最後に,電磁場中の電子を考え,Dirac 方程式の非相対論的極限 $(|p| \ll c)$ が Schrödinger 方程式であることを示す.Dirac 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)\psi \tag{0.0.1}$$

である. ここに電磁場を次のように導入する.

$$\begin{cases} \boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}(e > 0) \\ \phi = 0 \end{cases}$$
 (0.0.2)

これを用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) + \beta mc^2)\psi$$
 (0.0.3)

である. ここで,解の形を

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \tag{0.0.4}$$

とする. これを式 (0.0.3) に代入する.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$$
(0.0.5)

$$= c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) \begin{pmatrix} \psi_b \\ \psi_a \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a \\ -\psi_b \end{pmatrix}$$
 (0.0.6)

また、粒子のエネルギーを静止質量エネルギー (mc^2) と非相対論的エネルギーの項 $(\varepsilon_{\rm NR})$ に分け、

$$\varepsilon \sim mc^2 + \varepsilon_{\rm NR}$$
 (0.0.7)

波動関数の時間発展を次のように記述する.

$$\begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}$$
 (0.0.8)

この表式を用いると式 (0.0.3) の左辺は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} \right] e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}$$
(0.0.9)

となる. これより,

$$i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} \right] e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) \begin{pmatrix} \psi_b \\ \psi_a \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a \\ -\psi_b \end{pmatrix}$$
(0.0.10)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) \begin{pmatrix} \psi_b^0 \\ \psi_a^0 \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix}$$
(0.0.11)

が得られる. 上式の 2 行目に着目する. 両辺を mc^2 で割ると

$$\frac{1}{mc^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_b^0 \right) = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})}{mc} \psi_a^0 - 2\psi_b^0$$
(0.0.12)

である. ここで左辺は

$$\frac{1}{mc^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\frac{\varepsilon_{NR}}{\hbar}t} \right) \propto \frac{\varepsilon_{NR}}{mc^2}$$
 (0.0.13)

である. また,

$$\varepsilon_{\rm NR} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{0.0.14}$$

だから非相対論的極限 $(|\mathbf{p}| \ll c)$ で左辺は 0 となる. よって

$$\psi_b^0 = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})}{2mc} \psi_a^0 \tag{0.0.15}$$

(0.0.16)

を得る. これは粒子解と反粒子解を結ぶ式である. これを用いると1行目は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a^0 = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})\psi_b^0 \tag{0.0.17}$$

$$= \frac{[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})]}{2m} \psi_a^0$$
 (0.0.18)

と書き直される. 次に $[\sigma \cdot (p+eA)][\sigma \cdot (p+eA)]$ を計算する. まず、Pauli 行列には次の性質がある.

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{a}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{b}}) = (\sum_{i} \sigma_{i} \hat{a}_{i})(\sum_{j} \sigma_{j} \hat{a}_{j})$$

$$(0.0.19)$$

$$=\sum_{i}\sum_{j}\sigma_{i}\sigma_{j}\hat{a}_{i}\hat{b}_{j} \tag{0.0.20}$$

$$= \sum_{i} \sum_{j} \frac{1}{2} (\{\sigma_i, \sigma_j\} + [\sigma_i, \sigma_j]) \hat{a}_i \hat{b}_j$$

$$(0.0.21)$$

$$= \sum_{i} \sum_{j} \frac{1}{2} (2\delta_{i,j} + 2i \sum_{k} \varepsilon_{ijk} \sigma_k) \hat{a}_i \hat{b}_j$$

$$(0.0.22)$$

$$= \sum_{i} \hat{a}_{i} \hat{b}_{i} + i \sigma_{k} \sum_{i} \sum_{j} \sum_{k} \varepsilon_{ijk} \hat{a}_{i} \hat{b}_{j}$$

$$(0.0.23)$$

$$= \hat{\boldsymbol{a}}^2 + i \sum_{k} \sigma_k (\hat{\boldsymbol{a}} \times \hat{\boldsymbol{b}})_k \tag{0.0.24}$$

$$= \hat{\boldsymbol{a}}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\boldsymbol{a}} \times \hat{\boldsymbol{b}}) \tag{0.0.25}$$

ここで ε_{ijk} は Levi-Civita の完全反対称テンソルで

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (i, j, k) = (x, y, z), (y, z, x), (z, x, y) \\ -1 & (i, j, k) = (z, y, x), (y, x, z), (x, z, y) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$
(0.0.26)

である. これを使えば外積は

$$(\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b})_k = \sum_i \sum_j \varepsilon_{ijk} a_i b_j \tag{0.0.27}$$

と表される. また, $\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}$ は反交換関係で

$$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{0.0.28}$$

という演算子である. 式 (??) を用いると

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})] = (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A}) \times (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})]$$
(0.0.29)

$$= (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})^2 + i\boldsymbol{e}\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\boldsymbol{A} \times \hat{\boldsymbol{p}}) + (\hat{\boldsymbol{p}} \times e\boldsymbol{A})]$$
(0.0.30)

(0.0.31)

と変形される. ここで,

$$[(\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}}) + (\hat{\mathbf{p}} \times e\mathbf{A})]\psi = (\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}})\psi + (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A})\psi$$

$$(0.0.32)$$

$$= -i\hbar[(\mathbf{A} \times \nabla)\psi + (\nabla \times \mathbf{A})\psi] \tag{0.0.33}$$

$$= -i\hbar[\mathbf{A} \times (\nabla \psi) + (\nabla \psi) \times \mathbf{A} + (\nabla \times \mathbf{A})\psi]$$
 (0.0.34)

$$= -i\hbar[-(\nabla\psi) \times \mathbf{A} + (\nabla\psi) \times \mathbf{A} + (\nabla \times \mathbf{A})\psi]$$
 (0.0.35)

$$= -i\hbar(\nabla \times \mathbf{A})\psi \tag{0.0.36}$$

が成り立つ. 以上より,

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})] = (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{A})$$
(0.0.37)

$$= (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B} \tag{0.0.38}$$

したがって,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a^0 = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B} \right] \psi_a^0$$
 (0.0.39)

が得られる。右辺第2項 $\frac{e\hbar}{2m} \pmb{\sigma} \cdot \pmb{B}$ は Zeeman 相互作用によるエネルギーを表す。これは磁場中の自由粒子の Schrödinger 方程式と一致している。つまり,電磁場中の自由粒子の Dirac 方程式の非相対論的極限は,電磁場中の自由粒子の Schrödinger 方程式と一致する。