

第 1 章

Dirac 方程式の導出

1.1 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。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

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、

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \Rightarrow \hat{p}^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, -i\hbar \nabla \right) \quad (1.2)$$

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p} \right) \Rightarrow \hat{p}_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, i\hbar \nabla \right) \quad (1.3)$$

これを 4 元運動量の関係式に適用することで、演算子

$$-\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \equiv -\hbar^2 \square \quad (1.4)$$

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、

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi(x^\mu) = 0 \quad (1.5)$$

を考えることができる。(1.5) 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、(1.5) 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。(1.5) の複素共役を考えると、

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi^*(x^\mu) = 0 \quad (1.6)$$

(1.5) の左から ϕ^* をかけてたものから、(1.6) の左から ϕ をかけたものを引くと、

$$\begin{aligned} \phi^* \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi - \phi \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi^* &= 0 \\ \phi^* \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \phi - \phi \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \phi^* &= 0 \\ \frac{1}{c^2} \left(\phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial t^2} \phi \right) - (\phi^* \nabla^2 \phi - (\nabla^2 \phi^*) \phi) &= 0 \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) - \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) &= 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

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

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) \quad (1.8)$$

で定義すると、確率密度関数にあたるものは

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) \quad (1.9)$$

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。

1.2 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、

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \psi(x^\mu) = 0 \quad (1.10)$$

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

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{m_e c}{\hbar} \right)^2 \right] = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + i\beta \frac{m_e c}{\hbar} \right) \quad (1.11)$$

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，

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij}, \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (1.12)$$

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，(1.12) から，

$$(\alpha^i)^2 = I, \quad \beta^2 = I \quad (1.13)$$

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，(1.12) より，

$$\alpha^i = -\beta \alpha^i \beta, \quad \beta = -\alpha^i \beta \alpha \quad (1.14)$$

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，

$$\text{Tr} \alpha^i = -\text{Tr}(\beta \alpha^i \beta) = -\text{Tr}(\beta^2 \alpha^i) = -\text{Tr} \alpha^i \quad (1.15)$$

$$\text{Tr} \beta = -\text{Tr}(\alpha^i \beta \alpha^i) = -\text{Tr}((\alpha^i)^2 \beta) = -\text{Tr} \beta \quad (1.16)$$

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(1.12) 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，

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

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 (1.12) を満たしかつその限りである．ⁱⁱ

(1.10) を整理してやると，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \psi(x^\mu) \quad (1.18)$$

を得られる．(1.18) 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，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = \begin{pmatrix} m_e c^2 & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} & -m_e c^2 \end{pmatrix} \psi(x^\mu) \quad (1.19)$$

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 (1.12) 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、

$$i\hbar\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -i\hbar c \sum_{k=1}^3 \left(\psi^\dagger \alpha^k \frac{\partial\psi}{\partial x^k} + \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^k} \alpha^k \psi \right) \quad (1.20)$$

となる。これを整理すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} (\psi^\dagger \alpha^k \psi) = 0 \quad (1.21)$$

となるため、確率密度 ρ と確率流密度 $\mathbf{j}$ は

$$\rho = \psi^\dagger \psi = |\psi|^2, \quad \mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (1.22)$$

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

$$j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}) = (c\psi^\dagger, c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (1.23)$$

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。

1.3 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、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x^\mu) = \left[-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) + \beta m_e c^2 - e\Phi \right] \psi(x^\mu) \quad (1.24)$$

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

$$\psi(x^\mu) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t \right) \begin{pmatrix} \varphi(x^\mu) \\ \chi(x^\mu) \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

を Dirac 表示の下で変形すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - e\Phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2m_e c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

上の 2 成分についての方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \chi - e\Phi \varphi \quad (1.27)$$

下の 2 成分については非相対論的極限で、

$$0 = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi - 2m_e c^2 \chi \quad (1.28)$$

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,

$$\chi = -\frac{i\hbar}{2m_e c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi \ll \varphi \quad (1.29)$$

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 (1.29) を (1.27) に代入して Pauli 行列の公式を用いて変形すると,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x^\mu) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\boldsymbol{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e\Phi \right] \varphi(x^\mu) \quad (1.30)$$

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 (1.24) 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.