s) u(p, s) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) + d^*(p, s) v(p, s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \right] \\ = (\pi\Delta^2)^{-\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{2\Delta^2}\right) w^1(0) \end{aligned} \quad (4.72)$$

^{xi} 要は Fourier 展開.

を満たすように $b(p, s), d^*(p, s)$ を定めれば良い。両辺に $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right)$ を掛けて積分すると,

$$\sqrt{\frac{mc^2}{E}} \sum_s [b(p, s)u(p, s) + d^*(-p, s)v(-p, s)] = \left(\frac{\Delta^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\Delta^2 \mathbf{p}^2}{2\hbar^2}\right) w^1(0) \quad (4.73)$$

となる。さらにスピノルの直交性を用いて,

$$b(p, s) = \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \left(\frac{\Delta^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\Delta^2 \mathbf{p}^2}{2\hbar^2}\right) u^\dagger(p, s) w^1(0) \quad (4.74)$$

$$d^*(-p, s) = \sqrt{\frac{mc^2}{E}} \left(\frac{\Delta^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\Delta^2 \mathbf{p}^2}{2\hbar^2}\right) v^\dagger(-p, s) w^1(0) \quad (4.75)$$

となる。以上からわかるように、負エネルギー解の振幅は非零で、正エネルギー解に比べて

$$\frac{|d|}{|b|} = \frac{|v^\dagger(-p, s)w^1(0)|}{|u^\dagger(p, s)w^1(0)|} \approx \frac{|\mathbf{p}|c}{E + mc^2} \quad (4.76)$$

となるため、 $|\mathbf{p}| \approx mc$ の場合に無視できなくなる。大まかに見積もって、波束は主に $|\mathbf{p}| < \hbar/\Delta$ の状態から構成されるが、 $|\mathbf{p}| \approx mc$ の場合に $\Delta < \hbar/mc$ となり、波束は粒子の Compton 波長を 2π で割った長さと同じ程度に局在化される。

4.6 Klein paradox

1次元階段ポテンシャルにおける Dirac 粒子の反射と透過を考察しよう。ポテンシャルが

$$V(z) = \begin{cases} 0 & (z < 0) \\ V_0 & (z > 0) \end{cases} \quad (4.77)$$

で与えられているとする。ただし $V_0 > 0$ である。この時の Dirac 方程式は,

$$\begin{pmatrix} mc^2 & -i\hbar\sigma_z \frac{d}{dz} \\ -i\hbar\sigma_z \frac{d}{dz} & -mc^2 \end{pmatrix} \psi = E\psi \quad (z < 0) \quad (4.78)$$

$$\begin{pmatrix} V_0 + mc^2 & -i\hbar\sigma_z \frac{d}{dz} \\ -i\hbar\sigma_z \frac{d}{dz} & V_0 - mc^2 \end{pmatrix} \psi = E\psi \quad (z > 0) \quad (4.79)$$

で与えられる。 z 軸正の方向へと z 軸に沿ってスピン $\hbar/2$ の自由粒子が入射したとする。 $z < 0$ の領域での入射波は,

$$\psi_i = e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.80)$$

で与えられる。

一方反射波は,

$$\psi_r = a_r e^{-ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{c\hbar k}{E + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + b_r e^{-ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \end{pmatrix} \quad (4.81)$$

$z > 0$ の領域での透過波は,

$$\psi_t = a_t e^{iqz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\hbar q}{E - V_0 + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + b_t e^{iqz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{c\hbar q}{E - V_0 + mc^2} \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

と表される. 以上で a_r, b_r, a_t, b_t は定数であり, k, q はそれぞれ

$$c^2 \hbar^2 k^2 = E^2 - m^2 c^4 \quad (4.83)$$

$$c^2 \hbar^2 q^2 = (E - V_0)^2 - m^2 c^4 = (E - V_0 - mc^2)(E - V_0 + mc^2) \quad (4.84)$$

から定められる.

$z = 0$ での波動関数の連続性から,

$$1 + a_r = a_t \quad (4.85)$$

$$b_r = b_t = 0 \quad (4.86)$$

$$1 - a_r = r a_t \quad (4.87)$$

$$r \equiv \frac{q}{k} \frac{E + mc^2}{E - V_0 + mc^2} \quad (4.88)$$

第2式は反射・透過でスピンの反転は起こらないことを意味する. 第1式と第3式を連立させて解くと,

$$a_t = \frac{2}{1 + r}, \quad a_r = \frac{1 - r}{1 + r} \quad (4.89)$$

と求めることができる.

この結果を V_0 の大きさで場合分けをして考察する.

1. $V_0 > 0$ かつ $|E - V_0| < mc^2$ の場合

(4.84) より, q は純虚数であるため, 波動関数は $z > 0$ の領域で指数関数的に減少する. 侵入長は $\delta \approx \hbar/mc$ である.

2. $V_0 > E + mc^2$ の場合

非相対論的な量子力学ではポテンシャルの高さが大きくなるにつれてその侵入長は短くなったため, より強く波動関数が減衰することが予想できる. しかし, (4.83) より q は実数となり, 波動関数は $z > 0$ の領域を伝搬する.

透過率 T と反射率 R は,

$$T \equiv \frac{|j_t|}{|j_i|} = \frac{4r}{(1 + r)^2}, \quad R \equiv \frac{|j_r|}{|j_i|} = \frac{(1 - r)^2}{(1 + r)^2} \quad (4.90)$$

となる。ただし j_i, j_r, j_t は入射波, 反射波, 透過波に関する確率流で,

$$j_i = c\psi_i^\dagger \alpha^3 \psi_i = \frac{2c^2 \hbar k}{E + mc^2} \quad (4.91)$$

$$j_r = c\psi_r^\dagger \alpha^3 \psi_r = -\left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2 \frac{2c^2 \hbar k}{E + mc^2} \quad (4.92)$$

$$j_t = c\psi_t^\dagger \alpha^3 \psi_t = \left(\frac{2}{1+r}\right)^2 \frac{2c^2 \hbar q}{E - V_0 + mc^2} \quad (4.93)$$

である。 $T + R = 1$ より, 確率の保存則, $|j_i| = |j_r| + |j_t|$ が成り立つ。ただし, $r < 0$ であるため $T < 0, R > 1$ が導かれる。

反射率や透過率は非負で 1 を超えないはずだが, ポテンシャルの値によってはこれが崩れるという結論がでた。この原因は負エネルギー解が存在するためであると予想される。自由粒子の取るエネルギーの範囲は $mc^2 \leq E < \infty, -\infty < E \leq -mc^2$ である。負エネルギー状態に V_0 が作用すると, エネルギーの範囲は $-\infty < E \leq V_0 - mc^2$ となる。 $V_0 > E + mc^2$ のとき, 負エネルギー解の一部は $E > 0$ の振動解として振る舞う。すなわち, ポテンシャルの効果で負エネルギー解から正エネルギー解と同じ形の解が生成されることからこのようなパラドクスが発生すると考えられる。

第 5 章

Dirac 方程式の非相対論的極限

5.1 自由粒子に関する Foldy-Wouthuysen 変換

電磁場存在下における Dirac 方程式の非相対論的極限については前に考察した。このとき、4 成分波動関数から静止エネルギーを分離させた形

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}m_e c^2 t\right) \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

を用いて、Dirac 表示の下 $\chi(x)$ を消去して $\varphi(x)$ に関する方程式が Pauli 方程式になることを確認した。

今回は別の方法で Dirac 方程式の非相対論的極限を導出する。「Dirac スピノルは Dirac 表示において、上 2 成分と下 2 成分が Dirac 方程式を介して混ざり合うが、適当な Unitary 変換で近似的にこれらを分離させる」という方法を用いる。

もう少し具体的にどのような Unitary 変換となるか見ていこう。方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (5.2)$$

に対して、Unitary 変換

$$\psi' = U\psi, \quad \psi = U^{-1}\psi' \quad (5.3)$$

を施すと方程式は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(U^{-1}\psi') &= HU^{-1}\psi' \\ i\hbar \frac{\partial U^{-1}}{\partial t}\psi' + i\hbar U^{-1} \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= HU^{-1}\psi' \\ i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= UHU^{-1}\psi' - i\hbar U \frac{\partial U^{-1}}{\partial t}\psi' \\ i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= H'\psi' \end{aligned} \quad (5.4)$$

ただし、

$$H' = UHU^{-1} - i\hbar U \frac{\partial U^{-1}}{\partial t} = UHU^{-1} + i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} U^{-1} \quad (5.5)$$

である。

ここで、 H' が 2×2 行列を含むブロック対角化された形になるように Unitary 行列 $U = e^{iS}$ を選ぶ。このような Unitary 変換は **Foldy-Wouthuysen-Tani 変換 (FWT 変換)** と呼ばれている。

静止した自由粒子に関する Dirac 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta m_e c^2 \psi, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

のように与えられ、スピノルの上 2 成分と下 2 成分が完全に分離していることがわかる。一方運動している自由粒子は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \psi, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

となるため上 2 成分と下 2 成分が混ざり合って分離していない。上下 2 成分を混ぜる行列として、

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

などがある。上下 2 成分を混ぜない行列として、

$$\Gamma_S = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

がある。

$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2$ に対して、Unitary 変換を

$$U = e^{iS} = e^{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \theta} = \cos(|\mathbf{p}|\theta) + \frac{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \sin(|\mathbf{p}|\theta) \quad (5.10)$$

として選ぶと、

$$\begin{aligned} H' &= e^{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \theta} (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2) e^{-\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \theta} \\ &= \left\{ \cos(|\mathbf{p}|\theta) + \frac{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \sin(|\mathbf{p}|\theta) \right\} (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2) \left\{ \cos(|\mathbf{p}|\theta) - \frac{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \sin(|\mathbf{p}|\theta) \right\} \\ &= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2) \left\{ \cos(2|\mathbf{p}|\theta) - \frac{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \sin(2|\mathbf{p}|\theta) \right\} \\ &= c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \left\{ \cos(2|\mathbf{p}|\theta) - \frac{m_e c}{|\mathbf{p}|} \sin(2|\mathbf{p}|\theta) \right\} + \beta [m_e c^2 \cos(2|\mathbf{p}|\theta) + c|\mathbf{p}| \sin(2|\mathbf{p}|\theta)] \end{aligned} \quad (5.11)$$

となる。このとき H' における $c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ の係数が 0 となれば H' がブロック対角化されることとなる。このような条件を課せば、

$$\begin{aligned} \tan(2|\mathbf{p}|\theta) &= \frac{|\mathbf{p}|}{m_e c} \\ \cos(2|\mathbf{p}|\theta) &= \frac{m_e c}{\sqrt{\mathbf{p}^2 + (m_e c)^2}}, \quad \sin(2|\mathbf{p}|\theta) = \frac{|\mathbf{p}|}{\sqrt{\mathbf{p}^2 + (m_e c)^2}} \end{aligned}$$

これを代入すると、

$$H' = \beta c \sqrt{\mathbf{p}^2 + (m_e c)^2} \quad (5.12)$$

が導かれる。

以上の過程には一切近似は含まなかったため、自由粒子の場合には厳密に上下2成分を分離できることがわかる。ⁱしかし、その結果得たハミルトニアンは空間微分について非線形になっているため扱いにくい。方程式を空間微分について線形にする代わりに負エネルギー解を含む4成分波動関数を導入すると考えられる。

5.2 電磁場の存在下での FWT 変換

電磁場存在下での Dirac 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + \beta m_e c^2 - e\Phi] \psi \quad (5.13)$$

である。この場合については FWT 変換を用いて厳密に上下2成分を分離することはできないため、近似的にブロック対角化を行う。今は非相対論的極限に関心があるため、 $1/m_e$ (あるいは v/c)ⁱⁱ のべきで展開する。慣習的に運動量のみを含む項は $1/m_e^3$ まで、運動量と場のエネルギーを含む項については $1/m_e^2$ まで展開する。

FWT 変換により変換されたハミルトニアン

$$H' = U H U^{-1} - i\hbar U \frac{\partial}{\partial t} U^{-1} = e^{iS} H e^{-iS} - i\hbar e^{iS} \frac{\partial}{\partial t} e^{-iS} \quad (5.14)$$

の各項を後の計算のため S のべきで展開する。

$$F(\lambda) = e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} \quad (5.15)$$

という関数を考え、これを $\lambda = 0$ 周りで展開する。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial F}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=0} &= (i e^{i\lambda S} S H e^{-i\lambda S} - i e^{i\lambda S} H S e^{-i\lambda S})_{\lambda=0} \\ &= (i e^{i\lambda S} [S, H] e^{-i\lambda S})_{\lambda=0} \\ &= i [S, H] \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2} \right)_{\lambda=0} &= (i^2 e^{i\lambda S} S [S, H] e^{-i\lambda S} - i^2 e^{i\lambda S} [S, H] S e^{-i\lambda S})_{\lambda=0} \\ &= (i^2 e^{i\lambda S} [S, [S, H]] e^{-i\lambda S})_{\lambda=0} \\ &= i^2 [S, [S, H]] \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\left(\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} \right)_{\lambda=0} = i^n \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_n \quad (5.18)$$

となるため、

$$e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} i^n \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_n \quad (5.19)$$

ⁱ この結論はある意味当たり前で、最初のハミルトニアンを4元運動量の関係式から得た操作を逆向きにたどっていることとほとんど同じである。ただし別の道をたどっている。

ⁱⁱ 非相対論的極限とは $v \ll c$ の極限である。

従って,

$$e^{iS} H e^{-iS} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} i^n \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_n \quad (5.20)$$

一方,

$$G(\lambda) = -i\hbar e^{i\lambda S} \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\lambda S} \quad (5.21)$$

を $\lambda = 0$ 周りで展開すると,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial G}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=0} &= -i\hbar \left(i e^{i\lambda S} S \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\lambda S} - i e^{i\lambda S} \frac{\partial}{\partial t} (S e^{-i\lambda S}) \right)_{\lambda=0} \\ &= -\hbar (e^{i\lambda S} \dot{S} e^{-i\lambda S})_{\lambda=0} \\ &= -\hbar \dot{S} \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^n G}{\partial \lambda^n} \right)_{\lambda=0} &= -i\hbar \left(-i^n e^{i\lambda S} \underbrace{[S, [S, \dots, [S, \dot{S}] \dots]]}_{n-1} e^{-i\lambda S} \right)_{\lambda=0} \\ &= -\hbar i^{n-1} \underbrace{[S, [S, \dots, [S, \dot{S}] \dots]]}_{n-1} \end{aligned} \quad (5.23)$$

これより,

$$-i\hbar e^{i\lambda S} \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\lambda S} = -\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} i^{n-1} \underbrace{[S, [S, \dots, [S, \dot{S}] \dots]]}_{n-1} \quad (5.24)$$

従って第2項は,

$$-i\hbar e^{i\lambda S} \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\lambda S} = -\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} i^{n-1} \underbrace{[S, [S, \dots, [S, \dot{S}] \dots]]}_{n-1} \quad (5.25)$$

となる.

5.2.1 第1近似

以上を用いて展開していこう. ハミルトニアンを

$$H = \beta m_e c^2 + \mathcal{O} + \mathcal{E}, \quad \mathcal{O} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}), \quad \mathcal{E} = -e\Phi \quad (5.26)$$

とすると, $\mathcal{O}$ が上下2成分を混ぜる項 (奇の項とよぶことにする) となる. $\mathcal{O}$ と β は反可換で, $\mathcal{E}$ と β は可換である. すなわち,

$$\beta \mathcal{O} = -\mathcal{O} \beta, \quad \beta \mathcal{E} = \mathcal{E} \beta \quad (5.27)$$

H の中で, 非相対論的極限での支配的な項は $\beta m_e c^2$ である. そのため, 近似の手付けとして

$$H' = \beta m_e c^2 + \mathcal{O} + \mathcal{E} + i[S, \beta m_e c^2] \quad (5.28)$$

と変換しよう．この段階で $\mathcal{O}$ を消去する．すなわち $\mathcal{O} + i[S, \beta m_e c^2] = 0$ となればよい．このような S として

$$S = -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O} \quad (5.29)$$

を選べばよい．ⁱⁱⁱ

第1近似としてこの S を用いて，運動量のみを含む項に関しては $1/m_e^3$ まで，運動量と場のエネルギーを含む項に関しては $1/m_e^2$ までで展開の各項を計算すると，

$$\begin{aligned} i[S, H] &= i \left[-\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}, \beta m_e c^2 + \mathcal{O} + \mathcal{E} \right] \\ &= \frac{1}{2m_e c^2} \{ [\beta \mathcal{O}, \beta m_e c^2] + [\beta \mathcal{O}, \mathcal{O}] + [\beta \mathcal{O}, \mathcal{E}] \} \\ &= -\mathcal{O} + \frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}, \mathcal{E}] + \frac{1}{m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{i^2}{2!} [S, [S, H]] &= \frac{i^2}{2} \left[-\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}, \left(i\mathcal{O} - \frac{i}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{i}{m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 \right) \right] \\ &= -\frac{1}{4m_e c^2} \left\{ [\beta \mathcal{O}, \mathcal{O}] + \left[\beta \mathcal{O}, -\frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}, \mathcal{E}] \right] + \left[\beta \mathcal{O}, -\frac{1}{m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{1}{2m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{i^3}{3!} [S, [S, [S, H]]] &= \frac{i^3}{3!} \left[-\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}, \frac{1}{m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 + \frac{1}{4m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] + \frac{1}{m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 \right] \\ &= -\frac{1}{12m_e c^2} \left\{ \left[\beta \mathcal{O}, \frac{1}{m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 \right] + \left[\beta \mathcal{O}, \frac{1}{4m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] \right] + \left[\beta \mathcal{O}, \frac{1}{m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 \right] \right\} \\ &\approx \frac{1}{6m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 - \frac{1}{6m_e^3 c^6} \beta \mathcal{O}^4 \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{i^4}{4!} [S, [S, [S, [S, H]]]] &\approx \frac{i^4}{4!} \left[-\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}, \frac{i}{m_e c^2} \mathcal{O}^3 - \frac{i}{m_e^3 c^6} \beta \mathcal{O}^4 \right] \\ &\approx \frac{1}{24m_e^3 c^6} \beta \mathcal{O}^4 \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$-\hbar \dot{S} = \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} -\frac{i\hbar}{2!} [S, \dot{S}] &= -\frac{i\hbar}{2} \left[-\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}, -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{8m_e^2 c^4} [\beta \mathcal{O}, \beta \dot{\mathcal{O}}] \\ &= -\frac{i\hbar}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] \end{aligned} \quad (5.35)$$

ⁱⁱⁱ 急にこの形が出てくるのが非常に気持ち悪いが，強いて導出っぽいことをするならば， $\mathcal{O}$ を消したいので $\mathcal{O}$ を含んでいるだろう， β との積となるためこれを消すために β を含ませる，あとは定数を調整する，といった風に考えることができるだろう．

となる。以上から、第1近似でのハミルトニアン $H'_{(1)}$ は

$$H'_{(1)} = \beta m_e c^2 + \mathcal{O}_{(1)} + \mathcal{E}_{(1)} \quad (5.36)$$

$$\mathcal{O}_{(1)} \equiv \frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{1}{3m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 + \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}} \quad (5.37)$$

$$\mathcal{E}_{(1)} \equiv \mathcal{E} + \frac{1}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m_e^3 c^6} \beta \mathcal{O}^4 - \frac{1}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i\hbar}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] \quad (5.38)$$

となる。以下では $\mathcal{O}$ 系の項は上下の成分を混ぜる奇の項であり、 $\mathcal{E}$ 系の項は上下を混ぜない偶の項を表すものとする。^{iv}

5.2.2 第2近似と第3近似

第1近似ではまだ奇の項が残っている。 $\mathcal{O}_{(1)}$ は $O(1/m_e)$ の項である。さらなる近似で $\mathcal{O}_{(1)}$ を消去する。

$$\begin{aligned} S_{(1)} &= -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}_{(1)} \\ &= -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \left(\frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{1}{3m_e^2 c^4} \mathcal{O}^3 + \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}} \right) \end{aligned} \quad (5.39)$$

として、Unitary 変換 $U_{(1)} = e^{iS_{(1)}}$ を施す。この変換により、

$$H'_{(2)} = \beta m_e c^2 + \mathcal{O}_{(2)} + \mathcal{E}_{(2)} \quad (5.40)$$

$$\mathcal{E}_{(2)} \approx \mathcal{E}_{(1)} \quad (5.41)$$

$$\mathcal{O}_{(2)} \equiv \frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}_{(1)}, \mathcal{E}_{(1)}] + \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}}_{(1)} \quad (5.42)$$

となる。^v $\mathcal{O}_{(2)}$ は $O(1/m_e^2)$ の項で、これを消去するように

$$\begin{aligned} S_{(2)} &= -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \mathcal{O}_{(2)} \\ &= -\frac{i}{2m_e c^2} \beta \left(\frac{1}{2m_e c^2} \beta [\mathcal{O}_{(1)}, \mathcal{E}_{(1)}] + \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \beta \dot{\mathcal{O}}_{(1)} \right) \end{aligned} \quad (5.43)$$

を用いて Unitary 変換 $U_{(2)} = e^{iS_{(2)}}$ を用いて奇の項を消去すると、

$$H'_{(3)} = \beta \left(m_e c^2 + \frac{1}{2m_e c^2} \mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m_e^3 c^6} \mathcal{O}^4 \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i\hbar}{8m_e^2 c^4} [\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] \quad (5.44)$$

各項を具体的に計算すると、

$$\frac{1}{2m_e c^2} \mathcal{O}^2 = \frac{1}{2m_e c^2} [c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})]^2 = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (5.45)$$

ここで、Pauli 行列の性質から導かれる関係

$$[\alpha^i, \alpha^j] = 2i \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} \Sigma^k, \quad (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})I + i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (5.46)$$

^{iv} 具体的に計算すればわかるが、 $\mathcal{O}$ の偶数乗は偶の項となり、奇数乗は奇の項となる。

^v $\dot{\mathcal{O}}$ は場のエネルギー由来の項のみ残るため、 $1/m_e^3$ では無視する。

を用いた.

$$-\frac{1}{8m_e^3c^6}\mathcal{O}^4 = -\frac{1}{8m_e^3c^2}(\mathbf{p}^2)^2 \quad (5.47)$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{8m_e^2c^4}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i\hbar}{8m_e^2c^4}[\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] &= -\frac{1}{8m_e^2c^4}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}] + i\hbar\dot{\mathcal{O}}] \\ &\approx -\frac{1}{8m_e^2c^3}[\mathcal{O}, i\hbar e\boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \cdot \Phi) + i\hbar e\boldsymbol{\alpha} \cdot \dot{\mathbf{A}}] \\ &= \frac{\hbar}{8m_e^2c^3}[ie\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E}] \\ &\approx \frac{ie\hbar}{8m_e^2c^2}[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E}] \\ &= \frac{ie\hbar^2}{8m_e^2c^2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j \left(-\frac{\partial E^j}{\partial x^i} \right) + \frac{e\hbar}{4m_e^2c^3} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \\ &= \frac{e\hbar^2}{8m_e^2c^2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E} + \frac{ie\hbar^2}{8m_e^2c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}) + \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \end{aligned} \quad (5.48)$$

が導かれる.^{vi}

従って, $H'_{(3)}$ は

$$\begin{aligned} H'_{(3)} &= \beta \left[m_e c^2 + \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - \frac{1}{8m_e^3c^2} (\mathbf{p}^2)^2 \right] - e\Phi + \frac{e\hbar}{2m_e} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} \\ &\quad + \frac{ie\hbar^2}{8m_e^2c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} + \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} + \frac{e\hbar^2}{8m_e^2c^2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (5.49)$$

となる.

5.3 各項の物理的意味

各項の物理的意味を見ていこう.

1. β で括られた項は $\beta \sqrt{c^2(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + m_e^2c^4}$ を展開したときに現れる項である.^{vii}
2. 第2項は静電エネルギーを指す.
3. 第3項は Pauli 項に相当する.
4. 静電場の場合には $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$ であるため, 第4項は0となる.
5. $\Phi = \Phi(r)$ のとき, 第5項は,

$$\frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} = -\frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -\frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \quad (5.50)$$

となる. これはスピン軌道相互作用にあたる.

^{vi} 忘れてはならないのは, 後ろには作用する波動関数があることである. $\mathbf{p}$ 入れ替える際には積の微分公式を使って丁寧に行わなければならない.

^{vii} 目的の次数までで展開した結果ということは言うまでもない.

$\mathbf{E}$ の存在下で, 速度 $\mathbf{v}$ で運動する電子が感じる磁束密度は $\mathbf{B}' = -(1/c^2)\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -(1/m_e c^2)\mathbf{p} \times \mathbf{E}$ で, $\mathbf{B}'$ とスピン $\mathbf{S}$ との間の結合エネルギーは,

$$H_{SB'} = \frac{g_e \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}' \quad (5.51)$$

となる. ここで $\mu_B \equiv e\hbar/2m_e$ は**ボーア磁子 (Bohr magneton)**, g_e は磁気回転比である. $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\Sigma}/2$ とすると,

$$H_{SB'} = g_e \frac{e\hbar}{4m_e} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}' = g_e \frac{2\hbar}{4m_e^2 c^2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \quad (5.52)$$

となり, 今の場合には $g_e = 1$ であることがわかる. さらに, 電子に関する運動方程式 $m_e \mathbf{a} = -e\mathbf{E}$ を用いると $\mathbf{B}' = -(1/c^2)\mathbf{v} \times \mathbf{E} = (m_e/ec^2)\mathbf{v} \times \mathbf{a}$ となる. これより,

$$-\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B}' = -\frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{a} \equiv \boldsymbol{\Omega} \quad (5.53)$$

となる, ここで, $\boldsymbol{\Omega}$ は電子が行う歳差運動の角速度と解釈される. 加速度運動する系のベクトルを外部の慣性系から見た場合, **Thomas の歳差 (Thomas precession)** と呼ばれる首振り運動が生じる.

6. 最後の項は **Darwin 項** と呼ばれ, Zitterbewegung に起因している. 具体的に, 電子が $\langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle \approx (\hbar/m_e c)^2$ 程度の揺らぎを持って運動するため, クーロンポテンシャルの相対的な変動が起こる. V の相対的な変動 $\langle \delta V \rangle$ を以下のように評価する.

$$\begin{aligned} \langle \delta V \rangle &= \langle V(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \left\langle \sum_i \delta x^i \frac{\partial V}{\partial x^i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta x^i \delta x^j \frac{\partial^2 V}{\partial x^i \partial x^j} \right\rangle \\ &\approx \frac{1}{6} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle \nabla^2 V \approx -\frac{e\hbar^2}{6m_e^2 c^2} \nabla^2 \Phi = \frac{e\hbar^2}{6m_e^2 c^2} \nabla \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (5.54)$$

となり, 定数倍の違いを除き一致する.