Dirac 方程式 (1)

解析力学～幾何学的視点より～(16)

緒方秀教

電気通信大学　情報・ネットワーク工学専攻

August 2, 2022

今回の目的

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の方程式.

これからゲージ場の理論の話をしようと思うが，電磁場を扱うのに Dirac 方程式の話をする必要があるように思われる.

電磁場と古典力学は異なる座標変換則（Lorentz 変換 v.s. Galilei 変換）に従う.

1. Dirac 方程式の導出.
   Klein-Gordon 方程式 $\longrightarrow$ Dirac 方程式.
2. 方程式を解いてみる.
3. 正負エネルギー状態，スピンの存在.

以降は次回の話題.

1. Lorentz 変換に対する不変性.
2. 電磁場 $\longleftarrow$ （可換）ゲージ変換に対する不変性.

Contents

Contents

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

特殊相対論的自由粒子に対するエネルギー・運動量関係式．

$$E^2 = c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4,$$

$$E:\ \text{エネルギー},\quad \boldsymbol{p}:\ \text{運動量},\quad m:\ \text{質量},\quad c:\ \text{真空中の光速度}.$$

量子力学への移行：

$$E \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\quad \boldsymbol{p} \to -\mathrm{i}\hbar\nabla.$$

Klein-Gordon 方程式

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\triangle\psi + m^2c^4\psi.$$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

特殊相対論的自由粒子に対するエネルギー・運動量関係式．

$$E^2 = c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4,$$

E ： エネルギー，　$\boldsymbol{p}$ ： 運動量，　m ： 質量，　c ： 真空中の光速度．

量子力学への移行：

$$E \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \boldsymbol{p} \to -\mathrm{i}\hbar\nabla.$$

Klein-Gordon 方程式

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\triangle\psi + m^2c^4\psi.$$

Klein-Gordon 方程式の問題点

- 非負の確率密度がつくれない．
- 負のエネルギー． $E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$．
  電子がより低いエネルギー状態に遷移して，原子の安定性が脅かされる．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

Schrödinger 方程式における確率密度保存則.

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\triangle\psi - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\psi, \quad \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\triangle\psi^* + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\psi^*,$$

$$\begin{aligned}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\triangle\psi - \psi\triangle\psi^*) \\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*),\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot j = 0,$$

確率密度 $\rho = \psi^*\psi \geq 0,$

確率密度流 $j = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

Klein-Gordon 方程式の場合にも，確率密度保存則を無理やり作ってみる．

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \triangle\psi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi, \quad \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} = \triangle\psi^* - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi^*.$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0,$$

確率密度 $$\rho = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right),$$

確率密度流 $$\boldsymbol{j} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).$$

確率密度は必ずしも $\rho \geq 0$ となるとは限らない．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

- 確率密度保存則を作るためには，Schrödinger 方程式を見るとわかるように，方程式は時間 t について 1 階微分であることが望ましい．
- 相対論（Lorentz 変換）：時間と空間を対等に扱っている．
  $\longrightarrow$ 空間についても 1 階微分である．

そこで，量子力学方程式を次の形に想定する．

相対論的量子力学方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-\mathrm{i}\hbar c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + mc^2\beta)\psi$$

$$(\,\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)\,).$$

解 ψ は Klein-Gordon 方程式

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\triangle\psi + m^2c^4\psi.$$

も満たしてほしい．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

ψ が前頁の相対論的量子力学方程式の解ならば，

$$
\begin{aligned}
-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= (-\mathrm{i}\hbar c\, \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2\beta)^2 \psi \\
&= -\hbar^2 c^2 \left[(\alpha^1)^2 \partial_1^2 + (\alpha^2)^2 \partial_2^2 + (\alpha^3)^2 \partial_3^2\right] \psi \\
&\quad - \hbar^2 c^2 \sum_{i<j} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi \\
&\quad - \mathrm{i}\hbar c \left[(\alpha^1 \beta + \beta \alpha^1)\partial_1 + (\alpha^2 \beta + \beta \alpha^2)\partial_2 + (\alpha^3 \beta + \beta \alpha^3)\partial_3\right] \psi \\
&\quad + m^2 c^4 \beta^2 \psi .
\end{aligned}
$$

これが次の Klein-Gordon 方程式と一致してほしい．

$$
-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \triangle \psi + m^2 c^4 \psi .
$$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

ψ が前頁の相対論的量子力学方程式の解ならば，

$$
\begin{aligned}
-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= (-\mathrm{i}\hbar c\, \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2\beta)^2 \psi \\
&= -\hbar^2 c^2 \left[(\alpha^1)^2 \partial_1^2 + (\alpha^2)^2 \partial_2^2 + (\alpha^3)^2 \partial_3^2\right] \psi \\
&\quad - \hbar^2 c^2 \sum_{i<j} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi \\
&\quad - \mathrm{i}\hbar c \left[(\alpha^1\beta + \beta\alpha^1)\partial_1 + (\alpha^2\beta + \beta\alpha^2)\partial_2 + (\alpha^3\beta + \beta\alpha^3)\partial_3\right] \psi \\
&\quad + m^2 c^4 \beta^2 \psi.
\end{aligned}
$$

これが次の Klein-Gordon 方程式と一致してほしい．

$$
-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \triangle \psi + m^2 c^4 \psi.
$$

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

$$
\delta^{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad \text{(Kronecker のデルタ)}.
$$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

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

これを満たす係数 $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3, \beta$ を探す．

α^i, β はただの数ではありえない． $\longrightarrow$ α^i, β は Hermite 行列である．

Hamiltonian は Hermite 演算子である．

α^i, β は少なくとも 4 次の正方行列である．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

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

これを満たす係数 $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3, \beta$ を探す．

α^i, β はただの数ではありえない． $\longrightarrow$ α^i, β は Hermite 行列である．

Hamiltonian は Hermite 演算子である．

α^i, β は少なくとも 4 次の正方行列である．

- α^i, β は ± 1 を固有値にもつ．

$$\because \quad (\alpha^i)^2 = \beta^2 = I.$$

- $\mathrm{Tr}\,\alpha^i = \mathrm{Tr}\,\beta = 0$.

$\because \quad \alpha^i\beta + \beta\alpha^i = 0$ と $\beta^2 = 1$ より，$\alpha^i = -\beta\alpha^i\beta$,

$$\mathrm{Tr}\,\alpha^i = -\,\mathrm{Tr}(\beta\alpha^i\beta) = -\,\mathrm{Tr}(\beta^2\alpha^i) = -\,\mathrm{Tr}\,\alpha^i,$$

よって，$\mathrm{Tr}\,\alpha^i = 0$．同様にして，$\mathrm{Tr}\,\beta = 0$.

α^i, β は偶数次& $\mathrm{Tr} = 0$ の Hermite 行列である．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

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

2 次正方行列の場合はどうか？

- Pauli 行列：$\sigma^i\sigma^j+\sigma^j\sigma^i=2\delta^{ij}$ を満たす．

$$\sigma^1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma^2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma^3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

- しかし，β はどうとるか？
- 次の線型空間は $\mathbb{R}$ 上 3 次元である．

$$\{\, 2\times 2 \text{ 複素 Hermite 行列 } A \mid \operatorname{Tr} A=0 \,\}.$$

- 4 個の $\{\alpha^1,\alpha^2,\alpha^3,\beta\}$ は $\mathbb{R}$ 上線型独立であることが簡単に示される．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

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

2 次正方行列の場合はどうか？

- Pauli 行列：$\sigma^i\sigma^j + \sigma^j\sigma^i = 2\delta^{ij}$ を満たす．

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- しかし，β はどうとるか？
- 次の線型空間は $\mathbb{R}$ 上 3 次元である．

$$\{\, 2 \times 2 \text{ 複素 Hermite 行列 } A \mid \operatorname{Tr} A = 0 \,\}.$$

- 4 個の $\{\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3, \beta\}$ は $\mathbb{R}$ 上線型独立であることが簡単に示される．

2 次正方行列の範囲では，所望の α^i, β は見つけられない．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

$$\alpha^i\alpha^j + \alpha^j\alpha^i = 2\delta^{ij}, \quad \alpha^i\beta + \beta\alpha^i = 0, \quad \beta^2 = 1. \tag{1}$$

4 次正方行列の場合，所望の α^i, β が見つけられる．

【例】Dirac 表示（標準表示）

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{i.e.,} \quad \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (\, i = 1, 2, 3 \,),$$

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

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (\, I_2 : \ 2 \text{ 次単位行列} \,)$$

∗ (1) を満たす 4 × 4Hermite 行列は，上の (α^i, β) とユニタリ同値なもの $(U^\dagger\alpha^i U, U^\dagger\beta U)$（$U$ はユニタリ行列）に限る．

∗ この他よく使われる行列 α^i, β として，カイラル表示（Weyl 表示）がある．

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

【まとめ】

Dirac 方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i}\hbar c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \beta mc^2\right)\psi.$$

- 解 ψ は 4 成分 "ベクトル" である．
- $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$, β は次を満たす 4×4 行列である．

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta^{ij}, \quad \{\alpha^i, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1.$$

- α^i, β の例：Dirac 表示，または，標準表示

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \ (\, i = 1, 2, 3\,), \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix},$$

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ \text{(Pauli 行列)}.$$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

Dirac 方程式からは確率密度保存則を導くことができる．

$$
\begin{aligned}
\text{Dirac 方程式} \quad & \frac{\partial \psi}{\partial t} = -c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \frac{mc^2}{\mathrm{i}\hbar} \beta \psi, \\
\text{その Hermite 共役} \quad & \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = -c \nabla \psi^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha} - \frac{mc^2}{\mathrm{i}\hbar} \psi^\dagger \beta.
\end{aligned}
$$

$\rho = \psi^\dagger \psi$ とおくと，

$$
\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi + \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} = -c \nabla \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi).
$$

Dirac 方程式：特殊相対論的量子力学の基礎方程式

Dirac 方程式からは確率密度保存則を導くことができる.

$$\text{Dirac 方程式} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi + \frac{mc^2}{\mathrm{i}\hbar}\beta\psi,$$
$$\text{その Hermite 共役} \quad \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = -c\nabla\psi^\dagger\cdot\boldsymbol{\alpha} - \frac{mc^2}{\mathrm{i}\hbar}\psi^\dagger\beta.$$

$\rho = \psi^\dagger\psi$ とおくと,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t}\psi + \psi^\dagger\frac{\partial \psi}{\partial t} = -c\nabla\cdot(\psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\psi).$$

確率密度保存則

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0,$$
$$\rho = \psi^\dagger\psi \quad \text{確率密度} \quad (\,\rho \geq 0\,),$$
$$\boldsymbol{j} = c\psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\psi \quad \text{確率密度の流れ.}$$

$*$ $(j^\mu) = (c\rho, \boldsymbol{j})$ は相対論的 4 元ベクトルである.

Contents

Dirac 方程式の解

Dirac 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-i\hbar c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \beta mc^2)\psi.$$

解 ψ は 4 成分 "ベクトル" である．

$$\psi = \psi(x) = \begin{pmatrix}\varphi(x)\\ \chi(x)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varphi^1(x)\\ \varphi^2(x)\\ \chi^1(x)\\ \chi^2(x)\end{pmatrix} \quad \left(x = (ct, x^1, x^2, x^3)\right).$$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\varphi(x) = mc^2\varphi(x) - i\hbar c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\chi(x), \\ i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\chi(x) = -i\hbar c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi(x) - mc^2\chi(x). \end{cases}$$

Dirac 方程式の解

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\varphi(x) = mc^2\varphi(x) - i\hbar c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\chi(x), \\ i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\chi(x) = -i\hbar c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi(x) - mc^2\chi(x). \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - Et)\right)\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

を代入すると，

$$\begin{cases} E\varphi = mc^2\varphi + c\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\chi, \\ E\chi = c\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi - mc^2\chi. \end{cases} \tag{2}$$

(2) より，特殊相対論のエネルギー・運動量関係式が再現される．

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \quad \left(E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}\right).$$

Dirac 方程式の解

ふたつの二成分関数 φ, χ は何を意味しているか？

それを調べるため，静止状態（$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$）の解を考える．

$$\begin{cases} E\varphi = mc^2\varphi, \\ E\chi = -mc^2\chi. \end{cases}$$

- 正エネルギー状態：$E = mc^2$ の場合，

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\chi = 0).$$

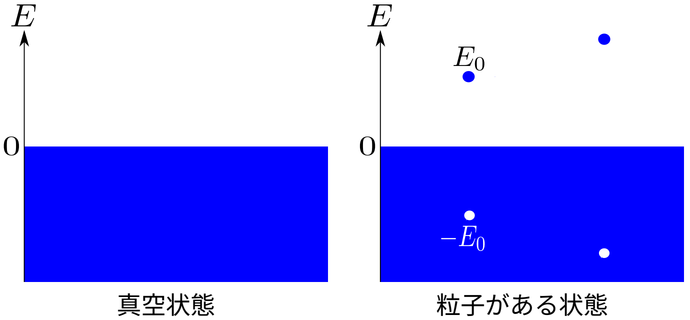
- 負エネルギー状態：$E = -mc^2$ の場合，

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\varphi = 0).$$

負エネルギー問題は解決していない？

Dirac 方程式の解

Dirac の空孔理論：負エネルギーの解釈．



- 真空状態：負エネルギー状態（ $E < 0$ ）は満杯である（Dirac の海）．
- エネルギー E_0 の粒子（電子）がある状態：
  Dirac の海からエネルギー $-E_0$ の状態が空き，「正孔（反粒子）」（陽電子）ができる．

$*$ 現在は Dirac 空孔理論は，場の量子論が確立するまでの過渡的な理論とされる．

Contents

非相対論的極限

- Dirac 方程式の解．

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}.$$

- φ, χ の二つの成分は何を意味しているのだろう？
- 非相対論的極限を考えることにより，これはスピンを意味することがわかる．

非相対論的極限

- Dirac 方程式の解．

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}.$$

- φ, χ の二つの成分は何を意味しているのだろう？
- 非相対論的極限を考えることにより，これはスピンを意味することがわかる．

電磁場中の荷電粒子に対する Dirac 方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\mathrm{i}\hbar c\, \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar} \boldsymbol{A}(x) \right) + mc^2 \beta + q\Phi(x) \right] \psi,$$

$\Phi(x)$： スカラーポテンシャル，　$\boldsymbol{A}(x)$： ベクトルポテンシャル.

波動関数 $\psi(x)$ から静止エネルギー mc^2 を分離する．

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} mc^2 t \right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

非相対論的極限

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\chi + q\Phi(x)\varphi, \tag{3}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\varphi + \left[q\Phi(x) - 2mc^2\right]\chi. \tag{4}$$

(4) の非相対論的極限（青字を無視する）

$$\chi = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\varphi. \tag{5}$$

(5) を (3) に代入して，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\right]^2\varphi + q\Phi(x)\varphi.$$

非相対論的極限

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\right]^2\varphi + q\Phi(x)\varphi.$$

公式

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

を用いると，

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\right]^2\varphi = \left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)^2\varphi + \frac{q}{\hbar}\boldsymbol{\sigma}\cdot\underbrace{\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}}_{\boldsymbol{B}}\varphi,$$

非相対論的極限

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\right]^2\varphi + q\Phi(x)\varphi.$$

公式

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

を用いると，

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)\right]^2\varphi = \left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)^2\varphi + \frac{q}{\hbar}\boldsymbol{\sigma}\cdot\underbrace{\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}}_{\boldsymbol{B}}\varphi,$$

Pauli 方程式

電磁場中の荷電粒子に対する非相対論的量子力学方程式．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)^2\varphi - \frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\varphi + q\Phi(x)\varphi.$$

非相対論的極限

Pauli 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(x)\right)^2\varphi - \underbrace{\frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\varphi}_{\text{Stern-Gerlach 項}} + q\Phi(x)\varphi.$$

磁場 $\boldsymbol{B}$ の方向に $z = x^3$ 軸をとると，

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} = B\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\begin{pmatrix}\varphi^1\\ 0\end{pmatrix} = B\begin{pmatrix}\varphi^1\\ 0\end{pmatrix}, \quad (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\begin{pmatrix}0\\ \varphi^2\end{pmatrix} = -B\begin{pmatrix}0\\ \varphi^2\end{pmatrix}.$$

φ の 2 個の成分はスピンを表すことがわかった．

Contents

まとめ

特殊相対論的量子力学方程式：Dirac 方程式．

- Klein-Gordon 方程式．
  負エネルギー，確率密度 ≥ 0 とならない．$\longrightarrow$ Dirac 方程式．
- Dirac 方程式は時間・空間座標について 1 階の微分方程式である．
- Dirac 方程式では非負の確率密度がつくれる．
  負エネルギー．$\longrightarrow$ Dirac の空孔理論．
- Dirac 方程式の解は 4 成分を持つ “ベクトル” である．
  $\longrightarrow$ スピンに対応（非相対論的極限）．

次回の内容．

- Dirac 方程式の Lorentz 変換に対する共変性．
- 可換ゲージ場としての電磁場．

まとめ

特殊相対論的量子力学方程式：Dirac 方程式.

- Klein-Gordon 方程式.
  負エネルギー，確率密度 ≥ 0 とならない. $\longrightarrow$ Dirac 方程式.
- Dirac 方程式は時間・空間座標について 1 階の微分方程式である.
- Dirac 方程式では非負の確率密度がつくれる.
  負エネルギー. $\longrightarrow$ Dirac の空孔理論.
- Dirac 方程式の解は 4 成分を持つ "ベクトル" である.
  $\longrightarrow$ スピンに対応（非相対論的極限）.

次回の内容.

- Dirac 方程式の Lorentz 変換に対する共変性.
- 可換ゲージ場としての電磁場.

Thank you!