

ファインマン講義 量子電磁力学 (1)

Feynman Lectures on Quantum Electrodynamics

訳および解説 並木 雅俊

Masatoshi Namiki

序文

この小冊子は、カリフォルニア工科大学 (Cal Tech) 1953 年度「量子力学」3 コースの第 3 番目 (第 3 学期) で行った講義ノートを基にしてつくられた。ここには、第 2 学期の講義での光と物質の相互作用に関する質疑応答も含まれている。この質疑応答を基にした講義は、第 1 回から第 6 回に分けて行った。相対論に基づく講義は、第 7 回目からである。

この講義は、量子電磁力学で得られる主な結果と単純かつ明解な計算方法を提示することを目的とした。もちろん、できる限りである。このため聴講対象者を実験物理で学位取得のために研究している学生とし、より高度で詳細な議論を身に付けなければならない理論物理専攻の学生ではない。そもそも、この講義は実験家を目指す学生の要求に応えること念頭に設置されている。Cal Tech のシンクロトロンなどを利用した高エネルギー実験において最も重要とされる光子過程での断面積の計算法の取得してもらうためである。このため、 π 中間子と核子の相互作用のような、より複雑な課題に取り組む理論物理学に役立つ量子電磁力学の学びを想定していない。つまり、場の演算子表現や S 行列の特性など量子電磁力学に内在する多くの特有な形式化における内容は含まれていない。このような議論には、場の量子論のより高度な知識の前提が必須である。それにもかかわらず、力学の講義においては、しばし、最小作用の原理やハミルトンの方程式などは除かれて行われているが、自然現象の物理的意

味を学ぶ上では十分に機能している。これと同様な意味で、この講義も（入門編として）これで完結できると思う。

たった1年間で、初等量子力学と量子電磁力学を同時に講義する試みは挑戦的なことである。これは、物理学の新しい分野が開拓されると、学生は教育プログラムの初期段階まで遡って学ばなければならないという考えに基づいている。最初の2回の講義は、主に、Leonard I. Schiff “Quantum Mechanics” (McGraw-Hill, 1949) を参考図書として、通常の量子力学コース（復習）とした。しかしながら、講義後半に進むに容易にするために、式 (15-3) ~ (15-5) で示した手法を用いて、伝播とポテンシャル散乱の理論を理解しやすいよう工夫した。もう1つの特徴は、非相対論的パウリ方程式を基礎として講義（第3回）したことであろう。

これらの試みはうまくいかなかった¹。この小冊子の内容のほとんどは、現在、大学院における量子力学の1年間のコース後に講義している。

リチャード P. ファインマン
カリフォルニア州パサデナ
1961年11月

注：この小冊子はアルバート・R. ヒップスが取った講義ノートを基に作成され、訂正を含めた編集は、H. T. ユラと E. R. ハギンズが行った（P. シフラが第2回の訂正を含めた編集を行った）。これらを経て、ベンジャミン出版社から物理学最前線シリーズの一冊として1961年に出版された。

光と物質の相互作用 —— 量子電磁力学

第 1 回講義

光と物質の相互作用の理論を量子電磁力学という。量子電磁力学は、非常に多くの等価法を用いていることもあって、実際よりも難しく思われている。そこで、最もシンプルなフェルミの手法から始めることにする。この手法を、フェルミとは異なった視点を出発点として、光子の放出または吸収を仮定することから始める。こうすれば、無理なく入っていけると思う。

フェルミの手法

宇宙のすべての原子がある箱の中にあると仮定する。この箱は、古典物理学（古典論）によると、振動子と物質の間の結合を伴う調和振動子の分布に関して自然に記述できるものとして扱うことになる。

量子電磁気学への移行は、端的に言えば、振動子を古典論ではなく量子力学で扱うことに他ならない。こう割り切って考えると、エネルギーは $(n + 1/2)\hbar\omega$ 、 $n=0, 1, 2, \dots$ と記述でき、ここで $(1/2)\hbar\omega$ はゼロ点（基底）エネルギーである。この箱の中に、光子がエネルギー $n\hbar\omega$ で分布していると考える。光子が物質と相互作用することで、光子の数 n は ± 1 （+は放出、-は吸収）変化させる。

箱の中の波は、平面定在波、球面波、平面進行波 $\exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x})$ のどれを使っても表現できる。すなわち、すべての電荷間に瞬時にはたらくクーロン相互作用 e^2/r_{ij} と横波だけでこと足りる。このため、クーロン力を、直ちに、シュレーディンガー方程式のポテンシャル項に代入すればよい。他の表現法としては、ハミルトニアン形式でのマクスウェル方程式、場の演算子を使った方法がある。

フェルミ²の手法では、無限大の自己エネルギー項 e^2/r_{ij} を導く。座標系を適切に選べば、この項を除くことはできるが、その代わりに横波が無限に寄与することになる（解釈することがより曖昧になってしまう）。このアノマリー（量子異常）は、現代の量子電磁気学の中心的課題の一つとなっている。

第 2 回講義

量子電磁力学の規則

現時点では正当性は証明されていないが、「量子電磁力学の規則」は次のとおりである。

規則 1：原子内のある定常状態から別の定常状態に遷移する過程において、光子を吸収する（放出する）確率振幅は、その光子を表す古典的電磁波と同じポテンシャルの下で同じ遷移振幅とはまったく同じである。ただし、次の (a) から (c) を条件とする。(a) 古典的電磁波を規格化して、単位体積 (1cm^3) あたりに光子を見いだす確率の $\hbar\omega$ 倍のエネルギー密度を表すこと、(b) 実際の古典的電磁波を 2 つの複素波 $e^{-i\omega t}$ と $e^{+i\omega t}$ に分け、 $e^{-i\omega t}$ だけを残すこと、(c) ポテンシャルは摂動計算において 1 回だけ作用すること、つまり電磁場の強さの 1 次の項だけを残すこととする。

規則 1 から、「吸収」を「放出」と変えることは、 $e^{-i\omega t}$ を $e^{+i\omega t}$ に置き換えるだけでよい。

規則 2：ある偏光の 1cm^3 あたりに利用可能な状態の数は、

$$d^3\mathbf{K}/(2\pi)^3$$

とする。これは、古典論での単位体積あたりの基準振動の数と同じであることに注意すること。

規則 3：光子はボース - アインシュタイン統計に従う。つまり、同一の光子が集まった状態は対称でなければならない（光子の交換、振幅の追加）。また、 n 個の同一の光子の状態の統計的重みは古典論の $n!$ ではなく 1 である。

したがって、一般に、光子は、適切に規格化されていれば、古典的なマクスウェル方程式の解で表すことができる。

多くの表現が可能であるが、電磁場は平面波で表すことが最も簡単である。平面波は常にベクトルポテンシャルのみで表すことができる（スカラーポテンシャルは、適切なゲージ変換を行うことにより 0 にできる）。実際の古典波を表すベクトルポテンシャルは、次で表すことができる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{a}e \cos(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})$$

A の規格化は、光子を見いだす単位体積あたりの確率に対応する必要がある。
したがって、平均エネルギー密度は $\hbar\omega$ でなければならない。

これから

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{\omega a}{c} \mathbf{e} \sin(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})$$

また、平面波では、

$$|\mathbf{B}| = |\mathbf{E}|$$

となる。平均エネルギー密度が等しいことより、

$$\frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega^2 a^2}{c^2} \overline{\sin^2(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})} = \frac{1}{8\pi} \frac{\omega^2 a^2}{c^2}$$

となる (ただし、 \bar{x} は x の平均を示す)。この値が $\hbar\omega$ に等しいことから、

$$a = \sqrt{\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega}}$$

となり、すなわち、

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sqrt{\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega}} \mathbf{e} \cos(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) \\ &= \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{2\omega}} \mathbf{e} \{ \exp\{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\} + \exp\{+i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\} \} \end{aligned}$$

したがって、原子が光子を吸収する振幅を次のようにする。

$$\sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{2\omega}} \exp\{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\} \quad (2-1)$$

放出の場合では、ベクトルポテンシャルは正の指数以外は同じである。

例： エネルギー E_i の励起状態 Ψ_i にある原子が、エネルギー E_f の状態 Ψ_f に遷移したとする。単位時間あたりの遷移確率は、放出光子を示すベクトルポテンシャル $a\mathbf{e}\exp\{+i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\}$ の影響により遷移確率と同じである。量子力学の規則であるフェルミの黄金律³を適用すると、

$$\frac{\text{遷移確率}}{\text{秒}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int_f(\text{ポテンシャル})_i \right|^2 \times (\text{状態密度})$$

$$(\text{状態密度}) = \frac{K^2 dK d\Omega}{(2\pi c)^3 d(\omega\hbar)} = \frac{\omega^2 d\Omega}{(2\pi c)^3 \hbar}$$

が得られる。

行列要素 $U_{fi} = \langle f | \text{ポテンシャル} | i \rangle$ は、摂動論を使って計算する。これに関しては、次の講義で詳しく述べる。ポテンシャルの選択によっては、物理的に同じ結果が得られることがあることを注意しておく（光子では、常に $\phi=0$ を選択していることによる）。

第3回講義

次のポテンシャル、

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{a} \exp\{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\} \\ \phi &= 0 \end{aligned}$$

における光子の平面波の表現は、「ゲージ」の選択が本質的である。パウリ方程式が量子力学的なゲージ変換に不変性であるため、ゲージの選択は自由である。

量子力学的変換は、古典論の変換を単純に拡張したもので、

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

と

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

それに任意のスカラー χ を導入し、次の変換をしても

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - c\nabla\chi$$

$$\phi' = \phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

\mathbf{E} と \mathbf{B} の不変性は保たれる。

量子力学においては、波動関数 ψ に次の変換

$$\psi' = e^{-i\chi} \psi$$

を行っても、次に示すように、パウリ方程式⁴⁾の不変性は保たれる。

パウリ方程式：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \psi + e\phi\psi$$

変換：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \psi' &= \frac{\partial}{\partial x} e^{-i\chi} \psi = e^{-i\chi} \frac{\partial \psi}{\partial x} - i \frac{\partial \chi}{\partial x} \psi e^{-i\chi} \\ \mathbf{p}(e^{-i\chi} \psi) &= e^{-i\chi} (\mathbf{p} - \hbar \nabla \chi) \psi \end{aligned}$$

それと

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) e^{-i\chi} \psi = e^{-i\chi} \left(\mathbf{p} - \hbar \nabla \chi - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi$$

となる。

項 $\frac{\partial \chi}{\partial t} \psi e^{-i\chi}$ における時間の偏微分は、 $\phi e^{-i\chi} \psi$ に含まれる。したがって、これらを代入すると、

$$\begin{aligned} \psi' &= e^{-i\chi} \psi \\ \mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \frac{\hbar c}{e} \nabla \chi \\ \phi' &= \phi + \frac{\hbar}{e} \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned}$$

となり、パウリ方程式の不変性が保たれていることが示された。

状態 i から状態 f に遷移を示す摂動ポテンシャルとしてパウリのハミルトニアンで、光子に対応するベクトルポテンシャル \mathbf{A} を定める。時間に依存する摂動計算により行列要素 U_{fi} は次のようになる。

$$\begin{aligned} \Delta H &= e^{i\omega t} U(x, y, z) \\ U_{fi} &= \int \psi_f^* \Delta H \psi_i \, dvol \\ &= \int \phi_f^*(x) \exp \left\{ i \left(\frac{E_f}{\hbar} t \right) \right\} e^{i\omega t} U(x) \exp \left\{ -i \left(\frac{E_f}{\hbar} t \right) \right\} \phi_i(x) \, dvol \end{aligned}$$

この式は、初期状態のエネルギーが $E_i - \hbar\omega$ と終状態のエネルギー E_f の間に、時間に依存しない摂動 $U(x, y, z)$ が作用したと同じ結果を得ることになる。よく知られている最も重要な寄与は $E_f = E_i - \hbar\omega$ となる状態で起こる⁵。

この結果から、単位時間あたりの遷移確率は、

$$P_{fi}d\Omega = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \frac{\omega^2 d\Omega}{(2\pi c)^3 \hbar}$$

U_{fi} を定めるには、次のように記述する。

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A}) + eV \\ &= \frac{1}{2m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} + eV - \frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \end{aligned}$$

ポテンシャルは一度しか作用しないとする規則、つまり（摂動）1次項のみで計算となるので $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$ の項は計算する必要はない。 $\mathbf{A} = a\mathbf{e}\exp\{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\}$ と次の2つの演算子の関係を用いて、

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} &= i\mathbf{K} \times a\mathbf{e}e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} e^{i\omega t} \\ \mathbf{p}e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} &= e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{K}) \end{aligned}$$

あるいは、

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} = e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e} + \hbar\mathbf{K} \cdot \mathbf{e})$$

となる。ここで、 $\mathbf{K} \cdot \mathbf{e} = 0$ （ゲージの選択とマクスウェル方程式から導かれる）の場合、

$$U_{fi} = a \int \varphi_f^* \left\{ -\frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} + e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}) + \frac{ie\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{K} \times \mathbf{e})e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} \right\} \varphi_i dvol$$

となる。この結果は正確である。これは「双極子」近似を使って簡略化することができる。この近似式を導出するため、電流や原子内の電子の速度程度の大きさをもつ項($e/2mc$) $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}})$ を考える。指数を次のように展開する。

$$e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} = 1 + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2}(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x})^2 + \dots$$

$\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}$ のオーダーは a_0/λ と同程度である。 a_0 は原子半径、 λ は波長である。 $a_0/\lambda \ll 1$ であるなら、 a_0/λ の最初の項のみとして、それ以外の高次の項はすべて無視できる。双極子近似では、 U_{fi} の最後の項を考慮する。この項は、 $(\hbar\mathbf{K}/mc) = (\hbar\mathbf{K}c/mc^2) \approx (mv^2/2mc^2)$ で評価すれば簡単である。このように、いくつかの項を無視しても、まだ大きく見積もっている。さらに正確に表すと、

$$\frac{ie\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{K} \times \mathbf{e}) e^{+i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} \approx \frac{v}{c} \times [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{K} \times \mathbf{e}) \text{の行列要素}]$$

となる。

ここでの行列要素は、

$$\int \varphi_f^* \frac{ie\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{K} \times \mathbf{e}) \varphi_i dvol$$

のことである。

ここで、次のように分けて見積るとよい近似となる。

$$\varphi_f^* = \varphi_f^*(x) U_f^* (\text{スピンの}), \quad \varphi_i = \varphi_i(x) U_i (\text{スピン})$$

これらの状態が直交しているため積分は、この近似のもとで正確に

$$\int \varphi_f^*(x) \varphi_i(x) U_f^* (\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{K} \times \mathbf{e})) U_i dvol = 0$$

となる。ここでは、双極子近似を使うため、

$$U_{fi} = -a \frac{e \mathbf{p}_{fi} \cdot \mathbf{e}}{m c}$$

である。ここで、

$$\mathbf{p}_{fi} \cdot \mathbf{e} = \int \varphi_f^* (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}) \varphi_i dvol = \mathbf{e} \cdot \int \varphi_f^* \mathbf{p} \varphi_i dvol$$

となり、これを使うことにより、

$$P_{fi} dr = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc} a \right)^2 (\mathbf{p}_{fi} \cdot \mathbf{e})^2 d\Omega \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar}$$

となる。 $\frac{\mathbf{p}_{fi}}{m} = i\omega_{fi} \mathbf{x}_{fi}$ を用いて、簡単な代数計算により、

$$P_{fi} d\Omega = a^2 \left[\frac{e^2 \omega^4}{(2\pi \hbar)^2 c^5} \right] (\mathbf{e} \cdot \mathbf{x}_{fi})^2 d\Omega$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{x}_{fi} = \int \varphi_f^* \mathbf{x} \varphi_i dvol$ である。これより、単位時間あたりの遷移確率は、

$$\begin{aligned}
\frac{\text{遷移確率}}{\text{秒}} &= \int a^2 \frac{e^2 \omega^4}{(2\pi)^2} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{x}_{fi})^2 d\Omega \\
&= a^2 \frac{e^2 \omega^4}{2\pi \hbar^2 c^5} \int_0^\pi |\mathbf{x}_{fi}|^2 \sin^3 \theta d\theta \\
&= 4a^2 e^2 \omega^4 \frac{|\mathbf{x}_{fi}|^2}{6\pi \hbar^2 c^5}
\end{aligned}$$

となる。項 $\mathbf{e} \cdot \mathbf{x}_{fi}$ は、大きさが $|\mathbf{e} \cdot \mathbf{x}_{fi}| = |\mathbf{x}_{fi}| \sin \theta$ で、向き（ベクトルの配置）を図 3-1 に示した。

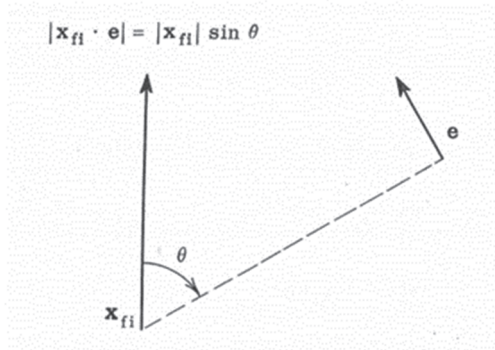


図 3-1

また、 $a^2 = \frac{4\pi \hbar c^2}{2\omega}$ を代入する（ a は (2-1) 式の係数である）と、

$$\frac{\text{遷移確率}}{\text{秒}} = \frac{4 e^2 \omega^3}{3 \hbar c^2} |\mathbf{x}_{fi}|^2$$

が得られる。

第 4 回講義

光の吸収

時間 T で状態 k から状態 l になるための振幅は、摂動論を用いると

$$a_{lk} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_l t\right) U_{lk}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right) dt$$

が得られ、 $U_{lk}(t)$ の時間依存性は次のように表すことができる。

$$U_{lk}(t) = u_{lk}e^{-i\omega t}$$

(第2回講義の規則に従うと、指数の符号は負、ポテンシャルに線形な項のみが含まれることになる。) この時間依存性を使って、積分を行うと、

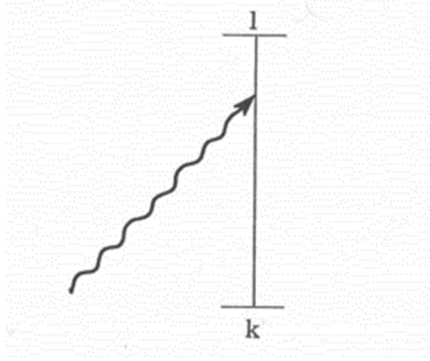


図 4-1

$$a_{lk} = -\frac{\exp\left\{\frac{iT}{\hbar}(E_l - \hbar\omega - E_k)\right\} - 1}{E_l - \hbar\omega - E_k} u_{lk}$$

が得られる。これより、遷移確率は、

$$|a_{lk}|^2 = \frac{4\sin^2\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)}{\Delta^2} |u_{lk}|^2, \quad \Delta = E_l - E_k - \hbar\omega$$

となる。これは、 (θ, ϕ) 方向に進む振動数 ω の光子が吸収される確率である。光子の向きの依存性は、行列要素 u_{lk} に含まれている。例えば、双極子近似の向きの依存性に関しては、式(4-1)を参照していただきたい。

入射する光子に様々な振動数と向きが含まれている場合、つまり、

$$P(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega = \left\{ \text{振動数 } \omega \sim \omega + d\omega, \text{ 立体角 } d\Omega \text{ の光子が存在する確率} \right\}$$

とし、 (θ, ϕ) 方向に進む任意の光子の吸収確率を求めたい場合は、振動数で積分する必要がある。 T が大きいとき、この吸収確率は、

$$\int_0^\infty \frac{4\sin^2(\Delta T/2\hbar)}{\Delta^2} |u_{lk}|^2 P(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega$$

となり、因数 $\sin^2(\Delta T/2\hbar)/\Delta^2$ は $E_l - E_k$ の近傍にある $\hbar\omega$ の値でほぼ代用でき、 $P(\omega, \theta, \phi)$ は、積分に寄与する ω の小さな範囲では、実質的に一定となるため積分に寄与しない。 u_{lk} についても同様に扱うと、

$$\text{遷移確率} = \frac{2\pi}{\hbar} |u_{lk}|^2 P(\omega_{lk}, \theta, \phi) d\Omega \quad (4-1)$$

となる。ここで $\hbar\omega_{lk} = E_l - E_k$ である。これは入射強度（単位時間に単位面積を貫くエネルギー）の観点から、

$$\text{入射強度} = i(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega = \hbar\omega c P(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega$$

と記述することができる。すなわち、

$$\text{遷移確率} = \frac{2\pi}{\hbar} |u_{lk}|^2 \frac{1}{\hbar\omega_{lk}c} i(\omega_{lk}, \theta, \phi) d\Omega \quad (4-2)$$

となる。双極子近似法を用いると、

$$u_{lk} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{lk}}} \frac{e}{m} (\mathbf{p}_{lk} \cdot \mathbf{e}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{lk}}} e\omega_{lk} (\mathbf{x}_{lk} \cdot \mathbf{e})$$

となり、単位時間当たりの全吸収確率、

$$\frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2 c} (\mathbf{x}_{lk} \cdot \mathbf{e})^2 i(\omega_{lk}, \theta, \phi) d\Omega \quad (4-3)$$

が得られる。

状態 l から状態 k への遷移を伴う自然放出の確率

$$\left\{ \text{単位時間あたりの自然放出の確率} \right\} = \frac{2\pi}{\hbar^2 (2\pi c)^3} |u_{lk}|^2 \omega_{lk}^2 d\Omega$$

また状態 k から状態 l への遷移を伴う光子の吸収の間には式 (4-1) より $|u_{lk}| = |u_{kl}|$ という逆の関係があることは明らかである。この関係は、特定の光子の状態が占有される確率 $n(\omega_{lk}, \theta, \phi)$ の概念から簡単に説明することができる。振

動数の範囲 $d\omega$ と立体角 $d\Omega$ 内に $\frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi c)^3}$ 個の光子が存在するため、この範囲

内に何らかの光子が存在する確率は、

$$P(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega = \frac{\omega^2}{(2\omega c)^3} n(\omega, \theta, \phi) d\omega d\Omega$$

となる。吸収確率を $n(\omega, \theta, \phi)$ で表す。

$$\text{単位時間あたりの遷移確率} = \frac{2\pi}{\hbar} |u_{ik}|^2 n(\omega, \theta, \phi) \frac{\omega_{ik}^2}{(2\omega c)^3} d\Omega \quad (4-4)$$

この式は、次のように解釈できる。 $n(\omega, \theta, \phi)$ は光子の状態が占有される確率なので、右辺の残りの項は、その状態の光子が吸収される単位時間あたりの確率でなければならない。式(4-4)を自然放出の速度と比較すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ある状態から光子が吸収される単位時間あたりの確率 (状態にある光子1個あたり)} \\ = \left\{ \text{光子がその状態に自然放出される単位時間あたりの確率} \right\} \end{array} \right\}$$

となる。以下では、状態ごとの平均光子数を $n(\omega, \theta, \phi)$ とすると、1つの状態に複数の光子が存在する場合であっても、式(4-4)が正しいことを示している。

始めの状態が同じ光子状態の2つの光子で構成されている場合、これら2つを区別することはできないため、始状態の統計的な重みは $1/2!$ となる。このプロセスの統計的な重みを振幅の2乗で表すと、単位時間あたりの遷移確率は、1つの光子状態に1つの光子しかない場合の2倍になることがわかる。始めに1つの光子状態につき3つの光子のうち1つが吸収されるとすると、次の6つの過程が考えられる (図4-2)。

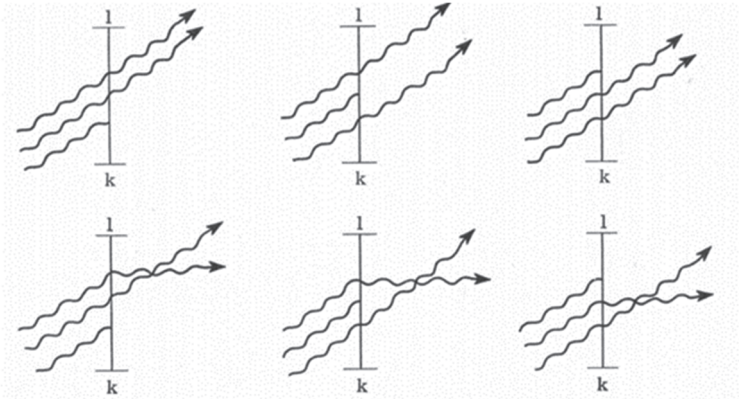


図 4-2

入射した3つの光子のうちの1つが吸収された場合でも、吸収されなかった光子が入れ替わる可能性がある。この過程では、始状態の統計的な重みは $1/3!$ 、終状態の統計的な重みは $1/2!$ 、となるので振幅は6となる。したがって、遷移確率は始状態ごとに1個の光子がある場合の $(1/3!) \times (1/2!) \times 6^2 = 3$ 倍となる。一般に、初めの光子状態ごとに n 個の光子がある場合の遷移確率は、光子状態ごとに1個の光子がある場合の n 倍となり、 $n(\omega, \theta, \phi)$ を状態ごとの光子の平均数とすると、式(4-4)が正しいことがわかる。

光子の放出をもたらす遷移には、光子の入射によって誘発される場合もある。このような過程(1つの入射光子を含む)は、図4-3のような図で示すことができる。

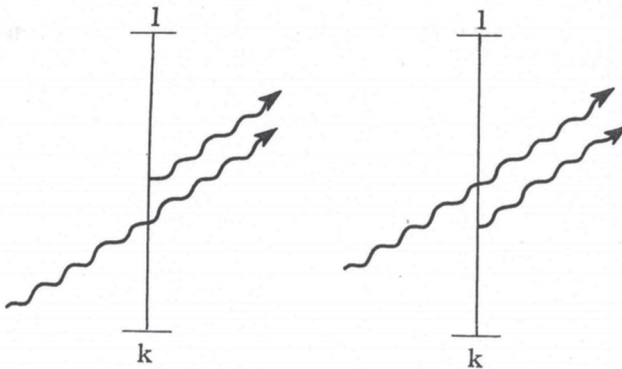


図 4-3

1個の光子を原子に入射すると2個の光子が放出される過程であるが、放出される2個の光子は互いに区別がつかない。終状態の統計的な重みは $1/2!$ であることとこの過程の振幅が2であることから、放出確率は自然放出の2倍となる。 n 個の光子を入射させると、始状態の統計的な重みは $1/n!$ 、終状態の統計的な重みは $1/(n+1)!$ 、この過程の振幅は自発的に放出される場合の振幅の $(n+1)!$ 倍となる。つまり、放射確率(単位時間あたり)は、自然放射確率の $n+1$ 倍となる。 n は遷移率の誘導部分を、1は遷移比の自然放出を意味している。

遷移確率の計算に使用したポテンシャルは、単位体積あたり 1 個の光子に規格化されており、遷移確率は電位の振幅の 2 乗に依存するので、光子状態あたり n 個の光子がある場合、吸収の正しい遷移確率は、電位を単位体積あたり n 個の光子 (振幅は \sqrt{n} 倍) に規格化することで得られることは明らかである。これが、半古典的な放射理論の妥当性の根拠である。半古典論においては、吸収は場のエネルギーに規格化されたポテンシャルによる摂動の結果として計算される。つまり、 n 個の光子があればエネルギーは $n\hbar\omega$ となる。しかし、発光の正しい遷移確率は $n+1$ に比例しているため、この方法では求めることができない。この間違いは、遷移確率のうち自然放出を除いたことによる。放射の半古典論では、発光確率の自然発生的な部分は一般的な議論によって得られ、それを含めると測定結果と合うプランク分布式が得られる。アインシュタインは、これらの関係式を、半古典論を用いて導出した。

第 5 回講義

双極子近似での選択則

双極子近似において、考慮すべき行列要素は、

$$\mathbf{x}_{if} = \int \Psi_f^* \mathbf{x} \Psi_i \text{dvol}$$

である。 \mathbf{x}_{if} の成分は x_{if} , y_{if} , z_{if} なので、

$$\text{遷移確率} \approx |x_{if}|^2 + |y_{if}|^2 + |z_{if}|^2$$

が満たされる。選択則は、この行列要素を 0 にする条件で決まる。例えば、水素の始状態と終状態が S 状態 (球対称) であれば、 $\mathbf{x}_{if} = \mathbf{0}$ となり、これらの状態間遷移は「禁止」される。しかしながら、P 状態から S 状態への遷移では $\mathbf{x}_{if} \neq \mathbf{0}$ なので、「許容」されることになる。

一般に、1 個の電子の遷移での選択則は、

$$\Delta L = \pm 1$$

である。このことは、座標 x , y , z が基本的にルジャンドル多項式 P_l で表されることからわかる。始状態の軌道角運動量を n とすると、波動関数は多項式 P_n を含むことになる⁶。 P_l と P_n には、

$$P_1 P_n = \frac{1}{2n+1} \{n P_{n-1} + (n+1) P_{n+1}\}$$

の関係がある。したがって、行列要素が 0 とならないことは終状態の角運動量が $n \pm 1$ となり、波動関数は P_{n+1} または P_{n-1} のいずれかを含むことになる。

複雑な原子（2 個以上の電子）の場合のハミルトニアンは、

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m} \left[\mathbf{P}_{\alpha} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}_{\alpha}) \right]^2 + (\text{クーロン項})$$

となる。遷移確率は $|P_{mn}|^2 = |\sum_{\alpha} (\mathbf{P}_{\alpha})_{mn}|^2$ に比例する。和は原子内の電子に対して行う。これまでに示したように $(\mathbf{P}_{\alpha})_{mn}$ は定数まで $(\mathbf{x}_{\alpha})_{mn}$ と同じであり、遷移確率は

$$|x_{mn}|^2 = \left| \sum_{\alpha} (x_{\alpha})_{mn} \right|^2$$

に比例している。

特に、2 個の電子の場合、行列の要素は、

$$\int \Psi_f^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) \Psi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1^3 d\mathbf{x}_2^3$$

で計算できる。ここで $(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)$ は、座標の回転における角運動量が 1 である「モノ」の波動関数と同様に振る舞う。初期状態において「モノ」が原子と相互作用しない場合、積 $(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) \Psi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ は、形式的に、全角運動量が J_{i+1} 、 J_i 、 $J_i - 1$ の 3 つの値を持つ（原子+モノ）の波動関数と見なすことができる。したがって、終状態の角運動量 J は $J_f \pm 1$ 、 J_f の 3 つの値のいずれかを持つことになり、行列要素は 0 ではない。したがって、一般的な選択則は $\Delta J = \pm 1, 0$ となる。

パリティ

パリティ（空間反転）は、波動関数の性質の一つで、すべての座標を反転させたときの振る舞いを意味する。つまり、

$$\Psi(-\mathbf{x}_1, -\mathbf{x}_2, \dots) = +\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)$$

であるならパリティは偶、

$$\Psi(-\mathbf{x}_1, -\mathbf{x}_2, \dots) = -\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)$$

ならパリティは奇である。

双極子近似に関する行列要素での積分変数を $\mathbf{x} = -\mathbf{x}'$ と変換した結果は、

$$\mathbf{x}_{if} = \int \Psi_f^*(\mathbf{x}) \mathbf{x} \Psi_i(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = \int \Psi_f^*(-\mathbf{x}')(-\mathbf{x}')\Psi_i(-\mathbf{x}')d^3\mathbf{x}'$$

となる。 Ψ_f のパリティが Ψ_i のパリティと同じであるなら、

$$\mathbf{x}_{if} = -\mathbf{x}_{if} = 0$$

となる。許容遷移においては、パリティが変化するという規則を採用する。電子が1個の原子では、 L がパリティを定めないため、 $\Delta L = 0$ は禁止される。多電子原子では、 L はパリティを定めない（個々の電子の角運動量は、ベクトル和でなく、代数的な和で決定される）ため、遷移 $\Delta L = 0$ は許容される。ただし、光子は常に角運動量が1であるため、 $0 \rightarrow 0$ の遷移は常に禁止される。

全波動関数は、偶または奇のいずれかのパリティを持つ。このことは、(外部磁場がない場合の) ハミルトニアンにパリティ演算子を作用しても不変であることからわかる。つまり、 $H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x})$ であれば、 $H\Psi(-\mathbf{x}) = E\Psi(-\mathbf{x})$ となる。それゆえに、状態が縮退していなければ、 $\Psi(-\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x})$ または $\Psi(-\mathbf{x}) = -\Psi(\mathbf{x})$ のいずれかが成り立つ。状態が縮退していれば、 $\Psi(-\mathbf{x}) \neq \Psi(\mathbf{x})$ の可能性もあるが、その場合、完全な解は、線形結合

$$\begin{array}{ll} \Psi(\mathbf{x}) + \Psi(-\mathbf{x}) & \text{偶パリティ} \\ \Psi(\mathbf{x}) - \Psi(-\mathbf{x}) & \text{奇パリティ} \end{array}$$

のいずれかになる。

禁制スペクトル線

禁制スペクトル線は、十分に希薄な気体に現れることがある。これは、禁制がどのような場合で絶対的なものではないことを示している。単に、その状態を保つ時間が、許容された場合よりもはるかに長くなることを意味するが、無限ではない。したがって、衝突頻度が十分に小さければ（第2種の衝突は、通常、禁制の場合に脱励起を起こす）、禁制遷移が起こるのに十分な時間があるかもしれない。ほとんど正確な行列要素

$$\int \Psi_f^*(\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} \Psi_i d^3\mathbf{x}$$

に対して、双極子近似では $e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}}$ を 1 に置き換える。これが 0 になると、前述のように遷移が禁止される。より高次項あるいは四重極近似で考えてみる。すなわち、 $e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}}$ を $1 - 1/\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}$ に置き換えると、行列要素

$$-i \int \Psi_f^*(\mathbf{e} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) \Psi_i d^3\mathbf{x}$$

が得られる。 z 方向に向かう光が x 方向に偏光しているなら、

$$-iK \int \Psi_f^*(p_x z) \Psi_i d^3\mathbf{x} = -iK |{}_f(p_x z)_i|^2$$

と計算され、遷移確率は、

$$(K)^2 |{}_f(p_x z)_i|^2$$

に比例していることがわかる。これに対して双極子近似では、

$$|{}_f(p_x)_i|^2$$

に比例する。これにより、四極子近似における遷移確率は $(Ka)^2 = a^2/\lambda^2$ のオーダーであるので、双極子近似で得た値より小さいことがわかる。ここで、 a は原子半径のオーダーで、 λ は放出される電磁波の波長である。

問題： $H(xz) - (xz)H = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{m} (p_x z + x p_z)$ と $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{1}{m} (p_x z + x p_z) \right]_{mn} = (xz)_{mn} (E_m - E_n)$

を示しなさい。ヒント： $p_x z$ は、

$$p_x z = \frac{1}{2}(p_x z + x p_z) + \frac{1}{2}(p_x z - x p_z)$$

として計算するとよい。

前に考えた問いから、右辺第 1 項は xz と定数を含めて同じであることがわかる。 xz は角運動量 2・偶パリティの波動関数と同様に振る舞う。第 2 項は、角運動量演算子 L_y そのもので角運動量 1 の波動関数の同様に振る舞い、偶パリティとなる。それゆえ、第 1 項に対応する選択規則は、パリティ不変である $\Delta J = \pm 2, \pm 1, 0$ となることがわかる。このような放射を電気四重極という。 $p_x z$

の第 2 項の選択則は $\Delta J = \pm 1, 0$ で、パリティは不変である。これに対応する放射を磁気双極子という。なお、 $\Delta J = \pm 2$ でなければ、角運動量やパリティの変化をみても、2 つのタイプの放射を区別することはできない。 $\Delta J = \pm 1, 0$ の場合は、放射の偏光によってのみ区別できる。このため、これら 2 つのタイプが同時に発生すると干渉を起こすこともある。

電気四重極放射の場合、 $1/2 \rightarrow 1/2$ と $0 \rightarrow 0$ の遷移は (ΔJ が ± 1 であっても)、角運動量を 2 つ変えることが不可能なため、禁止であることが暗黙の規則となっている。

さらに近似を高めると、同様の理由で、角運動量のベクトル変化、すなわち光子の角運動量と、様々な多極子の次数に伴うパリティ変化と全角運動量 ΔJ の変化の選択ルールを推論することができる (表 5-1)。

実際には、 ΔJ の暗黙の選択則すべて、多極次数が高くなるほど多くなるが、選択則を 2^l (2 は多極次数、 1 は角運動量の変化) と記述とでわかりやすく表現できる。

パリティの初めと終わりの値の積が $(-1)^{J_f - J_i}$ で、可能な限り低い多極子の次数が $J_f - J_i$ である、いわゆるパリティ優先の遷移では、表 5-1 の縦の破線で囲まれた多極子の種類の遷移確率はほぼ等しいことがわかった⁷。しかし、パリティの積が $(-1)^{J_f - J_i + 1}$ で、最も低い多極子次数が $|J_f - J_i| + 1$ のようなパリティ非有利な遷移では、このようにはならない場合がある。

表 5-1 遷移分類とその選択則

		電気双極子	磁気双極子	電気 4 重極	磁気 4 重極	電気 8 重極
光子	角運動量	1	1	2	2	3
	パリティ	奇	偶	偶	奇	奇
放出の 選択則	パリティ変化	Yes	No	No	Yes	Yes
	全変化	$\pm 1, 0$	$\pm 1, 0$	$\pm 2, \pm 1, 0$	$\pm 2, \pm 1, 0$	$\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$
	角運動量 ΔJ	No $0 \rightarrow 0$	No $0 \rightarrow 0$	No $0 \rightarrow 0$ $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ $0 \rightarrow 1$	No $0 \rightarrow 0$ $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ $0 \rightarrow 1$	No $0 \rightarrow 0$ $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ 他

第6回講義

放射平衡

ある系が平衡状態にある場合、エネルギーが $\hbar\omega$ だけ異なる2つの状態、例えば、 l 状態と k 状態にある単位体積あたりの原子数の比は、統計力学に従えば、

$$\frac{N_l}{N_k} = e^{-\frac{E_l - E_k}{kT}} = e^{-\hbar\omega/kT}$$

で与えられる。系が平衡状態にあることから、光子 $\hbar\omega$ の吸収によって単位時間あたりに状態 k から l に遷移する原子の数は、放出によって l から k に遷移する原子の数と等しくなければならない。振動数 ω の光子が単位体積あたり n 個存在するとすると、吸収の確率は n に比例し、放出の確率は $n+1$ に比例する。すなわち、

$$N_k n_\omega = N_l (n_\omega + 1)$$

あるいは、

$$\frac{n_\omega + 1}{n_\omega} = \frac{N_k}{N_l} = e^{\hbar\omega/kT}$$

$$n_\omega = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

となり、プランク分布が導出される。

光の散乱

ここでは、入射した光子が原子によって新たな方向（場合によってはエネルギー）に散乱される現象について議論する（図6-1参照）。これは、入射した光子の吸収と、原子による新たな光子の放出と考えられる。この現象に関係している2つの光子は、次のベクトルポテンシャルで表される。

$$\mathbf{A}_1 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_1}} \mathbf{e}_1 e^{i(\omega_1 t - \mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{x})}$$
$$\mathbf{A}_2 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_2}} \mathbf{e}_2 e^{i(\omega_2 t - \mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{x})}$$

この確率は、他の遷移確率と同様に、 B を用いて計算することができる。これにより決定される数は、初状態 k にある原子が、時間 T の間に、摂動 $A=A_1+A_2$ の作用によって状態 l に遷移する確率である。この確率は、次の A_{lk} を使うことで、どの遷移確率も同様に計算することができる。

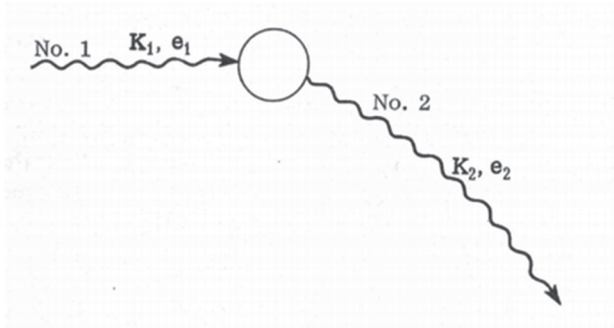


図 7-1

$$\begin{aligned}
 A_{lk} &= \delta_{kl} \exp[-i(E_l/\hbar)T] \\
 &\quad - (i/\hbar) \int_0^T \exp[-i(E_l/\hbar)(T-t_3)] U_{lk}(t_3) \exp[-i(E_l/\hbar)t_3] dt_3 \\
 &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^T \int_0^{t_4} \exp[-i(E_l/\hbar)(T-t_4)] U_{ln}(t_4) \\
 &\quad \times \exp[-i(E_n/\hbar)(t_4-t_3)] U_{nk}(t_3) \exp[-i(E_k/\hbar)t_3] dt_3 dt_4
 \end{aligned}$$

双極子近似を適用すると、

$$U = \Delta H = \frac{e}{mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{A})$$

となる。ただし、スピンを無視した。

A を定めるいくつかの積分は、2つのベクトルポテンシャルの各々1回のみ現れなければならない。したがって最初の積分では、 U の1項目の $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ は U_{lk} には現れない。積 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = (\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2) \cdot (\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2)$ は、結合項 $2\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2$ のみが寄与する。第2の積分では $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$ の寄与はなく、2つの和が寄与する。1項目は $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_2$ に基づく U_{ln} と $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_1$ に基づく U_{nk} が含まれる。2項目は、 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_1$ に基づく U_{ln}

と $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_2$ に基づく U_{nk} を持つ。これらの 2 つの項の結果、時間順序は模式的ではあるが図 6-2 に表される。

1 項目から生じる積分は、詳細に説明しないが、次のようになる。

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_1)_{nk} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_1}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)_{nk} e^{-i\omega_1 t}$$

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_1)_{ln} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_2}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_2)_{ln} e^{-i\omega_2 t}$$

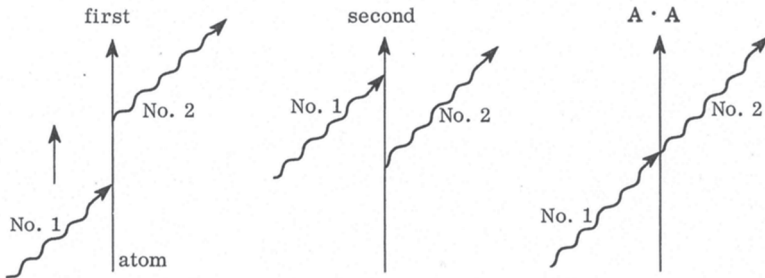


図 6-2

$$\sum_n \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_1 \omega_2}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_2)_{ln} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)_{nk}$$

$$\times \int_0^T \int_0^{t_4} \exp[-i(E_l/\hbar)(T - t_4) + i\omega_2 t_4] \times \exp[-i(E_n/\hbar)(t_4 - t_3) - i\omega_1 t_3]$$

$$\times \exp[-i(E_k/\hbar)t_3] dt_3 dt_4$$

この積分は、遷移確率に関して少し前に検討した積分と同じで、その和は、

$$\sum_n \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_1 \omega_2}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)_{ln} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_2)_{nk} e^{i\phi} [\sin(T \cdot \Delta/\hbar)] / (E_k - E_n + \hbar\omega_1) \cdot \Delta]$$

となる。ここで $\Delta = (E_l + \hbar\omega_2 - E_k - \hbar\omega_1)$ であり、位相 ϕ は n に依存しない。これらの結果から、エネルギー項 $E_l + \hbar\omega_2 \approx E_k + \hbar\omega_1$ のみが重要であることがわかっているため、分母が $(E_n - \hbar\omega_1 - E_k)(E_l - \hbar\omega_2 - E_n)$ 与えられる項は無視される。最終結果は、

$$\text{単位時間あたりの遷移確率} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \frac{\omega_2^2}{2\pi^3} d\Omega_2 = \sigma c \quad (6-1)$$

と表される。ここで M は、 ω_2 で積分し、 e_2 で平均して、 A_{lk} から決定される。そして断面積 σ は、

$$\sigma d\Omega_2 = \frac{e^4}{m^2 c^4} \frac{\omega_2}{\omega_1} d\Omega_2 \left| \frac{1}{m} \sum_n \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_2)_{ln} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)_{nk}}{E_k + \hbar\omega_1 - E_n} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)_{ln} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_2)_{nk}}{E_k - E_n - \hbar\omega_2} + \frac{1}{mc^2} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) \delta_{lk} \right|^2 \quad (6-2)$$

である。

総和の最初の項は前述の「第1項」から、2番目の項は「第2項」から得られた。絶対値内の最後の項は $A \cdot A$ に由来している。

$l \neq k$ であれば散乱は非干渉性（インコヒーレント）で、この結果を「ラマン効果」という。 $l = k$ であれば散乱はコヒーレントである。

さらに、すべての原子が基底状態で $l \neq k$ になっている場合、原子のエネルギーは増加する一方で、光の振動数 ω は減少する一方であることに注意すること。これにより「ストークス光」⁸が発生し、高振動数に「反ストークス光」が生じる。

仮に $\omega_1 = \omega_2$ （コヒーレント散乱）とすると、さらに $\hbar\omega_1$ は $E_k - E_n$ に大変近く、 E_n は原子の可能なエネルギー準位であるとする。そうすると、 n 以上の和の中の1つの項が非常に大きくなり、残りの項を支配する。この結果を「共鳴散乱」という。 σ を ω に対してプロットすると、このような ω の値では、断面積が急激に大きくなる（図6-3参照）。

得られた散乱式で気体の「屈折率」を求めることができる。これは、他の種類の散乱と同様に、順方向に散乱光を考慮することで得られる。

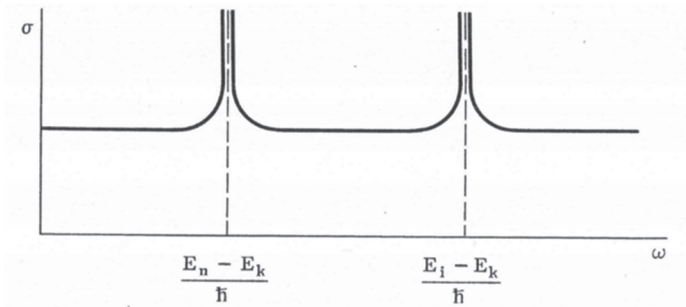


図 6-3

自己エネルギー

また量子電磁気学で考慮しなければならない現象として、原子が光子を放出し、同じ光子を再吸収する可能性を探ることがある。これは、対角要素 A_{kk} に影響を与える。その効果は、エネルギー準位のシフトに相当する。偏光の向きを e とすると、

$$\Delta E = \sum_n \int \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e})_{kn} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e})_{nk}}{E_k - E_n - \hbar\omega} \frac{d^3\mathbf{K}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi}{\omega}$$

が求められる。この積分は発散する。より厳密な相対論的計算でも、発散する積分が出てくる。これは、これまでの電磁気的な効果の定式化が、実際には完全に満足できる理論ではないことを意味する。無限の自己エネルギーという難点を回避するために必要な修正については後述する。その結果、エネルギー準位の位置に非常に小さなシフト ΔE が生じる。このシフトは、ラムとレザフォードによって測定された⁹。

特殊相対論要約

第 7 回講義

相対性原理は、関係する物体が互いに速度 v で一様に運動しているならば、どの物体から見ても、物理現象はまったく同一に観測できることを述べた原理である。つまり、速度 v で一様に運動している宇宙船で閉じた実験を行っても、

この速度（たとえば、宇宙の重心に対する速度）を決定することはできない。この原理は実験により検証されている。ニュートンの運動の法則はこの原理を満たしている。何故なら、ニュートンの運動の法則は2階微分で表されているため、ガリレオ変換

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t,$$

をしてもまったく同じ形式で記述されることによる。しかし、マクスウェル方程式に対してこの変換を行うと変化してしまう。初期の研究者は、この特徴を使って地球の絶対速度を測定しようと試みた（マイケルソン・モーリー実験）。しかし、この特徴による効果を得ることができなかった。アインシュタインは「マクスウェル方程式はどの座標系でもまったく同じ形式で表されること、それに光速はどの座標系から測定しても同じ値となる」という仮説を立てた。マクスウェル方程式を不変のものとする座標変換がローレンツ変換である。

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = x \cosh u - ct \sinh u$$

$$y' = y,$$

$$z' = z,$$

$$t' = \frac{t - \frac{xv}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = -\frac{x}{c} \sinh u + t \cosh u$$

ここで $u = v/c$ である。これ以後、表示を簡単にするため、光速 c を 1 とした単位系を使う。類似性を示すため、座標原点まわりに θ 回転させる変換式を記しておく。

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta$$

$$y' = -x \sin \theta + y \cos \theta$$

連続した変換： v_1 と v_2 の和、あるいは u_1 と u_2 の和は、

$$v_3 = v_1 + v_2 \quad \text{あるいは} \quad \tanh u_3 = \tanh(u_1 + u_2)$$

であるなら、結果的に同じとなる。アインシュタインは、ニュートンの運動の法則をローレンツ変換不変となる理論（特殊相対性理論）を構築した。

ローレンツ変換の興味深い結果として、動いている系の時計の遅れがある。この効果を時間の伸縮という。ある座標系から別の座標系に変換するには、テンソル算を使うとよい。このため、 x, y, z, ct の4つの座標成分をセットとして統一的に変換する4元ベクトルを定義する。4つの成分のうちどの成分かを区別するために添字 μ を次のようにして用いる。

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z, \quad x_4 = t$$

次の量は4元ベクトルである。

$$-\frac{\partial}{\partial x}, \quad -\frac{\partial}{\partial y}, \quad -\frac{\partial}{\partial z}, \quad +\frac{\partial}{\partial t} : (\nabla_\mu) \text{ 4次元勾配}$$

$$j_x, j_y, j_z, \rho : (j_\mu) \text{ 電流(と電荷)密度}$$

$$A_x, A_y, A_z, \varphi : (A_\mu) \text{ ベクトル(とスカラー)ポテンシャル}$$

$$p_x, p_y, p_z, E : (p_\mu) \text{ 運動量と全エネルギー}^{-10}$$

不変量とは、ローレンツ変換をしても変化しない量のことである。2つの4元ベクトル a_μ, b_μ が不変量であるなら、その積

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{\mu} a_{\mu} b_{\mu} \equiv a_4 b_4 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3$$

も不変量となる。和記号(Σ)を書かなくてもよいように、次のような和の約束を用いる。同じ添字が2回出てきたら、第1成分、第2成分、第3成分の前にマイナスをつけて、その上で和をとる。連続式のローレンツ不変性は、4ベクトル ∇_μ と j_μ の「積」として記すことで、次のように簡単に示すことができる。

$$\nabla_{\mu} j_{\mu} = \nabla_4 j_4 - \nabla_1 j_1 - \nabla_2 j_2 - \nabla_3 j_3 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

ある系で電荷が保存されていれば、全系で保存されるということは、この「積」である4元発散 $\nabla \cdot \mathbf{j}$ が不変量であることの結果であり、もう一つの不変量は、

$$p_{\mu} p_{\mu} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = E^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = E^2 - p^2 = m^2$$

である。ここで、 E は全エネルギー、 m は静止質量、 mc^2 は静止エネルギー、 \mathbf{p} は運動量である。すなわち、

$$E^2 = p^2 + m^2$$

のことである。また、自由粒子の波動関数 $\exp[(-i/\hbar)(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})]$ の位相、

$$Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = Et - p_x x - p_y y - p_z z = p_\mu x_\mu$$

から不変量であることがわかる。 $p_\mu p_\mu$ が不変量であることを利用して、実験室系のエネルギーを重心系のエネルギー (図 6-4) に変換するには、次のような方法がある (簡単のため、同一の粒子で考える)。

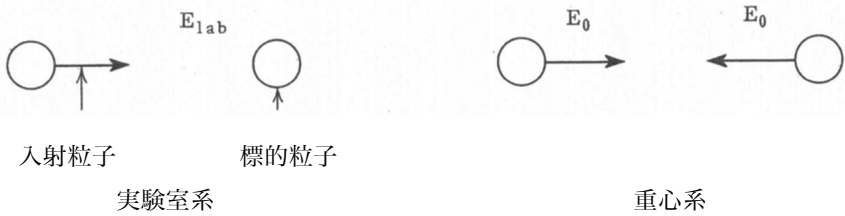


図 6-4

$$p_\mu p_\mu = E_{lab} m = E_0^2 + p_0^2$$

しかし、

$$p_0^2 = E_0^2 - m^2, \quad E_{lab} m = 2E_0^2 - m^2$$

それと

$$E_0 = \sqrt{\frac{1}{2} m (E_{lab} + m)}$$

である。電磁学の式 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ と $\mathbf{E} = -(1/c)(\partial \mathbf{A} / \partial t) - \nabla \phi$ を 4 元ベクトルで表すと、

$$B_x = \partial A_z / \partial y - \partial A_y / \partial z = -\nabla_y A_z + \nabla_z A_y$$

$$B_y = \partial A_x / \partial z - \partial A_z / \partial x = -\nabla_z A_x + \nabla_x A_z$$

$$B_z = \partial A_y / \partial x - \partial A_x / \partial y = -\nabla_x A_y + \nabla_y A_x$$

$$E_x = -\partial A_x / \partial t - \partial \phi / \partial x = -\nabla_t A_x + \nabla_x A_t$$

$$E_y = -\partial A_y / \partial t - \partial \phi / \partial y = -\nabla_t A_y + \nabla_y A_t$$

$$E_z = -\partial A_z / \partial t - \partial \phi / \partial z = -\nabla_t A_z + \nabla_z A_t$$

となる。ここでは、 ϕ が 4 元ベクトルポテンシャル A_μ の第 4 成分であることを利用した。これらから、 B_x 、 B_y 、 B_z 、 E_x 、 E_y 、 E_z は 2 階テンソルの成分であることがわかり、次のように整理できる。

$$F_{\mu\nu} = \nabla_\mu A_\nu - \nabla_\nu A_\mu \quad (7-1)$$

このテンソルは、反対称 ($F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$) で対角項 ($\mu = \nu$) が 0 である。したがって、独立成分は 16 個ではなく、6 個 (\mathbf{E} の 3 個の成分と \mathbf{B} の 3 個の成分) である。

$$F_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 0 & -B_z & B_y & E_x \\ B_z & 0 & -B_x & E_y \\ -B_y & B_x & 0 & E_z \\ -E_x & -E_y & -E_z & 0 \end{bmatrix}$$

マクスウェル方程式 $\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi\mathbf{J} + (\partial\mathbf{E}/\partial t)$ と $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$ は、

$$\nabla_\mu F_{\mu\nu} = 4\pi j_\nu \quad (7-2)$$

とまとめて記述できる。ここで $\nu = 1, 2, 3, 4$ 、 $j_1 = j_x, j_2 = j_y, j_3 = j_z, j_4 = \rho$ で μ は総和記号 (Σ) の添え字である。 $\nu = 1, 2, 3$ は回転 ($\nabla \times$) 式の 3 成分、 $\nu = 4$ は発散 ($\nabla \cdot$) の式から得た。

式 (7-1) を式 (7-2) に代入すると、ポテンシャル A_μ が満たす方程式

$$\nabla_\mu \nabla_\mu A_\nu - \nabla_\mu \nabla_\nu A_\mu = 4\pi j_\nu$$

が得られる。しかし、ポテンシャル A_ν は一意 (唯一) ではなく、次のポテンシャル

$$A'_\mu = A_\mu + \nabla_\mu \chi \quad (7-3)$$

(χ は任意のスカラー関数) でも上記の方程式を満たす。このようなポテンシャルの変化や変換は、(歴史的な理由から) ゲージ変換と言われている ($\square^2 \chi = 0$ を満たす χ が任意であることから、 A_μ は一意的に定まらない¹¹⁾)。ここでは、ポテンシャルが、ローレンツ条件と言われている

$$\nabla_\mu A_\mu = 0 \quad (7-4)$$

を満たすように変換されていると仮定することで、ポテンシャルをより明確にする。これは都合のよいことに、 $\nabla \cdot \nabla \equiv \nabla_\mu \nabla_\mu$ を使って A_μ の方程式は、

$$(\nabla \cdot \nabla) A_\nu = 4\pi j_\nu \quad (7-5)$$

と簡略化できる。この式は、波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -4\pi \mathbf{j} \quad (7-5')$$

$$\nabla^2 \phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi \rho$$

と同じである。式 (7-5) を $\square^2 A_\mu = -4\pi j_\mu$ (\square^2 はダランベール演算子あるいはダランベルシアンという¹²。 $\square^2 = \nabla^2 - (\partial/\partial t)^2 = -\nabla \cdot \nabla$) と記すこともある。このゲージの選択は、古典電磁気学で通常使われる

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (7-4')$$

である。

第 8 回講義

真空中のマクスウェル方程式の解

真空中での波動方程式

$$\square^2 A_\mu = -4\pi j_\mu = 0$$

の平面波解は、

$$A_\mu = e_\mu e^{-ik \cdot x}$$

であり、 e_μ と k_μ を一定ベクトルであり、それに k_μ は

$$k_\mu k_\mu = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 0$$

の条件のもと得られる。このことは、 ∇_ν が $e^{-ik \cdot x}$ に作用すると ik_ν を掛ける効果があることからわかる (直行座標においては ∇_ν は e_μ に作用しない)。これにより、

$$-\square^2 A_\mu = \nabla_\nu (\nabla_\nu A_\mu) = \nabla_\nu (-ie_\mu k_\nu e^{-ik \cdot x}) = -e_\mu (k_\nu k_\nu) e^{-ik \cdot x}$$

となる。なお、これらの操作において $\nabla_\nu A_\mu$ は 2 階テンソルを形成し、 $\nabla_\nu (\nabla_\nu A_\mu)$ は 3 階テンソルを形成し、さらに添字 ν の縮約で 1 階テンソル (ベクトルのこと) となる。

k_μ は、

$$k_\mu = (\omega, K_x, K_y, K_z) = (\omega, \mathbf{K})$$

であり、伝播ベクトルの成分で、よく使われているの記述で表すと

$$\exp(-ik \cdot x) = \exp\{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{x})\}$$

なので、条件 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 0$ は

$$\omega^2 - \mathbf{K} \cdot \mathbf{K} = 0$$

を意味することになる。

問題：ローレンツ条件

$$\nabla_\mu A_\mu = 0$$

が、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e} = 0$ を意味していることを示しなさい。

3次元の場合、一般的に、偏光ベクトル \mathbf{e} を $\mathbf{K} \cdot \mathbf{e} = 0$ 、スカラーポテンシャルを $\phi = 0$ とする。しかし、これは一意的な条件ではない。相対論的不変とはなっていないし、1つの座標でのみで成り立つ条件である。この条件は、 $\mathbf{K} \cdot \mathbf{e} = 0$ が存在する系に何らかの一意性を付与するパラドックスで、相対論とは相容れない事態にある。しかしながら、この「パラドックス」は場 $F_{\mu\nu}$ は変えずに \mathbf{e} を変える。これは常にゲージ変換が可能であるということから解決できた。したがって、ある系で $\mathbf{K} \cdot \mathbf{e} = 0$ を選ぶことは、あるゲージを選択することにつながる。

式 (7-3) のゲージ変換は、

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\chi$$

$$\phi' = \phi + (\partial\chi/\partial t)$$

と書き換えられる。ここで χ はスカラー関数である。しかし $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ なので、

ローレンツ条件式 (7-3) は、

$$\nabla \cdot \mathbf{A}' = \nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla \cdot \chi$$

としても

$$\square^2 \chi = 0$$

としても成り立つ。この方程式は解 $\chi = i\alpha e^{-ik \cdot x}$ を持つため、これを代入すると、

$$A'_\mu = A_\mu + \nabla_\mu(\alpha e^{-ik \cdot x}) = (e_\mu + \alpha k_\mu) e^{-ik \cdot x}$$

となる。ここで、 α は任意定数である。それゆえ、

$$e'_\mu = e_\mu + \alpha k_\mu$$

が、ゲージ変換によって得られる新しい偏光ベクトルとなる。通常の記載をすると、

$$\mathbf{e}' = \mathbf{e} + \alpha \mathbf{K}$$

$$e'_4 = e_4 + \alpha \omega$$

となる。したがって、どのような座標系であっても、定数 α を選択することで、

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}' = \mathbf{K} \cdot \mathbf{e} + \alpha \mathbf{K} \cdot \mathbf{K} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{e} + \alpha \omega^2 / c^2$$

を消去することができる。

微分の順序は重要ではないので $\nabla_\mu \nabla_\nu \chi \equiv \nabla_\nu \nabla_\mu \chi$ とすれば、ゲージ変換によって場

$$F'_{\mu\nu} = \nabla_\mu A'_\nu - \nabla_\nu A'_\mu = \nabla_\mu A_\nu + \nabla_\mu \nabla_\nu \chi - \nabla_\nu A_\mu - \nabla_\nu \nabla_\mu \chi = F_{\mu\nu}$$

が変化しないことがわかる。

相対論的力学

通常 velocities の成分は、4 ベクトルの成分になるようには機能を有していない。しかし別の量、

$$dz_\mu / ds = dt / ds, dx / ds, dy / ds, dz / ds$$

ここで、 $dz_\mu = dt, dx, dy, dz$ は粒子の経路の要素、 ds は固有時間を示し、

$$ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

である。速度の 4 元ベクトル表示を 4 元速度 u_μ という。 ds^2 を dt^2 で割ると固有時間と局所時間の関係、

$$(ds/dt)^2 = 1 - v^2$$

が得られる。通常 velocities の成分は次の関係がある。

$$dx/ds = (dx/dt)(dt/ds) = v_x / \sqrt{1 - v^2}$$

$$dy/ds = v_y / \sqrt{1 - v^2}$$

$$dz/ds = v_z / \sqrt{1 - v^2}$$

$$dt/ds = 1 / \sqrt{1 - v^2}$$

これらから、

$$u_\mu u_\mu = \frac{1}{1-v^2} - \frac{v_x^2}{1-v^2} - \frac{v_y^2}{1-v^2} - \frac{v_z^2}{1-v^2} = \frac{1-v^2}{1-v^2} = 1$$

と $u_\mu u_\mu = 1$ となる。また、4元運動量は、

$p_\mu = mu_\mu = m/\sqrt{1-v^2}$ 、 $mv_x/\sqrt{1-v^2}$ 、 $mv_y/\sqrt{1-v^2}$ 、 $mv_z/\sqrt{1-v^2}$ で定義される。

なお、 $p_4 = m/\sqrt{1-v^2}$ は全エネルギー E である。通常の表記での運動量 \mathbf{P} は、

$$\mathbf{P} = E\mathbf{v}$$

で与えられる¹³。ここで \mathbf{v} は通常速度である。

速度のように、 $d(\text{運動量})/dt$ で定義されている通常の力の成分を 4元ベクトルの成分として記述することはできない。しかし、4元運動量を使った次の物理量

$$f_\mu = \frac{dp_\mu}{ds}$$

を定めて、

$$f_\mu = \frac{d(mv_\mu/\sqrt{1-v^2})}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{F_\mu}{\sqrt{1-v^2}}, \quad \mu = 1, 2, 3$$

とすることにより、4元力を定義することはできる。ここで、 F_μ は通常の (3次元的な) 力である。この第4成分は、

$$f_4 = \frac{\text{力}}{\sqrt{1-v^2}} = \frac{\text{エネルギーの変化率}}{\sqrt{1-v^2}} = \frac{d(m/\sqrt{1-v^2})}{dt}$$

となる。このことは、 $m/\sqrt{1-v^2}$ が全エネルギーを意味し、通常の力の性質より、

$$\begin{aligned} \text{Power} &= \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = \left(\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2}} \right) \cdot \mathbf{v} \\ &= \frac{m}{2} \left(\frac{v^2}{(1-v^2)^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} \right) \frac{dv^2}{dt} \\ &= \frac{mv}{(1-v^2)^{3/2}} \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{m}{\sqrt{1-v^2}} \end{aligned}$$

となる。すなわち、ニュートンの運動の第 2 法則に対する相対論的修正は、次のようになる。

$$\frac{dp_\mu}{ds} = f_\mu = m \frac{dz_\mu}{ds^2} \quad (8-1)$$

通常ローレンツ力は、

$$\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (8-2)$$

であり、エネルギーの変化率は、

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}$$

と書ける。また、4 元力の定義から

$$\mathbf{f} = \frac{e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})}{\sqrt{1 - v^2}}$$

と表せ、第 4 成分は

$$f_4 = \frac{e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2}}$$

と書ける。

問題： 前述の \mathbf{f} と f_4 の式が

$$f_\nu = eu_\mu F_{\mu\nu}$$

と等価であることを示し、ニュートンの運動の方程式の相対論的修正が

$$m \frac{dz_\mu}{ds^2} = e \frac{dz_\nu}{ds} F_{\mu\nu} \quad (8-3)$$

となることを示しなさい。また、これが

$$\frac{d}{ds} \left[\left(\frac{dz_\mu}{ds} \right)^2 \right] = 0$$

を意味することも示しなさい。

通常考えれば荷電粒子の運動方程式は、

$$\frac{d(m\mathbf{v}/\sqrt{1 - v^2})}{dt} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (8-4)$$

と書ける。ラグランジュ形式を用いて運動方程式を導出する。ラグランジュの方程式は、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_\mu} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial x_\mu} \right) = 0$$

であり、このラグランジアンは、

$$L = -m\sqrt{1-v^2} - e\phi + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \quad (8-5)$$

である。また、 x に共役な運動量は $\partial L / \partial v$ あるいは、

$$\mathbf{P} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2}} + e\mathbf{A}$$

で与えられる。これに対応するハミルトニアンは、

$$H = e\phi + \sqrt{(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + m^2} \quad (8-6)$$

であり、 $(H - e\phi)^2 - (\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2$ を満たす。ハミルトニアンの考えを共変または4次元形式に適応することは困難である。しかしながら、作用

$$S = \int L dt$$

を極小値をとるという最小作用の原理は、

$$\begin{aligned} S &= \int L dt = m \int ds + e \int A_\mu \frac{dz_\mu}{ds} ds \\ &= \int \left\{ \sqrt{m \frac{dz}{d\alpha} \cdot \frac{dz}{d\alpha}} + e A_\mu \frac{dz_\mu}{d\alpha} \right\} d\alpha \end{aligned}$$

と表せる、素体論的な運動方程式が得られる。なお、定義により

$$\left(\frac{ds}{d\alpha} \right)^2 = \left(\frac{dz_\mu}{d\alpha} \right) \left(\frac{dz_\mu}{d\alpha} \right)$$

である。興味深いことに、もう一つの「作用」を

$$S' = \frac{m}{2} \int \left(\frac{dz_\mu}{d\alpha} \right)^2 d\alpha + e \int A_\mu(z_\mu) \frac{dz_\mu}{d\alpha} d\alpha$$

で定義しても、前述の S と同じ結果が導かれる。

問題: (1) 式 (8-5) のラグランジアンから運動方程式を導きなさい。式 (8-4) に対応するハミルトニアンが式 (8-6) であることを示しなさい。また、 \mathbf{P} を求めなさい。

(2) 前述の作用 S に対し、 $\delta S = 0$ (S の変分) が同じ方程式を導くことを示しなさい。

相対論的波動方程式

第 9 回講義

単位

これから、次のような規約を使う。質量、時間、それに長さの単位を次のように定義する¹⁴。

$$c = 1 \quad (c = 299,792,458 \text{ m/s})$$

$$\hbar = 1 \quad (\hbar = 1.05457187 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})$$

表 9-1 は、よく使われている単位との換算を参考として載せた。

次の数値も参考になる。

通常の単位系との対応を示す表が表 9-1 である。また、以下の数値が参考になる。

$$M_p = \text{陽子の質量} = 1836.3m = 938.2 \text{ MeV} \quad (m \text{ は電子の質量})$$

$$\text{原子質量 (u)} = 931.2 \text{ MeV}$$

$$M_H = \text{水素原子の質量} = 1.00815u$$

$$M_N = \text{中性子の質量} = 785 \text{ eV} + M_H$$

$$kT = 1 \text{ eV} \quad \text{ただし、} T = 11,606 \text{ K}$$

$$N_a = \text{アボガドロ定数} = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$N_a e = 96,520 \text{ C} \quad (\text{ファラデー定数})$$

クライン-ゴルドン方程式、パウリ方程式、ディラック方程式

相対論的古典力学に従えば、ハミルトニアンは、

$$H = \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + m^2} + e\phi \quad (9-1)$$

で与えられる。運動量 \mathbf{p} に量子力学の演算子 $-i\nabla$ を適応した場合、平方根で決定する演算を定義できない。このため、相対論的量子力学のハミルトニアンは、古典的な方程式である式 (9-1) から直接得ることはできない。しかし、次のように演算子を二乗して定義することができる。

$$(H - e\phi)^2 - (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 = m^2$$

そこで、 $H = i\partial/\partial t$ とし、

$$\left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right]^2 \Psi - \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right]^2 \Psi - \dots = m^2 \Psi \quad (9-2)$$

として、演算子の二乗が通常の演算子代数で評価を行うことにする。方程式 (9-2) は、相対論的方程式の可能性として、シュレーディンガー¹⁵によって最初に見いだされた。この方程式をクライン-ゴールドン方程式という¹⁶。相対論的な表記に従うと、

$$(i\nabla_\mu - eA_\mu)(i\nabla_\mu - eA_\mu)\Psi = m^2\Psi \quad (9-2')$$

となる。

表 9-1 表記と単位

本稿の表記	意味	通常の表記	値
m	電子の質量	m	
	エネルギー	mc^2	510.99keV
	運動量	mc	1704dyn · s
	振動数	mc^2/\hbar	
	波数	mc/\hbar	
$1/m$	コンプトン波長	\hbar/mc	$3.8615 \times 10^{-11}\text{cm}$
	時間	\hbar/mc^2	
e^2	微細構造定数	$e^2/\hbar c$	1/137.038
e^2/m	古典電磁半径	e^2/mc^2	$2.8178 \times 10^{-13}\text{cm}$
$1/me^2$	ボーア半径	\hbar^2/me^2	$0.5292 \times 10^{-8}\text{cm}$

この方程式は、「スピン」を考慮していないため、水素スペクトルの微細構造を記述することができない。そこで、スピンの0である π 中間子に適応を考える。その準備のため、水素原子の適応を示しておく。 $\mathbf{A}=0$ と $\phi = -Ze/r$ で、 $\Psi = \chi(r)\exp(-iEt)$ を式(9-2')に代入することにより、

$$\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \chi + \nabla^2 \chi = m^2 \chi$$

となる。

$E = m + W$ (ただし、 $W \ll m$) とし、 $V = -Ze^2/r$ として整理すると、

$$(W - V)\chi + \frac{1}{2m}\nabla^2 \chi = -\frac{1}{2m}(W - V)^2 \chi$$

となる。右辺の項は左辺第1項に比べ無視すると、通常のシュレーディンガー方程式が得られる。 $(W - V)^2/2m$ を摂動ポテンシャルとして計算し、水素原子のエネルギー準位の分裂による微細構造分裂を求め、実験値と比較することができる。

練習問題： クライン-ゴールドン方程式に関しては、

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) - e\phi\Psi\Psi^* = \text{確率密度}$$

$$\mathbf{j} = -\frac{1}{2}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - e\mathbf{A}\Psi\Psi^* = \text{確率密度流}$$

となる。これより、 (ρ, \mathbf{j}) が 4 元ベクトルであることと $\nabla_\mu j_\mu = 0$ が示される。

クライン-ゴールドン方程式は、発表当時、あまりに不合理な結果を導出したことで、この方程式は否定され、受け入れられなかった。この不合理な結果とは、負のエネルギー状態の可能性にあった。クライン-ゴールドン方程式がそのようなエネルギー状態を得てしまうことを確認するため、自由粒子での方程式で考えてみる。この方程式は、

$$\square^2 \Psi = m^2 \Psi$$

で記される。ここで、 \square^2 はダランベール演算子である。この方程式の解を 4 元ベクトル表示とすると、 $\Psi = A \exp(-ip_\mu x_\mu)$ となる。ここで、 $p_\mu p_\mu = m^2$ である。これにより、

$$p_\mu p_\mu = p_4 p_4 - p_x p_x - p_y p_y - p_z p_z = E^2 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$$

から、

$$E = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}$$

という結果が得られる。

E が負の値をとることは不可能であると考えられていたこともあって、ディラックは新しい相対論的波動方程式を考案した。このディラック方程式は、水素原子のエネルギー準位に対して正しい結果を得たこともあって、電子の記述する方程式として受け入れられた。しかし、ディラックの意図に反して、彼の方程式は負のエネルギー準位の存在も導き出した。このことを解釈することは、クライン-ゴールドン方程式も同様に解釈できるはずである。

練習問題: $\Psi = \exp(-iEt)\chi(x, y, z)$ が定数 \mathbf{A} と ϕ を持つクライン-ゴールドン方程式の解であるなら、 \mathbf{A} と ϕ を $-\mathbf{A}$ と $-\phi$ に置き換えた $\Psi = \exp(+iEt)\chi^*(x, y, z)$ も解となることを示しなさい。このことは、「負」のエネルギー解を解釈する手法となることを示している。このことは、電子と質量は同じであるが、電子と反対の電荷を持っている粒子の解を意味している。

ここではディラック方程式の発表当時の方法を踏襲するのではなく、別のアプローチで試みる。クライン-ゴールドン方程式は、シュレーディンガー方程式の 4 元ベクトル形式である。同様に、ディラック方程式は、パウリ方程式の 4 元ベクトル形式として展開できる。このような手順を踏むことによって、相対論的方程式には「スピン」の概念が内蔵されていることがわかる。スピンの概念はパウリによって初めて導入されたが、なぜ電子の磁気モーメントが $\hbar e/2mc$ であるのか、当初は明確に説明することができなかった。この値はディラック方程式から自然に導かれることにより、ディラック方程式だけが電子の磁気モーメントの正しい値を結果として導出できると考えられるようになった。し

かしながら、真実はそうではなく、パウリ方程式の研究が進むにつれ、同じ値が自然に、つまり最も単純化された値として導かれることがわかった。スピンはディラック方程式に内在しているが、クライン-ゴールドン方程式には内在していない。このため、クライン-ゴールドン方程式は機能しないと考えられており、スピンは相対論による必要条件であると一般的に捉えられていた。クライン-ゴールドン方程式は、スピンを持たない粒子に対して有効な相対論的方程式であるので、この認識は正しくない。

例えば、シュレーディンガー方程式は、

$$H\Psi = E\Psi$$

で、ハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2m}(-i\nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi$$

と記述できる。クライン-ゴールドン方程式は、

$$[(H - e\phi)^2 - (-i\nabla - e\mathbf{A})^2]\Psi = m^2\Psi \quad (9-3)$$

である。

一方、パウリの方程式 $H\Psi = E\Psi$ のハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla - e\mathbf{A})]^2 + e\phi \quad (9-4)$$

である。これらと比べると、シュレーディンガー方程式にある $(-i\nabla - e\mathbf{A})^2$ が $[\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla - e\mathbf{A})]^2$ に置き換えられていることがわかる。つまり、相対論的なパウリ方程式は、クライン-ゴールドン方程式からのアナロジーで、

$$(H - e\phi)^2\Psi - \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right\} \right]^2\Psi = m^2\Psi$$

となると思われるが、これは正しくない。これとよく似たかたちをしているが、 $(H$ を $i(\partial/\partial t)A$ に置き換えた) である

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - e\phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla - e\mathbf{A}) \right] \left[i\frac{\partial}{\partial t} - e\phi + \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla - e\mathbf{A}) \right] \Psi = m^2\Psi \quad (9-5)$$

が正しい表示である。この式は、ディラック方程式の一つの形である。

演算の対象となる波動関数 Ψ は、次のように表される行列である。

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}$$

次のようにすると、ディラックの最初の提案に近い形が得られる。このため便宜上、

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi - e\phi \Psi = \pi_4 \Psi$$

$$-i\nabla \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A} \Psi = \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Psi$$

と記す。ここで、関数 χ を $(\pi_4 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})\Psi = m\chi$ で定義する。

また、式 (9-5) から $(\pi_4 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})\chi = m\Psi$ とする。これら一対の方程式を

$$\chi + \Psi = \Psi_a$$

$$\chi - \Psi = \Psi_b$$

と記すと（よく使われる形に）書き換えることができる。これより、 Ψ と χ の一対の式を足したり引いたりすることで、

$$\pi_4 \Psi_a - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \Psi_b = m\Psi_a$$

$$-\pi_4 \Psi_b + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \Psi_a = m\Psi_b \quad (9-6)$$

の関係があることがわかる。これらの2つの式は、特定の規則を適用することで1つの式に記すことができる。ここで、改めて、波動関数から成る行列を、

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{a1} \\ \Psi_{a2} \\ \Psi_{b1} \\ \Psi_{b2} \end{pmatrix} \quad (9-7)$$

で定義する。ここで、 Ψ_a と Ψ_b は各々行列であることに注意する。すなわち、

$$\Psi_a = \begin{pmatrix} \Psi_{a1} \\ \Psi_{a2} \end{pmatrix}, \quad \Psi_b = \begin{pmatrix} \Psi_{b1} \\ \Psi_{b2} \end{pmatrix}$$

で定義できる。

そこで、 γ 行列に対して補助的な定義をしておく。

$$\gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9-8)$$

注意：式 (9-8) の右の行列の例を示しておく。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

なので、

$$\gamma_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。

Ψ_a と Ψ_b の 2 元連立方程式 (式 9-8)、実際は 4 元連立方程式であるが、これは次のように 1 つの方程式にまとめることができる。

$$\gamma_4 \pi_4 \Psi - \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\pi} \Psi = m \Psi$$

これにより、4 元ベクトル記法を使って、ディラック方程式は、

$$\gamma_\mu \pi_\mu \Psi = m \Psi$$

あるいは、

$$\gamma_\mu (i \nabla_\mu - e A_\mu) \Psi = m \Psi \quad (9-9)$$

となる。

練習問題： 次の γ 行列の関係

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = \begin{cases} 0 & \mu \neq \nu \text{ のとき} \\ 2 & \mu = \nu = 4 \text{ のとき} \\ -2 & \mu = \nu = 1, 2, 3 \text{ のとき} \end{cases}$$

を示しなさい。この間いは、

$$\gamma_t^2 = 1, \quad \gamma_x^2 = \gamma_y^2 = \gamma_z^2 = -1$$

$$\gamma_t \gamma_x = -\gamma_x \gamma_t, \quad \gamma_x \gamma_y = -\gamma_y \gamma_x$$

を示せばよい。2 番目の式については、 (y, z) 、 (z, t) などと同様である。

ディラック方程式と同様な式を得ることは、別の方法、クライン-ゴルドン方程式との比較においても得られる。例えば、式 (9-3) に $H = i(\partial/\partial t) = i\nabla_4$ 、 $e\phi = eA_4$ を代入すると次のように、

$$(i\nabla_\mu - eA_\mu)^2 \Psi = m^2 \Psi \quad (9-10)$$

4元ベクトル表示の方程式が得られる。パウリ方程式と同様の表記である式(9-4)を用いて、 $\sigma = \boldsymbol{\gamma}$ とし、 $\sigma_4 = \gamma_4$ を任意 (σ の4元ベクトル表示の定義を行うため) に設定して、式(9-4)を、

$$\left[\gamma_\mu \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right\} \right]^2 \Psi = m^2 \Psi \quad (9-11)$$

式(9-10)と類似形とする。これより、式(9-9)と比較する必要がある。

さて、パウリ方程式、式(9-4)は、3次元スカラー積 $(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2$ を単一のスカラー量 $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$ の2乗で置き換えているところが、シュレーディンガー方程式とは異なる。同様に、式(9-10)における4元ベクトル積 $(p_\mu - eA_\mu)^2$ を1つの量 $\gamma_\mu (p_\mu - eA_\mu)$ の2乗に置き換え、3次元の3つの行列 $\boldsymbol{\sigma}$ と同様に、4次元の4つの行列 γ_μ を用いた表現をする必要がある。このようにして得られた方程式

$$\{\gamma_\mu (i\nabla_\mu - eA_\mu)\}^2 \Psi = m^2 \Psi \quad (9-12)$$

は、本質的に式(9-9)と等価である(式(9-9)の両辺に演算子 $\gamma_\mu (i\nabla_\mu - eA_\mu)$ を作用させ、式(9-9)を再度使用して簡略化した)。

練習問題：式(9-12)は、

$$\left\{ (i\nabla_\mu - eA_\mu)^2 - \frac{1}{2} e \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\mu\nu} \right\} \Psi = m^2 \Psi$$

と等価であることを示しなさい。

第10回講義

γ 行列の代数

前回の講義において、ディラック方程式

$$\gamma_\mu (i\nabla_\mu - eA_\mu) \Psi = m \Psi \quad (10-1)$$

を得て、同時に、 γ 行列の特別な表現

$$\gamma_t = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_{x,y,z} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{x,y,z} \\ -\sigma_{x,y,z} & 0 \end{pmatrix} \quad (10-2)$$

を得た。これらの 4 行 4 列の行列の各要素は、別の 2 行 2 列の行列、

$$\text{単位行列: } \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{パウリ行列: } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \dots$$

で表現する。

しかし、 γ 行列を定義する最良の方法は、その使用上の重要性から、その交換関係を与えることにある。この交換関係は、 γ 行列の固有の表現を決定するものではなく、前述の表現は多くの可能な表現の一つに過ぎない。 γ 行列の交換関係は、

$$\begin{aligned} \gamma_t^2 = 1, \quad \gamma_x^2 = \gamma_y^2 = \gamma_z^2 = -1 \\ \gamma_t \gamma_{x,y,z} + \gamma_{x,y,z} \gamma_t = 0 \end{aligned} \tag{10-3}$$

$$\gamma_x \gamma_y + \gamma_y \gamma_x = 0, \quad \gamma_y \gamma_z + \gamma_z \gamma_y = 0, \quad \gamma_z \gamma_x + \gamma_x \gamma_z = 0$$

あるいは、統一表記では、

$$\begin{aligned} \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \tag{10-4} \\ \delta_{\mu\nu} = 0 \quad \mu \neq \nu \\ = +1 \quad \mu = \nu = 4 \\ = -1 \quad \mu = \nu = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

なお、この $\delta_{\mu\nu}$ の定義とスカラー積を形成するための規則により、

$$\delta_{\mu\nu} a_\nu = a_\mu$$

となる。

また、すでに定義した行列の積をつくることで、他の新しい行列が定められることもある。例えば、式 (10-5) は 2 つの γ 行列の積を並べたものである。 γ 行列の積でつくられた行列、

$$\gamma_x \gamma_y, \quad \gamma_x \gamma_z, \quad \gamma_x \gamma_t, \quad \gamma_y \gamma_z, \quad \gamma_y \gamma_t, \quad \gamma_z \gamma_t$$

のいずれもが $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \gamma_t$ のどれとも独立である（これらは後述の線形結合とはならない）。同様に、次の 3 つの行列の積、

$$\begin{aligned} \gamma_x \gamma_y \gamma_z (= \gamma_5 \gamma_t) \\ \gamma_y \gamma_z \gamma_t (= -\gamma_x \gamma_5) \\ \gamma_z \gamma_t \gamma_x (= -\gamma_y \gamma_5) \\ \gamma_t \gamma_x \gamma_y (= -\gamma_z \gamma_5) \end{aligned}$$

となる。

これらが3つの積のすべてである。というのも、もし3つの内の2つが等しければ、その積は $\gamma_t \gamma_y \gamma_t = -\gamma_t \gamma_t \gamma_y = -\gamma_y$ のように1つの行列で表せる。4つの積は、

$$\gamma_5 = \gamma_x \gamma_y \gamma_z \gamma_t$$

このように新しい性質があるので、 γ_5 と特別な名が付いている。4つ以上の積には、少なくとも2つ同じ γ_μ が含まれているため、3つ以下の積にすることができる。したがって、線形独立の16個の量がある。それらの線形結合には、16個の任意の定数が含まれることになる。これは、このような組み合わせが4行4列の行列で表現されることと一致する。(4行4列の行列がすべて γ 行列の代数で表現できることは数学的に興味深く、これをクリフォード代数あるいは超複素代数という。もっと簡単な例は、2行2列の行列、いわゆる4元数の代数で、これはパウリのスピ行列の代数である)。

練習問題： 次の2つの関係を確認めなさい。まず、

$$i\gamma_x \gamma_y = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, \quad i\gamma_y \gamma_z = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \quad i\gamma_z \gamma_x = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix} \quad (10-5)$$

と α の定義である

$$\gamma_t \gamma_{x,y,z} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{x,y,z} \\ \sigma_{x,y,z} & 0 \end{pmatrix} \equiv \alpha$$

である。また γ 行列は頻繁に現れるため γ_5 行列を定めておくと便利なので、次の関係、

$$\gamma_5 = \gamma_x \gamma_y \gamma_z \gamma_t = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10-6)$$

それに、

$$\gamma_5^2 = -1, \quad \gamma_5 \gamma_\mu + \gamma_\mu \gamma_5 = 0 \quad (10-7)$$

を確認しなさい。

ここで、後で使用するために、新しい記号

$$\vec{a} \equiv a_\mu \gamma_\mu = a_t \gamma_t - a_x \gamma_x - a_y \gamma_y - a_z \gamma_z \quad (10-8)$$

を定義しておく。この記号を使って、次の関係を示しておく。

$$\begin{aligned}\vec{a}\vec{b} &= -\vec{b}\vec{a} + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, & (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= a_\mu b_\mu) \\ a^2 &= a_\mu a_\mu \\ \vec{a}\gamma_5 &= -\gamma_5\vec{a}\end{aligned}\tag{10-9}$$

例えば、式 (10-9) の最初の式は、

$$\vec{a}\vec{b} = (a_t\gamma_t - a_x\gamma_x - a_y\gamma_y - a_z\gamma_z)(b_t\gamma_t - b_x\gamma_x - b_y\gamma_y - b_z\gamma_z)$$

として丁寧に計算し、2 つ目の因子を前面に出して交換関係を用いて整理することで確認できる。これを第 1 項で行うと、右カッコ内の最初の項 ($b_t\gamma_t$) の計算は γ_t が自分自身との交換、 γ_x 、 γ_y 、それに γ_y と反交換関係にあることを使うことにより、

$$b_t\gamma_t(a_t\gamma_t + a_x\gamma_x + a_y\gamma_y + a_z\gamma_z)$$

となる。このような操作をすべての項において実行することで、

$$\begin{aligned}\vec{a}\vec{b} &= b_t\gamma_t\{(-a_t\gamma_t + a_x\gamma_x + a_y\gamma_y + a_z\gamma_z) + 2a_t\gamma_t\} \\ &\quad + b_x\gamma_x\{(a_t\gamma_t - a_x\gamma_x - a_y\gamma_y - a_z\gamma_z) + 2a_x\gamma_x\} \\ &\quad + b_y\gamma_y\{(a_t\gamma_t - a_x\gamma_x - a_y\gamma_y - a_z\gamma_z) + 2a_y\gamma_y\} \\ &\quad + b_z\gamma_z\{(a_t\gamma_t - a_x\gamma_x - a_y\gamma_y - a_z\gamma_z) + 2a_z\gamma_z\} \\ &= -\vec{b}\vec{a} + 2(b_t a_t \gamma_t^2 + b_x a_x \gamma_x^2 + b_y a_y \gamma_y^2 + b_z a_z \gamma_z^2) \\ &= -\vec{b}\vec{a} + 2\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}\end{aligned}$$

が得られる。

練習問題： (1) 次の関係式を確かめなさい。

$$\begin{aligned}\gamma_x\vec{a}\gamma_x &= \vec{a} + 2a_x\gamma_x \\ \gamma_\mu\gamma_\mu &= 4 \\ \gamma_\mu\vec{a}\gamma_\mu &= -2\vec{a} \\ \gamma_\mu\vec{a}\vec{b}\gamma_\mu &= 4\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \\ \gamma_\mu\vec{a}\vec{b}\vec{c}\gamma_\mu &= -2\vec{c}\vec{b}\vec{a}\end{aligned}$$

(2) 次の関係式を冪級数で展開して確かめなさい。

$$\exp\{(u/2)\gamma_t\gamma_x\} = \cosh(u/2) + \gamma_t\gamma_x\sinh(u/2)$$

$$\exp\{(\theta/2)\gamma_t\gamma_y\} = \cos(\theta/2) + \gamma_t\gamma_y\sin(\theta/2) \quad (10-10)$$

(3) 次の関係式を示しなさい。

$$\begin{aligned} \exp\{-(u/2)\gamma_t\gamma_z\}\gamma_t\exp\{+(u/2)\gamma_t\gamma_z\} &= \gamma_t\cosh(u) + \gamma_z\sinh(u) \\ \exp\{-(u/2)\gamma_t\gamma_z\}\gamma_z\exp\{+(u/2)\gamma_t\gamma_z\} &= \gamma_z\cosh(u) + \gamma_t\sinh(u) \\ \exp\{-(u/2)\gamma_t\gamma_z\}\gamma_y\exp\{+(u/2)\gamma_t\gamma_z\} &= \gamma_y \\ \exp\{-(u/2)\gamma_t\gamma_z\}\gamma_x\exp\{+(u/2)\gamma_t\gamma_z\} &= \gamma_x \end{aligned} \quad (10-11)$$

等価変換

式 (10-3) と同じ交換関係を満たす別の γ 行列の表現が得られたとするなら、ディラック方程式 (10-1) の形は変わらないだろうか。この質問に答えるために、波動関数 $\Psi = S\Psi'$ を次のように変換する。ここで、 S は逆行列 $S^{-1}(SS^{-1} = 1)$ を持つとした定数行列である。このディラック方程式は、

$$\gamma_\mu\pi_\mu S\Psi' = mS\Psi' \quad (10-12)$$

となる。 π は位置の関数を加えた微分演算子、また π_μ と S は交換可能なので、この式は

$$\gamma_\mu S\pi_\mu\Psi' = mS\Psi'$$

とすることができる。この式に逆行列 S^{-1} を作用させると、

$$S^{-1}\gamma_\mu S\pi_\mu\Psi' = mS^{-1}S\Psi'$$

あるいは、

$$\gamma'_\mu\pi_\mu\Psi' = m\Psi'$$

となる。ここで、 $\gamma'_\mu = S^{-1}\gamma_\mu S$ であり、この変換 $\gamma'_\mu = S^{-1}\gamma_\mu S$ を等価変換という。この新しく定義した γ 行列が、式 (10-3) の交換関係を満たすことが容易に確認できる。 γ' 行列の積は、

$$\gamma'_\mu\gamma'_\nu = (S^{-1}\gamma_\mu S)(S^{-1}\gamma_\nu S) = S^{-1}(\gamma_\mu\gamma_\nu)S$$

と γ 行列とまったく同じように変換できるため、 γ' を含む方程式 (特に交換関係) は、変換表現においても同じになる。このことは γ 行列の別の表現を示しており、 γ' 行列においても、ディラック方程式は元の式 (10-1) とまったく同じ形になり、同じ結果が得られる。

相対論的不変性

ディラック方程式が相対論的に不変であることは、 γ 行列が 4 元ベクトルと同様に変換されると仮定することで証明できる。これは、

$$\gamma'_x = \frac{\gamma_x - v\gamma_t}{\sqrt{1-v^2}}, \quad \gamma'_y = \gamma_y, \quad \gamma'_z = \gamma_z, \quad \gamma'_t = \frac{\gamma_t - v\gamma_x}{\sqrt{1-v^2}}$$

である。また、 π 行列は、2 つの 4 元ベクトル ∇_μ と A_μ の結合となっているため、これまでの 4 元ベクトルと同様に変換できる。ディラック方程式の左辺 $\gamma_\mu \pi_\mu$ は 2 つの 4 元ベクトルの積で、ローレンツ変換不変量である。右辺の m も不変量である。4 元ベクトルである γ_μ を変換すると、 γ 行列の表現が新しくなるが、式 (10-11) を使うことで、等価変換により新しい γ が古い γ と異なっているためであるので、実際には γ 行列を変換する必要はない。つまり、すべてのローレンツ座標系において同じ特別な表現が使える。これにより、ローレンツ変換には 2 つの可能性があることがわかる。

1. γ 行列を同様に 4 元ベクトルに変換すると、波動関数は同じになる (座標系のローレンツ変換を除く)。
2. ローレンツ変換された座標系での標準的な表現を用い、この場合、波動関数は等価変換によって (練習問題の) (1) のものとは異なる。

ディラック方程式のハミルトニアン

ディラック方程式が低速度ではシュレーディンガー方程式に還元されることを示すためには、ハミルトニアン形式で記述することが都合がよい。原点とした方程式 (10-1) は、

$$\gamma_t \left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right\} \Psi - \boldsymbol{\gamma} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right\} \Psi = m\Psi$$

と記載できる。この式に、 $1\gamma_t$ を左から演算し、項を並べ替えると

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\gamma_t \boldsymbol{\gamma} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right\} + e\phi + \gamma_t m \right] \Psi = H\Psi$$

となる。式 (10-5) により、 H は次のようになる。

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} - e\mathbf{A} \right\} + e\phi + m\beta$$

ここで、 $\beta = \gamma_t$, $\alpha_{x,y,z} = \gamma_t \gamma_{x,y,z}$ 、式 (10-5)、そして、 α は次のような交換関係を満たす。 $\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1$ とすべてのペアは反交換する。

α と β は特別な表現ではエルミート行列である。また、この表現における H はエルミート演算子であることに留意すること。

練習問題： 確率密度 $\rho = \Psi^* \Psi$ と確率密度流 $\mathbf{j} = \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi$ が連続方程式

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

を満たすことを示しなさい。

注意： Ψ は 4 成分の波動関数であること、それに

$$\rho = \Psi^* \Psi = (\Psi_1^* \quad \Psi_2^* \quad \Psi_3^* \quad \Psi_4^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4$$

$$\mathbf{j}_z = \sum_{ij} \Psi_i^* (\alpha_x)_{ij} \Psi_j = \Psi_4^* \Psi_1 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_1^* \Psi_4$$

であることを参考にするとよい。

第 11 回講義

β と $\boldsymbol{\alpha}$ はある一定の表現においてのみエルミートであることに注意すること。特に、これまで使ってきた表現においてはエルミートである。これを標準表現という。この表現での式には必要に応じて S.R. という印を記しておく。 $\boldsymbol{\alpha}$ と β のエルミート性は、確率密度 (電荷密度) と確率密度流 (電流密度) の表現として、

$$\begin{aligned} \rho &= \Psi^* \Psi \\ \mathbf{j} &= \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi, \quad \text{S.R} \end{aligned} \quad (11-1)$$

を得るために必要である。したがって、すべての表現において真ではない。ディラック方程式は (意味がわかりやすいため、 \hbar と c を復元した)

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad H = \beta m c^2 + e \phi + c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right\} \quad (11-2)$$

となる。(注) なお、参考書としたシッフ『量子力学』に記載されているハミルトニアンは、 $e\phi$ 項を除くすべての項に負号がついており、このハミルトニアンとは異なっている。また、シッフ『量子力学』で使われている波動関数の成分 $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$ は、それぞれここでの $-\Psi_{b1}, -\Psi_{b2}, -\Psi_{a1}, \Psi_{a2}$ に対応する。これらはすべて、等価変換 $S^2 = i\beta\alpha_x\alpha_x\alpha_x$ が、ここで使われている表現とシッフの本で使われている表現の違いによる。これは、 $S^2 = -1$ とした結果、 $S^{-1} = S$ と

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

となることから簡単に確認できる。

x の期待値は、

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dvol = \int (\Psi_1^* x \Psi_1 + \Psi_2^* x \Psi_2 + \Psi_3^* x \Psi_3 + \Psi_4^* x \Psi_4) dvol \quad S.R.$$

で求められる。 Ψ が 4 つの成分の波動関数であることを忘れないこと。同様に、練習として、

$$\langle \alpha \rangle = \int \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi dvol$$

$$\langle \alpha_x \rangle = \int (\Psi_4^* \Psi_1 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_1^* \Psi_4) dvol \quad S.R.$$

を行ってみたい。また、行列要素も形式的には前述と同様に計算できる。例えば、

$$(\alpha)_{mn} = \int \Psi_m^* \boldsymbol{\alpha} \Psi_n dvol$$

となる。 A が任意の演算子である場合、その時間微分は、

$$\dot{A} = i(HA - AH) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

となる。 $A=x$ であれば、 x が H の $\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha}$ を除くすべての項と可換であるため、結果は明らかに

$$\dot{x} = i(Hx - xH) = \boldsymbol{\alpha} \quad (11-3)$$

となる。しかし、 $\boldsymbol{\alpha}^2 = 1$ なので、 $\boldsymbol{\alpha}$ の固有値は ± 1 である。したがって、 \dot{x} の固有値 (固有速度) は $\pm c$ (光速) となる。この結果は、速度を正確に決定することは、2 つの時間における位置を正確に決定することを意味することの議論によって、説得力のあるものになることがある。すると、不確定性原理により、運動量は完全に不確定となり、おそらくすべての値が等しくなる。速度と運動量の相対論的な関係から、これは光速に近い速度の可能性が高まることを意味し、極限では速度の期待値は光速となることがわかる。(注、この議論は完全に受け入れられるものではない。何故なら、 \dot{x} は \mathbf{p} と交換可能な演算子で、これら 2 つの量を同時に測定できることによる。)

同様に計算すると、

$$\begin{aligned} \overline{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})_x} &= i(Hp_x - p_xH) - ie(HA_x - A_xH) - e \frac{\partial A_x}{\partial t} \\ &= -e \frac{\partial \phi}{\partial x} + e\boldsymbol{\alpha} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} - e(\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)A_x - e \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

となる。 \mathbf{A} と A_x の項は、最終項を除いて、

$$e \left(\alpha_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + \alpha_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + \alpha_z \frac{\partial A_z}{\partial x} - \alpha_x \frac{\partial A_x}{\partial x} - \alpha_y \frac{\partial A_y}{\partial y} - \alpha_z \frac{\partial A_z}{\partial z} \right)$$

と計算する。これは、

$$e\boldsymbol{\alpha} \times (\nabla \times \mathbf{A}) = e\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{B}$$

の x 成分であることがわかる。最初と最後の項は \mathbf{E} の x 成分をつくる。したがって、

$$\overline{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})} = e(\mathbf{E} + \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{B}) = \mathbf{F}$$

は、 \mathbf{F} がローレンツ力のアナロジーとなる。この式は、ニュートンの運動の方程式のアナロジーとしてよく使われる。しかし、この式と \dot{x} との間には直接的な関係がないため、速度を小さくした極限においてニュートンの運動の方程式

に直結しない。このため、この議論は適切なアナロジーとして完全に受け入れることはできない。

次の関係式は、真であることが確定される可能性はあるが、その意味が完全に理解されているとは言えない。

$$\frac{d}{dt} \left(\mathbf{x} + \frac{i}{2m} \beta \boldsymbol{\alpha} \right) = \frac{\beta}{m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$$

$$\frac{d}{dt} \left(t + \frac{i}{2m} \beta \right) = \frac{\beta}{m} (H - e\phi)$$

$$i \frac{d}{dt} (\alpha_x \alpha_y \alpha_z) = -2m\beta \alpha_x \alpha_y \alpha_z$$

$$-\frac{d}{dt} (\beta \boldsymbol{\sigma}) = 2(\beta \alpha_x \alpha_y \alpha_z) (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$$

最後の関係式では、 $\boldsymbol{\sigma}$ は次の行列

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

を意味し、

$$\sigma_z = -i\alpha_x \alpha_y, \quad \dots$$

である。

古典物理学との類似性から、角運動量演算子は、

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$$

であると予想できるが、古典物理学では、

$$\mathbf{p} - e\mathbf{A} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2}}$$

であることに注意しなくてはならない。これまでの $\dot{\mathbf{R}}$ と $\overline{\dot{\mathbf{p}} - e\dot{\mathbf{A}}}$ の結果から、 \mathbf{L} の時間微分は、

$$\dot{\mathbf{L}} = \dot{\mathbf{R}} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \mathbf{R} \times \overline{\dot{\mathbf{p}} - e\dot{\mathbf{A}}}$$

と予想するかもしれない。(予想外の) 第 2 項はトルク (回転力) であると解釈できる。 F が中心力であるなら、この項はゼロになる。しかし、第 1 項のため

に \mathbf{L} が保存されないことがわかる。つまり、中心力があっても角運動量 \mathbf{L} は保存されないのである。

しかし、

$$\begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}$$

で定義された演算子 σ の時間微分を考えてみる。ここで、 $\sigma_z = -\alpha_x \alpha_y$ 、...である。z成分は、 H に含まれている β 、 $e\phi$ 、それに α_z とは交換するが、 α_x 、 α_x とは交換しないため、

$$\sigma_z = +1(H\alpha_x\alpha_y - \alpha_x\alpha_yH) = +(\alpha_x\pi_x\alpha_x\alpha_y - \alpha_x\alpha_x\alpha_x\pi_x + \alpha_y\pi_y\alpha_x\alpha_y - \alpha_x\alpha_y\alpha_y\pi_y)$$

となる。ここで、

$$\boldsymbol{\pi} = (-i\nabla - e\mathbf{A})$$

である。しかし、

$$\begin{aligned} \alpha_x\pi_x\alpha_x\alpha_y &= \alpha_x\alpha_x\alpha_y\pi_x = \alpha_y\pi_x \\ -\alpha_x\alpha_y\alpha_x\pi_x &= \alpha_x\alpha_x\alpha_y\pi_x = \alpha_y\pi_x \\ \alpha_y\pi_y\alpha_x\alpha_y &= -\alpha_y\alpha_y\alpha_x\pi_y = -\alpha_x\pi_y \\ -\alpha_x\alpha_y\alpha_y\pi_y &= -\alpha_x\pi_y \end{aligned}$$

これより、

$$\dot{\sigma}_z = (2\alpha_y\pi_x - 2\alpha_x\pi_y)$$

となる。これは $-2\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\pi}$ の z成分であることがわかる。最後に、

$$\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{\sigma}} = -\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\pi} = -\boldsymbol{\alpha} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$$

であるが、これは負の符号を持つ L の第1項である。したがって、中心力で消滅する

$$\frac{d}{dt} \left(\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) = \mathbf{R} \times \mathbf{F}$$

は次のようになる。演算子 $\mathbf{L} + (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ は全角運動量演算子とみなすことができ、 \mathbf{L} は軌道角運動量、 $(\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ はスピン 1/2 の固有角運動量を示すわけである。

したがって、中心力によって全角運動量は保存される。

問題：(1) 定常場 $\phi = 0$, $\partial A/\partial t = 0$ において、

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$$

は運動の定数であることを示しなさい。これは、電子の異常ジャイロ磁気率の結果であることに注意すること。また、電子のサイクロトロン振動数は、磁場中での歳差運動の速度に等しいことを意味する。

(2) 定常磁場 $\phi = 0$, $\partial A/\partial t = 0$ 中で、定常状態の場合、

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

の Ψ_1, Ψ_2 がパウリ方程式の ψ_1, ψ_2 と同じであることを示しなさい。また、 E_{Pauli} をパウリ方程式における運動エネルギー、それに $E_{Dirac} = W + m$ をディラック方程式の（静止エネルギー＋運動エネルギー）とすると、

$$E_{Dirac} = \sqrt{2mE_{Pauli} + m^2}$$

が成り立つことを示し、この関係の簡潔さを説明しなさい。

ディラック方程式の非相対論的近似

ここでは、すべてのポテンシャルが定常状態であると仮定して、定常状態を検討する。これによって計算は簡単になるが、本質的ではない。この場合、

$$\Psi = e^{-iEt}\psi(x)$$

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{ディラックハミルトニアン})$$

それに、

$$E = m + W$$

とする。すなわち、

$$H\Psi = (m + W)\Psi = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})\Psi + \beta m\Psi + e\phi\Psi$$

である。 Ψ を式 (9-5) のように書き、 $\boldsymbol{\alpha}$ 、 β を第 10 回講義で示したようにすると、前の式は 2 つの式 (9-6)、

$$(m + W)\Psi_a = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\Psi_b + m\Psi_a + V\Psi_a \quad (11-4)$$

$$(m + W)\Psi_b = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\Psi_a - m\Psi_b + V\Psi_b \quad (11-5)$$

つまり以前と同様に、 $\boldsymbol{\pi} = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$ と $V = e\phi$ で記すことができることを思い出していただきたい。式 (11-5) を簡略化して Ψ_b について解くと、

$$\Psi_b = \frac{1}{2m + W - V} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \Psi_a \quad (11-6)$$

となる。ここで、 $W \ll 2m$ と $V \ll 2m$ であるなら、 $\Psi_b \approx (v/c)\Psi_a$ となる。このため、 Ψ_a と Ψ_b をそれぞれ Ψ の大きな成分、小さな成分と呼ぶことがある。式 (11-6) の Ψ_b を式 (11-4) に代入すると、

$$W\Psi_a = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \frac{1}{2m + W - V} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \Psi_a + V\Psi_a \quad (11-7)$$

となり、 $2m$ に対して W と V を無視すると、

$$W\Psi_a = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \Psi_a + V\Psi_a$$

となる。これは、方程式 (9-4) と同じで、パウリ方程式となる。

ここでは、パウリ方程式を使うことでどのような誤差が生じるかを判断するために、第2次項まで、つまり $(v/c)^2$ のオーダーまで近似を行う。

第12回講義

第11講の結果である式 (11-6) と式 (11-7) を使って、低エネルギー近似 $(W - V) \ll 2m$ を行い、 v^4 のオーダーまで計算する。したがって、

$$\frac{1}{2m + W - V} \approx \frac{1}{2m} - \frac{W - V}{(2m)^2} \quad (12-1)$$

となる。すると、方程式 (11-7) は、

$$(W - V)\Psi_a = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \Psi_a - \frac{1}{4m^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})\Psi_a \quad (12-2)$$

となり、規格化の要件 $\int (\Psi_a^2 + \Psi_b^2) dvol = 1$ は、

$$\int \Psi_a^2 \left\{ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2}{4m^2} \right\} \Psi_a dvol = 1 \quad (12-3)$$

となる。次の置換を行うと、

$$\chi = \left\{ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2}{8m^2} \right\} \Psi_a \quad (12-4)$$

規格化の積分は $((v/c)^2$ のオーダー) で次のように、

$$\int \chi^* \chi \, dvol = 1$$

と簡単になる。また、この置換によって式 (12-2) の解釈が容易になる。式 (12-2) を次のように書き換えると、

$$\begin{aligned} & \left\{ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2}{8m^2} \right\} (W - V) \left\{ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2}{8m^2} \right\} \Psi_a \\ &= \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \Psi_a + \frac{1}{8m^2} \{ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 (W - V) - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \} \Psi_a \end{aligned}$$

この式に、式 (12-4) を適用して $1 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2/8m^2$ で割ると、

$$\begin{aligned} (W - V) \chi &= \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \chi - \frac{1}{8m^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^4 \chi \\ &+ \frac{1}{8m^2} \{ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 (W - V) - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 \} \chi \quad (12-5) \end{aligned}$$

となる。上式 (12-5) をより解釈しやすく変形するため、演算子代数のテクニクを使う。特に、

$$A^2 B - 2ABA + BA^2 = A(AB - BA) - (AB - BA)A$$

の関係を使う。これにより、 $\boldsymbol{\pi} = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})$ と

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(W - V) - (W - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) = +i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V) = -ie(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})$$

を使うことで (前述の $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} = \mathbf{A}$ と $(W - V) = B$ も使用)、

$$i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}) - i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) = \nabla \cdot \mathbf{E} - 2\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \mathbf{E})$$

(ここで $\nabla \times \mathbf{E} \approx \partial \mathbf{B} / \partial t$ と近似をした) となり、式 (12.5) は、

$$\begin{aligned} W\chi &= V\chi + \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \chi - \frac{e}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \chi - \frac{1}{8m^3} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{p})^2 \chi \\ &\quad - \frac{e}{8m^2} \{ \nabla \cdot \mathbf{E} - 2\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \times \mathbf{E} \} \chi \quad (12-6) \end{aligned}$$

と展開できる。このような形の波動方程式の解釈は、式 (12-6) の (右辺) 各項を個々に考えた方が容易となる。

右辺第 1 項は、すでに登場している通常のスカラーポテンシャルエネルギーである。

右辺第 2 項は、運動エネルギーと解釈できる。

右辺第 3 項は、パウリのスピン効果で、パウリの方程式に出てくる通りである。

右辺第 4 項は、運動エネルギーに対する相対論的な補正である。この補正は、

$$E = \sqrt{m^2 + p^2} = m\sqrt{1 + p^2/m^2} = m + p^2/2m - p^4/8m^3 + \dots$$

に起因する。

右辺の最後の項（第 5 項）は、第 4 項と等価である。

第 5 項と第 6 項は、スピン軌道結合を示している。これを理解するため、第 6 項の一部である項 $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E})$ を考えてみる。この項は、逆 2 乗場では、 $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{r})/r^3$ に比例している。因子 $\mathbf{p} \times \mathbf{r}$ は、角運動量 \mathbf{L} と解釈することで、 $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L})/r^3$ （スピン軌道結合）を得ることができる。この項は、電子が s 状態 ($\mathbf{L} = 0$) の場合では何の影響も与えない。一方、第 5 項は $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi Ze\delta(\mathbf{r})$ に還元され、s 状態 ($r = 0$ で波動関数がゼロでないとき) にのみ影響を与える。つまり、第 5 項と第 6 項を合わせると、スピン軌道結合の連続関数の結果となる。電子の磁気モーメント $e/2m$ は、第 3 項の係数として現れ、さらに第 5 項と第 6 項の係数、すなわち、 $(e/2m)(1/4m^2)$ となる。

第 6 項を解釈するには、古典論的な議論が必要である。荷電粒子が速度 \mathbf{v} で電場中を移動することは、有効磁場 $\mathbf{B} = \mathbf{v} \times \mathbf{E} = (1/m)(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \times \mathbf{E}$ の影響の下で示される。このことは、第 6 項がこの有効磁場でのエネルギー $(e/2m)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})$ であることを示している。しかし、この方法では（実験値との比が）2 倍異なってしまう。ディラック方程式が導出される以前に、トーマス¹⁷はこの単純な古典的議論が不完全であることを示し、正しい項である第 6 項¹⁸を与えた。中性子と陽子を記述するためにパウリが導入した異常の場合は、状況が異なる（下の問題（3）を参照のこと）。修正パウリ方程式では、第 5 項と第 6 項を掛け合わせるときに、異常モーメントが係数 2 で現れる。

問題：(1) 方程式 (12-5) を水素原子に適用し、エネルギー準位を 1 次のオーダーで求めなさい。得られた結果をより正確な結果と比較検討しなさい (参考：シッフの本の 323 頁)。座標の原点での波動関数の違いに注意すること。この違いは、実際には空間的に制限され過ぎていないこともあって、本質的ではない。原点付近では、ディラック方程式の正しい解は、水素原子では、

$$r\sqrt{1-\left(\frac{Z}{137}\right)^2} \approx r - \frac{1}{40,000}$$

に比例し、シュレーディンガー方程式の解は $r \rightarrow 0$ において $\Psi \rightarrow$ 定数となる。

(2) A と ϕ が時間に依存する場合、 $W = i\partial/\partial t$ として、講義で示した手順に従って、同じオーダーの近似で計算しなさい。

(3) 修正パウリ方程式は、中性子と陽子にも適用できる。これは、ディラック方程式に異常モーメントの項を加えることで得られる。すなわち、次の方程式、

$$\gamma_\mu(i\nabla_\mu - eA_\mu)\Psi + \frac{\mu}{4M}\gamma_\mu\gamma_\nu F_{\mu\nu}\Psi = m\Psi$$

である。これに β を左から演算させると、より馴染みのある式であるハミルトニアンを使うことができ、

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_{Dirac}\Psi + \frac{\mu}{4M}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} - \boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E})\Psi$$

と記載することができる。

式 (12-6) を導いたときと同じ近似で、陽子において、

$$\left\{V + \frac{1}{2M}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \left(\mu + \frac{e}{2M}\right)\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} + \frac{1}{8M^3}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{p})^2\right\}\Psi + \left\{\frac{1}{4M^2}\left(\frac{2\mu}{4M} + \frac{e}{2M}\right)(\nabla\cdot\mathbf{E} + 2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\times\mathbf{E})\right\}\Psi \quad (12-7)$$

となること、また中性子においては式 (12-7) で $e = 0$ とした式となることを示しなさい。

(4) 式 (12-7) は、原子における電子-中性子散乱を考察するのに適用できる。原子による中性子の散乱のほとんどは、原子核による等方的な散乱である。しかし、原子の電子も散乱し、原子核の散乱に対して、干渉波を発生させる。遅い中性子において、この効果が実験的検証されている。これは式 (12-6) の第

5項で解釈できる ($e = 0$ と修正した式 (12-7))。電子の電荷は原子核の外に存在するので、 $\nabla \cdot \mathbf{E}$ は 0 とは異なる値をとる。第 5 項はボルン近似において、中性子-電子散乱の振幅を計算するのに使われる。しかしながら、この効果が発見された当初は、中性子と電子の相互作用がポテンシャル $c\delta(R)$ (ここで $\delta(R)$ はディラック δ 関数、 R は中性子と電子の距離) で与えられると仮定して説明されていた。

$c\delta(R)$ による散乱振幅をボルン近似で計算し、第 5 項で与えられるものと比較しなさい。また、

$$c = \frac{4\pi\mu_N e^2}{4M_N^2}$$

であることを示しなさい。

$c\delta(R)$ をポテンシャルとして解釈するために、平均ポテンシャル V を、半径 e^2/mc^2 の球に作用し、同様な効果をもたらすポテンシャルとして定義する。

$\mu_N = -1.9135eh/2M_N$ を使って、得られた V が実験結果と同じ精度 (すなわち、 $4400 \pm 400\text{eV}^{19}$) 内で一致することを示しなさい。

(5) v^2/c^2 より高次の項を無視して、

$$\int \Psi_f^* \alpha f(R) \Psi_i \text{dvol} \rightarrow \int \chi_f^* \left(\frac{pf + fp}{2m} + \frac{\boldsymbol{\sigma} \times \nabla f}{2m} \right) \chi_i \text{dvol}$$

を示しなさい。

(次号に続く)

注

- 1) ファインマン (Richard Phillips Feynman, 1918~1988) がユニークで魅力ある物理学者であると同時に素晴らしい教師であった。これらのことは、彼を知る誰もが認めていた。ファインマン曰く、「僕の物理学に対する最大の貢献は、量子電磁気学 (ファインマンは、この構築に貢献したことより朝永振一郎、ジュリアン・シュヴィンガーと共にノーベル物理学賞を受賞した) でも、超流動ヘリウム理論でも、パートン模型でもなく、『ファインマン物理学』の著作だ」と語ったことが

ある。ここからも、ファインマンが大学教育をととても大切にしていたことが窺える。また、ファインマンの研究スタイルは試行錯誤にある。頭に浮かんだものを勢いよく吐き出し、そして錯誤を素早く潰す。この思考過程を、気に入った解が得られるまで辛抱強く(集中力をもって)繰り返すことにある。このスタイルは、彼の講義ノートづくりでも同様であったと思う。彼の講義の聴講者であった D.L. グッドステイン (現在、Cal Tech 教授) によると「ファインマンの講義を聴いても、試験問題をうまく解けるようになったかと言えば、まったくそうではない。彼の講義から、物理の考え方と論証の仕方を学んだ」という。ここで「うまくいかなかった」という言葉は、おそらく学生の答案を見てのことだろう。

- 2) フェルミ (Enrico Fermi, 1901~1954) は、理論物理でも、実験物理でも業績豊かなローマ出身の研究者である。この両刀使いはノーベル物理学賞 (1938 年) 理由である「中性子放射による新放射性元素の存在証明と熱中性子による原子核反応の発見」からもわかる。
- 3) 時間依存の摂動論の最低次で計算した近似式である。状態 i から状態 f に単位時間あたりの遷移確率は、 $(2\pi/\hbar)|\langle\psi_f|V|\psi_i\rangle|^2\rho(E_f)$ となる。ここで、 $\rho(E_f)$ は最終状態の密度である。
- 4) パウリ近似とも言われている。電荷 e 、質量 m の非相対論的ハミルトニアン $(1/2m)\{p - (e/c)A\}^2 + e\phi$ に相対論的補正をして $(v/c)^2$ の項まで残して導出された方程式である。パウリ (Wolfgang Pauli, 1900~1958) は、20 歳で相対論の本を執筆し、量子力学の構築に貢献した。理論物理学の良心と言われたほど、重要な指摘をした。実験はまるでダメで、パウリが近くにいるだけで実験はうまくいかないことを比喻されて「パウリ効果」と言われた。
- 5) 例えば、ランダウ=リフリッツ (佐々木健、好村滋洋訳)『量子力学 1』(東京図書, 1967) の「§40. 時間に依存する摂動」が参考になる。
- 6) $e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kl) P_l(\cos \theta)$ (平面波に対する展開式)。
 $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$ である (ロドリグの公式)。
- 7) ガンマ線を放出している原子核においては、これは当てはまらない。理由は明確ではないが、多極子の次数ごとに磁気放射が優勢になる。
- 8) ストークス線ともいう。物質に一定の波長をもった光を入射させたときに放射される散乱光のうち、入射光より長波長側に現れる線をいう。短波長側に現れる線を反ストークス光という。ストークス (George G. Stokes, 1819~1903) は、ケンブリッジ大学第 13 代ルーカス教授 (ニュートンは第 2 代) で、流体力学、光学、応用数学などで多くの業績を積んだ。
- 9) ラム (Willis Eugen Lamb, 1913~2008) とレザフォード (Robert C. Retherford, 1912~1981) の実験は 1947 年に発表された (“Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method” Phys. Rev. 72 (1947) 241-243)。グイソンは「ラムシフトが物理学の中心テーマであった時代は、私の世代の物理学者全員にとって黄金時代であった。捉えどころがなく、測定が難しいこの小さなシフトが、粒子や場についての考え方を明確にしてくれた」とラムの実験結果が量子電磁力学誕生のきっかけをつくったことを述べた。なお、原文は Rutherford となっている。明らかな間違いである。これでは、大実験物理学者のラザフォードを想定してしまうため、読者を惑わしてしまう。

- 10) これから先、エネルギー E は、静止エネルギー mc^2 を含めたエネルギーを意味する。
- 11) ベクトルポテンシャルは任意の関数の勾配 (∇) の範囲で、スカラーポテンシャルは同じ関数の時間微分の範囲内でしか決定できない。
- 12) ファインマンは \square^2 をダランベール演算子としたが、2 乗を付けずに、 \square をダランベール演算子として使用していることが多い。すなわち、 $\square = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2 - (\partial^2/\partial t^2)$ が一般的である。
- 13) この式は、 $E = \mathbf{P} \cdot \mathbf{v}$ なら分かるが、たいへん奇妙に感じる。 $c = 1$ とした単位に由来している。 $\mathbf{P} = (mv_x/\sqrt{1-v^2}, mv_y/\sqrt{1-v^2}, mv_z/\sqrt{1-v^2})$ であり、 $E = p_4 = m/\sqrt{1-v^2}$ なので、 $E\mathbf{v}$ は \mathbf{P} に等しくなるという意味である。
- 14) この単位系では長さ⁻¹=時間⁻¹=質量=エネルギーとなるため、すべてをエネルギーの単位 MeV あるいはそのべきで表すことができる。この単位系も自然単位系というが、電子の質量 m_e も 1 とした単位系を自然単位系ということが多い。
- 15) エルヴィン・シュレーディンガー (Erwin Schrodinger, 1887~1961) は、方程式に冠された他、シュレーディンガーの猫でも知られている。また、ハイゼンベルク (Werner K. Heisenberg, 1901~1976)、ディラック (P. A. M. Dirac, 1902~1984)、パウリと共に、量子力学構築に最も貢献した研究者としても知られている。
- 16) オスカー・クライン (Oskar Klein, 1894~1977)、ウォルター・ゴルドン (Walter Gordon, 1893~1939)。クラインは、ボーア学派の一員として研究に専念した後、ストックホルム大学で後進を育成した。彼の名に因んだ物理学用語は、この方程式以外、クライン-仁科の式、クラインのパラドックス、クライン変換、カルツァークライン理論がある。
- 17) トーマス (Llewellyn H. Thomas, 1903~1992) は、電子の自転に対して、相対論とコマ理論を用いて計算し、対応原理を加えてエネルギー準位を求めた (1927 年)。また、原子内多電子系における量子力学を近似的に解くための模型をフェルミ (1927 年) と独立に解いた (1926 年) ことでも知られている。これをトーマス-フェルミ模型という。
- 18) 第 6 項の係数は、 $(e/2m)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})$ である。
- 19) ファインマンは、L.L. Foldy の論文を文献として挙げている。“The Electro-Neutron Interaction”, Phys. Rev. **87** (1952) 693-696。フォルディは、この論文の直前頁に “The Electromagnetic Properties of Dirac Particles”, Phys. Rev. **87** (1952) 688-693 も掲載している。この論文の内容から、ファインマンがノートづくりに参考としたことが窺える。