ディラック方程式〜非相対論的極限〜

電磁場中のディラック方程式の非相対論的極限を取り、それがパウリ方程式になることを見ます。

　電磁場中のクライン・ゴルドン方程式の非相対論的極限は、スピンの寄与を含まない電磁場中のシュレーディンガー方程式です。なので、同様に電磁場中のディラック方程式の非相対論的極限を取れば、スピン 1/2 の粒子を記述する非相対論的な方程式、つまりパウリ方程式になるはずです。
　電磁場中とするために、電磁場中のクライン・ゴルドン方程式と同じことをします。4 元ベクトルポテンシャル $A^\mu = (A_0, \boldsymbol{A}) = (\kappa_b\Phi/c, \boldsymbol{A})$ によって

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ \Rightarrow\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\ ,\ -i\hbar\nabla\ \Rightarrow\ -i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}$$

と置き換えて、電磁場中のディラック方程式を作ります。置き換えると

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi)\psi = (c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}) + \beta mc^2)\psi$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}) + q\Phi + \beta mc^2)\psi$$

これの 4 成分スピノール ψ を

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

として 2 成分ごとに分割します。そうすると、ディラック・パウリ表現で

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} + q\Phi\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})\chi_2 \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})\chi_1 \end{pmatrix} + q\Phi\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} \chi_1 \\ -\chi_2 \end{pmatrix}$$

非相対論的極限は、静止エネルギー mc^2 に比べて運動量が十分小さいとする近似です。なので、エネルギー $E = c\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + mc^2}$ は静止エネルギー mc^2 になります。このことから、χ_1, χ_2 から静止エネルギーの項を分離して

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}\exp[-\frac{imc^2t}{\hbar}]$$

とすれば

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right)\exp(-\frac{imc^2t}{\hbar}) &= \left(\begin{array}{c} c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})v \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})u \end{array}\right)\exp(-\frac{imc^2t}{\hbar}) \\
&\quad + q\Phi\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right)\exp(-\frac{imc^2t}{\hbar}) + mc^2\left(\begin{array}{c} u \\ -v \end{array}\right)\exp(-\frac{imc^2t}{\hbar}) \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right) + mc^2\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right) &= \left(\begin{array}{c} c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})v \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})u \end{array}\right) + q\Phi\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right) + mc^2\left(\begin{array}{c} u \\ -v \end{array}\right) \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right) &= \left(\begin{array}{c} c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})v \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})u \end{array}\right) + q\Phi\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array}\right) - 2mc^2\left(\begin{array}{c} 0 \\ v \end{array}\right) \qquad (1)
\end{aligned}
$$

左辺は静止エネルギーを分離した部分なので、mc^2 より十分小さいとして無視します (固有値としてのエネルギーが静止エネルギーより十分小さい)。さらに、電磁場 $q\Phi$ も $|q\Phi| \ll mc^2$ として、右辺第二項は無視します。

そうすると、(1) の上側の成分は $v = 0$ になります。下側の成分を取り出すと

$$
\begin{aligned}
0 &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})u - 2mc^2v \\
v &= \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})}{2mc}u \qquad (2)
\end{aligned}
$$

mc が分母にいるので、v は u に比べて小さくなります。

ちなみに、$\boldsymbol{p}$ を非相対論的な $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{V}$ として、電磁場がないとすると

$$
v \simeq \frac{|\boldsymbol{V}|}{2c}u
$$

速度 $|\boldsymbol{V}|$ が光速 c に比べて十分小さければ $v \simeq 0$ です。これは、非相対論的極限で負エネルギー部分が 0 になることを言っています。このように、非相対論的極限で、正エネルギー部分と負エネルギー部分が混ざることなく分離し、非相対論的な結果と一致させられることがディラック・パウリ表現の特徴です。

非相対論的極限での v, u の関係 (2) が分かったので、(1) に戻ります。(1) の上側の成分に (2) を入れると

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u = \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}))(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}))}{2m}u + q\Phi u
$$

右辺の第一項の分子はパウリ行列の関係

$$
(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{X})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{Y}) = \boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{Y} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{X}\times\boldsymbol{Y})
$$

を使い

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}))(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})) &= (\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot((\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})\times(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}))\\
&= (\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot((-i\hbar\nabla-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})\times(-i\hbar\nabla-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A}))\\
&= (\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(-\hbar^2\nabla\times\nabla+\frac{q^2}{\kappa_b^2}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}+i\hbar\frac{q}{\kappa_b}\nabla\times\boldsymbol{A})\\
&= (\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 - \frac{q\hbar}{\kappa_b}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})\\
&= (\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 - \frac{q\hbar}{\kappa_b}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}
\end{aligned}
$$

3 行目は微分演算子が作用する関数が後ろにいるとして変形し、最後の置き換えは磁場 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ です。というわけで、u は

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u = (\frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{\kappa_b}\boldsymbol{A})^2 - \frac{q\hbar}{2m\kappa_b}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}+q\Phi)u \tag{3}
$$

これはパウリ方程式そのものです。u の 2 成分はスピン 1/2 を表します。このように、電磁場中のディラック方程式の非相対論的極限はパウリ方程式となります。このため、ディラック方程式にはスピンが含まれていることが確認でき、スピン 1/2 の粒子を記述すると言えます。また、スピンは相対論的、非相対論的に関係なく存在することもわかります。

パウリ方程式のハミルトニアンでの $\boldsymbol{B}$ の項は $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ と書け、$\boldsymbol{\mu}$ は粒子に固有の磁気モーメントで

$$
\boldsymbol{\mu} = g\frac{q}{2mc}\boldsymbol{S} \qquad (\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma})
$$

と定義されます。g は g 因子、$\boldsymbol{S}$ は 2×2 行列のスピン演算子です。パウリ方程式は非相対論的な電子 $(q=-e)$ を記述し、その g 因子は 2 です。なので、ディラック方程式から電子の g 因子が 2 になることが示せています。g 因子の実験値は大体 2.002 です。この 2 からのズレは、電磁場との相互作用の寄与をさらに見ていくことで理論的に計算でき、それは実験値と異常なほど一致します。これは QED で触れます。