# 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 Diac 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

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

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \tag{5.2}$$

に対して，Unitary 変換

$$\psi' = U\psi, \qquad \psi = U^{-1}\psi' \tag{5.3}$$

を施すと方程式は,

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

ただし,

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

である．

ここで，$H'$ が $2 \times 2$ 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

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

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

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

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，

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

などがある．上下 2 成分を混ぜない行列として，

$$\mathit{\Gamma}_S = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{5.9}$$

がある．

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

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

として選ぶと，

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

となる．このとき $H'$ における $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ 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，

$$\tan(2|\boldsymbol{p}|\theta) = \frac{|\boldsymbol{p}|}{m_e c}$$
$$\cos(2|\boldsymbol{p}|\theta) = \frac{m_e c}{\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + (m_e c)^2}}, \qquad \sin(2|\boldsymbol{p}|\theta) = \frac{|\boldsymbol{p}|}{\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + (m_e c)^2}}$$

これを代入すると，

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

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.

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

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

$$H' = UHU^{-1} - i\hbar U\frac{\partial}{\partial t}U^{-1} = e^{iS}He^{-iS} - i\hbar e^{iS}\frac{\partial}{\partial t}e^{-iS} \tag{5.14}$$

の各項を後の計算のため $S$ のべきで展開する．

$$F(\lambda) = e^{i\lambda S}He^{-i\lambda S} \tag{5.15}$$

という関数を考え，これを $\lambda = 0$ 周りで展開する．

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

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

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

となるため,

$$e^{i\lambda S}He^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}i^n[\underbrace{S,[S,\cdots,[S}_{n},H]\cdots]] \tag{5.19}$$

---

[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,

$$e^{iS}He^{-iS}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}i^n[\underbrace{S,[S,\cdots,[S}_{n},H]\cdots]] \tag{5.20}$$

一方,

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

を $\lambda=0$ 周りで展開すると,

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

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

これより,

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

従って第 2 項は,

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

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

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

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 $\beta$ は反可換で，$\mathcal{E}$ と $\beta$ は可換である．すなわち,

$$\beta\mathcal{O}=-\mathcal{O}\beta,\qquad \beta\mathcal{E}=\mathcal{E}\beta \tag{5.27}$$

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

$$H'=\beta m_ec^2+\mathcal{O}+\mathcal{E}+i[S,\beta m_ec^2] \tag{5.28}$$

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

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

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，

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

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

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

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

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

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

---

[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，$\beta$ との積となるためこれを消すために $\beta$ 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

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

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

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

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．

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

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

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

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

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

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

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

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，

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

各項を具体的に計算すると，

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

ここで，Pauli 行列の性質から導かれる関係

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

---

[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．

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

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

が導かれる．[vi]

従って，$H'_{(3)}$ は

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

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. $\beta$ で括られた項は $\beta\sqrt{c^2(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2 + m_e^2c^4}$ 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 $\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$ であるため，第 4 項は 0 となる．
5. $\Phi = \Phi(r)$ のとき，第 5 項は，

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

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．$\boldsymbol{p}$ 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] 目的の次数まででで展開した結果ということは言うまでもない．

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

$$H_{SB'} = \frac{g_e \mu_B}{\hbar}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}' \tag{5.51}$$

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．$\boldsymbol{S} = \hbar\boldsymbol{\Sigma}/2$ とすると,

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

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 $m_e\boldsymbol{a} = -e\boldsymbol{E}$ を用いると $\boldsymbol{B}' = -(1/c^2)\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E} = (m_e/ec^2)\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{a}$ となる．これより,

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

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，Zitterwebegung に起因している．具体的に，電子が $\left\langle(\delta\boldsymbol{r})^2\right\rangle \approx (\hbar/m_e c)^2$ 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．

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

となり，定数倍の違いを除き一致する．