Dirac 方程式の非相対論的近似: g-ファクター, スピン軌道相互作用, ラーモア反磁性, シュタルク効果, 交差相関

平松信義

2019 年 6 月 20 日

Dirac 表示 $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ のもとで, $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$, $E' = E - mc^2$ とおくと, Dirac 方程式 $[\vec{\alpha} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A}) + \beta mc^2 + e\phi]\Psi = E\Psi$ は, 以下のように書き直せる:

$$\begin{pmatrix} E' - e\phi & -\vec{\sigma} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A}) \\ -\vec{\sigma} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A}) & E' + 2mc^2 - e\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

非相対論的近似のもとで $2mc^2$ が $E' - e\phi$ より十分に大きいとすれば, 上式から $cp|\Psi_1| \sim mc^2|\Psi_2|$, すなわち $|\Psi_2|/|\Psi_1| \sim v/c$ となる。Ψ_2 は重要でないため, 上式から Ψ_2 を消去する。最低次までの近似で,

$$\begin{aligned}(E' - e\phi)\Psi_1 &= [\vec{\sigma} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A})] \frac{1}{2mc^2 + E' - e\phi} [\vec{\sigma} \cdot (c\vec{p} - e\vec{A})]\Psi_1 \\ &\simeq \frac{1}{2m}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})][1 - \frac{E' - e\phi}{2mc^2}][\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})]\Psi_1 \\ &\simeq \frac{1}{2m}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})]^2\Psi_1 - \frac{ie\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla}\phi)[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})]\Psi_1.\end{aligned} \tag{2}$$

関係 $(\vec{\sigma} \cdot \vec{X})(\vec{\sigma} \cdot \vec{Y}) = \vec{X} \cdot \vec{Y} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{X} \times \vec{Y})$ を用いると,

$$\begin{aligned}(E' - e\phi)\Psi_1 = \frac{1}{2m}&[(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + i\vec{\sigma} \cdot \{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \times (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\}]\Psi_1 \\ &+ \frac{e\hbar}{4m^2c^2}[-i(\vec{\nabla}\phi) \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + \vec{\sigma} \cdot \{(\vec{\nabla}\phi) \times (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\}]\Psi_1.\end{aligned} \tag{3}$$

ここで $A = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{x}$ となるようなゲージを取ると, $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 - \vec{p}^2 = \frac{ie\hbar}{2c}\epsilon_{ijk}(\partial_i B_j x_k + B_j x_k \partial_i) + \frac{e^2}{4c^2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm}B_j x_k B_l x_m = \frac{ie\hbar}{c}\epsilon_{ijk}B_j x_k \partial_i + \frac{e^2}{4c^2}(\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl})B_j x_k B_l x_m = -\frac{e}{c}\vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{4c^2}[B^2x^2 - (\vec{B} \cdot \vec{x})^2] = -\frac{e}{c}\vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{4c^2}B^2\vec{x}_\perp^2$ が分かる. ただし磁場方向に垂直な方向ベクトル $\vec{x}_\perp = \vec{x} - \frac{\vec{B}}{|B|^2}(\vec{x} \cdot \vec{B})$ を定義し, 公式 $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$ を用いた. さらに球対称なポテンシャルに弱い電場 $\vec{\varepsilon}$ が (摂動的に) 入っているとすると, $\vec{\nabla}\phi = \frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}\vec{x} - \vec{\varepsilon}$ であるので, $(\vec{\nabla}\phi') \cdot \vec{p} = \frac{d\phi'}{dr}p_r$, $(\vec{\nabla}\phi') \cdot \vec{A} = 0$, $(\vec{\nabla}\phi') \times \vec{p} = \frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}\vec{L}$, かつ $[(\vec{\nabla}\phi') \times \vec{A}]_i = \frac{1}{2r}\frac{d\phi'}{dr}\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm}x_j B_l x_m = \frac{1}{2r}\frac{d\phi'}{dr}(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})x_j B_l x_m = \frac{r}{2}\frac{d\phi'}{dr}\vec{B}_i - \frac{1}{2r}\frac{d\phi'}{dr}\vec{x}_i(\vec{B} \cdot \vec{x})$ が成り立つ. ゲージによらず成り立つ関係式 $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \times (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) = -\frac{e}{c}(\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}) = \frac{i\hbar e}{c}(\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \frac{i\hbar e}{c}\vec{B}$ に注意すると,

$$\begin{aligned}(E' - e\phi)\Psi_1 &= \frac{1}{2m}[\vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{4c^2}B^2\vec{x}_\perp^2 - \frac{\hbar e}{c}\vec{B} \cdot \vec{\sigma}]\Psi_1 \\ &+ \frac{e\hbar}{4m^2c^2}[-i\frac{d\phi'}{dr}p_r + i(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\sigma})\{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \cdot \vec{\sigma}\} + \frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}\vec{\sigma} \cdot \vec{L} - \frac{e}{2c}\{r\frac{d\phi'}{dr}(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) - \frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}(\vec{B} \cdot \vec{x})(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})\}]\Psi_1 \\ &= [\frac{\vec{p}^2}{2m} - \underline{\frac{e}{2mc}\vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})} - \underline{\frac{e^2}{8mc^2}B^2\vec{x}_\perp^2} + \frac{-ie\hbar}{4m^2c^2}\frac{d\phi'}{dr}p_r + \underline{\frac{ie}{m^2c^2\hbar}(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{S})\{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \cdot \vec{S}\}} \\ &+ \underline{\frac{e}{8m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}\vec{S} \cdot \vec{L}} - \frac{e^2}{8m^2c^3}r\frac{d\phi'}{dr}\vec{B} \cdot \vec{S} - \frac{e^2}{8m^2c^3}\frac{1}{r}\frac{d\phi'}{dr}(\vec{B} \cdot \vec{x})(\vec{x} \cdot \vec{S})\}]\Psi_1.\end{aligned} \tag{4}$$

最終式の<u>第 2 項</u>は Zeeman 項であり、磁場と角運動量のカップリングを表し, 最低次の近似では軌道とスピンの g-ファクターが 2 倍違うことを示している。<u>第 3 項</u>はラーモア項であり、ラーモア反磁性を記述するが、非相

対論的な量子力学でも現れる。第 4 項は相対論的なクーロン補正項である。第 5 項は電場と磁場の交差相関を表す。第 6 項はスピン・軌道相互作用項である。

参考文献

[1] 安藤陽一 トポロジカル絶縁体入門

[2] 金森順次郎 磁性