

ディラック方程式

クライン・ゴールドン方程式の負の確率密度の問題を解決するために作られたディラック方程式を導出し、解を求めます。

「ディラック方程式の解～別解～」の後半も見てください。

表記上の注意をしておきます。「クライン・ゴールドン方程式」で4次元の表記を与えましたが、ここでは3次元ベクトルの表記しか使いません。なので、3次元ベクトルの内積は

$$\sum_{i=1}^3 A_i B_i = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}, \quad \sum_{i=1}^3 A_i \partial_i = \sum_{i=1}^3 A_i \frac{\partial}{\partial x^i} = \mathbf{A} \cdot \nabla$$

として、添え字の位置を下に揃えたものを使います。4次元の表記では $A_i = -A^i$ なので、4次元表記と比較するときには注意が必要です ($A^\mu = (A^0, A^i) = (A^0, \mathbf{A})$, $A_\mu = (A_0, A_i) = (A_0, -\mathbf{A})$)

また、行列が入ってきますが、単位行列は明確に書かないので式の構造から行列なのかどうか判断してください。

クライン・ゴールドン方程式で負の確率密度が許されるのは時間の2階微分があるのが原因です。そのため、その初期条件として波動関数とその1階微分の値を自由に選べてしまい、確率密度において負の値をゆるしています。この問題を解決させるには、時間の1階微分方程式に変えればいいです。この発想でディラック方程式を作ります。

量子論でのハミルトニアン演算子 \hat{H} による微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

から考えます。クライン・ゴールドン方程式では空間微分も2階でしたが、時間と空間が同じになるように空間も1階微分として、ハミルトニアン演算子を

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2\beta$$

とまずはおいてみます。 $\boldsymbol{\alpha}$ は3次元ベクトル $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ 、 β は適当なスカラー量です。なので

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= (-i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2)\psi \\ &= -i\hbar (c\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + c\alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + c\alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3})\psi + \beta mc^2\psi \end{aligned}$$

という形です。これをディラック (Dirac) 方程式と呼びます。これだけではただ形が決まっただけで意味がどうなっているのかわからない上に、本当にこれで大丈夫なのかさえ分かりません。

まず問題なのは、ここで使われている $\boldsymbol{\alpha}$ と β が何なのかです。そもそも、ディラック方程式はクライン・ゴールドン方程式を1階微分の形に書き換えて表現しようとして作ったものなので、2階微分の形にすればクライン・ゴールドン方程式と一致しなければなりません。なので、 $\boldsymbol{\alpha}$ と β を求めるには、このディラック方程式を2階微分の形にし、クライン・ゴールドン方程式と比較すればいいことになります。

というわけで、ディラック方程式の波動関数以外の部分を2乗します。今の表記を使ってディラック方程式のハミルトニアンを2乗すると

$$\begin{aligned}
 -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} &= (-i\hbar c \alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} + \beta m c^2) (-i\hbar c \alpha_j \frac{\partial}{\partial x^j} + \beta m c^2) \\
 &= (-\hbar^2 c^2 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} (\alpha_j \frac{\partial}{\partial x^j}) - i\hbar c \alpha_i (\frac{\partial}{\partial x^i} \beta) m c^2 - \beta m c^2 i\hbar c \alpha_j \frac{\partial}{\partial x^j} + \beta^2 m^2 c^4) \\
 &= (-\hbar^2 c^2 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \alpha_j \frac{\partial}{\partial x^j} - i\hbar m c^3 (\alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \beta + \beta \alpha_j \frac{\partial}{\partial x^j}) + \beta^2 m^2 c^4)
 \end{aligned}$$

これに波動関数をくっつけば

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \left(-\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} \frac{\partial}{\partial x^i \partial x^j} - i\hbar m c^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial}{\partial x^i} + m^2 c^4 \beta^2 \right) \psi$$

α_i と β は定数なので微分演算子はそのままだ波動関数に作用します。これとクライン・ゴールドン方程式

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \psi$$

を比較すれば、 α_i と β に対する条件を与られます。 $i\hbar m c^3$ の項はクライン・ゴールドン方程式にないので、 $\alpha_i \beta + \beta \alpha_i$ は0です。なので、 α_i, β は数ではなく行列です。そして、ハミルトニアン演算子 \hat{H} がエルミートであることから、 α と β もエルミート行列と分かります。他の項も一致するように選べば、 α_i, β は条件として

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \tag{1}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \tag{2}$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1 \tag{3}$$

3番目の1は単位行列で、1番目の関係から分かります。これらの関係とエルミート行列であることを満たすなら、 α_i と β は何を選んでもいいです。また、 α_i, β の固有値は一番下の式より ± 1 と分かります。これは単純で α_i の固有値を λ_i 、固有ベクトルを v とすれば

$$\alpha_i^2 v = \lambda_i \alpha_i v = \lambda_i^2 v$$

なので、 $\lambda_i^2 = 1$ となるからです。

まだ何行何列の行列なのかかわからないので、 N 次元の行列とし $N \times N$ 行列としておき、 N がいくつなのか決定します。(3)の2番目の式に右から β をかけると

$$\alpha_i + \beta \alpha_i \beta = 0 \tag{4}$$

同じように α_i を左からかけると

$$\beta + \alpha_i \beta \alpha_i = 0 \quad (5)$$

α_i と β はエルミート行列なので適当なユニタリー行列によって対角化できるので、 α_i と β は対角行列になっています。 α_i のトレースは (4) と $\text{tr}[AB] = \text{tr}[BA]$ (トレースの巡回性) を使うことで

$$\text{tr}\alpha_i = -\text{tr}[\beta\alpha_i\beta] = -\text{tr}[\alpha_i\beta\beta] = -\text{tr}\alpha_i$$

この式から $\text{tr}\alpha_i = 0$ が分かります。同様に β でも (5) を使うことで

$$\text{tr}\beta = 0$$

トレースが 0 であることと $\alpha_i^2 = \beta^2 = 1$ から、 α_i と β の対角成分は単純に $+1$ と -1 が選べます。その和が 0 であることは、 $+1$ の個数を n_+ 、 -1 を n_- とすれば

$$N = n_+ + n_-, \quad \text{tr}(\alpha_i) = n_+ - n_- = 0$$

なので、 N は $2n_+$ となり、偶数の行列とわかります。

2×2 行列なのでパウリ行列 $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ を考えます。パウリ行列は 2×2 エルミート行列で、反交換関係は $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$ 、トレースは 0 なので α の条件に合います。しかし、パウリ行列と線形独立なエルミート行列は 2×2 単位行列 I_2 なので、 β に合う行列がありません (パウリ行列と 2×2 単位行列による線形結合 $A = a_1 I_2 + b_1 \sigma_1 + b_2 \sigma_2 + b_3 \sigma_3$ は任意の 2×2 エルミート行列。 $I_2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ は 2×2 エルミート行列による実ベクトル空間の基底)。このように 2×2 行列では作れなく、最小の行列は $N = 4$ です。なので 4×4 行列で作ります。

4×4 行列を使うためにディラック方程式での波動関数は 4 行 1 列の行列で、通常の波動関数とは違った性質を持ちます。これをスピノール (spinor) と呼び、 ψ の行列成分をスピノール成分と呼びます。また、4 行 1 列は 4 つの成分を持つので ψ を 4 成分スピノールと言われます。

というわけで、条件を満たす 4×4 行列なら、 α_i と β はなんでもいいです。最もよく使われるのは、パウリ行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と 2×2 単位行列 I_2 による

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3))$$

α, β での 0 は 2×2 行列です。これはディラック・パウリ (Dirac-Pauli) 表現と呼ばれます。これを使うと非相対論近似を取るときに波動関数を 4 成分でなく 2 成分になるので便利です。パウリ行列が出てきたことからなんとなく予想できるように、ディラック方程式は後で示すようにスピン $1/2$ の粒子を記述します。

他の表現が適している場合もあり、「ワイル方程式」では別の表現を使っています。ディラック・パウリ表現 α, β から 4 次元の別の表現へは、適当なユニタリー行列 U による変換

$$\alpha' = U\alpha U^{-1}, \beta' = U\beta U^{-1}$$

によって全て作れます。

ディラック方程式の形が求まったので、ディラック方程式では確率密度が正の値のみなのかを確かめます。「クライン・ゴールドン方程式」と同じように、ディラック方程式に ψ^\dagger をかけたものと、エルミート共役「†」を取って ψ をかけたものを用意し

$$\begin{aligned} i\hbar\psi^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\psi &= -i\hbar c\sum_{i=1}^3\psi^\dagger\alpha_i\frac{\partial}{\partial x^i}\psi + mc^2\psi^\dagger\beta\psi \\ -i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi &= i\hbar c\sum_{i=1}^3\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^i}\alpha_i\psi + mc^2\psi^\dagger\beta\psi \end{aligned}$$

行列成分を書いていませんが、 $\alpha_i = \alpha_i^\dagger, \beta = \beta^\dagger$ は 4×4 行列、 ψ は 4×1 行列なのに注意してください。行列のエルミート共役は、転置して複素共役を取ります。この 2 つを引くことで

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger\psi) = i\hbar c\sum_{i=1}^3\frac{\partial}{\partial x^i}(\psi^\dagger\alpha_i\psi)$$

よって、連続の方程式

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

を満たす確率密度 ρ は左辺から

$$\rho = \psi^\dagger\psi = \sum_{k=1}^4\psi_k^\dagger\psi_k$$

ψ_k の添え字は 4×1 行列の成分を表わしています。これはベクトルと複素共役を取ったベクトルの内積の形なので、 $\rho > 0$ です。確率の流れは右辺が

$$\begin{aligned} -c\sum_{i=1}^3\frac{\partial}{\partial x^i}(\psi^\dagger\alpha_i\psi) &= -c(\nabla\psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha}\psi - c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla\psi \\ &= -c\nabla \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha}\psi) \end{aligned}$$

となるので

$$\mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi$$

$\rho > 0$ のために負の確率密度が現れないので、 ρ を確率密度として扱って問題ないです。

次にディラック方程式によってどのような粒子が記述されるのかを知るために、ディラック方程式を解きます。解はハミルトニアン演算子の固有関数のことです。

最初に、粒子が静止しているとしてディラック方程式を解きます (やることは量子力学での計算とほとんど同じ)。静止していると3次元運動量は0なので、ディラック方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta)\psi(\mathbf{x}, t) \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \beta mc^2 \psi(t)$$

β を行列で書けば

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = mc^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \psi(t)$$

左辺はハミルトニアン演算子 \hat{H} なので

$$\hat{H}\psi(t) = mc^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \psi(t)$$

\hat{H} の固有値はエネルギーの観測値 E に対応しているはずですが、右辺を見ると $E = -mc^2$ として負のエネルギーがあります。これを単純に解くと

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}$$

$$\psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{imc^2}{\hbar}t}, \quad \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{imc^2}{\hbar}t}$$

このように4成分スピノールによる4つの解が出てきます。前に出ている縦ベクトル (4×1 行列) がスピノール成分です。これらを

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

に入れてみれば、exp 内の ± の対応から \hat{H} の固有値として、 ψ_1, ψ_2 が正のエネルギー、 ψ_3, ψ_4 が負のエネルギーに対応するのが分かります。このような負のエネルギー解はクライン・ゴルドン方程式でも導出されます。この負エネルギー解の解釈については今は置いておくとして（「空孔理論」で触れます）、今度は静止していない場合の解を求めます。

静止していない時のディラック方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta)\psi(\mathbf{x}, t)$$

に対して、まずは $\psi(\mathbf{x}, t)$ を量子力学と同じように

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) &= E\psi(\mathbf{x}, t) \\ \psi(\mathbf{x}, t) &= \psi(\mathbf{x}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right] \end{aligned} \quad (6)$$

これをディラック方程式に入れれば、ディラック・パウリ表現で

$$E\psi(\mathbf{x}) = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{x}) + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \psi(\mathbf{x})$$

$\psi(\mathbf{x})$ の 4 成分を

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \\ \psi_3(\mathbf{x}) \\ \psi_4(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1(\mathbf{x}) \\ \chi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (7)$$

として、2 成分を持った χ_1, χ_2 で書きます。(7) を使えば

$$E \begin{pmatrix} \chi_1(\mathbf{x}) \\ \chi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(\mathbf{x}) \\ \chi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

右辺の行列を計算すれば、1 行目と 2 行目に対応する 2 つの式は

$$(E - mc^2)\chi_1(\mathbf{x}) - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi_2(\mathbf{x}) = 0 \quad (8a)$$

$$(E + mc^2)\chi_2(\mathbf{x}) - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi_1(\mathbf{x}) = 0 \quad (8b)$$

$\chi_1(\mathbf{x})$ と $\chi_2(\mathbf{x})$ も量子力学を参考に

$$\begin{pmatrix} \chi_1(\mathbf{x}) \\ \chi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right] \quad (9)$$

\mathbf{p} は 3次元運動量です。後は 2×1 行列 u, v がどうなっているのか分かればいいです。

(9) を (8a) と (8b) に入れば、 \exp に $\hat{\mathbf{p}}$ が作用し

$$(E - mc^2)u - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}v = 0 \quad (10a)$$

$$(E + mc^2)u - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}v = 0 \quad (10b)$$

これは微分演算子のないただの連立方程式です。連立方程式なので、これが解を持つためには係数の行列式が 0 になればよく

$$\begin{vmatrix} E - mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & E + mc^2 \end{vmatrix} = 0$$

から

$$\begin{aligned} 0 &= (E^2 - m^2c^4) - c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ &= (E^2 - m^2c^4) - c^2\mathbf{p}^2 \quad ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2) \end{aligned}$$

そうするとエネルギー E は

$$\begin{aligned} E^2 &= m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2 \\ E &= \pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} \end{aligned} \quad (11)$$

これは特殊相対論でのエネルギーの式ですが、 E は正負両方の値を持ち

$$E_+ = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} = |E|, \quad E_- = -|E|$$

E_{\pm} は E_{λ} と書くことにします ($E_{\lambda} = \lambda|E|$)。 u と v は (10a),(10b) から

$$v = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{mc^2 + E_{\lambda}}u \quad (12a)$$

$$u = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E_{\lambda} - mc^2}v \quad (12b)$$

となっています。

求められた (12a) と (11) を (6) に入れると、規格化定数を N して

$$\psi_\lambda(\mathbf{x}, t) = N \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_\lambda t)}{\hbar}\right] = N \begin{pmatrix} u \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E_\lambda + mc^2} u \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_\lambda t)}{\hbar}\right] \quad (13a)$$

これがディラック方程式の解です (規格化定数は「ディラック方程式～別解～」参照)。 u は条件を入れないと決まらない任意の関数です (1 階偏微分方程式の解は任意関数を 1 つ含む)。解は E_+ , E_- によって区別されており、正負のエネルギーで区別される状態があると考えられます。

また、(12b) によって、 v で書くな

$$\psi_\lambda(\mathbf{x}, t) = N \begin{pmatrix} \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E_\lambda - mc^2} v \\ v \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_\lambda t)}{\hbar}\right] \quad (13b)$$

このようになります。

解の意味をはっきりさせるために u, v の形を決めます。そのために、 $\mathbf{p} = 0$ の極限で静止している解と対応するようにします。 u, v を

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ もしくは } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とにおいて、(12a),(12b) からそれぞれを求めると

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E_\lambda + mc^2} \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 + ip_2 \end{pmatrix} \quad (14a)$$

$$u = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c}{E_\lambda + mc^2} \begin{pmatrix} p_1 - ip_2 \\ -p_3 \end{pmatrix} \quad (14b)$$

$$v = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda - mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E_\lambda - mc^2} \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 + ip_2 \end{pmatrix} \quad (14c)$$

$$v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad u = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda - mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c}{E_\lambda - mc^2} \begin{pmatrix} p_1 - ip_2 \\ -p_3 \end{pmatrix} \quad (14d)$$

という 4 つが求まります ($\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3$)。 $\mathbf{p} \rightarrow 0$ の極限でエネルギーは $E_\lambda = \lambda mc^2$ になるので、(14a),(14b) に対して $E_- = -mc^2$ を選ぶと分母が 0 になり発散してしまうために $E_+ = +mc^2$ を選ばなくてはなりません。同様に、(14c),(14d) では $E_- = -mc^2$ になります。よって、(14a),(14b) は正のエネルギー状態、(14c),(14d) では負のエネルギー状態に対応していることとなります。

このことを (13a),(13b) の行列部分に適用させます。つまり、(14a),(14b) での u を (13a) に入れれば (もしくは (13b) に v を入れる)

$$\omega_+(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} u \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda + mc^2} u \end{pmatrix} \Rightarrow \omega_+^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_3}{|E| + mc^2} \\ \frac{cp_1 + icp_2}{|E| + mc^2} \end{pmatrix}, \omega_+^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{cp_1 - icp_2}{|E| + mc^2} \\ -\frac{cp_3}{|E| + mc^2} \end{pmatrix}$$

このときの exp 部分は $\exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - |E|t)/\hbar]$ なので、ハミルトニアン演算子の固有値は $E_+ > 0$ です。同様に、(14c),(14d) での v を (13b) に入れれば (もしくは (13a) に u を入れる)

$$\omega_-(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_\lambda - mc^2} v \\ v \end{pmatrix} \Rightarrow \omega_-^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{cp_3}{|E| + mc^2} \\ \frac{cp_1 + icp_2}{|E| + mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \omega_-^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{cp_1 - icp_2}{|E| + mc^2} \\ \frac{cp_3}{|E| + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

このときの exp 部分は $\exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} + |E|t)/\hbar]$ なので、ハミルトニアン演算子の固有値は $E_- < 0$ です。というわけで、 ω_+, ω_- が正負のエネルギーの解に対応します。計算すれば分かるように、これらは $\omega_+^{(1)\dagger} \omega_+^{(2)} = \omega_+^{(1)\dagger} \omega_-^{(1)} = \dots = 0$ として直交しているので、独立な解です。

4成分スピノールの解が4つ出てきましたが、次に重要なのはこのように解を書いたとき、4成分スピノールが何を意味しているのかです。そのために、正エネルギー、負エネルギーの解がそれぞれ2ついるので、それらが何によって区別されるのかを求めます。

パウリ行列 σ による 4×4 行列 Σ を

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

とします。パウリ行列 σ_3 はスピン $1/2$ の状態に対して固有値 ± 1 を持ちます。なので、 Σ はそれを 4×4 行列に拡張したものとと言えます。実際に、パウリ行列の交換関係から

$$[\Sigma_i, \Sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \Sigma_k$$

となっており、角運動量演算子の交換関係に従っています。 ϵ_{ijk} ($\epsilon_{123} = +1$) はレヴィ・チビタ記号です。固有値を $\hbar/2$ にするなら

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \Sigma = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

と定義します。

しかし、 Σ はディラック方程式のハミルトニアン演算子 \hat{H} と交換しません (後で示します)。このため、 Σ の固有関数はハミルトニアン演算子の固有関数となりません。また、 Σ は保存量になっていないことも分かります。このままだと不便なので、ハミルトニアン演算子と交換する新しい量を定義します。

行列計算から

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 & 0 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})$$

と

$$\beta(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} = (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\beta$$

がすぐに分かるので

$$[\hat{H}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = 0 \quad (15)$$

$$[\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = 0 \quad (16)$$

というわけで、 $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}$ はハミルトニアン演算子と交換します。これを利用して

$$\hat{h}(\boldsymbol{p}) = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{|\boldsymbol{p}|} = \boldsymbol{S} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{|\boldsymbol{p}|}$$

という演算子を定義し、 $h(\boldsymbol{p})$ をヘリシティ (helicity) 演算子と呼び、その固有値はヘリシティと呼ばれます。もしくは、パウリ行列だけを取り出して

$$\hat{h}(\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}}{|\boldsymbol{p}|}$$

と定義されることもあります ($\hbar/2$ を残す場合もあります)。定義から分かるように、ヘリシティは運動量方向のスピン成分のことです (パウリ行列と運動量方向の単位ベクトルの内積だから)。スピンと違い保存量になっているので、ヘリシティは重要な量になっています。

x_3 軸方向のみに運動している場合を考えます。このときの、3次元運動量と S は

$$\hat{\boldsymbol{p}} = (0, 0, \hat{p}_3), \quad \hat{\boldsymbol{S}} = (S_1, S_2, S_3)$$

3次元運動量の固有状態に作用させれば \hat{p}_3 は p_3 になるので、ヘリシティ演算子は

$$\hat{h} = \hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

これから、ディラック方程式の解に対してヘリシティ演算子の固有値は $\pm\hbar/2$ と分かり、スピンと同じように ± 1 で状態を区別できます。実際に、(13a) においてヘリシティ $\pm\hbar/2$ の固有関数を ψ_{λ}^{\pm} とし、 ω_{+} の場合を使えば、 x_3 方向に運動しているとき

$$\psi_{\lambda}^{+}(\mathbf{x}, t) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_3}{|E| + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(|E|t - p_3x_3)\right]$$

$$\psi_{\lambda}^{-}(\mathbf{x}, t) = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp_3}{|E| + mc^2} \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(|E|t - p_3x_3)\right]$$

となり、 ω_{+} の 2 つの解は区別されていることが分かります。このように、ヘリシティによって状態は区別できます。言い換えれば、スピンの方向が違うことを意味しており (運動量 0 でも区別できるから)、量子力学でのスピン上向き、下向きと同じです。

まとめると、ディラック方程式に従う自由粒子 (ディラック粒子) は正エネルギー、負エネルギーの解を持ち、それぞれがスピン上向き、下向きの状態を持ちます。つまり、ディラック方程式はスピン 1/2 の粒子を記述すると考えられます。なので、電子やクォークといったものを記述します。

スピンのことをもう少し触れておきます。量子力学と違いディラック方程式ではスピンの存在が必然的に導かれることを示します。

注：簡略化するためにここから下では \hbar と c を 1 として扱います (自然単位 (natural unit))

保存量かどうか調べるためにはハミルトニアン演算子と交換するかを見ればいいので、例えば自由粒子では

$$[\mathbf{p}, H] = 0$$

という関係があり、これは運動量の保存を表わします。面倒なので演算子のハットも外しています。そして、非相対論的な量子力学においては軌道角運動量 L は保存していて

$$[\mathbf{L}, H] = 0 \quad (\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p})$$

しかし、ディラック方程式のハミルトニアン演算子を使用するとこれは保存しなく

$$[\mathbf{L}, H_D] = i\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p} \quad (H_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m)$$

これは、 L_3 成分では

$$[L_3, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m] = \boldsymbol{\alpha} \cdot [L_3, \mathbf{p}] = i\boldsymbol{\alpha} \cdot (p_2, -p_1, 0) = i(\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1)$$

となっており、他の成分でも同様なので

$$[\mathbf{L}, H_D] = i\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}$$

となるからです。

スピン演算子を 4×4 行列に拡張した Σ も交換しません。 ρ を

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

とすると

$$\Sigma = \rho \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha} \rho, \quad \rho \Sigma = \boldsymbol{\alpha}$$

Σ_3 とハミルトニアン演算子の交換を見ると

$$\begin{aligned} [\Sigma_3, H_D] &= [\Sigma_3, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = [\Sigma_3, \boldsymbol{\alpha}] \cdot \mathbf{p} \\ &= [\rho \alpha_3, \boldsymbol{\alpha}] \cdot \mathbf{p} \\ &= \rho \alpha_3 (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \cdot \mathbf{p} - (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \rho \alpha_3 \cdot \mathbf{p} \\ &= 2i(\alpha_2, -\alpha_1, 0) \cdot \mathbf{p} \\ &= -2i(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})_3 \end{aligned}$$

これは他の成分も同様なので

$$[\boldsymbol{\Sigma}, H_D] = -2i(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})$$

$\boldsymbol{\alpha}$ の関係

$$\alpha_3 \alpha_1 - \alpha_1 \alpha_3 = 2i\Sigma_2, \quad \alpha_2 \alpha_3 - \alpha_3 \alpha_2 = 2i\Sigma_1, \quad \alpha_1 \alpha_2 - \alpha_2 \alpha_1 = 2i\Sigma_3$$

を使っています。交換しないので Σ (もしくは S) は保存量ではありません。

しかし、今の結果から、軌道角運動量 L とスピン角運動量 S の和である全角運動量 $J = L + S$ は

$$[\mathbf{J}, H_D] = 0 \quad (\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{2}\Sigma)$$

となり全角運動量 \mathbf{J} が保存します。なので、ディラック方程式はスピンをはじめから含んでいると言えて、スピンの理論的に導かれています。

ついでに、ハミルトニアン演算子との交換関係の話としてハイゼンベルク方程式を見ます。3次元座標の位置演算子 $x_i(t)$ のハイゼンベルク方程式は、正準交換関係 $[x_i, p_j] = i\delta_{ij}$ から

$$\begin{aligned} \frac{dx_i(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[H_D, x_i(t)] = \frac{i}{\hbar}[c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m, x_i(t)] \\ &= \frac{i}{\hbar}[c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m, e^{iH_D t/\hbar} x_i(0) e^{-iH_D t/\hbar}] \\ &= \frac{i}{\hbar} e^{iH_D t/\hbar} [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m, x_i(0)] e^{-iH_D t/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} c \sum_{j=1}^3 e^{iH_D t/\hbar} \alpha_j e^{-iH_D t/\hbar} [p_j, x_i] \\ &= c\alpha_i(t) \end{aligned}$$

速度であることをはっきりさせるために自然単位系ではなくしています。ハミルトニアン演算子が時間発展を担っているのは通常の量子力学と同じなので、時間発展は $e^{iH_D t/\hbar}$ で与えています。 $\alpha_i(t)$ が時間依存していなければ

$$\frac{dx_i}{dt} = c\alpha_i$$

α_i の固有値は ± 1 なので、粒子は光速 $\pm c$ で動いている（光速でゆらいでいる）ことになります。しかし、 α_i はハミルトニアン演算子と交換しなく、観測される α_i の期待値は光速からズレるはずですが、実際に、ディラック方程式に従う電子は光速で動いてなく（電子は質量を持つ）、光速付近の速度を行き来していると考えられます。この運動をジグザグ運動 (Zitterbewegung) と呼びます。

$\alpha_i(t)$ を求めます。 $\alpha_i(t)$ のハイゼンベルク方程式は

$$\frac{d\alpha_i(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H_D, \alpha_i(t)] = \frac{i}{\hbar} e^{iH_D t/\hbar} [H_D, \alpha_i] e^{-iH_D t/\hbar} \quad (\alpha_i = \alpha_i(0))$$

これから $\alpha_i(t)$ は保存量ではないです。 H_D と α_i の交換関係は

$$[H_D, \alpha_i] = H_D \alpha_i - \alpha_i H_D = -2\alpha_i H_D + H_D \alpha_i + \alpha_i H_D = -2\alpha_i H_D + \{H_D, \alpha_i\}$$

第2項の反交換関係は

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij}, \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$$

を使うことで

$$\begin{aligned}\{H_D, \alpha_i\} &= (c \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j + \beta m) \alpha_i + \alpha_i (c \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j + \beta m) = c \sum_{j=1}^3 \{\alpha_i, \alpha_j\} p_j + \{\beta, \alpha_i\} \\ &= 2c \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} p_j \\ &= 2cp_i\end{aligned}$$

これから、 H_D と α_i の交換関係は

$$[H_D, \alpha_i] = 2cp_i - 2\alpha_i H_D$$

となり

$$\frac{d\alpha_i(t)}{dt} = 2\frac{i}{\hbar} e^{iH_D t/\hbar} (cp_i - \alpha_i H_D) e^{-iH_D t/\hbar} \quad (17)$$

ここで

$$F_i = cp_i H_D^{-1} - \alpha_i, \quad F_i(t) = e^{iH_D t/\hbar} (cp_i H_D^{-1} - \alpha_i) e^{-iH_D t/\hbar} \quad (18)$$

とします。 H_D はハミルトニアン演算子なので、その固有値は0でないとして H_D^{-1} としています。 F_i と H_D は

$$\begin{aligned}F_i H_D &= cp_i - H_D \alpha_i = cp_i - 2cp_i + \alpha_i H_D = -cp_i + \alpha_i H_D \\ H_D F_i &= cp_i - \alpha_i H_D\end{aligned}$$

となっているので、 F_i は H_D と反交換して

$$F_i H_D = -H_D F_i$$

そうすると、 $F_i(t)$ は

$$F_i(t) = e^{iH_D t/\hbar} F_i e^{-iH_D t/\hbar} = e^{2iH_D t/\hbar} F_i$$

となるので、 t で積分すると

$$\int_0^t F_i(t') dt' = \int_0^t e^{2iH_D t'/\hbar} F_i dt' = \frac{1}{2iH_D/\hbar} (e^{2iH_D t} F_i - F_i)$$

必要なものは求めたので、(17)に戻り

$$\frac{d\alpha_i(t)}{dt} = -2\frac{i}{\hbar} H_D F_i(t)$$

これを t で積分すると

$$\alpha_i(t) = -2\frac{i}{\hbar} H_D \int_0^t F_i(t') dt' = -\frac{2i}{\hbar} H_D \frac{1}{2iH_D/\hbar} (e^{2iH_D t} F_i - F_i) = -F_i(t) + F_i$$

$t = 0$ では、(18) から

$$\alpha_i(0) = \alpha_i = cp_i H_D^{-1} - F_i$$

なので

$$\begin{aligned} \alpha_i(t) &= cp_i H_D^{-1} - F_i - e^{2iH_D t/\hbar} F_i + F_i \\ &= cp_i H_D^{-1} - F_i(t) \\ &= cp_i H_D^{-1} - e^{2iH_D t/\hbar} (cp_i H_D^{-1} - \alpha_i) \end{aligned}$$

c をかけると

$$c\alpha_i(t) = c^2 p_i H_D^{-1} - cF_i(t)$$

第1項の H_D はハミルトニアン演算子なのでエネルギー E とすれば、特殊相対論で出てくる古典的な速度 $c^2 p_i/E$ です。第2項は時間に依存して振動する項です。というわけで、 $c\alpha_i(t)$ の値は振動しているのが分かります。また、位置 $x_i(t)$ は

$$\begin{aligned} \frac{dx_i(t)}{dt} &= c^2 p_i H_D^{-1} - e^{2iH_D t/\hbar} (c^2 p_i H_D^{-1} - c\alpha_i) \\ x_i(t) &= x_i(0) + c^2 p_i H_D^{-1} t - \frac{\hbar}{2i} H_D^{-1} (e^{2iH_D t/\hbar} - 1) (c^2 p_i H_D^{-1} - c\alpha_i) \\ &= x_i(0) + c^2 p_i H_D^{-1} t - \frac{\hbar c}{2i} H_D^{-1} (e^{2iH_D t/\hbar} - 1) F_i \end{aligned}$$

となっています。