相対論的量子力学

anko9801

2023 年 11 月 24 日

目次

0.1 電磁場中の荷電粒子 2
1 相対論的波動方程式 2
1.1 クライン・ゴルドン方程式 2
1.2 ディラック方程式 4
1.3 ディラック方程式の共変性 5
1.4 無限小変換 7
1.5 有限ローレンツ変換 8
1.6 非相対論的極限 9
1.7 双線型形式の変換性 9
1.8 2 次元時空におけるディラック方程式 14
2 指数関数 16
3 スピノル球関数 18
4 水素原子における電子のエネルギー準位 22

0.1 電磁場中の荷電粒子

スカラーポテンシャル ϕ, ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ の中での電荷 q を持つ粒子の運動は次の置き換えで記述できる。

$$H \mapsto H - q\phi(\boldsymbol{r}, t) \tag{0.1}$$

$$\boldsymbol{p} \mapsto \boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \tag{0.2}$$

一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ の場合, ベクトルポテンシャルは $\boldsymbol{A} = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$ (対称ゲージ) と置くことができるので

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{q^2}{8m}(\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{r}^2 - (\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{r})^2) \tag{0.3}$$

$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ となるので

$$\begin{aligned} H &= \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})^2}{2m} && (0.4) \\ &= \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p - qA})^2}{2m} && (0.5) \\ &= \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p - qA})^2 - 2\frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{s} \qquad \left(\boldsymbol{s} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right) && (0.6) \end{aligned}$$

となる。ゼーマン相互作用

1 相対論的波動方程式

1.1 クライン・ゴルドン方程式

相対論的力学におけるエネルギーと運動量の関係に基づいてローレンツ変換のもとで共変となる相対論的波動方程式を構築する。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(t, \boldsymbol{r}) \tag{1.1}$$

相対論的力学における自由粒子のエネルギーと運動量の関係 $E = \pm\sqrt{(mc^2)^2 + (c\boldsymbol{p})^2}$ より

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \pm\sqrt{(mc^2)^2 + (c\hat{\boldsymbol{p}})^2}\psi(x) \tag{1.2}$$

となるが

1. 時間微分と空間微分について非対称であり, ローレンツ変換のもとでの共変性が見えない。

2. 実際に, 光速よりも速く情報が伝播しないという, 相対論的な因果律を破る。
3. 空間微分が平方根の中に入っているため連続の方程式を導くことができず, 波動関数の確率解釈ができない。

上記の波動方程式では, 時間に関して 1 階微分, 空間に関して 2 階微分が平方根の中に入っている. この非対称性を解消するため, 時間微分を両辺に作用させると

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \boldsymbol{p}\right) = \left(i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -i\hbar\nabla\right) = i\hbar\partial^\mu \tag{1.3}$$

$$(mc^2)^2 = E^2 - (c\boldsymbol{p})^2 = c^2 p_\mu p^\mu = -(\hbar c)^2\partial_\mu\partial^\mu \tag{1.4}$$

$$\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi(x) = 0 \tag{1.5}$$

を得る。これをクライン・ゴルドン方程式と呼ぶ。

定義 (クライン・ゴルドン方程式)**.**

$$\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi(x) = 0 \tag{1.6}$$

クライン・ゴルドン方程式から

$$\psi^*(x)\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi(x) = 0 \tag{1.7}$$

$$\psi(x)\left[\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi^*(x) = 0 \tag{1.8}$$

が得られるので両辺の差を取って

$$\psi^*(x)\partial_\mu\partial^\mu\psi(x) - \psi(x)\partial_\mu\partial^\mu\psi^*(x) = 0 \tag{1.9}$$

$$\partial_\mu[\psi^*(x)\partial^\mu\psi(x) - \psi(x)\partial^\mu\psi^*(x)] = 0 \tag{1.10}$$

$$\partial_\mu j^\mu(x) = 0 \tag{1.11}$$

連続の方程式が成り立つ。

$$j^\mu(x) := \psi^*(x)\partial^\mu\psi(x) - \psi(x)\partial^\mu\psi^*(x) \tag{1.12}$$

これより保存則が成り立つ。となる。ただし $\rho(x) = j^0(x)/c$ は非負とは限らないため粒子の存在確率密度と解釈することはできない。

クライン・ゴルドン方程式では時間に関して 2 階微分を含むため、$j^0(x)$ に時間微分が残り、確率解釈ができなかった。時間に関して 1 階微分のみを含む相対論的波動方程式を構築したい。また共変性を満足するためには空間に関しても 1 階微分のみを含む必要がある。そこで

1.2 ディラック方程式

確率解釈できる相対論的波動方程式を構築する。

次の形となることを仮定する。ただし、α^i, β は次を満たす無次元の未知係数である。これをディラック方程式という。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \Big(c\alpha^i p_i + \beta mc^2\Big)\psi(x) \tag{1.13}$$

これがクライン・ゴルドン方程式を満たすことから

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\psi(x) &= \Big(c\alpha^i p_i + \beta mc^2\Big)^2\psi(x) &(1.14)\\ &= \Big[c^2\alpha^i p_i\alpha^j p_j + \beta^2(mc^2)^2 + (\alpha^i\beta + \beta\alpha^i)p_i(mc)\Big]\psi(x) &(1.15)\\ &= [(c\boldsymbol{p})^2 + (mc^2)^2]\psi(x) &(1.16)\end{aligned}$$

係数を比較することによって α^i と β は次を満たすエルミート行列であることがわかる。

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta^{ij}, \qquad \beta^2 = 1, \qquad \{\alpha^i, \beta\} = 0 \tag{1.17}$$

さらにガンマ行列 $\gamma^\mu := (\beta, \beta\boldsymbol{\alpha})$ を定義する。両辺に左から β/c を掛けてディラック方程式は次のようになる。

$$i\hbar\gamma^0\partial_0\psi(x) = \Big(-i\hbar\gamma^i\partial_i + mc\Big)\psi(x) \tag{1.18}$$

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi(x) = 0 \tag{1.19}$$

ガンマ行列の同値な条件は次のようになる。

$$(\gamma^0)^\dagger = \beta^\dagger = \beta = \gamma^0 \tag{1.20}$$

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta\alpha^i)^\dagger = \alpha^i\beta = -\beta\alpha^i = -\gamma^i \tag{1.21}$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \begin{cases}\beta\alpha^\mu\beta\alpha^\nu + \beta\alpha^\nu\beta\alpha^\mu = -\beta^2(\alpha^\mu\alpha^\nu + \alpha^\nu\alpha^\mu) = -2\delta^{\mu\nu} & (\mu > 0, \nu > 0)\\ \beta\beta\alpha^\nu + \beta\alpha^\nu\beta = \beta^2\alpha^\nu - \beta^2\alpha^\nu = 0 & (\mu = 0, \nu > 0)\\ 2\beta^2 = 2 & (\mu = \nu = 0)\end{cases} \tag{1.22}$$

$$= 2g^{\mu\nu} \tag{1.23}$$

より γ^0 はエルミート行列で γ^i は反エルミート行列である。$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \{\gamma^\nu, \gamma^\mu\}$ より $\mu \leq \nu$ のときを示せばよい。

定義 (ディラック方程式)**.**

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi(x) = 0 \tag{1.24}$$

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \qquad (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i, \qquad \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \tag{1.25}$$

式 (1.17) を満たす行列は例えばディラック表示がある。

$$\alpha^i = \sigma^i \otimes \sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \sigma^0 \otimes \sigma^3 = \begin{pmatrix} \sigma^0 & 0 \\ 0 & -\sigma^0 \end{pmatrix} \tag{1.26}$$

ただしパウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$ は次のように定義される。

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.27}$$

パウリ行列は Hermite 行列 $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ かつユニタリ行列 $\sigma_i^\dagger\sigma_i = \sigma_i\sigma_i^\dagger = I$ で次の性質を満たす。

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{1.28}$$

これより

$$(\alpha^i)^\dagger = \alpha^i, \qquad \beta^\dagger = \beta, \qquad \beta^2 = (\sigma^0 \otimes \sigma^3)^2 = 1 \tag{1.29}$$

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = \{\sigma^i \otimes \sigma^1, \sigma^j \otimes \sigma^1\} = (\sigma^i\sigma^j + \sigma^j\sigma^i) \otimes (\sigma^1)^2 = 2\delta^{ij} \tag{1.30}$$

$$\{\alpha^i, \beta\} = \{\sigma^i \otimes \sigma^1, \sigma^0 \otimes \sigma^3\} = (\sigma^i\sigma^0 - \sigma^0\sigma^i) \otimes (\sigma^1\sigma^3) = 0 \tag{1.31}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \Big(c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x)) + \beta mc^2 + q\phi(x)\Big)\psi(x) \tag{1.32}$$

$$= \begin{pmatrix} +mc^2 + q\phi(x) & c\boldsymbol{\sigma} \cdot [\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x)] \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot [\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x)] & -mc^2 + q\phi(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix} \tag{1.33}$$

1.3 ディラック方程式の共変性

$$A_\mu(t, \boldsymbol{r}) = \left(\frac{\phi(t, \boldsymbol{r})}{c}, \boldsymbol{A}(t, \boldsymbol{r})\right) \tag{1.34}$$

共変微分 D_μ を次のように定義する。

$$D_\mu := \partial_\mu - \frac{q}{i\hbar}A_\mu(x) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{i\hbar}\frac{\phi(t,\boldsymbol{r})}{c} + \frac{q}{i\hbar}\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{r})\right) \tag{1.35}$$

$$(i\hbar\gamma^\mu D_\mu - mc)\psi(x) = 0 \tag{1.36}$$

まず次の式が成り立つことを確認する。

$$D_\mu D_\nu^\dagger = \left(\partial_\mu - \frac{q}{i\hbar}A_\mu(x)\right)\left(\partial_\nu + \frac{q}{i\hbar}A_\nu(x)\right) \tag{1.37}$$

$$= \partial_\mu\partial_\nu + \frac{q}{i\hbar}\partial_\mu A_\nu(x) - \frac{q}{i\hbar}A_\mu(x)\partial_\nu + \frac{q^2}{\hbar^2}A_\mu(x)A_\nu(x) \tag{1.38}$$

よって次のように示せる。

$$(\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = \sum_{i,j}(D_i\sigma^i)(D_j\sigma^j)^\dagger \tag{1.39}$$

$$= \sum_{i,j}\left(\delta^{ij}I + i\sum_k \varepsilon^{ijk}\sigma^k\right)D_iD_j^\dagger \tag{1.40}$$

$$= \sum_i D_i^2 + i\sum_{i,j,k}\varepsilon^{ijk}\sigma^k D_iD_j^\dagger \tag{1.41}$$

$$= \boldsymbol{D}^2 + i\sum_{i,j,k}\varepsilon^{ijk}\sigma^k\frac{q}{i\hbar}\partial_i A_j(x) \tag{1.42}$$

$$= \boldsymbol{D}^2 + \frac{q}{\hbar}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A}(x)) \tag{1.43}$$

$$= \boldsymbol{D}^2 + \frac{q}{\hbar}\boldsymbol{B}(x)\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{1.44}$$

慣性系 x^μ と共変微分 D_μ におけるローレンツ共変性は次のようになる。

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \tag{1.45}$$

$$D'_\mu = \Lambda_\mu{}^\nu D_\nu \tag{1.46}$$

波動関数 $\psi(x)$ のローレンツ共変性

$$\psi'(x') = S_\Lambda\psi(x) \tag{1.47}$$

このときディラック方程式は次のように変換でき、共変性を満たす。$S_\Lambda^{-1}\gamma^\mu S_\Lambda = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu$ を満

たすように定めた S_Λ

$$
\begin{aligned}
(i\hbar\gamma^\mu D'_\mu - mc)\psi'(x') &= (i\hbar\gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu D_\mu - mc)S_\Lambda\psi(x) && (1.48)\\
&= S_\Lambda(i\hbar S_\Lambda^{-1}\gamma^\mu S_\Lambda \Lambda^\nu_\mu D_\mu - mc)\psi(x) && (1.49)\\
&= S_\Lambda(i\hbar \Lambda^\mu_\lambda \gamma^\lambda \Lambda^\nu_\mu D_\mu - mc)\psi(x) && (1.50)\\
&= S_\Lambda(i\hbar \delta^\nu_\lambda \gamma^\lambda D_\mu - mc)\psi(x) && (1.51)\\
&= S_\Lambda(i\hbar \gamma^\nu D_\mu - mc)\psi(x) = 0 && (1.52)
\end{aligned}
$$

1.4 無限小変換

無限小変換を考える。

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu + \omega^\mu{}_\nu \tag{1.53}$$

$$\omega^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta\eta_x & -\Delta\eta_y & -\Delta\eta_z \\ -\Delta\eta_x & 0 & \Delta\theta_z & -\Delta\theta_y \\ -\Delta\eta_y & -\Delta\theta_z & 0 & \Delta\theta_x \\ -\Delta\eta_z & \Delta\theta_y & -\Delta\theta_x & 0 \end{pmatrix} \tag{1.54}$$

$$
\begin{aligned}
\Lambda^\mu{}_\nu \Lambda_\mu{}^\lambda &= \delta^\lambda_\nu && (1.55)\\
\Lambda^\mu{}_\nu \Lambda_\mu{}^\lambda &= (\delta^\mu_\nu + \omega^\mu{}_\nu)(\delta^\lambda_\mu + \omega_\mu{}^\lambda) = \delta^\lambda_\nu + \omega_\nu{}^\lambda + \omega^\lambda{}_\nu && (1.56)
\end{aligned}
$$

$\omega_{\nu\lambda} = -\omega_{\lambda\nu}$ と反対称となる。そして S_Λ を次のように定義する。

$$S_\Lambda = 1 + \omega_{\mu\nu}\Gamma^{\mu\nu}, \qquad S_\Lambda^{-1} = 1 - \omega_{\mu\nu}\Gamma^{\mu\nu} \tag{1.57}$$

対称と反対称だと 0 になるから $\Gamma^{\mu\nu}$ は反対称としても構わないが今回は $\Gamma^{\mu\nu} = c\gamma^\mu\gamma^\nu$ とする。

$$
\begin{aligned}
S_\Lambda^{-1}\gamma^\mu S_\Lambda &= \Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu && (1.58)\\
(1-\omega_{\kappa\lambda}\Gamma^{\kappa\lambda})\gamma^\mu(1+\omega_{\kappa\lambda}\Gamma^{\kappa\lambda}) &= (\delta^\mu_\nu + \omega^\mu{}_\nu)\gamma^\nu && (1.59)\\
\gamma^\mu - \omega_{\kappa\lambda}\Gamma^{\kappa\lambda}\gamma^\mu + \omega_{\kappa\lambda}\gamma^\mu\Gamma^{\kappa\lambda} &= \gamma^\mu + \omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu && (1.60)\\
\omega_{\kappa\lambda}\gamma^\mu\Gamma^{\kappa\lambda} - \omega_{\kappa\lambda}\Gamma^{\kappa\lambda}\gamma^\mu &= \omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu && (1.61)\\
c\omega_{\kappa\lambda}\gamma^\mu\gamma^\kappa\gamma^\lambda - c\omega_{\kappa\lambda}\gamma^\kappa\gamma^\lambda\gamma^\mu &= c\omega_{\kappa\lambda}\gamma^\mu\gamma^\kappa\gamma^\lambda - c\omega_{\kappa\lambda}(2g^{\mu\lambda}\gamma^\kappa - 2g^{\mu\kappa}\gamma^\lambda + \gamma^\mu\gamma^\kappa\gamma^\lambda) && (1.62)\\
&= c(-2\omega_\kappa{}^\mu\gamma^\kappa + 2\omega^\mu{}_\lambda\gamma^\lambda) = 4c\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu = \omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu && (1.63)
\end{aligned}
$$

$$S_\Lambda = 1 + \frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu \tag{1.64}$$

1.5　有限ローレンツ変換

$$S_\Lambda = \tag{1.65}$$

$$\psi'(x') = \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\eta}}{2}\cdot\boldsymbol{\alpha} + i\frac{\boldsymbol{\theta}}{2}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right)\psi(x) \tag{1.66}$$

Σ^i を次のように定義する。

$$\Sigma^i := \frac{i}{2}\sum_{j,k}\varepsilon^{ijk}\gamma^j\gamma^k \tag{1.67}$$

$$(\Sigma^i)^\dagger = -\frac{i}{2}\sum_{j,k}\varepsilon^{ijk}\gamma^k\gamma^j = \Sigma^i \tag{1.68}$$

$$\{\Sigma^i, \Sigma^j\} = 2\delta^{ij} \tag{1.69}$$

$i = j$ のとき、ある k, l が存在して

$$\begin{aligned}
\{\Sigma^i, \Sigma^j\} &= -\frac{1}{2}\left(\sum_{a,b}\varepsilon^{iab}\gamma^a\gamma^b\right)^2 && (1.70)\\
&= -\frac{1}{2}\left(\gamma^k\gamma^l - \gamma^l\gamma^k\right)^2 && (1.71)\\
&= -\frac{1}{2}\left(\gamma^k\gamma^l\gamma^k\gamma^l - \gamma^k\gamma^l\gamma^l\gamma^k - \gamma^l\gamma^k\gamma^k\gamma^l + \gamma^l\gamma^k\gamma^l\gamma^k\right) && (1.72)\\
&= 2 && (1.73)
\end{aligned}$$

$i \neq j$ のとき a, b, c, d のいづれか 2 つ 1 組は同じであるから

$$\begin{aligned}
\{\Sigma^i, \Sigma^j\} &= -\frac{1}{4}\sum_{a,b}\sum_{c,d}(\varepsilon^{iab}\gamma^a\gamma^b\varepsilon^{jcd}\gamma^c\gamma^d + \varepsilon^{jcd}\gamma^c\gamma^d\varepsilon^{iab}\gamma^a\gamma^b) && (1.74)\\
&= -\frac{1}{4}\sum_{a,b}\sum_{c,d}\varepsilon^{iab}\varepsilon^{jcd}(1 + (-1)^3)\gamma^a\gamma^b\gamma^c\gamma^d && (1.75)\\
&= 0 && (1.76)
\end{aligned}$$

よって $\{\Sigma^i, \Sigma^j\} = 2\delta^{ij}$ である。

$\boldsymbol{\Sigma} = (\Sigma^1, \Sigma^2, \Sigma^3)$ と任意の $\boldsymbol{v} = (v^1, v^2, v^3)$ に対して次が成り立つことを示せ。

$$(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\Sigma})^2 = (v^i\Sigma^i)(v^j\Sigma^j)^\dagger = v^i\Sigma^i\Sigma^j(v^j)^\dagger = \delta^{ij}v^i(v^j)^\dagger = \boldsymbol{v}^2 \tag{1.77}$$

1.6 非相対論的極限

ディラック表示のディラック方程式

非相対論的極限 $mc^2 \to \infty$ において、シュレーディンガー方程式に帰着する。荷電粒子に対するクライン・ゴルドン方程式

$$[\hbar^2 D^2 + (mc)^2]\psi(x) = 0 \tag{1.78}$$

$$\psi(x) = e^{-i(mc^2)t/\hbar}\varphi(x) \tag{1.79}$$

とおくと

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \frac{mc^2}{i\hbar}e^{-i(mc^2)t/\hbar}\varphi(x) = \frac{mc^2}{i\hbar}\psi(x) \tag{1.80}$$

$$D_\mu = \partial_\mu - \frac{q}{i\hbar}A_\mu(x) = \frac{1}{i\hbar}(p_\mu - qA_\mu(x)) = \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c}\phi(x), \boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x)\right) \tag{1.81}$$

$$D^2 = D_\mu D^\mu = -\frac{1}{\hbar^2}\left[\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c}\phi(x)\right)^2 - (\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2\right] \tag{1.82}$$

$$\begin{aligned}
[\hbar^2 D^2 + (mc)^2]\psi(x) &= \left[(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2 - \left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c}\phi(x)\right)^2 + (mc)^2\right]\psi(x) &(1.83)\\
&= \left[(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2 - \left(mc - \frac{q}{c}\phi(x)\right)^2 + (mc)^2\right]\psi(x) &(1.84)\\
&= \left[(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2 + 2mq\phi(x) - \left(\frac{q}{c}\phi(x)\right)^2\right]\psi(x) &(1.85)\\
&= 2m\left[-\frac{q^2\phi^2}{2mc^2} + \frac{(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2}{2m} + q\phi(x)\right]\psi(x) &(1.86)
\end{aligned}$$

非相対論的極限 $mc^2 \to \infty$ のとき $\phi(x)$ は時間に依存しないからシュレーディンガー方程式となる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \left(\frac{(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(x))^2}{2m} + q\phi\right)\psi(x) \tag{1.87}$$

1.7 双線型形式の変換性

ローレンツ変換 S_Λ の中で本義ローレンツ変換 S_L と空間反転 S_P

$$S_L = \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\eta}}{2}\cdot\boldsymbol{\alpha} + i\frac{\boldsymbol{\theta}}{2}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right) \tag{1.88}$$

$$S_P = \gamma^0 \tag{1.89}$$

$$S_L^\dagger = \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\eta}}{2}\cdot\boldsymbol{\alpha} - i\frac{\boldsymbol{\theta}}{2}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right) \tag{1.90}$$

$$\gamma^0 S_L^\dagger \gamma^0 = \exp\left(+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2}\cdot\boldsymbol{\alpha} - i\frac{\boldsymbol{\theta}}{2}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right) \tag{1.91}$$

$$S_L^{-1} = \exp\left(+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2}\cdot\boldsymbol{\alpha} - i\frac{\boldsymbol{\theta}}{2}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\right) \tag{1.92}$$

より $S_L^\dagger S_L \neq 1$ となる。

$$\psi'^\dagger(x')\psi'(x') = \psi^\dagger(x) S_L^\dagger S_L \psi(x) \neq \psi^\dagger(x)\psi(x) \tag{1.93}$$

定義.

$$\bar{\psi}(x) := \psi^\dagger(x)\gamma^0 \tag{1.94}$$

$$\bar{\psi}'(x') = \psi'^\dagger(x')\gamma^0 = \psi^\dagger(x) S_L^\dagger \gamma^0 = \psi^\dagger(x)\gamma^0 S_L^{-1} = \bar{\psi}(x) S_L^{-1} \tag{1.95}$$

$$\bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \psi^\dagger(x) S_L^{-1} S_L \psi(x) = \psi^\dagger(x)\psi(x) \tag{1.96}$$

カイラリティ γ^5 を次のように定義する。

$$\gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{1.97}$$

$$(\gamma^5)^\dagger = -i(-\gamma^3)(-\gamma^2)(-\gamma^1)\gamma^0 = i\gamma^3\gamma^2\gamma^1\gamma^0 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \gamma^5 \tag{1.98}$$

$$(\gamma^5)^2 = -(\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3)(\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3)^\dagger = -(\gamma^0)^2(\gamma^1)^2(\gamma^2)^2(\gamma^3)^2 = 1 \tag{1.99}$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = i(\gamma^\mu\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 + \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^\mu) = i((-1)^\mu + (-1)^{3-\mu})\gamma^0\cdots(\gamma^\mu)^2\cdots\gamma^3 = 0 \tag{1.100}$$

$$\bar{\psi}'(x)\gamma^5\psi'(x) = \psi^\dagger(x) S_L^{-1}\gamma^5 S_L \psi(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^5\psi(x) \tag{1.101}$$

$$\bar{\psi}'(x)\gamma^5\psi'(x) = \psi^\dagger(x) S_P^{-1}\gamma^5 S_P \psi(x) = -\psi^\dagger(x)\gamma^5\psi(x) \tag{1.102}$$

荷電粒子に対するディラック方程式

$$(i\hbar\gamma^\mu D_\mu - mc)\psi(x) = 0 \tag{1.103}$$

を用いて, 軸性ベクトル $j_A^\mu(x) := \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)$ の発散 $\partial_\mu j_A^\mu(x)$ を計算し、微分を含まない形で表せ。まず次の式が成り立つことを確認する。

$$\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5 = \gamma^0\gamma^0\gamma^5 + \gamma^0\gamma^i\gamma^5 \tag{1.104}$$

$$= \gamma^0\gamma^0\gamma^5 - \gamma^i\gamma^0\gamma^5 \tag{1.105}$$

$$= (\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0\gamma^5 \tag{1.106}$$

よってディラック方程式より次のようになる。

$$\partial_\mu j_A^\mu(x) \tag{1.107}$$

$$= \partial_\mu(\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)) \tag{1.108}$$

$$= \partial_\mu(\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)) \tag{1.109}$$

$$= (\partial_\mu\psi(x))^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5\psi(x) + \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5\partial_\mu\psi(x) \tag{1.110}$$

$$= (\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x))^\dagger\gamma^0\gamma^5\psi(x) - \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5(\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)) \tag{1.111}$$

$$= \left(\frac{1}{i\hbar}(\gamma^\mu qA_\mu(x) + mc)\psi(x)\right)^\dagger\gamma^0\gamma^5\psi(x) - \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5\left(\frac{1}{i\hbar}(\gamma^\mu qA_\mu(x) + mc)\psi(x)\right) \tag{1.112}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\Big(qA_\mu(x)(\psi^\dagger(x)(\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0\gamma^5\psi + \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5\gamma^\mu\psi(x)) + 2mc\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5\psi(x)\Big) \tag{1.113}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\Big(qA_\mu(x)(\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5\psi - \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)) + 2mc\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5\psi(x)\Big) \tag{1.114}$$

$$= -\frac{2mc}{i\hbar}\bar{\psi}(x)\gamma^5\psi(x) \tag{1.115}$$

問題 1.1.

中心力ポテンシャル $V(r)$ を持つハミルトニアン $\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 + V(r)$ を考える. ◇

(1) $\hat{H}$ と軌道角運動量 $\hat{L} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ との交換関係を求めよ。

証明

$$[\hat{H},\hat{L}^i] = [c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 + V(r), \varepsilon^{ijk}r^j\hat{p}^k] \tag{1.116}$$
$$= \varepsilon^{ijk}\Big(c[\alpha^\mu\hat{p}^\mu, r^j\hat{p}^k] + mc^2[\beta, r^j\hat{p}^k] + [V(r), r^j\hat{p}^k]\Big) \tag{1.117}$$
$$= \varepsilon^{ijk}\Big(c\alpha^\mu(p^\mu r^j p^k - r^j p^k p^\mu) + mc^2(\beta r^j p^k - r^j p^k\beta) + (V(r)r^j p^k - r^j p^k V(r))\Big) \tag{1.118}$$
$$= \varepsilon^{ijk}\Big(c\alpha^\mu(-i\hbar\delta^{\mu j})p^k + 0 + r^j(-i\hbar\partial^k V(r))\Big) \tag{1.119}$$
$$= -i\hbar c\varepsilon^{ijk}\alpha^j p^k - i\hbar\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial r}{\partial\boldsymbol{r}}\right)_i \tag{1.120}$$
$$= -i\hbar c\varepsilon^{ijk}\alpha^j p^k - i\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)_i \tag{1.121}$$
$$= -i\hbar c\varepsilon^{ijk}\alpha^j p^k \tag{1.122}$$

□

(2) $\Sigma^i := -\dfrac{i}{2}\sum_{j,k}\varepsilon^{ijk}\alpha^j\alpha^k$ とするとき、$\hat{H}$ とスピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{S}} = \dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$ との交換関係を求めよ。

証明

$$[\hat{H},\hat{S}^i] = \left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 + V(r), -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ijk}\alpha^j\alpha^k\right] \tag{1.123}$$
$$= -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ijk}\Big(c[\alpha^\mu,\alpha^j\alpha^k]p^\mu + mc^2[\beta,\alpha^j\alpha^k] + [V(r),\alpha^j\alpha^k]\Big) \tag{1.124}$$
$$= -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ijk}\Big(c(\alpha^\mu\alpha^j\alpha^k - \alpha^j\alpha^k\alpha^\mu)p^\mu + mc^2(\beta\alpha^j\alpha^k - \alpha^j\alpha^k\beta) + 0\Big) \tag{1.125}$$
$$= -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ijk}\Big(c((-\alpha^j\alpha^\mu + 2\delta^{\mu j})\alpha^k - \alpha^j(-\alpha^\mu\alpha^k + 2\delta^{k\mu}))p^\mu + 0 + 0\Big) \tag{1.126}$$
$$= -\frac{i\hbar c}{2}\varepsilon^{ijk}(\alpha^k p^j - \alpha^j p^k) \tag{1.127}$$
$$= i\hbar c\varepsilon^{ijk}\alpha^j p^k \tag{1.128}$$

□

(3) 全角運動量が保存量となることを示せ。

証明

全角運動量がハミルトニアンと交換するから保存量となる。

$$[\hat{H},\hat{J}^i] = [\hat{H},\hat{L}^i + \hat{S}^i] = 0 \tag{1.129}$$

□

問題 1.2.

$\boldsymbol{\sigma}$ をパウリ行列として、任意のベクトル $\boldsymbol{p}$ に対する 2 行 2 列の行列 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ を考える。 ◇

(1) $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2$ を求めよ。

証明

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2 = (\sigma^i p^i)(\sigma^j p^j)^\dagger \tag{1.130}$$

$$= p^i p^j \left(\delta^{ij} I + i\varepsilon^{ijk}\sigma^k\right) \tag{1.131}$$

$$= \boldsymbol{p}^2 \tag{1.132}$$

□

(2) $Tr(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ を求めよ。

証明

$\boldsymbol{p} = (p^1, p^2, p^3)$ とすると

$$Tr(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = Tr\begin{pmatrix} p^3 & p^1 - ip^2 \\ p^1 + ip^2 & -p^3 \end{pmatrix} = 0 \tag{1.133}$$

□

(3) $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ の固有値を求めよ。

証明

$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ の固有値を λ_1, λ_2 とおくと

$$\lambda_1 + \lambda_2 = Tr(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = 0 \tag{1.134}$$

$$\lambda_1^2 = \lambda_2^2 = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2 = \boldsymbol{p}^2 \tag{1.135}$$

よって固有値は $\pm|\boldsymbol{p}|$ である。 □

(4) $\boldsymbol{p} := |\boldsymbol{p}|(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ とするとき、固有ベクトルを求めよ。

証明

$$
(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\mp|\boldsymbol{p}|I)\boldsymbol{v}=|\boldsymbol{p}|\begin{pmatrix}\cos\theta\mp 1 & \sin\theta\cos\phi-i\sin\theta\sin\phi\\ \sin\theta\cos\phi+i\sin\theta\sin\phi & -\cos\theta\mp 1\end{pmatrix}\boldsymbol{v} \tag{1.136}
$$

$$
=|\boldsymbol{p}|\begin{pmatrix}\cos\theta\mp 1 & \sin\theta e^{-i\phi}\\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta\mp 1\end{pmatrix}\boldsymbol{v} \tag{1.137}
$$

より固有値 $\pm|\boldsymbol{p}|$ に対する固有ベクトルはそれぞれ次のベクトルの定数倍である。

$$
\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix}\sin\theta e^{-i\phi}\\ -\cos\theta\pm 1\end{pmatrix} \tag{1.138}
$$

□

1.8　2 次元時空におけるディラック方程式

ガンマ行列についても

$$
\gamma^0=\sigma_1,\qquad \gamma^1=i\sigma_2,\qquad \gamma^5=-\sigma_3 \tag{1.139}
$$

2 次元時空におけるディラック方程式は次のように考えられる。

$$
(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu-mc)\psi(x)=0 \tag{1.140}
$$

このときガンマ行列 γ^0,γ^1 は次を満たす。

$$
\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2g^{\mu\nu},\qquad (\gamma^0)^\dagger=\gamma^0,\qquad (\gamma^1)^\dagger=-\gamma^1 \tag{1.141}
$$

またカイラリティ γ^5 は次を満たす。

$$
(\gamma^5)^\dagger=\gamma^5,\qquad (\gamma^5)^2=1,\qquad \{\gamma^\mu,\gamma^5\}=0 \tag{1.142}
$$

カイラリティ γ^5 がガンマ行列の複素数係数多項式で表されるとするとガンマ行列の性質より次のように書ける。

$$
\gamma^5=\sum_{e_0,e_1}a_{e_0,e_1}(\gamma^0)^{e_0}(\gamma^1)^{e_1}=\alpha_0+\alpha_1\gamma^0+\alpha_2\gamma^1+\alpha_3\gamma^0\gamma^1\qquad (a_{e_0,e_1},\alpha_i\in\mathbb{C}) \tag{1.143}
$$

これを代入するとガンマ行列の直交性より

$$
(\gamma^5)^\dagger=\gamma^5\iff\alpha_0\in\mathbb{R},\alpha_1\in\mathbb{R},\alpha_2\in i\mathbb{R},\alpha_3\in\mathbb{R} \tag{1.144}
$$

$$
\{\gamma^\mu,\gamma^5\}=0\implies\alpha_0=\alpha_1=\alpha_2=0 \tag{1.145}
$$

$$
(\gamma^5)^2=1\implies\alpha_4=\pm 1 \tag{1.146}
$$

となる。よって $\gamma^5 = \pm\gamma^0\gamma^1$ となる。ここでは特に $\gamma^5 = \gamma^0\gamma^1$ とする。

問題 1.3.

$\gamma_\pm = \dfrac{1 \pm \gamma^5}{2}$ とするとき $(\gamma_+)^a$, $(\gamma_-)^b$, $(\gamma_+)^a(\gamma_-)^b$, $(\gamma_-)^b(\gamma_+)^a$ $(a, b \in \mathbb{Z}_{>0})$ を $\gamma_\pm$ を用いて表わせ。 $\diamond$

証明

$$(\gamma_\pm)^2 = \frac{1 \pm 2\gamma^5 + (\gamma^5)^2}{2^2} = \frac{1 \pm \gamma^5}{2} = \gamma_\pm \tag{1.147}$$

$$\gamma_+\gamma_- = \gamma_-\gamma_+ = \frac{1 + \gamma^5 - \gamma^5 - (\gamma^5)^2}{2^2} = 0 \tag{1.148}$$

より帰納法から次が示せる。

$$(\gamma_+)^a = \gamma_+, \qquad (\gamma_-)^b = \gamma_-, \qquad (\gamma_+)^a(\gamma_-)^b = 0, \qquad (\gamma_-)^b(\gamma_+)^a = 0 \tag{1.149}$$

□

問題 1.4.

$\psi_\pm(x) = \gamma_\pm\psi(x)$ は γ^5 の固有関数である。それぞれの固有値を求めよ。 $\diamond$

証明

カイラリティを作用させることで固有関数 $\psi_\pm(x)$ の固有値は ± 1 となる。

$$\gamma^5\psi_\pm(x) = \gamma^5\gamma_\pm\psi(x) = \frac{\gamma^5 \pm 1}{2}\psi(x) = \pm\gamma^5\psi(x) \tag{1.150}$$

□

問題 1.5.

$\psi_\pm(x)$ が満たす連立微分方程式をディラック方程式から求めよ。 $\diamond$

証明

$\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = 0$ より $\gamma^\mu\gamma_\pm = \gamma_\mp\gamma^\mu$ となる。よって

$$\begin{cases} \gamma_+(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi(x) = 0 \\ \gamma_-(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi(x) = 0 \end{cases} \tag{1.151}$$

$$\iff \begin{cases} i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_-(x) = mc\psi_+(x) \\ i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_+(x) = mc\psi_-(x) \end{cases} \tag{1.152}$$

となる。 □

問題 1.6.

$m=0$ の場合に $\psi_+(x) \propto e^{-iEt/\hbar+ipx/\hbar}$ が解となるとき、E, p が満たす関係式を求めよ。 ◇

証明

$m=0$ のとき $i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_+(x)=0$ となる。 $\gamma^1=\gamma^0(\gamma_+-\gamma_-)$ より

$$
\begin{aligned}
i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_+(x) &= i\hbar(\gamma^0 c\partial_t+\gamma^1\partial_x)\psi_+(x) && (1.153)\\
&= (\gamma^0 Ec-\gamma^1 p)\psi_+(x) && (1.154)\\
&= \gamma^0(Ec-(\gamma_+-\gamma_-)p)\psi_+(x) && (1.155)\\
&= \gamma^0(Ec-p)\psi_+(x)=0 && (1.156)
\end{aligned}
$$

となる。よって $Ec=p$ を満たす。 □

問題 1.7.

$m=0$ の場合に $\psi_-(x) \propto e^{-iEt/\hbar+ipx/\hbar}$ が解となるとき、E, p が満たす関係式を求めよ。 ◇

証明

$m=0$ のとき $i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_-(x)=0$ となる。 $\gamma^1=\gamma^0(\gamma_+-\gamma_-)$ より

$$
\begin{aligned}
i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi_-(x) &= i\hbar(\gamma^0 c\partial_t+\gamma^1\partial_x)\psi_-(x) && (1.157)\\
&= (\gamma^0 Ec-\gamma^1 p)\psi_-(x) && (1.158)\\
&= \gamma^0(Ec-(\gamma_+-\gamma_-)p)\psi_-(x) && (1.159)\\
&= \gamma^0(Ec+p)\psi_-(x)=0 && (1.160)
\end{aligned}
$$

となる。よって $Ec=-p$ を満たす。 □

2 指数関数

問題 2.1.

次の式を示せ。

$$
e^{i\hat{B}}\boldsymbol{A}e^{-i\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\ldots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\boldsymbol{A}]]\ldots] \tag{2.1}
$$

◇

証明

$e^{i\lambda\hat{B}}\boldsymbol{A}e^{-i\lambda\hat{B}}$ について考える。これを λ について展開すると

$$e^{i\lambda\hat{B}}\boldsymbol{A}e^{-i\lambda\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}e^{i\lambda\hat{B}}\boldsymbol{A}e^{i\lambda\hat{B}}\right]_{\lambda=0} \tag{2.2}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}\lambda^{n-1}}e^{i\lambda\hat{B}}i[\hat{B},\boldsymbol{A}]e^{i\lambda\hat{B}}\right]_{\lambda=0} \tag{2.3}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\left[e^{i\lambda\hat{B}}i^n\underbrace{[\hat{B},\ldots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\boldsymbol{A}]]\ldots]e^{i\lambda\hat{B}}\right]_{\lambda=0} \tag{2.4}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\ldots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\boldsymbol{A}]]\ldots] \tag{2.5}$$

よって $\lambda = 1$ を代入することで示せる。

$$e^{i\hat{B}}\boldsymbol{A}e^{-i\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\ldots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\boldsymbol{A}]]\ldots] \tag{2.6}$$

□

問題 2.2.

∂ を微分演算子とするとき、$(\partial e^{i\hat{B}})e^{-i\hat{B}} = -e^{i\hat{B}}(\partial e^{-i\hat{B}})$ を示せ。 ◇

証明

$1 = e^{i\hat{B}}e^{-i\hat{B}}$ に微分演算子を作用させることで示せる。

$$0 = \partial 1 = \partial(e^{i\hat{B}}e^{-i\hat{B}}) = (\partial e^{i\hat{B}})e^{-i\hat{B}} + e^{i\hat{B}}(\partial e^{-i\hat{B}}) \tag{2.7}$$

$$(\partial e^{i\hat{B}})e^{-i\hat{B}} = -e^{i\hat{B}}(\partial e^{-i\hat{B}}) \tag{2.8}$$

□

問題 2.3.

次の式を示せ。

$$e^{i\hat{B}}(\partial e^{-i\hat{B}}) = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\ldots[\hat{B},[\hat{B}}_{n-1},\partial\hat{B}]]\ldots] \tag{2.9}$$

◇

証明

(1) において $\boldsymbol{A}=\partial$ を代入して示せる。

$$e^{i\hat{B}}(\partial e^{-i\hat{B}}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\dots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\partial]]\dots] \tag{2.10}$$

$$= \partial + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\dots[\hat{B},[\hat{B}}_{n},\partial]]\dots] \tag{2.11}$$

$$= -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{B},\dots[\hat{B},[\hat{B}}_{n-1},\partial\hat{B}]]\dots] \tag{2.12}$$

$$\tag{2.13}$$

□

3　スピノル球関数

問題 3.1.

スピノル球関数を球面調和関数を用いて次のように定義する。

$$\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\\ \pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\end{pmatrix}_{j=l\pm 1/2} \tag{3.1}$$

軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$, スピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{S}}$, 全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ とする。

$\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi)$ が持つパリティを求めよ。 ◇

証明

球面調和関数におけるパリティは $(-1)^l$ となるからスピノル球関数のパリティは $(-1)^l$ となる。

$$Y_l^m(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\phi) \tag{3.2}$$

$$\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^l\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) \tag{3.3}$$

□

問題 3.2.

$\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi)$ が持つ $\hat{J}_z$ の固有値を求めよ。 ◇

証明

球面調和関数における固有値からスピノル球関数の $\hat{J}_z$ の固有値は $m\hbar$ となる。

$$\hat{J}_z Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \tag{3.4}$$

$$\hat{J}_z \mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) = m\hbar \mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.5}$$

□

問題 3.3.
$\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi)$ が持つ $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値を求めよ。 ◇

証明
球面調和関数における固有値からスピノル球関数の $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ となる。

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\phi) \tag{3.6}$$

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 \mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) \mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.7}$$

□

問題 3.4.
$\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi)$ が持つ $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ の固有値を求めよ。 ◇

証明
$\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi)$ に $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ を作用させると

$$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2)\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.8}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.9}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\left(\left(l \pm \frac{1}{2}\right)\left(l \pm \frac{1}{2} + 1\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.10}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\left(\pm\left(l + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\right)\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi) \tag{3.11}$$

$$\tag{3.12}$$

より固有値は $\dfrac{\hbar^2 l}{2}, -\dfrac{\hbar^2(l+1)}{2}$ となる。 □

問題 3.5.
$\mathcal{Y}_{j,m}^{\pm}(\theta,\phi)$ が持つ $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値を求めよ。 ◇

証明

$\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi)$ に $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ を作用させると

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) &= \hbar^2 j(j+1)\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) &(3.13)\\ &= \hbar^2\left(l\pm\frac{1}{2}\right)\left(\left(l\pm\frac{1}{2}\right)+1\right)\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) &(3.14)\\ &= \hbar^2\left(\left(l\pm\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)^2-\frac{1}{4}\right)\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi) &(3.15)\end{aligned}$$

より固有値は $l^2-\dfrac{1}{4}, (l+1)^2-\dfrac{1}{4}$ となる。 □

問題 3.6.

パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$ と位置ベクトル $\boldsymbol{r}=r(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)$ に対して $\boldsymbol{\sigma}\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi)$ を計算し、スピノル球関数のみを用いて表せ。 ◇

証明

まず演算子を計算すると

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\boldsymbol{\sigma}\cdot(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi}\\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{3.16}$$

となる。三角関数を球面調和関数に作用させたときの固有値は次のようになるから

$$\cos\theta Y_l^m(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^m(\theta,\phi)+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^m(\theta,\phi) \tag{3.17}$$

$$\sin\theta e^{i\phi}Y_l^m(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m+1}(\theta,\phi)+\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m+1}(\theta,\phi) \tag{3.18}$$

$$\sin\theta e^{-i\phi}Y_l^m(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m-1}(\theta,\phi)+\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m-1}(\theta,\phi) \tag{3.19}$$

次のように計算できる。

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi}\\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\\ \pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\end{pmatrix}_{j=l\pm1/2} \tag{3.20}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left(\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\cos\theta Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\sin\theta e^{-i\phi}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\right. \tag{3.21}$$

$$\left.,\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\sin\theta e^{i\phi}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\mp\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\cos\theta Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\right)_{j=l\pm1/2} \tag{3.22}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left(\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\sqrt{\frac{(l+m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{3}{2})}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m-1/2}(\theta,\phi)\right. \tag{3.23}$$

$$+\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\sqrt{\frac{(l+m-\frac{1}{2})(l-m+\frac{1}{2})}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m-1/2}(\theta,\phi) \tag{3.24}$$

$$\pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\sqrt{\frac{(l-m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{3}{2})}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m-1/2}(\theta,\phi) \tag{3.25}$$

$$\pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\sqrt{\frac{(l+m+\frac{1}{2})(l+m-\frac{1}{2})}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m-1/2}(\theta,\phi) \tag{3.26}$$

$$,-\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\sqrt{\frac{(l+m+\frac{1}{2})(l+m+\frac{3}{2})}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m+1/2}(\theta,\phi) \tag{3.27}$$

$$+\sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m}\sqrt{\frac{(l-m+\frac{1}{2})(l-m-\frac{1}{2})}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m+1/2}(\theta,\phi) \tag{3.28}$$

$$\mp\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\sqrt{\frac{(l+m+\frac{3}{2})(l-m+\frac{1}{2})}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1}^{m+1/2}(\theta,\phi) \tag{3.29}$$

$$\left.\mp\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m}\sqrt{\frac{(l+m+\frac{1}{2})(l-m-\frac{1}{2})}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1}^{m+1/2}(\theta,\phi)\right)_{j=l\pm1/2} \tag{3.30}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left((2l+1)\sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}\pm1}{(2l+1)(2l+1\pm2)}}Y_{l\pm1}^{m-1/2}(\theta,\phi)\right. \tag{3.31}$$

$$\left.,\mp(2l+1)\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}\pm1}{(2l+1)(2l+1\pm2)}}Y_{l\pm1}^{m+1/2}(\theta,\phi)\right)_{j=l\pm1/2} \tag{3.32}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j+1\pm1}}\left(\sqrt{j+\frac{1}{2}\mp\left(m-\frac{1}{2}\right)}Y_{j\pm1/2}^{m-1/2}(\theta,\phi)\right. \tag{3.33}$$

$$\left.,\mp\sqrt{j+\frac{1}{2}\pm\left(m+\frac{1}{2}\right)}Y_{j\pm1/2}^{m+1/2}(\theta,\phi)\right)=\mathcal{Y}^{\mp}_{j,m}(\theta,\phi) \tag{3.34}$$

よって次の式となる。

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mathcal{Y}^{\pm}_{j,m}(\theta, \phi) = \mathcal{Y}^{\mp}_{j,m}(\theta, \phi) \tag{3.35}$$

□

4 水素原子における電子のエネルギー準位

問題 4.1.

中心力ポテンシャル $V(r) = -\dfrac{\alpha\hbar c}{r}$ のもとでディラック方程式を解くことにより得られる水素原子中の電子のエネルギー準位を考える。

主量子数 n が与えられたとき、全角運動量 j が取り得る値を答えよ。 ◇

証明

n と j に関して $n = j + n' + 1/2$ という関係があるから $j = 1/2, \ldots, (2n-1)/2$ を取る。 □

問題 4.2.

主量子数 n, 全角運動量 j を持つ状態のエネルギー固有値の表式を書き下せ。また、そのエネルギー固有値の縮重度を答えよ。 ◇

証明

主量子数 n, 全角運動量 j を持つ状態のエネルギー固有値の表式は次のようになる。

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - \left(j + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2}}} \tag{4.1}$$

また縮重度は $j = l \pm 1/2$ より $n' = 0$ において $2j+1$、$n' > 0$ において $2(2j+1)$ となる。 □

問題 4.3.

主量子数 n を持つ状態の総数を求めよ。 ◇

証明

$n = j + n' + 1/2$ と $j = l \pm 1/2$ より状態の総数は $2n^2$ となる。

$$2n + 2 \times \sum_{n'=1}^{n-1} 2(n - n') = 2n^2 \tag{4.2}$$

□

問題 4.4.

電子の静止エネルギーから測った束縛エネルギーの大きさが縮退を除いて 7 番目と 10 番目

に大きい準位の主量子数 n と全角運動量 j をそれぞれ答えよ。また、それらの準位の束縛エネルギーの大きさを有効数字 6 桁で求めよ。 $\diamond$

証明

7 番目に大きい準位は $n=4, j=1/2$ で 10 番目に大きい準位は $n=4, j=7/2$ である。またそれぞれの束縛エネルギーは

$$\mathcal{E} \approx -\frac{\alpha^2 mc^2}{2n^2} - \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\frac{\alpha^4 mc^2}{2n^3} \tag{4.3}$$

$$\approx -\frac{13.60569}{n^2} - \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\frac{7.249022 \times 10^{-4}}{n^3} \tag{4.4}$$

$$\mathcal{E}_{4,1/2} \approx 0.850365 \tag{4.5}$$

$$\mathcal{E}_{4,7/2} \approx 0.850356 \tag{4.6}$$

となる。 $\square$

問題 4.5.

同じ主量子数 n を持つ状態でも全角運動量 j に依存してエネルギー準位が分裂する. この現象を表す名称を答えよ. $\diamond$

証明

微細構造 $\square$