

本節では Shrödinger 方程式を修正し、Lorentz 共変性を有する **Dirac 方程式**を導く。

Shrödinger 方程式は、ハミルトニアン $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V = E$ と運動量 \mathbf{p} に対して

$$E \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + V, \mathbf{p} \Rightarrow -i\hbar \nabla \quad (0.0.1)$$

という置き換えをすることにより得られた。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \quad (0.0.2)$$

しかし、式 (0.0.2) は Lorentz 共変性をもたない、つまり、相対論と矛盾している。なぜなら、相対論によると時間と空間は同等であるが、式 (0.0.2) は時間の 1 階微分、空間の 2 階微分になっているからである。

相対論的な電子の運動を記述する試みの一つに **Klein-Gordon 方程式**がある¹。まずはこれを導いてみる。静止している X 系と一定の速さ v で動く X' 系を考える。 $t = dt$ における X' 系の原点 O' の座標は

$$\begin{cases} X' \text{ 系} & (c d\tau, 0, 0, 0) \\ X \text{ 系} & (c dt, dx, dy, dz) \end{cases} \quad (0.0.3)$$

である。世界長さ不変性より

$$dx^2 + dy^2 + dz^2 - (c dt)^2 = -(c d\tau)^2 \quad (0.0.4)$$

が成り立つ。上式に m^2 を乗じ、 $(d\tau^2)$ で割る。

$$\left(m \frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dz}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dy}{dt} \right)^2 - \left(mc \frac{dt}{d\tau} \right)^2 = -(mc)^2 \quad (0.0.5)$$

左辺の第 1 項から第 3 項は運動量 p_x, p_y, p_z と同じ形をしているので

$$\mathbf{p}^2 \equiv \left(m \frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dz}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dy}{dt} \right)^2 \quad (0.0.6)$$

と置く。左辺第 4 項はとりあえず p_0 と置いておく。つまり、

$$\mathbf{p}^2 - p_0^2 = -(mc)^2 \quad (0.0.7)$$

である。 p_0 について計算を進めると、

$$\mathbf{p}^2 - p_0^2 = -(mc)^2 \quad (0.0.8)$$

$$p_0^2 = \mathbf{p}^2 + (mc)^2 \quad (0.0.9)$$

$$p_0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + (mc)^2} \quad (0.0.10)$$

$$= mc \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2}} \quad (0.0.11)$$

$$\simeq mc + \frac{1}{2} mc \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2} \quad (|\mathbf{p}| \ll mc^2) \quad (0.0.12)$$

$$= mc + \frac{\mathbf{p}^2}{2mc} \quad (0.0.13)$$

を得る。最後の式の右辺第 2 項はエネルギーを c で割ったものになっていることに気づく。よって、 p_0 に c を乗じたものはエネルギーを表すと解釈する。したがって、

$$E \equiv p_0 c = mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (0.0.14)$$

が得られる。これが相対論的な粒子のエネルギーであり、 mc^2 は**静止質量エネルギー**と呼ばれている²。

¹O.Klein(1894-1977), W.Gordon(??)

²有名な $E = mc^2$ である。

式 (0.0.7) に $p_0 = E/c$ を代入する.

$$\mathbf{p}^2 - \left(\frac{E}{c}\right)^2 = -(mc)^2 \quad (0.0.15)$$

これに対し素直に

$$E \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + V, \mathbf{p} \Rightarrow -i\hbar \nabla \quad (0.0.16)$$

という量子化を実行し, 波動関数に作用させる.

$$\left(-\hbar^2 \nabla^2 + \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \psi = -m^2 c^2 \psi \quad (0.0.17)$$

これを変形すると Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (0.0.18)$$

が得られる. また, これはダランベルシアン (d'Alembertian) $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = \partial^\mu \partial_\mu = \partial^2$ を用いて,

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (0.0.19)$$

と書くことができる.

Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (0.0.20)$$

Klein-Gordon 方程式は時間と空間を同等に扱っており, Lorentz 共変性を満たしている. しかし, これには波動関数の確率解釈が成り立たないという問題がある. これは以下のように説明される. 式 (0.0.18) は 2 階の微分方程式である. よって, ψ と $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ は独立に指定される. そのため, 粒子の存在確率が保存するためには

$$\frac{d}{dt} \left[\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^2 \right] = 0 \quad (0.0.21)$$

が必要であるが, ψ と $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ が独立に決められるため

$$\frac{d}{dt} \left[\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^2 \right] \quad (0.0.22)$$

$$= \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] d\mathbf{r} \neq 0 \quad (0.0.23)$$

となってしまう. よって, 波動関数の確率解釈が成り立たないため, 量子状態を記述する方程式として不適である³.

以上の議論から, 相対論的粒子の運動を記述する方程式は時間と空間の 1 階微分であることが必要だと推察される. Dirac はこの問題を次のように解決した. まずは

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar}\right) \psi = 0 \quad (0.0.24)$$

を出発点とする. 式 (0.0.18) と式 (0.0.24) を見比べて演算子が

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\alpha} \cdot \nabla - i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar}\right) \quad (0.0.25)$$

³Klein-Gordon 方程式はスピン 0 の粒子の場の方程式である.

のように因数分解できればよいとわかる⁴。見やすくするために少し表記を変える。

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} = \frac{1}{c} \partial_t + \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} \quad (0.0.26)$$

こうすると,

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\alpha} \cdot \nabla - i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} \right) \quad (0.0.27)$$

$$= \left(\frac{1}{c} \partial_t - \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i - i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} \right) \left(\frac{1}{c} \partial_t + \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_j \partial_j + i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} \right) \quad (0.0.28)$$

$$= \frac{1}{c^2} \partial_t^2 + \frac{1}{c} \partial_t \left(- \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i + \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_j \partial_j \right) + \frac{1}{c} i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} - \frac{1}{c} i\hat{\beta} \frac{mc}{\hbar} - \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \partial_i \partial_j \quad (0.0.29)$$

$$- i\frac{mc}{\hbar} \left(\sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \hat{\beta} \partial_i + \sum_{j=x,y,z} \hat{\beta} \hat{\alpha}_j \partial_j \right) + \hat{\beta}^2 \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \quad (0.0.30)$$

$$= \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i^2 \partial_i^2 - \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z, i \neq j} \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \partial_i \partial_j - i\frac{mc}{\hbar} \left(\sum_{i=x,y,z} (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) \partial_i \right) + \hat{\beta}^2 \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \quad (0.0.31)$$

を得る。よって、この因数分解が成り立つには $\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ が

$$\begin{cases} \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i^2 = \hat{\beta}^2 = 1 \\ \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_j = 0 \quad (j \neq k) \\ \hat{\alpha}_j \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_j = 0 \end{cases} \quad (0.0.32)$$

を満たさなければならない。この条件を満たすには $\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ が行列である必要がある⁵。

次に、 α_i と β を求めていく⁶。ハミルトニアンはエルミート演算子なので、 α_i , β もエルミート行列である。さらに、式(??)より、

$$\alpha_i^2 = I, \beta^2 = I \quad (0.0.33)$$

である。まずは β に関して考える。エルミート行列は適当なユニタリ行列によって対角化される。つまり、適当なユニタリ行列を V として

$$\beta' = V^\dagger \beta V = \text{diag}(b_1, b_2, \dots, b_n) \quad (0.0.34)$$

とできる。diag は () 内を対角成分とする対角行列を表す。 n は行列の次元である。さらに

$$\beta'^2 = (V^\dagger \beta V)^2 = V^\dagger \beta^2 V = \text{diag}(b_1^2, b_2^2, \dots, b_n^2) \quad (0.0.35)$$

である。 $\beta^2 = I$ より、

$$\beta'^2 = V^\dagger I V = I \quad (0.0.36)$$

だから、

$$b_1^2 = b_2^2 = \dots = b_n^2 = 1 \quad (0.0.37)$$

を得る。よって、 β の固有値は ± 1 であることがわかる。また、

$$\hat{\alpha}_j \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_j = 0 \quad (0.0.38)$$

⁴ α (の各成分) と β が交換関係を満たす数字であるか否かは明確ではないのでハットをつけた。

⁵行列であることが明確なのでハットを外す。

⁶Dirac-Pauli 表示まで読み飛ばしてよい。

より,

$$\beta = -\alpha_i \beta \alpha_i^{-1} = -\alpha_i \beta \alpha_i \quad (0.0.39)$$

が成り立つ. これを用いて β のトレースを計算する.

$$\text{tr}(\beta) = \text{tr}(\beta I) \quad (0.0.40)$$

$$= \text{tr}(\beta \alpha_i^2) \quad (0.0.41)$$

$$= \text{tr}(\alpha_i \beta \alpha_i) \quad (0.0.42)$$

$$= -\text{tr}(\beta) \quad (0.0.43)$$

$$\Rightarrow 2 \text{tr}(\beta) = 0 \quad (0.0.44)$$

よって, β の対角成分の和は 0 である. 対角成分は ± 1 であることがわかっているので, β は偶数次元の行列であることがわかる. 以上の議論は α^i でも同様である. ここで式 (0.0.24) を眺めてみると, $m \neq 0$ の場合, 独立な 4 つの行列が必要なことが確認できる. 偶数次元で最小行列は 2 行 2 列である. しかし, 2 行 2 列で独立なエルミート行列は 3 つ (Pauli 行列など) しかない. よって, 質量をもつ粒子の運動を記述するのに必要なエルミート行列の次元は 4 以上であることがわかる⁷.

その中の一つが **Dirac-Pauli 表示**で, 以下のように表される⁸.

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.45)$$

$$\alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.46)$$

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.47)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (0.0.48)$$

4 行 4 列のエルミート行列で式 (0.0.32) を満たすものは, これらか, それのユニタリ同値なものしかない⁹.

式 (0.0.24) を変形することで **Dirac 方程式**が得られる.

Dirac 方程式

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi = 0 \quad (0.0.50)$$

α, β は式 (0.0.32) を満たす. また, Dirac-Pauli 表示を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \begin{pmatrix} mc^2 I & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -mc^2 I \end{pmatrix} \psi \quad (0.0.51)$$

⁷質量 0 の粒子を記述する Weyl 行列は 2 行 2 列の行列を用いる.

⁸実際に計算して確かめよ.

⁹これは Clifford 代数を考えることで導ける. らしい. Clifford 代数とは

$$\{ \gamma^\mu, \gamma^\nu \} = 2\eta^{\mu\nu} I \quad (0.0.49)$$

という関係のことである. $\eta^{\mu\nu}$ は計量テンソル.

と書ける．成分表示で

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & -i\hbar c \partial_z & -i\hbar c(\partial_x - i\partial_y) \\ 0 & mc^2 & -i\hbar c(\partial_x + i\partial_y) & i\hbar c \partial_z \\ -i\hbar c \partial_z & -i\hbar c(\partial_x - i\partial_y) & -mc^2 & 0 \\ -i\hbar c(\partial_x + i\partial_y) & i\hbar c \partial_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \psi \quad (0.0.52)$$

である．

Dirac 方程式を見ると，波動関数も 4 成分必要であることがわかる．つまり，

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (0.0.53)$$

である．このような量を **Dirac spinor** という．

例として，Dirac 方程式の平面波解

$$\psi = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (0.0.54)$$

を考える．これを式 (0.0.52) に代入する．

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar ck & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & -\hbar ck \\ \hbar ck & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & -\hbar ck & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 a_1 + \hbar ck a_3 \\ mc^2 a_2 - \hbar ck a_4 \\ -mc^2 a_3 + \hbar ck a_1 \\ -mc^2 a_4 - \hbar ck a_2 \end{pmatrix} \quad (0.0.55)$$

a_1 と a_3 に関する部分を取り出すと

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & cp \\ cp & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad (0.0.56)$$

a_2 と a_4 に関する部分を取り出すと

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & -cp \\ -cp & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (0.0.57)$$

である．これらの式で

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.58)$$

以外の解が存在するには

$$\det \begin{pmatrix} \hbar\omega - mc^2 & \pm cp \\ \pm cp & \hbar\omega + mc^2 \end{pmatrix} = 0 \quad (0.0.59)$$

が必要である．よって

$$\hbar\omega = \pm \sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} \quad (0.0.60)$$

が得られる．したがって，式 (0.0.56) と式 (0.0.57) の固有関数は

$$\tan 2\theta = \frac{p}{mc} \quad (0.0.61)$$

として

$\hbar\omega = \sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2}$ のとき

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \quad (0.0.62)$$

$\hbar\omega = -\sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2}$ のとき

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (0.0.63)$$

である。また、式 (0.0.55) の固有値問題の解は

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (0.0.64)$$

と

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (0.0.65)$$

の線形結合で表される。ここではこれら2つの独立解の意味を考えてみる。 $p \ll mc$ とする。
まず $E = \hbar\omega = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ のとき、独立解は

$$\psi_{\uparrow}^+ = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.66)$$

と

$$\psi_{\downarrow}^+ = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ \cos \theta \\ 0 \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.67)$$

である。これらは上2成分は今まで慣れ親しんできたアップスピンとダウンスピンの固有ベクトルと一致していることに気づくだろう。これは粒子解を示している。

次に $E = \hbar\omega = -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ のとき、独立解は

$$\psi_{\uparrow}^- = e^{i(kz - \omega t)} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (0.0.68)$$

と

$$\psi_{\downarrow}^- = e^{i(kz - \omega t)} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (0.0.69)$$

である。これらは下2成分のみで表されており、反粒子解である。

しかし、負のエネルギーが存在すると、正エネルギーの電子が負エネルギーの状態に落ち込み、電子が安定でなくなってしまう。負エネルギー解の存在は深刻な問題である。これに対し、Dirac は以下の**空孔理論** (hole theory) を提案した。空孔理論は、真空を、負エネルギーの電子が完全に埋まっている状態として定義する。この負エネルギー状態が電子で埋め尽くされている状態を **Dirac の海** という。真空状態に1個の電子を導入したとき、Pauli の排他律により電子は正エネルギー状態に配置される。これにより、電子の安定性は保証される。また、電磁場を真空に加えた時、負エネルギー状態の電子が Dirac の海を飛び出し正エネルギー状態に励起される。負エネルギー電子が減ったので、エネルギーは増えたとして観測される。Dirac の海に空いた穴は電子と同じ質量、反対の電荷をもつ。これを**陽電子**という。一般に、同じ質量をもち同じ大きさの異符号の電荷をもつ粒子は**反粒子**と呼ばれる。