相対論的量子力学

Dirac 方程式

・連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \qquad \left\{ \begin{array}{l} S: 流れ \\ \rho: 密度 \end{array} \right.$$

Schrödinger eq.

ψ^* かける $\rightarrow$ $$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi$$

複素共役

ψ かける $\rightarrow$ $$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^* + V\psi^*$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) + \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\right\} = 0$$ となる.

$$\rho = \psi^*\psi^*, \quad S = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$ となる

・Klein-Gordon eq.

光速に近いとき $E^2 = m_0^2c^4 + c^2p^2$ となる $\because$ $\left(\begin{array}{l} E = mc^2 \\ p = mv \\ m = \dfrac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{array} \right.$

$\hat{p} \rightarrow -i\hbar\nabla^2$ より.

$$\left\{\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right\}\psi = \left\{\Box - \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right\} = 0$$ クライン・ゴルドン eq. ※

$m_0 = 0 \rightarrow \Box\psi = 0$ 相対論的波動方程式

光の質量がゼロ.を意味する.

1次元 KG-eq

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\psi = 0$$

$$\rho = -\frac{1}{c^2}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right)$$

$$S = -\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right)$$

※ は2階微分を含むので. ψ, $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ は任意に選べる.

このとき $\rho > 0$ となる保証なし

$\longrightarrow$ よくない.

Dirac方程式の導出

時間, 空間の1階微分にしたい.　　$a^2+b^2=(a+ib)(a-ib)$

$$(E-V)^2=m_0^2c^4+c^2(p_x^2+p_y^2+p_z^2)\qquad V=V(x,y,z)$$

$E\to H$ として.

$$H=V\pm c\sqrt{p_x^2+p_y^2+p_z^2+m_0^2c^2}$$

$$p_x^2+p_y^2+p_z^2+m_0^2c^2=(\alpha_x p_x+\alpha_y p_y+\alpha_z p_z+\beta m_0 c)^2$$ となる. $\alpha_i,\ \beta$ を決めたい.

一般に, 決められない $\longrightarrow$ 全て演算子とみなす.

$$\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2+m_0^2c^2=(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z+\hat{\beta}m_0c)$$
$$\times(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z+\hat{\beta}m_0c)$$
$$=\hat{\alpha}_x^2\hat{p}_x^2+\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\hat{p}_x\hat{p}_y+\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_z\hat{p}_x\hat{p}_z+\hat{\alpha}_x\hat{\beta}\hat{p}_x m_0c$$
$$+\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x\hat{p}_y\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y^2\hat{p}_y^2+\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z\hat{p}_y\hat{p}_z+\hat{\alpha}_y\hat{\beta}\hat{p}_y m_0c$$
$$+\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x\hat{p}_z\hat{p}_x+\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y\hat{p}_z\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z^2\hat{p}_z^2+\hat{\alpha}_z\hat{\beta}\hat{p}_z m_0c$$
$$+\hat{\beta}\hat{\alpha}_x m_0c\hat{p}_x+\hat{\beta}\hat{\alpha}_y m_0c\hat{p}_y+\hat{\beta}\hat{\alpha}_z m_0c\hat{p}_z+\hat{\beta}^2m_0^2c^2$$

成立するためには.

$$\hat{\alpha}_x^2=\hat{\alpha}_y^2=\hat{\alpha}_z^2=\hat{\beta}^2=1$$

$$\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y=-\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x,\quad \hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x=-\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_z,\quad \hat{\alpha}_i\hat{\beta}=-\hat{\beta}\hat{\alpha}_i\quad(i=x,y,z)$$

$$\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z=-\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y\qquad \hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j=-\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i$$

これらをみたすのは以下

$$\hat{\alpha}_x=\left(\begin{array}{cc|cc} & & & 1\\ & & 1 & \\ \hline & 1 & & \\ 1 & & & \end{array}\right)\quad \hat{\alpha}_y=\left(\begin{array}{cc|cc} & & & -i\\ & & i & \\ \hline & -i & & \\ i & & & \end{array}\right)\quad \hat{\alpha}_z=\left(\begin{array}{cc|cc} & & 1 & \\ & & & -1\\ \hline 1 & & & \\ & -1 & & \end{array}\right)\quad \hat{\beta}=\left(\begin{array}{cc|cc} 1 & & & \\ & 1 & & \\ \hline & & -1 & \\ & & & -1\end{array}\right)$$

Dirac行列

$\hat{\alpha}_x^{+}=\hat{\alpha}_x$ …. であり, エルミート性.

よって、そのとき、 $\hat{H} = \hat{V} + c\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + c\hat{\alpha}_y\hat{p}_y + c\hat{\alpha}_z\hat{p}_z + \hat{\beta}m_0c^2$ となる。

ここで $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $\cdots$ として、

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -ic\hbar\left(\hat{\alpha}_x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \hat{\alpha}_y\frac{\partial\psi}{\partial y} + \hat{\alpha}_z\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) + \beta m_0c^2\psi + V\psi$$

(Dirac 方程式)

ここで $\psi = [\psi_1\ \psi_2\ \psi_3\ \psi_4]^T$ と書ける。

成分ごとに書くと、

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = (V + m_0c^2)\psi_1 - ic\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial z} - ic\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_4$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = (V + m_0c^2)\psi_2 + ic\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial z} - ic\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_3$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial t} = (V - m_0c^2)\psi_3 - ic\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial z} - ic\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_2$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial t} = (V - m_0c^2)\psi_4 + ic\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial z} - ic\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_1$$

$V = 0$ (自由粒子) のとき、 $\frac{\hat{\beta}}{\hbar c}$ をかけて、

$$i\hat{\beta}\frac{\partial\psi}{\partial(ct)} = -i\hat{\beta}\left(\hat{\alpha}_x\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\alpha}_y\frac{\partial}{\partial y} + \hat{\alpha}_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi + \frac{m_0c}{\hbar}\psi$$ となる。

ここで
$$\left.\begin{aligned} &\gamma^k = \hat{\beta}\hat{\alpha}_k \quad (k=1,2,3) \\ &\gamma^4 = \hat{\beta} \\ &(x^1, x^2, x^3, x^4) = (x, y, z, ct) \end{aligned}\right\}$$ として、

$$i\left(\gamma^1\frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2\frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3\frac{\partial}{\partial x^3} + \gamma^4\frac{\partial}{\partial x^4}\right)\psi - \frac{m_0c}{\hbar}\psi = 0$$

$$\longrightarrow \sum_{\mu=1}^{4} i\gamma^\mu\frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} - \frac{m_0c}{\hbar}\psi = 0 \qquad (1)$$

$$\longrightarrow i\gamma^\mu\partial_\mu\psi - \frac{m_0c}{\hbar}\psi = 0$$ と書ける。

ここで、 $\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\delta^{\mu\nu}$ $(\mu,\nu = 1,2,3,4)$ が成り立つ。

・Dirac方程式の解.

$V=0$ の自由粒子の解を求める.

$$\psi_j = u_j e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$ 平面波

$E=\hbar\omega$, $p_x=\hbar k_x$, $p_y=\hbar k_y$, $p_z=\hbar k_z$ を用いて

$$\left\{\begin{aligned}
&(E - m_0c^2)u_1 - c p_z u_3 - c(p_x - i p_y)u_4 = 0\\
&(E - m_0c^2)u_2 - c(p_x + i p_y)u_3 + c p u_4 = 0\\
&(E - m_0c^2)u_3 - c p_z u_1 - c(p_x - i p_y)u_2 = 0\\
&(E - m_0c^2)u_4 - c(p_x - i p_y)u_1 + c p_z u_2 = 0
\end{aligned}\right.$$

これらが解をもつ条件 → 行列式 $=0$

$$(E^2 - m_0^2c^4 - c^2 p^2)^2 = 0$$

$$\longrightarrow E^2 = m_0^2c^4 + c^2p^2$$

$$E = \pm(m_0^2c^4 + c^2p^2)^{\frac{1}{2}}$$

正のエネルギー $E_+ = (m_0^2c^4 + c^2p^2)^{\frac{1}{2}}$ に対して.

$$\left\{\begin{aligned}
&u_1 = \frac{cp_z}{E_+ + m_0c^2},\quad u_2 = \frac{c(p_x + ip_y)}{E_+ + m_0c^2},\quad u_3 = 1,\quad u_4 = 0\\
&u_1 = \frac{c(p_x - ip_y)}{E_+ + m_0c^2},\quad u_2 = \frac{-cp_z}{E_+ + m_0c^2},\quad u_3 = 0,\quad u_4 = 1
\end{aligned}\right.$$

負のエネルギー $E_- = -(m_0^2c^4 + c^2p^2)^{\frac{1}{2}}$

$$\left\{\begin{aligned}
&u_1 = 1,\quad u_2 = 0,\quad u_3 = \frac{-cp_z}{-E_- + m_0c^2},\quad u_4 = \frac{-c(p_x + ip_y)}{-E_- + m_0c^2}\\
&u_1 = 0,\quad u_2 = 1,\quad u_3 = \frac{-c(p_x - ip_y)}{-E_- + m_0c^2},\quad u_4 = \frac{-cp_z}{-E_- + m_0c^2}
\end{aligned}\right.$$

$+$ → 電子

$-$ → 陽電子 (Diracの予言)

Anderson 1936 ノーベル賞

コメント ψ を $e^{i(k_z z - \omega t)}$ と z 方向への伝播とすると, もう少し易しくなる

エルミート $\rightarrow (\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$

$\gamma^{4+} = \gamma^{4}, \quad \gamma^{k+} = -\gamma^{k} \quad (k=1,2,3)$

$$\sum_{\mu=1}^{4} i \frac{\partial \psi^{+}}{\partial x^{\mu}} \gamma^{\mu} - \frac{m_0 c}{\hbar} \psi^{+} = 0$$

右から γ^4 をかけて

$$\sum_{\mu=1}^{4} i \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^{\mu}} \gamma^{\mu} + \frac{m_0 c}{\hbar} \bar{\psi} = 0$$, ただし. $\bar{\psi} = \psi^{+}\gamma^{4}$

(1)式に左から $\bar{\psi}$ をかける, 上式に右から ψ をかける. たす.

$$\sum_{\mu=1}^{4} \bar{\psi}\gamma^{\mu}\frac{\partial \psi}{\partial x^{\mu}} + \sum_{\mu=1}^{4} \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^{\mu}}\gamma^{\mu}\psi = 0$$

まとめて. $\displaystyle\sum_{\mu=1}^{4} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}}\left(\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right) = 0$ となる.

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x}(\bar{\psi}\gamma^{1}\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{\psi}\gamma^{2}\psi) + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\psi}\gamma^{3}\psi) + \frac{\partial}{\partial (ct)}(\bar{\psi}\gamma^{4}\psi) = 0$$

$\rho = \bar{\psi}\gamma^{4}\psi = \psi^{+}\psi$

$j^{k} = c\bar{\psi}\gamma^{k}\psi$ として. $\displaystyle\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\, j = 0$ が得られる.

$\rho > 0$

よって. Dirac eq. は連続の式をみたす.

・Dirac方程式とスピン角運動量

まず, Schrödinger eq. では, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V$ に対して

$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$ などとの交換関係

$[\hat{H}, \hat{l}_x] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{l}_y] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$ となる

⟶ 軌道角運動量 L は運動の定数となる.

一方, Dirac ハミルトニアンと $\hat{l}$ との交換関係

$$\left.\begin{aligned}
[\hat{H}_D, \hat{l}_x] &= -c\hbar^2\left(\hat{\alpha}_y\frac{\partial}{\partial z} - \hat{\alpha}_z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
[\hat{H}_D, \hat{l}_y] &= -c\hbar^2\left(\hat{\alpha}_z\frac{\partial}{\partial x} - \hat{\alpha}_x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
[\hat{H}_D, \hat{l}_y] &= -c\hbar^2\left(\hat{\alpha}_x\frac{\partial}{\partial y} - \hat{\alpha}_y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned}\right\}$$

交換しない

⟶ L は運動の定数でない.

(L と S の和が交換する)

$$\hat{\sigma}_x = \left(\begin{array}{cc|cc} & 1 & & \\ 1 & & & \\ \hline & & & 1 \\ & & 1 & \end{array}\right), \quad \hat{\sigma}_y = \left(\begin{array}{cc|cc} & -i & & \\ i & & & \\ \hline & & & -i \\ & & i & \end{array}\right) \quad \hat{\sigma}_z = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & & & \\ & -1 & & \\ \hline & & 1 & \\ & & & -1 \end{array}\right)$$

⟵ Pauli 行列 2×2 を拡張したもの.

$$\hat{\rho}_1 = \left(\begin{array}{cc|cc} & & 1 & \\ & & & 1 \\ \hline 1 & & & \\ & 1 & & \end{array}\right) \quad \hat{\rho}_3 = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & & & \\ & 1 & & \\ \hline & & -1 & \\ & & & -1 \end{array}\right)$$

$$\left\{\begin{aligned}
\hat{\alpha}_x &= \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_x\\
\hat{\alpha}_y &= \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_y\\
\hat{\alpha}_z &= \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_z\\
\hat{\beta} &= \beta_3
\end{aligned}\right.$$

$$[\hat{H}_D, \hat{\sigma}_x] = 2c\hbar\left(\hat{\alpha}_y\frac{\partial}{\partial z} - \hat{\alpha}_z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$[\hat{H}_D, \hat{\sigma}_y] = 2c\hbar\left(\hat{\alpha}_z\frac{\partial}{\partial x} - \hat{\alpha}_x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$[\hat{H}_D, \hat{\sigma}_z] = 2c\hbar\left(\hat{\alpha}_x\frac{\partial}{\partial y} - \hat{\alpha}_y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$ となる.

よって $[\hat{H}, \hat{l}_x + \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x] = 0, \cdots \Longrightarrow [\hat{H}, \hat{\boldsymbol{l}} + \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}] = 0$

スピン角運動量演算子 $\hat{s} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$ として,

$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ として $[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{J}}] = 0$ となるので, J が運動の定数となる.

Pauli 行列を用いて Dirac ハミルトニアンは,

$$\hat{H} = \hat{V} + c\hat{\rho}_1(\hat{\sigma}_x\hat{p}_x + \hat{\sigma}_y\hat{p}_y + \hat{\sigma}_z\hat{p}_z) + \hat{\rho}_3 m_0c^2$$ となる.

Dirac 方程式において, スピンは自動的に含まれている.

・電磁場中でのDirac方程式

$$\mathbb{P} \to \mathbb{P} - e\mathbb{A} \quad (\text{Diracのおきかえ})$$

$$\hat{H}_D = e\phi + c\left\{\hat{\alpha}_x(\hat{p}_x - e\hat{A}_x) + \hat{\alpha}_y(\hat{p}_y - e\hat{A}_y) + \hat{\alpha}_z(\hat{p}_z - e\hat{A}_z)\right\} + \hat{\beta} m_0 c^2$$

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ であるから.

$$\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right) - c\hat{\alpha}\cdot(\hat{p} - e\hat{A}) - \hat{\beta} m_0 c^2\right\}\psi = 0$$ となる.

左から $\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right) + c\hat{\alpha}\cdot(\hat{\mathbb{P}} - e\hat{\mathbb{A}}) + \hat{\beta} m_0 c^2\right\}$ をかける

$$\Rightarrow \Big\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)^2 - c^2(\hat{\mathbb{P}} - e\hat{\mathbb{A}})^2 - m_0^2 c^4 + ic\hbar e(\hat{\alpha}_x E_x + \hat{\alpha}_y E_y + \hat{\alpha}_z E_z) + ic^2\hbar e(\underbrace{\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y}_{i\hat{\sigma}_z} B_z + \underbrace{\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z}_{i\hat{\sigma}_x} B_x + \underbrace{\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x}_{i\hat{\sigma}_y} B_y)\Big\}\psi = 0$$

次ページ

$$\to \left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)^2 - c^2(\hat{\mathbb{P}} - e\mathbb{A})^2 - m_0^2 c^4 + ic\hbar e(\hat{\alpha}\cdot\mathbb{E}) - c^2\hbar e(\hat{\sigma}\cdot\mathbb{B})\right\}\psi = 0 \quad \circledast$$

$E = E_1 + m_0 c^2$ とする
相対論的　非相対論的

$E_1 \ll m_0 c^2,\ e\phi \ll m_0 c^2$

$$(E_1 - e\phi + mc^2)^2 - m^2c^4 = 2mc^2(E_1 - e\phi) + \cancel{(E_1 - e\phi)^2}$$

このとき, $(E - e\phi)^2 - m_0^2 c^4 \simeq 2m_0 c^2 (E_1 - e\phi)$

$$\to E_1\psi' = \left\{\frac{1}{2m_0}(\hat{\mathbb{P}} - e\mathbb{A})^2 - e\phi - \frac{ie\hbar}{2m_0 c}\hat{\alpha}\cdot\mathbb{E} + \frac{e\hbar}{2m_0}\hat{\sigma}\cdot\mathbb{B}\right\}\psi'$$

電子スピンの磁気モーメント μ_s → エネルギー $\mu_s\cdot\mathbb{B} = \frac{e\hbar}{2m_0}\hat{\sigma}\cdot\mathbb{B}$

$\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma} = \hat{\mathbb{S}}$ なので. $\mu_s = \frac{e}{m_0}\hat{\mathbb{S}}$ となる.

一方, 古典電磁気学では.

円電流 → $\mu = I\cdot A$

$\mathbb{A} = \pi r^2$. $I = ev/2\pi r$ より $\mu = \frac{ev}{2\pi r}\cdot\pi r^2 = \frac{e}{2m_0}\overbrace{(mvr)}^{\ell} \to \mu = \frac{e}{2m_0}\ell$

$$\left\{(\hat{E}-e\phi)+c\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})+\hat{\beta}m_0c^2\right\}\left\{(\hat{E}-e\phi)-c\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})-\hat{\beta}m_0c^2\right\}\psi=0$$ を計算する

$$\to\left\{(\hat{E}-e\phi)^2-\left[\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})\right]^2-m_0^2c^4\right.$$
$$\left.-(\hat{E}-e\phi)\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})+\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})(\hat{E}-e\phi)\right\}\psi=0$$

$(\alpha\cdot\mathbb{B})(\alpha\cdot\mathbb{C})=\mathbb{B}\cdot\mathbb{C}+i\sigma\cdot(\mathbb{B}\times\mathbb{C})$ において、$\mathbb{B}=\mathbb{C}=(\hat{p}-e\hat{A})$ とすると、

$$(\hat{p}-e\hat{A})\times(\hat{p}-e\hat{A})=-e(\hat{A}\times\hat{p}+\hat{p}\times\hat{A})=i\hbar e\nabla\times\mathbb{A}=i\hbar e\mathbb{B}$$ より

$\mathbb{B}=\nabla\times\mathbb{A}$

$$\left[\hat{\alpha}\cdot(\hat{p}-e\hat{A})\right]^2=(\hat{p}-e\hat{A})^2-e\hbar\hat{\sigma}\cdot\hat{B}$$ となる。

最後の2項は、

$$e\hat{\alpha}\cdot(\mathbb{E}\mathbb{A}-\mathbb{A}\mathbb{E})+e\hat{\alpha}\cdot(\phi\hat{p}-\hat{p}\phi)$$
$$=i\hbar e\hat{\alpha}\cdot\frac{\partial\mathbb{A}}{\partial t}+i\hbar e\hat{\alpha}\cdot\nabla\phi=-i\hbar e\hat{\alpha}\cdot\hat{\mathbb{E}}\quad\leftarrow\ \mathbb{E}=-\frac{\partial\mathbb{A}}{\partial t}-\nabla\phi$$

よって、Ⓐの式を得る

$$\left\{\underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)^2-m_0^2c^4}_{\simeq 2m_0c^2(E_1-e\phi)}-c^2(\hat{p}-e\hat{A})^2+ic\hbar e(\hat{\alpha}\cdot\hat{\mathbb{E}})-c^2\hbar e(\hat{\sigma}\cdot\mathbb{B})\right\}\psi=0$$

Ⓐに $\psi=\begin{pmatrix}u_1(r)\\u_2(r)\\u_3(r)\\u_4(r)\end{pmatrix}e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}t}$ を代入して

$$\left(2mc^2(E_1-e\phi)-c^2(p-eA)^2-c^2e\hbar\sigma\cdot\mathbb{B}\right)\begin{pmatrix}u_1(r)\\u_2(r)\end{pmatrix}+ic\hbar e\sigma\cdot\mathbb{E}\begin{pmatrix}u_3(r)\\u_4(r)\end{pmatrix}=0$$

ⒶⒶ

古典論

Biot-Savart law $\quad \mathbb{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} Ze \frac{\mathbb{r} \times \mathbb{v}}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze}{m} \cdot \frac{1}{r^3} \mathbb{l}$

$(\mathbb{l} = \mathbb{r} \times \mathbb{p} = \mathbb{r} \times m\mathbb{v})$

スピン磁気モーメント $\mu_s = -\frac{e}{m} \mathbb{s} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbb{s}$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.2732 \times 10^{-24}\ \mathrm{A \cdot m^2}$

スピンと $\mathbb{B}$ の相互作用

$H_{so} = -\mu_s \cdot \mathbb{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{1}{r^3} (\mathbb{l} \cdot \mathbb{s})$ となる

Dirac 方程式から求めた値より 2倍大きい.

・スピン軌道相互作用の導出

$$\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)-c\hat{\alpha}\cdot\hat{p}-\hat{\beta}m_0c^2\right\}\psi=0 \qquad (A=0 とした)$$

$$\psi(r,t)=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad を代入.$$

ここで σ は Pauli 行列 $\hat{\alpha}=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}&0\\0&\hat{\sigma}\end{pmatrix}$

$$(E-e\phi-mc^2)\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}=c\sigma\cdot p\begin{pmatrix}u_3\\u_4\end{pmatrix}$$

$$(E-e\phi+mc^2)\begin{pmatrix}u_3\\u_4\end{pmatrix}=c\sigma\cdot p\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$$

→ Weyl 方程式 $(m=0)$

$E-e\phi+mc^2\simeq 2mc^2$ として. $\begin{pmatrix}u_3\\u_4\end{pmatrix}=\dfrac{1}{2mc}(\sigma\cdot p)\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$

㊀に代入し. E を含んだ項は. $\dfrac{ie\hbar}{4m^2c^2}(\sigma\cdot E)(\sigma\cdot p)\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$ となる.

$(\sigma\cdot E)(\sigma\cdot p)=(E\cdot p)+i(\sigma\cdot[E\times p])$ が成立する.

中心力場では. $\phi(r)=U(r)$ として. $E=-\mathrm{grad}\,\phi(r)=-r\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{dU}{dr}\right)$

$$E\times p=-\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}(r\times p)=-\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}\,\hbar l$$

よって.
$$\frac{ie\hbar}{4m^2c^2}(E\cdot p)+\underbrace{\frac{e\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}\right)(\sigma\cdot l)}$$

$$\hookrightarrow \hat{H}_{so}=\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}\right)(s\cdot l)$$

スピン軌道相互作用ハミルトニアン

$U(r)=-\dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r}$ (Coulomb) のとき. $\dfrac{1}{r}\dfrac{dU}{dr}$ は $\dfrac{1}{r^3}$ の次元となる.

$$\rightarrow H_{so}=\frac{\mu_0}{8\pi}Z\left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2\frac{1}{r^3}(l\cdot s)$$

これは 円電流に対する Biot-Savert の法則から求めたエネルギーより $\frac{1}{2}$ 小さい.

例. Rashba型 spin-orbit interaction

$\frac{dU(r)}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r} \longrightarrow \nabla U(r)$ とする

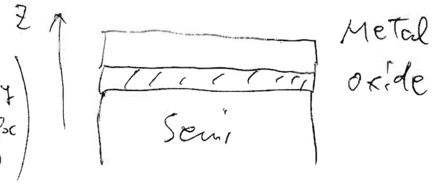
$H_{SO} = \alpha_R \boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p}\times\nabla U(r))$ となる (ここで α は定数)

$-\alpha_R(\mathbf{p}\times\nabla U(r))$ が磁場に相当. (Zeeman energy $-\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$)

金属/酸化物/半導体 接合(MOS)の界面 ⟶ ポテンシャルの空間変化

M O S

$\mathbf{p}\times\nabla U \propto \mathbf{p}\times z$ となり, $\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}\times\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} p_y \\ -p_x \\ 0 \end{pmatrix}$



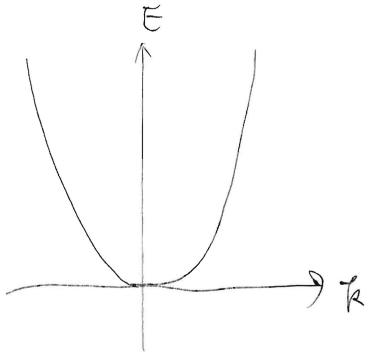
$H_R = \frac{\alpha_R}{\hbar}(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x)$ となる.

$$\overset{=H_0+H_R}{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2k^2}{2m} & i\alpha_R k_- \\ -i\alpha_R k_+ & \frac{\hbar^2k^2}{2m} \end{pmatrix}$$

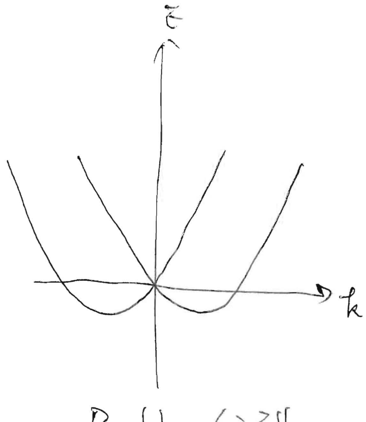
ただし, $k_\pm = k_x \pm i k_y$

また $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

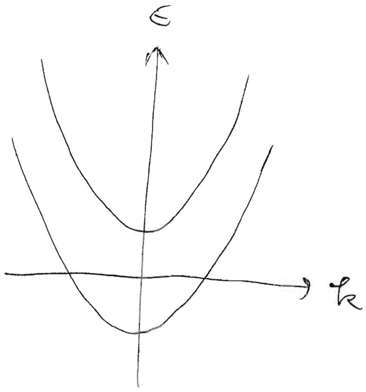
$\xrightarrow{\text{対角化}}$ $E_{k\pm} = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \pm \alpha_R k$



自由電子



Rashba分裂



Zeeman分裂

・中心力場中でのDirac方程式

全角運動量 $\hat{J}^2=(\hat{l}+\hat{s})^2=\hat{l}^2+2\hat{l}\cdot\hat{s}+\frac{3}{4}\hbar^2$

$\hat{H}_0$ と $\hat{l}^2$ は交換しない。

$\hat{l}\cdot\hat{s}=\frac{1}{2}\hbar\,\hat{l}\cdot\hat{\sigma}$ となる。

ここで、$\hat{K}=\hat{\beta}\{(\hat{l}\cdot\hat{\sigma})+\hbar\}$ を導入する

$$\hat{K}^2=\hat{l}^2+(\hat{l}\cdot\hat{\sigma})\hbar+\hbar^2 \quad \leftarrow \quad (\hat{l}\cdot\hat{\sigma})^2=\hat{l}^2+i\hat{\sigma}\cdot(\hat{l}\times\hat{l})$$

$$=\left(\hat{l}+\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}\right)^2+\frac{1}{4}\hbar^2 \qquad =\hat{l}^2-\hat{\sigma}\cdot\hat{l} \qquad \hat{l}\times\hat{l}=i\hat{l}$$

$$=\left(\hat{J}+\frac{\hbar^2}{4}\right)$$

そして、$\hat{K}^2\psi=\left\{\left(\cancel{\ }j+\frac{1}{2}\right)\hbar\right\}^2\psi$ となる

$\hat{K}\psi=k\hbar\psi \qquad k=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)=\pm1,\pm2,\cdots\pm\infty$

また、$\left\langle\frac{1}{\hbar}(\hat{l}\cdot\hat{\sigma})\right\rangle=\frac{1}{\hbar^2}\left\langle\left(\hat{J}^2-\hat{l}^2-\frac{1}{4}\hat{\sigma}^2\right)\right\rangle$

$$=j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}=\begin{cases}-\left(j+\frac{3}{2}\right) & l=j+\frac{1}{2}\text{ のとき}\\ \left(j-\frac{1}{2}\right) & l=j-\frac{1}{2}\text{ のとき}\end{cases}$$

よって、$k=\begin{cases}-\left(j+\frac{1}{2}\right) & l=j+\frac{1}{2}\\ j+\frac{1}{2} & l=j-\frac{1}{2}\end{cases}$

$\hat{\sigma}^2$ の固有値 $s(s+1)=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)=\frac{3}{4}$ となる

次に、極座標表示を考える

$\hat{p}_r=(-i\hbar\nabla)_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=\frac{1}{r}(\hat{r}\cdot\hat{p}-i\hbar)$ と定義する

$\rightarrow \hat{r}\cdot\hat{p}=\hat{r}\hat{p}_r+i\hbar$

$$\begin{cases}\hat{\alpha}_r=\frac{1}{r}(\hat{\alpha}\cdot\hat{r})\\ (\hat{\alpha}\cdot\hat{r})(\hat{\alpha}\cdot\hat{p})=(\hat{r}\cdot\hat{p})+i(\hat{l}\cdot\hat{\sigma})=\hat{r}\hat{p}_r+i\hat{\beta}\hat{K}\\ (\hat{\alpha}\cdot\hat{p})=\hat{\alpha}_r\hat{p}_r+\frac{i\hat{\alpha}_r\hat{\beta}\hat{K}}{r}\end{cases}$$

$\leftarrow \hat{\beta}\hat{K}=\hat{\beta}^2\overbrace{\{\hat{l}\hat{\sigma}+\hbar\}}^{\hat{K}} \quad (\hat{\beta}^2=1)$

$\downarrow$

$\hat{l}\cdot\hat{\sigma}=\hat{\beta}\hat{K}-\hbar$

$\longrightarrow \hat{H}_0=\hat{V}(r)+c\hat{\alpha}_r\hat{p}_r+\frac{ic\hat{\alpha}_r\hat{\beta}\hat{K}}{r}+\hat{\beta}m_0c^2$ と Dirac Hamiltonian が書ける。

$$\longrightarrow \left(c\hat{\alpha}_r\hat{p}_r+\frac{i\hbar ck\hat{\alpha}_r\hat{\beta}}{r}+\hat{\beta}m_0c^2+\hat{V}(r)-E_{n,k}\right)\psi(n,k,m)=0 \qquad ☆$$

$\psi(n,k,l)$ は動径方向、角度方向に分離できない。($\hat{\alpha}_r,\hat{\beta}$ が $\hat{H}_0$ と交換しないため)

$$\hat{H}_D \psi(n,k,m) = E_{n,k} \psi(n,k,m)$$

$$\hat{K} \psi(n,k,m) = k\hbar\ \psi(n,k,m)$$

$$\hat{J}_z \psi(n,k,m) = m\hbar\ \psi(n,k,m)$$

Ⓐに左から $\hat{\beta}$ をかけて、元の式と足して２で割る

$$\left(c\hat{p}_r - \frac{i\hbar c k}{r}\right)\left\{\hat{\alpha}_r \psi(-n,k,m)\right\} + \left(m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E_{n,k}\right)\psi(+n,k,m) = 0$$

ただし、$\psi(\pm n,k,m) = \frac{1}{2}\left(1 \pm \hat{\beta}\right)\psi(n,k,m)$

Ⓐに左から $\hat{\alpha}_r$, $\hat{\beta}\hat{\alpha}_r$ をかけて足して２で割る

$$\left(c\hat{p}_r + \frac{i\hbar c k}{r}\right)\psi(+n,k,m) - \left(m_0 c^2 - \hat{V}(r) + E_{n,k}\right)\left\{\hat{\alpha}_r \psi(-n,k,m)\right\} = 0$$

ここで、
$$\left.\begin{aligned} &\delta_1 = \frac{m_0 c^2 + E_{n,k}}{\hbar c}, \quad \delta_2 = \frac{m_0 c^2 - E_{n,k}}{\hbar c}, \\ &\delta = \sqrt{\delta_1 \delta_2} = \frac{i}{\hbar} p_{n,k}, \quad \rho = \delta \cdot r, \\ &\psi(+n,k,m) = \frac{F(r)}{r} \\ &i\hat{\alpha}_r \psi(-n,k,m) = \frac{G(r)}{r} \end{aligned}\right\}$$
とおく。

$$\rightarrow \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{k}{\rho}\right)G(\rho) - \left(\frac{\delta_2}{\delta} + \frac{rV(r)}{\rho\hbar c}\right)F(\rho) = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho}\right)F(\rho) - \left(\frac{\delta_1}{\delta} - \frac{rV(r)}{\rho\hbar c}\right)G(\rho) = 0$$

さらに、ポテンシャル $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$, $\alpha = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c}$ （微細構造定数）として、

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{k}{\rho}\right)G(\rho) - \left(\frac{\delta_2}{\delta} - \frac{\alpha}{\rho}\right)F(\rho) = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho}\right)F(\rho) - \left(\frac{\delta_1}{\delta} + \frac{\alpha}{\rho}\right)G(\rho) = 0$$

を解けばよいことになる。

$\psi(\pm n, k, m)$ は $r=0$ で有限, $r\to\infty$ でゼロ.

$$\left.\begin{array}{l} \rho=0 \text{ で } G(\rho)=F(\rho)=0 \\ \rho\to\infty \text{ で } G(\rho)=F(\rho)=0 \end{array}\right\}$$

$\rightarrow$ $G(\rho)=g(\rho)e^{-\rho}$, $F(\rho)=f(\rho)e^{-\rho}$ と仮定する

$$g(\rho)=\rho^s\sum_{n'=0}^{\infty} f_{n'}\rho^{n'} \qquad f(\rho)=\rho^s\sum_{n'=0}^{\infty} g_{n'}\rho^{n'}$$ 級数展開

$$\left(\frac{d}{d\rho}-1+\frac{k}{\rho}\right)g-\left(\frac{\delta_2}{\delta}-\frac{\alpha}{\rho}\right)f=0$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}-1-\frac{k}{\rho}\right)f-\left(\frac{\delta_1}{\delta}+\frac{\alpha}{\rho}\right)g=0$$ (合流型超幾何関数)

ρ^{s-1} で比較
$$\left.\begin{array}{l}(s+k)g_0+\alpha f_0=0\\ -\alpha g_0+(s-k)f_0=0\end{array}\right\}\rightarrow s=\sqrt{k^2-\alpha^2}$$

ρ^{s+t-1} で比較
$$(s+t+k)g_t-g_{t-1}+\alpha f_t-\frac{\delta_2}{\delta}f_{t-1}=0$$
$$(s+t-k)f_t-f_{t-1}-\alpha g_t-\frac{\delta_1}{\delta}g_{t-1}=0$$

$$\rightarrow \frac{g_t}{f_t}=\frac{(s+t-k)\delta_2-\alpha\delta}{\alpha\delta_2+(s+t+k)}$$ また. $\dfrac{g_0}{f_0}=\dfrac{s-k}{\alpha}=-\dfrac{\alpha}{s+k}$

$t=n'+1$ を代入して. $g_{n'}=-\dfrac{\delta_2}{\delta}f_{n'}$ $(n'\geq 0)$

これより $2\delta\cdot(s+n')=\alpha(\delta_1-\delta_2)=\dfrac{2\alpha}{\hbar c}E_{n'k}$

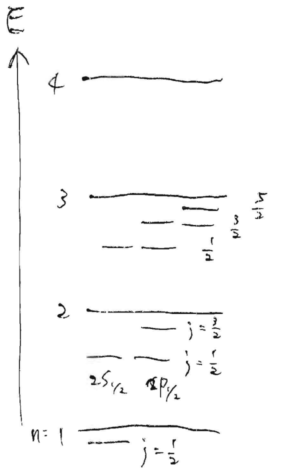
よって. $E_{n'k}=m_0c^2\left\{1+\dfrac{\alpha^2}{(s+n')^2}\right\}^{-\frac{1}{2}}$ $(n'=0,1,2,\cdots)$

静止エネルギー $E_0=m_0c^2$ を引く α^2 までの近似にて.

$$E_{n,k}=E_n-\frac{|E_n|\alpha^2}{n^2}\left(\frac{4n}{|k|}-3\right)$$ となる $|k|=j+\frac{1}{2}$

$$E_{n,j}=E_n-\frac{|E|\alpha^2}{n^2}\left(\frac{4n}{j+\frac{1}{2}}-3\right)$$

ここで $E_n=\dfrac{mc^2\alpha^2}{2n^2}=\dfrac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2}=\dfrac{R}{n^2}$
(非相対論)



よって. 相対論効果により. エネルギー準位がシフトする

$j=l\pm\frac{1}{2}$ により指定される.

Z が大きいとき. l と s が結合し. 相対論補正が必要.

j で決まる
$2S_{1/2}$ $2P_{1/2}$ わずかにずれる
→ ラムシフト