

相対論的量子力学

2007.10.1-2008.1.28 坂井典佑

目次

1	相対論的波動方程式	1
1.1	(非相対論的) 量子力学の基本的仮定	1
1.2	(特殊) 相対性理論	2
1.2.1	光速と4元ベクトル	2
1.2.2	3次元空間回転	3
1.2.3	ローレンツ・ブースト	4
1.3	クライン・ゴールドン方程式	5
1.4	ディラック方程式	6
1.5	ワイル方程式	8
2	ディラック方程式の相対論的共変性	8
2.1	ガンマ行列	8
2.2	ディラック波動関数の共変性	9
2.2.1	ディラック波動関数の無限小変換行列	9
2.2.2	有限ローレンツ変換	10
2.2.3	ローレンツ共役スピノル	11
3	自由粒子に対するディラック方程式の解	12
3.1	静止粒子解	12
3.2	平面波解	12
3.3	射影演算子	13
3.4	電子と陽電子	14
3.5	電磁相互作用と荷電共役変換	15
4	電磁場の中でのディラック方程式	16
4.1	電磁相互作用	16
4.2	非相対論的近似 (シュレーディンガー近似)	17
5	水素型原子	18
5.1	球対称静電場のもとでのディラック方程式	18
5.2	軌道角運動量とスピン角運動量の合成: スピノル球関数	19
5.3	球対称静電場のもとでの波動関数	22
5.4	Coulomb ポテンシャルに対するディラック方程式	22
5.5	水素型原子のエネルギー準位	24
6	スカラー場の量子化	25
7	電磁場の量子化	27
7.1	マックスウェル (Maxwell) 方程式とゲージ不変性	27
7.2	自由電磁場の量子化	30

参考書

1. 西島和彦, "相対論的量子力学" 新物理学シリーズ 13, 培風館, 1973
2. 坂井典佑, "場の量子論" 裳華房フィジックスライブラリー, 裳華房, 2002
3. 坂井典佑, "素粒子物理学" 物理学基礎シリーズ 10, 培風館, 1993 (特に第一章)
4. ヴェ・ベレステッキー, イェ・リフシッツ, エリ・ピタエフスキー著, 井上健男訳, "相対論的量子力学 1" ランダウ・リフシッツ理論物理学教程, 東京図書, 1969
5. J.D. Bjorken, and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics", McGraw-Hill, 1965
6. J.D. Bjorken, and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Fields", McGraw-Hill, 1965

1 相対論的波動方程式

1.1 (非相対論的) 量子力学の基本的仮定

1. 系の状態は複素数である「波動関数」 ψ で記述される。またそれらの線形結合を作っても波動関数として可能なものとなる。すなわち、重ね合わせができる。数学的に言えば、波動関数全体が線形ベクトル空間を成す。
2. 「力学変数の測定」のような操作は、波動関数から情報を得てくる操作なのだから、「力学変数はすべて、波動関数に作用する演算子で表わされる。」力学変数の例としてはエネルギー・運動量・座標等がある。
3. 「個々の測定で得られる測定値はその測定している力学変数を表わす演算子 Ω の固有値 ω_n である。」

$$\Omega u_n = \omega_n u_n \quad (1.1)$$

演算子の性質によって固有値は連続スペクトルになるものと、離散スペクトルになるものがある。観測値が実数になるためには、演算子はエルミートでなければならない。

$$\Omega^\dagger = \Omega \quad (1.2)$$

4. 不確定性原理で表わされているように、粒子の座標と運動量のように同時に正確に観測できない力学変数もある。3. に従うと、同時に観測できる量は同時固有関数が作れるような演算子で表わされていなければならない。すなわち、互いに交換するような演算子である。そこで、系の状態を完全に指定するのに必要かつ十分な力学変数の組があると仮定する。すなわち、「同時観測可能量の完全な組を選んで、それらの固有値を指定することによって状態は完全に決まる。」と仮定する。一次元で運動する粒子では、エネルギー E とか、運動量 p とか、座標 x 等のうち一つをとれば十分である。この仮定をさらに正確に定式化すると次のようになる。同時観測可能量の完全な組の固有値を指定するラベルを n とし、その固有値に対応する固有関数を u_n とする。「任意の波動関数 ψ は同時観測可能量の完全な組 Ω の固有関数 u_n で展開できる。」すなわち、「同時観測可能量の完全な組の固有関数は完全系を成す。」というのがここでの仮定である。

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \sum_n a_n(t) u_n(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

ここで、展開係数を a_n とした。

5. 同時観測可能量の完全な組の固有関数系を正規直交系にとっておくとう便利である。このとき「観測可能量 Ω の測定でその固有値 ω_n が得られる確率は ω_n に対する固有関数 u_n の係数を a_n として、 $|a_n(t)|^2$ で与えられる。」実際、正規直交系にしてあると全確率が 1 になる。

$$\sum_n |a_n|^2 = 1.$$

従って、観測可能量 Ω の期待値 $\langle \Omega \rangle$ は

$$\langle \Omega \rangle (t) = \sum_n |a_n(t)|^2 \omega_n = \int dx \psi^*(x, t) \Omega \psi(x, t). \quad (1.4)$$

で与えられる。

6. さらにこれらの仮定に付け加えて、系の時間発展を与える方程式が必要である。非相対論的な量子力学ではシュレーディンガー方程式で与えられる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = H\psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \mathbf{x}) + V(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}). \quad (1.5)$$

時刻 t で粒子が位置 \mathbf{x} に存在する確率密度 $\rho(t, \mathbf{x})$ は

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \psi^*(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) \quad (1.6)$$

で与えられる。時刻 t での波動関数 $\psi(t, \mathbf{x})$ が与えられると、後の時刻での波動関数はシュレーディンガー方程式で一意的に予言される。最初の時刻で全確率が 1 になるように波動関数の規格化を決めたとき、後の時刻での波動関数についても、全確率が 1 でなければならない。これを確率の保存と呼ぶ。これを保証するのは、次のような確率の保存則の微分形である。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{x})}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad \text{div } \mathbf{j} \equiv \nabla \cdot \mathbf{j} \quad (1.7)$$

ここで確率の流れ \mathbf{j} は次のような 3 成分ベクトルである。

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi) \quad (1.8)$$

問題 1.1. シュレーディンガー方程式 (1.5) を用いて、確率の保存則の微分形 (1.7) を証明せよ。

1.2 (特殊) 相対性理論

1.2.1 光速と 4 元ベクトル

光速 c はどの慣性系でも同一である。

$$c = 2.99792458 \times 10^{10} \text{ cm/s} \quad (1.9)$$

エネルギー E の 2 乗と運動量 p (に光速 c を掛けたもの) の 2 乗との差はどの慣性系で観測しても同じになる。

$$E^2 - (pc)^2 = m^2 c^4 \quad (1.10)$$

これをまとめて 4 成分ベクトルと考え、4 元運動量と呼ぶ。

$$p^\mu = (p^0, \mathbf{p}) \equiv \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (1.11)$$

時間座標と空間座標などもまとめて 4 元ベクトルと考える方が都合がよい。次元が同じになるように、時間座標に光速 c を掛けた量を 4 元座標の第 0 成分とする。

$$x^\mu = (x^0, \mathbf{x}) \equiv (ct, \mathbf{x}) \quad (1.12)$$

従って、4次元積分 d^4x と書いたときは4元座標についての積分であって、時間座標での積分を用いる場合は3次元積分 d^3x を別個に分離して表記する。

$$d^4x \equiv dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 = c dt d^3x. \quad (1.13)$$

一般に、時間方向(0)と空間方向($i = 1, 2, 3$)とをひとまとめにして4元ベクトルと考えるとき、添え字はギリシャ文字 $\mu, \nu, \dots, (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3)$ などと表わす。4元ベクトル $A^\mu = (A^0, A^i)$ と $B^\mu = (B^0, B^i)$ の内積は通常の内積と異なり、時間成分の積と空間成分の積の符号を逆にして加えたものとして定義する。

$$A \cdot B = A^0 B^0 - A^1 B^1 - A^2 B^2 - A^3 B^3 \quad (1.14)$$

上付きの添え字に対して下付きの添え字を持った4元ベクトルは空間成分の符号を変えたものと定義する

$$A_\mu = (A_0, A_i) = (A^0, -A^i) \quad (1.15)$$

こうすると内積は常に上付きの添え字と下付きの添え字との間にとることにすれば通常の内積となる。

$$A \cdot B = \sum_{\mu=0}^3 A^\mu B_\mu = A^0 B_0 + A^1 B_1 + A^2 B_2 + A^3 B_3 \quad (1.16)$$

また行列の記法を用いれば、計量行列と呼ばれる4行4列の行列 $\eta_{\mu\nu}$ を導入して次のようにも表わせる。

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \eta^{\mu\nu} \quad (1.17)$$

$$A \cdot B = A^\mu \eta_{\mu\nu} B^\nu = A_\mu \eta^{\mu\nu} B_\nu \quad (1.18)$$

簡単化のために、この式では添え字を繰り返した量の積は添え字について和を取っているというアインシュタインの規約を用いている。以下では特に断わらない限りこの規約に従う。

1.2.2 3次元空間回転

回転を表すには、空間成分だけ考えればよい。空間成分を $i, j, k, \dots = 1, 2, 3$ で表す。ある系での微小に異なる2点間の座標の差 dx^i は、回転した系での座標の差 dx'^i との間に次のような関係があるとする。

$$dx'^j = a^j_k dx^k \quad (1.19)$$

回転した座標系でも距離の大きさは変わらないから、

$$(dx'^j)^2 = (dx^k)^2 \rightarrow a^j_l a^j_k = \delta_{lk} \quad (1.20)$$

という条件が得られる。したがって、

$$a^t_a = 1 \rightarrow \det a = \pm 1 \quad (1.21)$$

特に行列式が $\det a = +1$ の場合、この行列全体は $SO(3)$ という群になる。

この $SO(3)$ は空間反転などを含まない純粹の回転なので、無限小回転を積み重ねて得ることができる。そこで、 $\Delta\theta^j_k$ という角度で表される無限小回転を考える。

$$a^j_k = \delta^j_k + \Delta\theta^j_k \quad (1.22)$$

$$a^j_k a^j_l = \delta_{kl} \rightarrow \Delta\theta^l_k = -\Delta\theta^k_l \quad (1.23)$$

3軸周りの角度 θ だけの回転では、第3軸の成分は変わらず、第1,2軸成分だけが変化するので、 $\Delta\theta \equiv \Delta\omega^1{}_2$ とすると、

$$\Delta\theta^1{}_2 = -\Delta\theta^2{}_1 \equiv d\theta \quad (1.24)$$

$$a(d\theta)^j{}_k = 1 + d\theta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

$$\frac{da(\theta)}{d\theta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} a(\theta) \quad (1.26)$$

これを積分すると

$$a(\theta)^j{}_k = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

が得られる。4次元(時空)ベクトルに対する回転行列として表すと、時間成分は不変なので、

$$a(\theta)^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

となる。

1.2.3 ローレンツ・ブースト

二人の観測者が互いに等速直線運動している場合を考えるには、時間も含めた4次元座標の間の変換を考える必要がある。ある慣性系で測定した微小に異なる2点の座標の差 dx^μ は、異なる慣性系で測定した座標の差 dx'^μ との間に次のような関係がある。

$$dx'^\mu = a^\mu{}_\nu dx^\nu \quad (1.29)$$

特殊相対性理論は、光の速度はどの慣性系で測定しても同じであるという実験事実に基づいている。したがって、

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (1.30)$$

$$ds^2 = ds'^2 \rightarrow a^\mu{}_\lambda \eta_{\mu\nu} a^\nu{}_\rho = \eta_{\lambda\rho} \quad (1.31)$$

$$a^t{}_\eta a = \eta \rightarrow \det a = \pm 1 \quad (1.32)$$

特に行列式が+1の場合の行列は、無限小変換を積み重ねて実現できる場合であり、 $SO(1,3)$ という群になる。

問題 1.2.3.

1軸方向のローレンツ・ブーストを前節の回転の場合と同様にして求めよ。

1. 無限小ローレンツ・ブースト $d\omega \equiv -\Delta\omega^0{}_1$ を表す行列を求めよ。
2. 少しずつローレンツ・ブーストを積み重ねていくことで有限のローレンツ・ブーストにするために、(1.25), (1.26)を参考にして、微分方程式を求めよ。

3. この微分方程式を積分して有限の大きさ ω のローレンツ・ブーストが次の行列で与えられることを示せ．

$$a(\omega)^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \cosh\omega & -\sinh\omega & 0 & 0 \\ -\sinh\omega & \cosh\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

ここで現れたパラメータは、二つの慣性系間の相対運動の速度 v との間次のような関係がある．

$$\tanh\omega = \beta \equiv \frac{v}{c}, \quad \cosh\omega = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \equiv \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(\frac{v}{c})^2}} \quad (1.34)$$

ここで得た結果から、ある慣性系で観測した 4 元運動量 p^μ などの 4 元ベクトル A^μ を、その慣性系に対して x 方向に速度 v で走っている別の慣性系の観測者から見たときに A'^μ という 4 元ベクトルとして見えたとする．この両者の関係は、次のローレンツ変換で与えられる．

$$\begin{pmatrix} A'^0 \\ A'^1 \\ A'^2 \\ A'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^0 \\ A^1 \\ A^2 \\ A^3 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \frac{v}{c}, \quad \gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (1.35)$$

この変換のもとで 4 元ベクトルの内積 (1.16) が不変となる．

1.3 クライン・ゴールドン方程式

非相対論ではポテンシャルエネルギーを V として、エネルギーは

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (1.36)$$

で与えられる．ポテンシャルがない ($V = 0$) 場合が自由粒子である．一方、相対性理論では、自由粒子のエネルギー E と運動量 p の間には

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = p^2 + m^2c^2 \quad (1.37)$$

というアインシュタインの関係式が成り立っている．

量子力学では、すべての力学変数は、それを観測するための操作、すなわち演算子に対応している．エネルギーと運動量を表す演算子は

$$E = \hbar\nu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p^j = \hbar k^j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (1.38)$$

実は、これらは相対論的な対称性を保つ形になっている．

$$\begin{aligned} p_0 &= p^0 = \frac{E}{c} = \frac{1}{c} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^0}, \\ p_j &= -p^j = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j} \end{aligned} \quad (1.39)$$

まとめると、

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv i\hbar \partial_\mu \quad (1.40)$$

実際、上付きの変数での微分を行うと、その微分演算子は下付きになる．たとえば、定数ベクトル V_ν と座標ベクトル x^ν の内積を微分すると

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} (x^\nu V_\nu) = V_\mu \quad (1.41)$$

非相対論的なエネルギーの式 (1.36) に現れる力学変数を演算子に置き換えて、波動関数 $\psi(t, \mathbf{x})$ に作用させると、シュレーディンガー方程式 (1.5) が得られる。一方、相対論的なアインシュタインの関係式 (1.37) に現れる力学変数を演算子に置き換えて、波動関数 $\phi(t, \mathbf{x})$ に作用させると

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \phi(t, \mathbf{x}) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}\right)^2 \phi(t, \mathbf{x}) + m^2 c^2 \phi(t, \mathbf{x}) \quad (1.42)$$

という形の微分方程式となる。この方程式は波動を表わしており、クライン (Klein)・ゴールドン (Gordon) 方程式と呼ばれている。

クライン・ゴールドン方程式 (1.42) を満たす波動関数 ψ, ϕ に対して、次のような内積が定義できる。

$$(\psi, \phi) = i \int d^3x [\psi^*(t, \mathbf{x}) \partial_0 \phi(t, \mathbf{x}) - \partial_0 \psi^*(t, \mathbf{x}) \phi(t, \mathbf{x})] \quad (1.43)$$

この被積分関数を第 0 成分 (時間成分) とする 4 元カレントベクトル j_μ を次のように定義できる。

$$j_\mu \equiv i(\psi^*(\partial_\mu \phi) - (\partial_\mu \psi^*)\phi) \quad (1.44)$$

問題 1.3.

クライン・ゴールドン方程式を用いて、(1.44) 式に定義したカレントが保存することを示せ。

$$\partial^\mu j_\mu = 0 \quad (1.45)$$

また、このカレントの保存則を用いて (1.43) 式に定義した内積が時間と共に変化しないことを示せ。

$$\frac{d}{dt}(\psi, \phi) = 0 \quad (1.46)$$

シュレーディンガー方程式の場合の確率の保存則 (1.7) を参考にするとよい。

一般にクライン・ゴールドン方程式には、正エネルギー解と負エネルギー解が必ず存在している。どちらを取るかによって、ここに定義した確率密度にはまだ符号を選ぶだけの不定性が残っているので、正エネルギー、負エネルギー解のどちらかの解に対しては、内積を正定値にできる。しかし、正エネルギー解に対して正定値になるように確率の流れの符号を選ぶと、負エネルギー解に対して負の確率密度となるので、結局このままではクライン・ゴールドン方程式を確率解釈の点で意味のあるものにはできない。場の量子論の立場に立って初めて、意味のある確率解釈ができるようになる。

1.4 ディラック方程式

シュレーディンガー方程式は時間微分について一階で、空間微分について二階の微分方程式であった。クライン・ゴールドン方程式は、アインシュタインの関係式を微分演算子の間の関係式ととらえ、時間についても二階の微分方程式にすることで、相対論的共変性を実現しようとしたものであった。これに対して、相対論的な変換性を正しく取り入れる為に、空間微分を一階にしようとするのが、ディラック (Dirac) の立場である。一般に二階の微分方程式を一階にするには、波動関数の成分を増やすと良い。連立微分方程式として一階であっても、余分に入れた成分を消去すると、二階の微分方程式が得られる。この二階の微分方程式として、クライン・ゴールドン方程式が得られるようになっていけばよい。波動関数が N 成分あるとしよう。

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(t, \mathbf{x}) \\ \psi_2(t, \mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

この波動関数を時間微分した結果は、波動関数そのものやその空間微分の線形結合になる場合を考える。これが1階の線形微分方程式である。微分方程式に現れる空間微分などの作用が波動関数の各成分にどのような割合で働くかを指定するために、4種類の N 行 N 列の行列 $\alpha^j, j = 1, 2, 3$ と β を導入する。その結果、質量 m の電子に対するディラック方程式は

$$\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{\hbar}{i} \alpha^j \frac{\partial}{\partial x^j} \psi(t, \mathbf{x}) + mc\beta \psi(t, \mathbf{x}) \quad (1.48)$$

であると仮定する。このディラック方程式の微分演算を二度繰り返すと、2階の微分方程式になる。これがアイシュタインの関係式を表わしていなければならないから、クラインゴルドン方程式に帰着しなければならない。

$$\begin{aligned} \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi &= \left(\frac{\hbar}{i} \alpha^j \frac{\partial}{\partial x^j} + mc\beta \right) \left(\frac{\hbar}{i} \alpha^k \frac{\partial}{\partial x^k} + mc\beta \right) \psi \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \right)^2 \psi + m^2 c^2 \psi. \end{aligned} \quad (1.49)$$

これが成り立つための必要十分条件は、行列 α^j と β とが互いに反交換し、自分自身との積が1になることである。

$$\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j = 2\delta^{jk}, \quad (1.50)$$

$$\alpha^j \beta + \beta \alpha^j = 0, \quad \beta^2 = 1. \quad (1.51)$$

ハミルトニアン固有値が実数であるためには、ハミルトニアンがエルミートでなければならない。そのための必要十分条件は行列 α^j, β がエルミートであることである。

$$\alpha^{j\dagger} = \alpha^j, \quad \beta^\dagger = \beta \quad (1.52)$$

問題 1.4.1. 行列 β, α^i には次の性質があることを示せ。

1. 固有値は+1または-1。(ヒント:(1.50)の $j = k$ の場合と,(1.51)の2番目の式を用いよ)
2. 対角線成分の和は零である。

$$\text{Tr} \alpha^i = \text{Tr} \beta = 0 \quad (1.53)$$

(ヒント:(1.51)の1番目の式に β を掛けてトレースをとり、トレースの中で行列をcyclicに動かせることを用いるとよい。また、 α^j を掛けて同じ議論をする)

これらの結果から、行列 β, α^j は偶数次元($N = \text{偶数}$)でなければならないことがわかる。

もっとも小さい次元は $N = 2$ の場合になる。角運動量 $1/2$ の場合の行列表現に登場するパウリスピン行列

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.54)$$

はエルミートで、互いに反交換し、自身の2乗は1になるので、 β, α^j の候補になる。一方、2行2列のエルミート行列は四つしか独立なものはなく、パウリ行列と単位行列の線形結合で表わせる。このように、 $N = 2$ では最大三つしか独立な反交換行列は存在しない。従って、 $N \geq 4$ でなければならない。

$N = 4$ の場合の行列を具体的に構成すると、たとえば、

$$\alpha^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

これをディラック・パウリ表現の行列と呼ぶ。

確率密度は4つの成分の寄与の和だから

$$\rho(t, \mathbf{x}) \equiv \psi^\dagger \psi \quad (1.56)$$

問題 1.4.2.

以下の式をディラック方程式を用いて証明せよ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + \frac{\partial}{\partial x^k} (c\psi^\dagger \alpha^k \psi) = 0 \quad (1.57)$$

この式は確率の保存則を表す . この保存則を 4 次元的に表すと ,

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (1.58)$$

となる . ただし , ここで , 確率の流れの第 0 成分 j^0 は確率密度に光速を掛けたものであり , 確率の流れを表す空間成分 j^k は

$$j^k \equiv c\psi^\dagger \alpha^k \psi, \quad j^0 \equiv c\psi^\dagger \psi, \quad j^\mu = (j^0, j^1, j^2, j^3) \quad (1.59)$$

1.5 ワイル方程式

$m = 0$ の場合 , 反可換な行列は三つしか要らないので , 2 行 2 列のパウリ行列で実現できる . すなわち , 波動関数は 2 成分でよい . このとき , 相対論的な波動方程式はワイル方程式と呼ばれる .

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sigma^j \frac{\partial}{\partial x^j} \psi(t, \mathbf{x}) = \sigma^j p^j c \psi(t, \mathbf{x}) \quad (1.60)$$

問題 1.5.

1. パウリのスピ行列が次の関係式を満たすことを確かめよ .

$$\sigma^j \sigma^k = \delta^{jk} + i\epsilon^{jkl} \sigma^l \quad (\sigma^j)^\dagger = \sigma^j \quad (1.61)$$

ここで ϵ^{jkl} とは完全反対称な数テンソルで

$$\epsilon^{123} = +1 \quad (1.62)$$

2. ディラック・パウリ表現の行列が (1.52) , (1.50) 及び (1.51) を満たすことを示せ .

2 ディラック方程式の相対論的共変性

2.1 ガンマ行列

行列 α^j, β の代わりに , 次のようなガンマ行列 γ^μ を考えた方が相対論的な変換性が見やすくなる .

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha^i. \quad (2.1)$$

時間成分 γ^0 はエルミートだが , 空間成分 γ^j は反エルミートであることに注意しよう .

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \quad \gamma^{j\dagger} = -\gamma^j \quad (2.2)$$

これらの行列 γ^μ もまた , 互いに反交換し , 2 乗すると恒等行列に比例するが , α^k と異なり , 空間成分が恒等行列の逆符号 -1 になる . この事実を (1.17) 式の計量行列 $\eta^{\mu\nu}$ を用いて表すことができる .

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \quad (2.3)$$

このガンマ行列を用いてディラック方程式を書き直すと

$$(\gamma^\mu i\hbar \partial_\mu - mc)\psi(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (2.4)$$

γ^5 という行列が有用である .

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (2.5)$$

この行列は 2 乗すると恒等行列 1 になり , 行列 γ^μ と反交換する .

$$\gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (\gamma^5)^2 = 1 \quad (2.6)$$

一般にガンマ行列はディラック・パウリ表現でのガンマ行列と必ずユニタリー行列で次のようにつながっている (ユニタリー同値) .

$$\gamma^\mu = U^\dagger\gamma_{DP}^\mu U \quad (2.7)$$

ガンマ行列は , ディラック・パウリ表現では具体的に

$$\gamma_{DP}^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_{DP}^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix}, \quad j = 1, 2, 3, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

ガンマ行列の代数 (2.3) を満たす行列を 2 行 2 列の行列を用いて直積として表現することができる . たとえばディラック・パウリ表現の行列は

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & \sigma^1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

$$\rho^1 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho^2 = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho^3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\gamma_{DP}^0 = \rho^3, \quad \gamma_{DP}^j = i\rho^2\sigma^j, \quad \beta_{DP} = \rho^3, \quad \alpha_{DP}^j = \rho^1\sigma^j \quad (2.11)$$

2.2 ディラック波動関数の共変性

2.2.1 ディラック波動関数の無限小変換行列

ディラックの波動関数は多成分だから , 座標系を変えた時に , ベクトルと同じように , 波動関数の成分が一般に混じり合う可能性がある . ローレンツ変換のもとでディラック波動関数が次のように変換したとしよう .

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x') = S(a)\psi(x), \quad x' = ax \quad (2.12)$$

逆変換の場合を考えると

$$\psi(x) = S(a^{-1})\psi'(x'), \quad x = a^{-1}x' \quad (2.13)$$

したがって , 波動関数の変換行列 S の間には次の関係がある .

$$S(a^{-1}) = [S(a)]^{-1} \equiv S^{-1}(a) \quad (2.14)$$

このローレンツ変換のもとでディラック方程式の形が変わらないためには ,

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = a^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \quad (2.15)$$

$$(\gamma^\mu i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc)\psi(x) = 0 \rightarrow (\gamma^\mu i\hbar \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - mc)\psi'(x') = 0 \quad (2.16)$$

左から $S^{-1}(a)$ を掛けると

$$\rightarrow a^\nu{}_\mu \gamma^\mu = S^{-1}(a)\gamma^\nu S(a) \quad (2.17)$$

無限小ローレンツ変換 $a^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \Delta\omega^\mu{}_\nu$ を行ったときの , 波動関数に対するディラック生成子行列を $\sigma_{\mu\nu}$ とすると ,

$$S(a) = 1 - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\Delta\omega^{\mu\nu}, \quad \sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu} \quad (2.18)$$

(2.17) 式はこの場合には,

$$2i(\delta^\nu_\alpha \gamma_\beta - \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) = [\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] \quad (2.19)$$

となり, この解は

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad (2.20)$$

問題 2.2.1.

1. (2.20) 式の行列が, (2.19) 式を満たすことを確かめよ.
2. ディラック・パウリ表現では具体的に無限小変換の行列が以下のようになることを示せ.

$$\sigma_{jk} = \sigma^{jk} = \epsilon_{jkl} \begin{pmatrix} \sigma^l & 0 \\ 0 & \sigma^l \end{pmatrix} \quad \sigma_{0j} = -\sigma^{0j} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^j \\ -i\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

2.2.2 有限ローレンツ変換

12 平面内の回転を無限小回転を積み重ねて構成する. 回転角 ω での回転行列 $a(\omega)$ に, さらに微小回転 $d\omega = \Delta\omega^{12} = -\Delta\omega^{12}$ を加えると

$$a(\omega + d\omega) = a(d\omega) \cdot a(\omega) \quad (2.22)$$

$$S(a(\omega + d\omega)) = S(a(d\omega)) \cdot S(a(\omega)) \quad (2.23)$$

$$\frac{dS(a(\omega))}{d\omega} = \frac{i}{2}\sigma_{12}S(a(\omega)) \quad (2.24)$$

$$(\sigma_{12})^2 = +1 \rightarrow S(a(\omega)) = \exp\left(\frac{i}{2}\sigma_{12}\omega\right) = \cos\frac{\omega}{2} + i\sigma_{12}\sin\frac{\omega}{2} \quad (2.25)$$

12 平面内の回転の無限小生成子が (スピン) 角運動量の 3 軸成分 S_3 だから,

$$S_3 = \hbar\frac{\sigma_{12}}{2} \quad (2.26)$$

もしも 12 平面内で 2π だけ回転すれば, 本来元に戻るはずだが, ディラック波動関数は符号が逆になる.

$$S(\omega = 2\pi) = \cos\pi = -1 \quad (2.27)$$

したがって, 4π 回転して波動関数は元に戻る. これは角運動量が奇数の半分である場合に起こることで, 二価表現とも呼ぶ.

$$\psi(r, \theta, \phi + 2\pi) = S(\omega = 2\pi)\psi(r, \theta, \phi) = -\psi(r, \theta, \phi) \quad (2.28)$$

ローレンツ・ブーストの場合は, 1 軸方向への微小変換が $d\omega = -\Delta\omega^{01} = \Delta\omega^{01}$ なので,

$$\frac{dS(a(\omega))}{d\omega} = -\frac{i}{2}\sigma_{01}S(a(\omega)) \quad (2.29)$$

$$(\sigma_{01})^2 = -1 \rightarrow S(a(\omega)) = \exp\left(-\frac{i}{2}\sigma_{01}\omega\right) = \cosh\frac{\omega}{2} - i\sigma_{01}\sinh\frac{\omega}{2} \quad (2.30)$$

このローレンツ・ブーストの場合は, 無限小変換の行列 $\sigma_{01}/2$ がエルミートでないので, 変換行列 $S(a(\omega))$ はユニタリー行列ではないことに注意しよう.

これらの変換によって, ディラック方程式 (2.4) が異なる慣性系にいる観測者から見て同じ形になるということを確認することができる. このように, 異なる慣性系で見ても同じ形になることを相対論的に共変であるという.

2.2.3 ローレンツ共役スピノル

前節で見たように、空間回転は 4 行 4 列のユニタリー行列で表わされているが、ローレンツ・ブーストはユニタリー行列ではない。従って、波動関数のエルミート共役を作ってもローレンツ・ブーストのもとではよい変換性を示さない。相対論的共変性を見やすくするには波動関数の複素共役ではなく、複素共役をとった上で転置し、さらに行列 γ^0 を右から掛けたものが重要な役割を果たす。得られたものは横に 4 成分並んだ波動関数で、 ψ の上に横線を付けて表わす。

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*) \quad (2.31)$$

無限小ローレンツ変換の行列はエルミートなものと、反エルミートなものがあるが、いずれに対しても、次の性質が成り立つ。

$$\sigma_{jk}^\dagger = \sigma_{jk}, \quad \sigma_{0j}^\dagger = -\sigma_{0j}, \quad \gamma^0 \sigma_{\mu\nu}^\dagger \gamma^0 = \sigma_{\mu\nu} \quad (2.32)$$

有限な (微小でない) ローレンツ変換 S について、次の性質が成り立つ。

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = S^{-1} \quad (2.33)$$

したがって、 $\bar{\psi}$ はローレンツ変換のもとで次のように逆行列で変換する。

$$\bar{\psi}'(x') = \psi'^\dagger(x') \gamma^0 = \psi^\dagger(x) S^\dagger \gamma^0 = \psi^\dagger(x) \gamma^0 S^{-1} = \bar{\psi}(x) S^{-1} \quad (2.34)$$

したがって、この横 4 成分の波動関数 $\bar{\psi}$ の右側に縦 4 成分の波動関数 ψ を行列の意味で掛け合わせて作った量はローレンツ変換を施しても不変である。すなわちどの慣性系で見ても同じ値を示す。このような量をスカラー量と呼ぶ。同様にベクトルの脚 μ を持つ行列 γ^μ を間にはさんだ量は、ローレンツ変換のもとで 4 元運動量などと同様にベクトルとして変換する。より一般に、ガンマ行列を用いて二つのディラック波動関数 ψ_1, ψ_2 の 2 次形式を作る (2 次形式を書いたときのディラック波動関数の添え字 1, 2, ... は異なる波動関数の区別をするためのインデックスである)。ローレンツ変換のもとで、この 2 次形式と同じ変換性を示す量を、4 元ベクトル A^μ, B^μ, \dots から構成して対応させてみると

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1 \psi_2 &\Leftrightarrow A \cdot B && \text{スカラー,} \\ \bar{\psi}_1 \gamma^\mu \psi_2 &\Leftrightarrow A^\mu && \text{ベクトル,} \\ \bar{\psi}_1 \gamma^\mu \gamma^\nu \psi_2 &\Leftrightarrow A^\mu B^\nu && \text{テンソル} \end{aligned} \quad (2.35)$$

ローレンツ変換のもとでの変換性の面から、ディラック波動関数として用いられる ψ や $\bar{\psi}$ を特徴付けた場合、これらの波動関数はスピノルと呼ばれている。よりくわしくいうと、 ψ をスピノル、 $\bar{\psi}$ をローレンツ共役スピノルと呼ぶ。

最小作用の原理によれば、作用を最小にする軌跡が実際に実現する運動である。すなわち運動方程式は、作用を変分することによって得られる。ここに導入したローレンツ共役スピノルを用いるとディラック方程式を導く作用を簡単に書き下すことが出来る。

$$S_{Dirac} = \int d^4x \bar{\psi}(x) (i\hbar \partial_\mu \gamma^\mu - mc) \psi(x) \quad (2.36)$$

ディラック波動関数 $\bar{\psi}$ についてこの作用を変分すると、ディラック方程式になっている。また、この作用には次のような不変性がある。

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha} \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = e^{-i\alpha} \bar{\psi} \quad (2.37)$$

$$S_{Dirac} \rightarrow S'_{Dirac} = \int d^4x \bar{\psi}'(x) (i\hbar \partial_\mu \gamma^\mu - mc) \psi'(x) = S_{Dirac} \quad (2.38)$$

この変換の微小変換を考えると、この不変性が確率保存 (粒子数保存) に対応していることが分かる。

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x})) = 0 \quad (2.39)$$

3 自由粒子に対するディラック方程式の解

3.1 静止粒子解

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta mc^2 \psi \quad (3.1)$$

波動方程式が4成分だから, エネルギーが E で, 運動量が p の固有状態としては四つの独立な解 ($j = 1, \dots, 4$) が存在する.

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4, \\ \psi(t, \mathbf{x}) = w(p) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar} + i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right). \quad (3.2)$$

4成分の波動関数 $w(p)$ は具体的にディラック方程式を解くことによって与えられる. ディラック粒子が静止している座標系では解は特に簡単で, 独立な解は四つあるが, その内二つは正エネルギー解である.

正エネルギー解

$$\psi^1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-i \frac{mc^2}{\hbar} t}, \quad \psi^2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-i \frac{mc^2}{\hbar} t} \quad (3.3)$$

負エネルギー解

$$\psi^3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{i \frac{mc^2}{\hbar} t}, \quad \psi^4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{i \frac{mc^2}{\hbar} t} \quad (3.4)$$

$$\psi^r(x) = w^r(\mathbf{p}=0) e^{-i \epsilon_r \frac{mc^2}{\hbar} t}, \quad \epsilon_r = \begin{cases} +1 & r = 1, 2 \\ -1 & r = 3, 4 \end{cases} \quad (3.5)$$

ふたつの正(負)エネルギー解の違いは, スピン角運動量の向きの違いである. 3軸方向の角運動量 S_z は(2.26)式で与えられている. ディラック・パウリ表示では

$$\sigma_{jk} = \epsilon_{jkl} \times \begin{pmatrix} \sigma^l & 0 \\ 0 & \sigma^l \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

となるので, 上の4つの解のスピン角運動量の第3成分は

$$w^1, w^3, S_z = +\frac{\hbar}{2}, \quad w^2, w^4, S_z = -\frac{\hbar}{2} \quad (3.7)$$

3.2 平面波解

静止系(座標 x^μ) に対して速度 $-v$ で動いている慣性系(座標 x'^μ) で見ると速度 v で動いているディラック粒子の波動関数 $\psi'(x')$ が得られる.

$$\psi'(x') = S(\omega(-v)) \psi(x) \quad (3.8)$$

$$\exp(-i \epsilon_r \frac{mc^2}{\hbar} t) = \exp(-i \epsilon_r \frac{p_\mu x'^\mu}{\hbar}) \quad (3.9)$$

$$S(\omega(-v)) = e^{-\frac{i}{2} \omega \sigma_{01}}, \quad \tanh \omega = -\frac{v}{c} \quad (3.10)$$

$$\psi'^r(x') = w^r(\mathbf{p}) e^{-i \epsilon_r \frac{p_\mu x'^\mu}{\hbar}}, \quad \sigma_{01} = -i \alpha^1 = -i \rho^1 \sigma^1 \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned}
w^r(\mathbf{p}) &= e^{-\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}}w^r(\mathbf{p}=0) \\
&= \left(\cosh \frac{\omega}{2} - \alpha^1 \sinh \frac{\omega}{2} \right) w^r(\mathbf{p}=0) \\
&= \cosh \frac{\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -\tanh \frac{\omega}{2} \\ 0 & 1 & -\tanh \frac{\omega}{2} & 0 \\ 0 & -\tanh \frac{\omega}{2} & 1 & 0 \\ -\tanh \frac{\omega}{2} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&\quad \times w^r(\mathbf{p}=0)
\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$-\tanh \frac{\omega}{2} = \frac{-\tanh \omega}{1 + \sqrt{1 - \tanh^2 \omega}} = \frac{\frac{mvc}{\sqrt{1-(v/c)^2}}}{\frac{mc^2}{\sqrt{1-\tanh^2 \omega}} + mc^2} = \frac{pc}{E + mc^2} \tag{3.13}$$

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2} \tag{3.14}$$

$$\cosh \frac{\omega}{2} = \sqrt{\frac{\cosh \omega + 1}{2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \tag{3.15}$$

結局，ディラック方程式の一般解は

$$\psi^r(x) = w^r(\mathbf{p})e^{-i\epsilon_r(p_\mu x^\mu/\hbar)} \tag{3.16}$$

得られた波動関数はディラック方程式を満たすので，

$$(p_\mu \gamma^\mu - \epsilon_r mc)w^r(\mathbf{p}) = 0, \quad \bar{w}^r(\mathbf{p})(p_\mu \gamma^\mu - \epsilon_r mc) = 0 \tag{3.17}$$

波動関数の規格化はローレンツ変換のもとで不変な内積をとれば，静止系で求めたものと同じになるので，

$$\bar{w}^r(\mathbf{p})w^{r'}(\mathbf{p}) = \delta_{rr'}\epsilon_r \tag{3.18}$$

一方， ψ^\dagger との内積はローレンツ変換のもとで不変ではない．この値は実際に得られた解について求めてみることできるが，もっと容易な方法としては，静止系での値は容易に求められることと，ローレンツ変換のもとでベクトル量としてふるまうことに着目すると，

$$(w^r(\epsilon_r \mathbf{p}))^\dagger w^{r'}(\epsilon_r \mathbf{p}) = \delta_{rr'} \frac{E}{mc^2} \tag{3.19}$$

であることがわかる．また，4元運動量 p^μ を与えた時にディラック方程式の解は4個独立なものがあり，上で与えた解は完全系をなしている．

$$\sum_{r=1}^4 \epsilon_r w_\alpha^r(\mathbf{p}) \bar{w}_\beta^r(\mathbf{p}) = \delta_{\alpha\beta} \tag{3.20}$$

これも直接示してもよいが，次のように考えるともっと容易である．静止系 $\mathbf{p}=0$ でこの式が成り立つことは，解 (3.3)-(3.4) から直ちに分かる．これに左から $S(\omega(\mathbf{p}))$ ，右から $S(\omega(\mathbf{p}))^{-1}$ を掛けると $\mathbf{p} \neq 0$ の場合が得られる．この時，右辺はすでに単位行列だから $S \cdot S^{-1} = 1$ となって上の式が示せたことになる．

3.3 射影演算子

射影演算子 P_r とは，

$$P_r P_{r'} = P_r \delta_{rr'} \tag{3.21}$$

ディラック方程式を満たす波動関数に作用する場合は，

$$(p_\mu \gamma^\mu - mc)(p_\mu \gamma^\mu + mc) = (p_\mu \gamma^\mu - mc)(p_\mu \gamma^\mu + mc) = p^2 - (mc)^2 = 0 \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
(\pm p_\mu \gamma^\mu + mc)(\pm p_\mu \gamma^\mu + mc) &= (p_\mu \gamma^\mu)^2 \pm 2p_\mu \gamma^\mu mc + (mc)^2 \\
&= p^2 \pm 2p_\mu \gamma^\mu mc + (mc)^2 = 2mc(\pm p_\mu \gamma^\mu + mc)
\end{aligned}
\tag{3.23}$$

だから、ディラック方程式を満たす 4 元運動量 p^μ の粒子の波動関数にたいして、次の演算子 $\Lambda_\pm(\mathbf{p})$ ($\Lambda_\pm(\mathbf{p})$) は正 (負) エネルギー状態への射影演算子となる。

$$\Lambda_\pm(\mathbf{p}) = \frac{\pm p_\mu \gamma^\mu + mc}{2mc}
\tag{3.24}$$

スピンの向きが z 軸の正の向きの射影演算子 $\frac{1+\sigma_z}{2}$ は、スピンの方向を表わす 4 元単位ベクトルが $s^\mu = (0, 0, 0, 1)$ というベクトルになったものである。静止系 $p^\mu = (E/c, 0, 0, 0)$ で考えると容易に分かるように、スピンの向きを表わす単位ベクトルは 4 元運動量ベクトルと直交する。

$$s^\mu p_\mu = 0
\tag{3.25}$$

これを、 s^μ という 4 元ベクトルで表わされる一般の方向への射影演算子 $\Sigma(s)$ に一般化できる。

$$\begin{aligned}
\frac{1 + \sigma_z}{2} &= \frac{1 + i\gamma^1\gamma^2}{2} = \frac{1 + \gamma_5\gamma_3\gamma^0}{2} \\
\rightarrow &= \frac{1 + \gamma_5 s^\mu \gamma_\mu \gamma^0}{2} \equiv \Sigma(s), \quad s^\mu p_\mu = 0
\end{aligned}
\tag{3.26}$$

3.4 電子と陽電子

電子はスピン $\frac{1}{2}$ で電荷 $-e$ を持つ粒子である。ここで e は素電荷と呼ばれ、電子の電荷の絶対値である。電子の質量は他の素粒子に比して比較的軽く、

$$m_e \approx 0.51099906(15)\text{MeV}/c^2
\tag{3.27}$$

量子力学はもともと非相対論的なシュレーディンガー方程式によって記述されていた。ディラックは、1928 年にシュレーディンガー方程式に代わる相対論的波動方程式を提案した。これがディラック方程式である。質量 m_e の電子のエネルギー E と運動量 p の間には

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4
\tag{3.28}$$

というアインシュタインの関係式が成り立っている。この関係式を運動量 p に対してエネルギー E を決める方程式と見て解くと、明らかにこの関係式には正エネルギー解と負エネルギー解とがある。

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad E = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}
\tag{3.29}$$

これらの解のうち、正エネルギー解はもともと目指していた通り、電子を記述している。

第 3.1 節で具体的にディラックの波動方程式の解を求めた。(3.2), (3.3), (3.4) 式に得たように、アインシュタインの関係式から示唆される通り、実際に負エネルギー解が生じる。アインシュタインの関係式は相対性理論の直接の帰結なので、その解として正エネルギー解と同時に負エネルギー解が得られることは相対性理論を考える限り、一般に避けられない問題である。もしもこのような負エネルギー解が物理的状態として本当に存在していると、次のように真空が不安定になる。エネルギーは保存しているから、もしも負エネルギー解の状態を作り出すと、残った系ではエネルギーが増えている。たとえば正エネルギー解の電子 1 個が負エネルギー解に遷移すると同時にいくつかの光子を生成して、二つの状態の差だけのエネルギーを放出することができる。この過程はいくらでも繰り返すことができる。このように、どんどん負エネルギー解に遷移する方がエネルギー的に有利となり、系が負エネルギー解の生成に対して不安定となってしまう。

この問題に対して、1930 年にディラックはホール (空孔, hole) 理論という解決を与えた。まず、自然界での経験法則として、スピンの半奇数の粒子は波動関数が反対称であり、フェルミ・ディラック統計に従

い、整数スピンの粒子は波動関数が対称であり、ボース・アインシュタイン統計に従うことに注意しよう*。ディラックは、電子はスピンの1/2だからフェルミ・ディラック統計に従う点に着目して、我々が「真空状態」と呼んでいるのは、ディラック方程式の負エネルギー解の状態がすべてつまっている状態であると提案した。これに対して、この状態にさらに正エネルギー解の電子が1個ある状態が1電子状態である。パウリの排他律に従って、フェルミ粒子は二つの粒子が同じ状態を占めることはできない。そうすると、負エネルギー状態はすべてつまっているから、この1電子状態から負エネルギー状態への遷移は起こらない。従って1電子状態は安定となる。外からエネルギーを与えると、負エネルギー状態につまっている電子の一つを正エネルギー状態に遷移させることが出来る。このとき、新しい正エネルギーの電子が生成されただけでなく、今までつまっていた負エネルギー解の状態に穴が空く。この穴は全部つまっていた状態を「真空状態」だとすると、運動量 p 、エネルギー $E = -\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ 、電荷 $-e$ の電子が1個足りないのだから、運動量 $-p$ 、エネルギー $E = +\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ で電荷が $+e$ の状態に見える。つまり、あたかも一つの粒子の状態のように見える。このような「ホール」(空孔)は一つの粒子状態である。この新しい粒子は質量 $m = \sqrt{E^2 - p^2c^2}/c^2$ が正エネルギー解と同じだが、電荷などのすべての(加法的に)保存する量が逆符号である。たとえば、電荷 q や粒子数、運動量、スピン S_z などすべて逆符号となる。このような粒子のことを反粒子と呼んでいる。先ほどの過程とちょうど逆に、空いている負エネルギー状態があって、そこへ正エネルギー電子が遷移することが電子と陽電子の対消滅である。負エネルギー解の状態の消滅(生成)を正エネルギーの反粒子の生成(消滅)と解釈するのである。

ディラックは、ディラック方程式とホール(空孔)理論とを提案することによって電子には反粒子があることを予言した。こうして予言された電子の反粒子は陽電子と呼ばれている。陽電子は実際に1932年にアンダーソン(C.D.Anderson)が宇宙線の中に電子と同じ質量で逆の電荷を持つ粒子を発見したことによって、見事に実験的に検証された。

3.5 電磁相互作用と荷電共役変換

ディラックのホール理論に従って、負エネルギー解は反粒子であると考え。そのために、粒子・反粒子の変換 C を荷電共役変換と呼ぶ。ディラック・スピノルに対して荷電共役変換を具体的に定義しておく。粒子が加法的に保存する量子数を持っていれば、反粒子の量子数は粒子の量子数と同じ大きさで逆符号となる。電荷という量子数を具体的に導入するために、電子と電磁場との相互作用を考えよう。その場合、次のように、微分演算子をベクトルポテンシャルに比例してシフトする形に置き換えることで、電磁相互作用を導入することができる。この置き換えをディラックの置き換えと呼び、これによって生じる相互作用の形を Minimal interaction という。電子の持つ電荷の絶対値 $e > 0$ を電荷の単位として考え、これを素電荷と呼ぶ。考えているディラック粒子が素電荷 e の Q 倍の電荷を持っているとして、この Q をその粒子の電荷と呼ぶことにする。電子の場合にはこの値は $Q = -1$ である。この場合の Minimal interaction は

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow p_\mu - eA_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - eA_\mu \quad (3.30)$$

電子に Minimal interaction を導入した場合に、電子のディラック方程式は

$$\left[\gamma^\mu i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right] \psi = 0 \rightarrow \left[\gamma^\mu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - eA_\mu \right) - mc \right] \psi = 0 \quad (3.31)$$

このように電磁場のポテンシャル A_μ はディラック方程式の微分項を通じて結合する。一般に電荷 Q の場合にディラック方程式は、

$$\left[i\hbar \left(\partial_\mu - i \frac{eQ}{\hbar} A_\mu \right) \gamma^\mu - mc \right] \psi(x) = 0 \quad (3.32)$$

反粒子の波動関数は複素共役をとった波動関数から得られるはずだが、どれだけ成分が混合するかは分からないから、荷電共役という物理的な意味が得られるように決めることにする。その成分の混合を表わす行列を C とすると

$$\psi^c \equiv C\bar{\psi}^T = C\gamma^{0T}\psi^* \quad (3.33)$$

*この事実は、相対論と量子力学とを両立させた場の量子論では、証明できる。

ここで複素共役スピノルの代わりに共役スピノル $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ の転置 (T) を用いて縦ベクトルにした．反粒子は電荷の符号が逆になるべきだから，反粒子のディラック方程式は

$$\left[i\hbar(\partial_\mu + i\frac{eQ}{\hbar}A_\mu)\gamma^\mu - mc \right] \psi^c(x) = 0 \quad (3.34)$$

である．(3.32) 式を満たす ψ に (3.33) 式の変換を施した結果，この方程式が得られる必要がある．そのための必要十分な条件は，ガンマ行列が荷電共役の混合行列 C によって次のように変換されることである．

$$C^{-1}\gamma^\mu C = -\gamma^{\mu T} \quad (3.35)$$

この行列 C はユニタリー行列にとることができる．

$$C^\dagger C = 1 \quad (3.36)$$

このような荷電共役行列 C の具体的な形はガンマ行列の具体的な表示によるが，ディラック・パウリ表示では

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

で与えられる．

問題 3.5.

1. 荷電共役変換したスピノルのローレンツ共役波動関数はもとの波動関数で次のように表されることを示せ．

$$\bar{\psi}^c = -\psi^T C^{-1} \quad (3.38)$$

2. ディラック波動関数の 2 次形式が荷電共役変換のもとの変換性が次のようになることを示せ．

$$\bar{\psi}_1^c \psi_2^c = -\psi_1^T \bar{\psi}_2^T \quad (3.39)$$

$$\bar{\psi}_1^c \gamma^\mu \psi_2^c = +\psi_1^T \gamma^{\mu T} \bar{\psi}_2^T \quad (3.40)$$

$$\bar{\psi}_1^c \gamma^\mu \gamma^\nu \psi_2^c = -\psi_1^T \gamma^{\mu T} \gamma^{\nu T} \bar{\psi}_2^T \quad (3.41)$$

$$\bar{\psi}_1^c \gamma^5 \psi_2^c = -\psi_1^T \gamma^{5T} \bar{\psi}_2^T \quad (3.42)$$

4 電磁場の中でのディラック方程式

4.1 電磁相互作用

電磁場との相互作用はディラックの置き換えによって与えられる．

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow p_\mu + eA_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \quad (4.1)$$

これを適用して，クライン・ゴールドン方程式と電磁場との相互作用を与えると，

$$\left[g^{\nu\mu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) - (mc)^2 \right] \psi = 0 \quad (4.2)$$

これがスピン 0 の粒子の電磁場との相互作用を与えている．

このスピン 0 粒子の場合の電磁場との相互作用と、ディラック 方程式の電磁場との相互作用を比較する。

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) - mc \right] \psi = 0 \quad (4.3)$$

この方程式にさらに微分演算子を作用させると、

$$\left[\gamma^\nu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) + mc \right] \left[\gamma^\mu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) - mc \right] \psi = 0 \quad (4.4)$$

となる。これに

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = \eta^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu} \quad (4.5)$$

を用いると

$$\begin{aligned} & \left[g^{\nu\mu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) - (mc)^2 \right. \\ & \left. - i\sigma^{\nu\mu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) \right] \psi = 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

反対称化された行列の係数は反対称部分しか効かないので、

$$\begin{aligned} & -i\sigma^{\nu\mu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) = -i\frac{\sigma^{\nu\mu}}{2} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu, i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right] \\ & = -i\frac{\sigma^{\nu\mu}}{2} (ie\hbar) \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} \right) \equiv \frac{1}{2} e\hbar \sigma^{\nu\mu} F_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (4.7)$$

ここで、電場と磁場をあわせて、4次元の2階反対称テンソルとして場の強さ $F_{\mu\nu}$ を定義した。

$$F_{\mu\nu} \equiv \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} \quad (4.8)$$

結局スピン 1/2 粒子を表すディラック方程式の電磁場との相互作用は

$$\left[g^{\nu\mu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} + eA_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + eA_\mu \right) - (mc)^2 + \frac{1}{2} e\hbar \sigma^{\nu\mu} F_{\nu\mu} \right] \psi = 0 \quad (4.9)$$

となり、スピン 0 粒子の場合に比して、最後の項が余分に付け加わっている。

4.2 非相対論的近似 (シュレーディンガー近似)

静的電磁場

$$\psi(t, \mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}, \quad u(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

$$\left[\left(\frac{E + e\Phi}{c} \right)^2 - (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - (mc)^2 + \frac{1}{2} e\hbar \sigma^{\nu\mu} F_{\nu\mu} \right] u = 0, \quad A^0 = \frac{\Phi}{c} \quad (4.11)$$

運動エネルギー W

$$W \equiv E - mc^2 \quad (4.12)$$

非相対論的近似

$$W \ll mc^2, \quad W + e\Phi \ll mc^2 \quad (4.13)$$

$$\left[2m(W + e\Phi) + \frac{(W + e\Phi)^2}{c^2} - (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - \frac{1}{2} e\hbar \sigma^{\nu\mu} F_{\nu\mu} \right] u = 0 \quad (4.14)$$

$(W + e\Phi)$ に比して $(W + e\Phi)^2$ を無視すると，シュレーディンガー方程式と同様の形に表わせて，

$$W u \simeq \left[\frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} - e\Phi - \frac{e\hbar}{4m} \sigma^{\nu\mu} F_{\nu\mu} \right] u \quad (4.15)$$

ディラック・パウリ表示でのガンマ行列を用いると，ローレンツ変換行列 $\sigma^{\nu\mu}$ は (2.21) 式のようにパウリ行列で与えられる．このパウリ行列と電場磁場に比例する項のうち，電場 F_{0j} に比例する行列 σ^{0j} は上成分 ϕ と下成分 χ を結び付ける．これに対して，磁場 F_{jk} に比例する行列 σ^{jk} は上成分 ϕ どうし，下成分 χ どうしを結び付ける．非相対論的極限では，正エネルギー解である上成分が主で，下成分は小さいから，上成分と下成分を結ぶ項は無視できて，

$$\begin{aligned} \sigma_{jk} F^{jk} &= \epsilon_{jkl} \sigma^l F^{jk} = 2\sigma^l \epsilon_{ljk} \partial^j A^k \\ &= -2\sigma^l \epsilon_{ljk} \partial_j A^k = -2\sigma^l (\text{rot}\mathbf{A})^l = -2\sigma^l B^l \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$W \phi \simeq \left[\frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} - e\Phi + \frac{e\hbar}{2m} \sigma^j B^j \right] \phi = 0 \quad (4.17)$$

一様静磁場では

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{x} \quad (4.18)$$

$$(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \simeq \mathbf{p}^2 + e(\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) \quad (4.19)$$

$$(\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{x}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) = \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \quad (4.20)$$

$$S^j = \frac{\hbar}{2} \sigma^j \quad (4.21)$$

$$W \phi \simeq \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2m} e(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \right] \phi = 0 \quad (4.22)$$

このように，磁場に対してそれに比例する磁気モーメントが軌道運動によって生じている．これはスピン 0 の粒子であるクライン・ゴルドン方程式の場合にもある．これに対して，ディラック方程式で記述されるスピン 1/2 粒子の場合には，スピンによって生じる余分な磁気モーメントが加わっている．特に，ディラック粒子の磁気モーメント μ は軌道運動の場合の倍の大きさの係数を持っている．軌道運動の場合に生じる磁気モーメントの比例係数との比を g -因子 g と呼ぶ．ディラック粒子の場合は g -因子 g が 2 である．

$$\mu^j = \frac{e\hbar}{2m} \sigma^j = \frac{e}{2m} 2S^j \equiv \frac{e}{2m} S^j \cdot g, \quad g = 2 \quad (4.23)$$

5 水素型原子

5.1 球対称静電場のもとでのディラック方程式

電場と磁場は 4 元ポテンシャルで次のように与えられる．

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \dot{\mathbf{A}}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5.1)$$

中心力の静電場に対する 4 元ポテンシャルは

$$A^\mu = \left(\frac{\Phi}{c}, \mathbf{A} \right), \quad \Phi = \Phi(r), \quad \mathbf{A} = 0 \quad (5.2)$$

$$H = \alpha^j p^j c + \beta mc^2 - e\Phi = H_0 + V, \quad V = -e\Phi \quad (5.3)$$

ディラック・パウリ表示では

$$H_0 = \rho^1 \sigma^j p^j c + \rho^3 mc^2, \quad H = \begin{pmatrix} mc^2 + V & \sigma^j p^j c \\ \sigma^j p^j c & -mc^2 + V \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

まず，多変数の微分方程式はそのままでは解けないので，保存量（運動の恒量）を求める必要がある．中心力ポテンシャル $V(r)$ は軌道角運動量 \mathbf{L} と交換する

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \quad [\mathbf{L}, V(r)] = 0 \quad (5.5)$$

しかし，ディラック方程式の微分を含む項とは交換しない．全ハミルトニアンと交換して保存するのは，次の全角運動量である．

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad [\mathbf{J}, H] = 0 \quad (5.6)$$

問題 5.1. 全角運動量が保存することを示せ．次のようにするとよい．

1. 軌道角運動量と全ハミルトニアンとの交換子 $[L^j, H]$ を求めよ．
2. この項を相殺するには，ディラック波動関数に対する回転の無限小生成子 σ_{kl} , $k, l = 1, 2, 3$ を (3.6) 式のように，ディラック・パウリ表示で考えて得られるスピン角運動量行列 σ^j を用いるとよい．

$$\sigma_{kl} = \epsilon_{klj}\sigma^j \quad (5.7)$$

全ハミルトニアンとの交換子 $[\sigma^j, H]$ を求めよ．

したがって，静電場の場合に同時対角化可能な量としては，エネルギー $H\psi = E\psi$ ，全角運動量 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ がある．さらに，上成分と下成分を区別するのに役立つ量として，パリティがある．

$$\psi'(x^0, -\mathbf{x}) = P\psi(x^0, \mathbf{x}) \quad (5.8)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \sigma^j = \begin{pmatrix} \sigma^j & 0 \\ 0 & \sigma^j \end{pmatrix}, \quad P = \eta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

だから，上成分と下成分の波動関数をこれらの固有状態にすると，角運動量の固有値は共通だが，パリティの固有値は逆符号となる．

$$J(\phi) = J(\chi), \quad J_z(\phi) = J_z(\chi), \quad P(\phi) = -P(\chi) \quad (5.10)$$

5.2 軌道角運動量とスピン角運動量の合成: スピノル球関数

軌道角運動量の固有関数：球関数

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]. \quad (5.11)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}. \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi), \\ L_z Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon(l, m) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (5.14)$$

$$\epsilon(l, m) = \begin{cases} (-1)^m, & m > 0, \\ 1, & m \leq 0. \end{cases} \quad (5.15)$$

角運動量を合成して全角運動量の固有関数を作る．

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (5.16)$$

角運動量の合成則によれば，ふたつの角運動量ベクトルが同じ向きに揃った場合から，逆向きに揃った場合まで，ひとつずつ小さな角運動量の大きさをもつ合成系の波動関数ができる．今考えている角運動量の大きさ l と $1/2$ との合成では， $l > 0$ ならば，合成系の全角運動量は $l + \frac{1}{2}$ と $l - \frac{1}{2}$ というふたつの場合がある．

$$l \otimes \frac{1}{2} = \left(l + \frac{1}{2} \right) \oplus \left(l - \frac{1}{2} \right) \quad (5.17)$$

しかし， $l = 0$ の場合には，合成してもスピン角運動量しかないので，全角運動量もスピン角運動量と同じく $j = 1/2$ だけである．

角運動量の z 成分がもっとも大きな値を持つ波動関数は軌道角運動量も，スピン角運動量もどちらも最大の z 成分を持つ場合だから，

$$\phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = Y_l^l \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_l^l \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \phi_{j,j}^{(+)}, \quad j = l + \frac{1}{2} \quad (5.18)$$

この波動関数に下降演算子 $J_- = L_- + S_-$ を作用させると同じ全角運動量で \hbar だけ z 成分の角運動量が小さな波動関数になる．具体的に実行するために必要な公式は

$$J_- \phi_{jj_z} = \hbar \sqrt{(j + j_z)(j + 1 - j_z)} \phi_{jj_z - 1} \quad (5.19)$$

$$L_- Y_l^m = \hbar \sqrt{(l + m)(l + 1 - m)} Y_l^{m-1} \quad (5.20)$$

$$S_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

最大の j_z を持つ波動関数 (5.18) に J_- を作用させて同じ $j = l + \frac{1}{2}$ で z 成分が \hbar だけ小さな波動関数を求めると，

$$\begin{aligned} \phi_{l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\frac{J_-}{\hbar} \right) \phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\frac{L_- + S_-}{\hbar} \right) Y_l^l \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\frac{L_-}{\hbar} Y_l^l \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + Y_l^l \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{2l} Y_l^{l-1} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + Y_l^l \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{2l} Y_l^{l-1} \\ Y_l^l \end{pmatrix} \quad (5.22) \end{aligned}$$

全角運動量の z 成分が $l - \frac{1}{2}$ となる波動関数には独立なものが二つある．このうち，全角運動量の大きさが $l + \frac{1}{2}$ の波動関数が上に求めたものである．これと直交するのが，もう一つの波動関数で，これは z 成分が $l + \frac{1}{2}$ の波動関数が他にないことから，全角運動量が $l - \frac{1}{2}$ の波動関数であることが分かる．

$$\begin{aligned} \phi_{l-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(Y_l^{l-1} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \sqrt{2l} Y_l^l \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} Y_l^{l-1} \\ -\sqrt{2l} Y_l^l \end{pmatrix} \equiv \phi_{j,j}^{(-)}, \quad j = l - \frac{1}{2} \quad (5.23) \end{aligned}$$

全角運動量 $l + \frac{1}{2}$ の波動関数のうちで， z 成分が最大になる波動関数が (5.18) であり，全角運動量 $l - \frac{1}{2}$ の波動関数のうちで， z 成分が最大になる波動関数が (5.23) である．したがって，これらの波動関数に下降演算子 $J_- = L_- + S_-$ を作用させるとすべての波動関数が得られる．その結果は，

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad l \geq 0, \quad \phi_{j,m}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2j}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+m} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{j-m} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

$$j = l - \frac{1}{2}, \quad l \geq 1, \quad \phi_{j,m}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+1-m} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{j+1+m} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

問題 5.2.

上に求めた (5.18) と (5.23) に下降演算子を作用させることによって, すべての波動関数を具体的に求めよ.

かくして得られた全角運動量の固有関数 $\phi_{j,m}^{(\pm)}$ をスピノル球関数と呼び, 以下のような性質がある.

$$\mathbf{J}^2 \phi_{j,m}^{(\pm)} = j(j+1)\hbar^2 \phi_{j,m}^{(\pm)} \quad (5.26)$$

$$J_z \phi_{j,m}^{(\pm)} = m\hbar \phi_{j,m}^{(\pm)} \quad (5.27)$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \phi_{j'm'}^{(\alpha')\dagger} \phi_{jm}^{(\alpha)} = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \delta_{\alpha'\alpha}, \quad \alpha, \alpha' = \pm \quad (5.28)$$

$$\begin{aligned} \hbar\sigma^k \cdot L^k \phi_{j,m}^{(\pm)} &= [\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \sigma^k \sigma^k] \phi_{j,m}^{(\pm)} \\ &= \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \phi_{j,m}^{(\pm)} \\ &= -\hbar^2 (1 + \kappa) \phi_{j,m}^{(\pm)} \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$\kappa = \begin{cases} -(l+1) = -(j + \frac{1}{2}) & j = l + \frac{1}{2} \\ l = j + \frac{1}{2} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.30)$$

このようにして構成された二つのスピノル球関数を結び付ける演算子が, $\sigma^k x^k / r$ であることが以下のようにして分かる. まず, この演算子が全角運動量と交換することを確かめる.

$$[L^j, x^k] = [\epsilon^{jlm} x^l p^m, x^k] = (-i\hbar) \epsilon^{jlk} x^l, \quad [\sigma^j, \sigma^k] = 2i\epsilon^{jkl} \sigma^l,$$

を用いると,

$$\begin{aligned} \left[J^j, \frac{\sigma^k x^k}{r} \right] &= \frac{\sigma^k}{r} [L^j, x^k] + \frac{\hbar}{2} [\sigma^j, \sigma^k] \frac{x^k}{r} \\ &= \frac{\sigma^k}{r} (-i\hbar) \epsilon^{jlk} x^l + \frac{\hbar}{2} 2i\epsilon^{jkl} \sigma^l \frac{\hbar x^k}{2r} = 0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

したがって, この演算子を作用させても全角運動量は変化しない.

$$\mathbf{J}^2 \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(\pm)} = \hbar^2 j(j+1) \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(\pm)}, \quad J_z \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(\pm)} = \hbar m \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(\pm)} \quad (5.32)$$

全角運動量の大きさと z 成分が j, m である波動関数は $\phi_{jm}^{(+)}$ と $\phi_{jm}^{(-)}$ の二つしかないので, $\frac{\sigma^k x^k}{r}$ を掛けた結果はそれらの線形結合になるはずである. 一方, この二つの波動関数を区別する量子数は, パリティである.

$$P \phi_{jm}^{(+)} = (-1)^{j-\frac{1}{2}} \phi_{jm}^{(+)}, \quad P \phi_{jm}^{(-)} = (-1)^{j+\frac{1}{2}} \phi_{jm}^{(-)} \quad (5.33)$$

演算子 $\frac{\sigma^k x^k}{r}$ のパリティ変換のもとでの変換性は,

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \rightarrow +\mathbf{L} \quad (5.34)$$

スピンは角運動量的一种だから, 角運動量と同じ変換性を持つので,

$$\sigma^k \rightarrow \sigma^k, \quad \frac{\sigma^k x^k}{r} \rightarrow -\frac{\sigma^k x^k}{r} \quad (5.35)$$

したがって, $\frac{\sigma^k x^k}{r}$ によって異なるパリティの波動関数に移ることになる.

$$\frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(-)} = c_{j,m}^{(-)} \phi_{j,m}^{(+)} \quad (5.36)$$

しかし, 両辺共に, 角運動量の最小の波動関数 $m = -j$ から昇降演算子 J_\pm によってすべての z 成分の値を持つ波動関数を構成できる. したがって, この比例定数は m によらない. この定数を具体的に求めるには, $m = -j$ について, 値を比べればよい. 具体的には, 天頂角 $\theta \approx 0$ 付近での値を比べると, $c_{j,m}^{(-)} = 1$ であることが分かる.

$$\phi_{j,m}^{(+)} = \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(-)}, \quad \phi_{j,m}^{(-)} = \frac{\sigma^k x^k}{r} \phi_{j,m}^{(+)} \quad (5.37)$$

5.3 球対称静電場のもとでの波動関数

$$\psi_{jm} = \begin{pmatrix} \frac{iG_j^+}{r}\phi_{jm}^{(+)} + \frac{iG_j^-}{r}\phi_{jm}^{(-)} \\ \frac{F_j^+}{r}\phi_{jm}^{(-)} + \frac{F_j^-}{r}\phi_{jm}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

$$P \begin{pmatrix} \frac{iG_j^+}{r}\phi_{jm}^{(+)} \\ \frac{F_j^+}{r}\phi_{jm}^{(-)} \end{pmatrix} = (-1)^{j-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{iG_j^+}{r}\phi_{jm}^{(+)} \\ \frac{F_j^+}{r}\phi_{jm}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (5.39)$$

$$P \begin{pmatrix} \frac{iG_j^-}{r}\phi_{jm}^{(-)} \\ \frac{F_j^-}{r}\phi_{jm}^{(+)} \end{pmatrix} = (-1)^{j+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{iG_j^-}{r}\phi_{jm}^{(-)} \\ \frac{F_j^-}{r}\phi_{jm}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

$$\psi_{jm}^l = \begin{pmatrix} \frac{iG_{lj}}{r}\phi_{jm}^l \\ \frac{F_{lj}}{r}\sigma^k x^k \phi_{jm}^l \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

$$P\psi_{jm}^l(x^0, \mathbf{x}) = (-1)^l \psi_{jm}^l(x^0, -\mathbf{x}) \quad (5.42)$$

$$\sigma^k a^k \sigma^l b^l = a^k b^k + i\sigma^k (\mathbf{a} \times \mathbf{b})^k \quad (5.43)$$

$$\begin{aligned} \sigma^k p^k &= \frac{\sigma^l x^l}{r} \frac{\sigma^m x^m}{r} \sigma^k p^k = \frac{\sigma^l x^l}{r^2} (x^k p^k + i\sigma^k (\mathbf{x} \times \mathbf{p})^k) \\ &= \frac{\sigma^l x^l}{r^2} \left(\frac{\hbar}{i} x^k \nabla^k + i\sigma^k L^k \right) = \frac{\sigma^l x^l}{r^2} \left(\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} + i\sigma^k L^k \right) \end{aligned} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} \sigma^k p^k \frac{f(r)}{r} \phi_{jm}^l &= \frac{\sigma^l x^l}{r^2} \left(\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} + i\sigma^k L^k \right) \frac{f(r)}{r} \phi_{jm}^l \\ &= \frac{\sigma^l x^l}{r^2} \left(\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} - i\hbar(1+\kappa) \right) \frac{f(r)}{r} \phi_{jm}^l \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \frac{f(r)}{r} - i\hbar(1+\kappa) \frac{f(r)}{r^2} \right) \frac{\sigma^l x^l}{r} \phi_{jm}^l \end{aligned} \quad (5.45)$$

$$E\psi = H\psi = \begin{pmatrix} mc^2 + V & \sigma^k p^k c \\ \sigma^k p^k c & -mc^2 + V \end{pmatrix} \psi \quad (5.46)$$

動径方向の波動関数に対するディラック方程式は

$$(E - mc^2 - V)G_{lj}(r) = \left(-\frac{dF_{lj}}{dr} + \frac{\kappa}{r} F_{lj}(r) \right) \hbar c \quad (5.47)$$

$$(E + mc^2 - V)F_{lj}(r) = \left(\frac{dG_{lj}}{dr} + \frac{\kappa}{r} G_{lj}(r) \right) \hbar c \quad (5.48)$$

5.4 Coulomb ポテンシャルに対するディラック方程式

$$V(r) = -e\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r} \quad (5.49)$$

$$\alpha \simeq \frac{1}{137} \quad (5.50)$$

原点の周りでのべき級数解を考えるために，原点での特異点の指数 γ を決める．

$$G_{lj}(r) = r^\gamma (a_0 + a_1 r + \dots), \quad (5.51)$$

$$F_{lj}(r) = r^{\gamma'} (b_0 + b_1 r + \dots) \quad (5.52)$$

動径方向の方程式 (5.47), (5.48) が成り立つためには, 両者の指数 γ, γ' が一致しなければならず, かつ,

$$Z\alpha a_0 = -(\gamma - \kappa)b_0, \quad Z\alpha b_0 = (\gamma + \kappa)a_0 \quad (5.53)$$

$g_0 \neq 0, f_0 \neq 0$ という解があるためには

$$\gamma^2 = \kappa^2 - (Z\alpha)^2 \quad (5.54)$$

$$\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} \quad (5.55)$$

次に無限遠での解のふるまいを調べる. 方程式は無限遠では

$$\begin{aligned} (E - mc^2)G_{lj}(r) &\simeq -\hbar c \frac{dF_{lj}(r)}{dr}, \\ (E + mc^2)F_{lj}(r) &\simeq \hbar c \frac{dG_{lj}(r)}{dr}, \\ r &\rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5.56)$$

F_{lj} を消去すると

$$(m^2 c^4 - E^2)G_{lj}(r) \simeq (\hbar c)^2 \frac{d^2 G_{lj}(r)}{dr^2}, \quad r \rightarrow \infty \quad (5.57)$$

$$\lambda \equiv \frac{\sqrt{m^2 c^2 - (E^2/c)^2}}{\hbar} \quad (5.58)$$

一般に $e^{\pm\lambda r}$ という二つの解の線形結合となるが, 無限遠での境界条件として, 波動関数は有界でなければならないから, 境界条件を満たすのは,

$$G, F \sim e^{-\lambda r} \quad (5.59)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{F_{lj}}{G_{lj}} = -\frac{\hbar\lambda}{E/c + mc} = -\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} \quad (5.60)$$

$$G_{lj}(r) = r^\gamma e^{-\lambda r} w_1 \quad (5.61)$$

$$F_{lj}(r) = -\frac{\hbar\lambda}{E/c + mc} r^\gamma e^{-\lambda r} w_2 \quad (5.62)$$

無次元変数を用いた方が便利なので, 動径方向の座標を変数変換して

$$x \equiv 2\lambda r \quad (5.63)$$

$$\frac{dw_1}{dx} - \frac{w_1 - w_2}{2} + \frac{1}{x}((\gamma + \kappa)w_1 + Aw_2) = 0 \quad (5.64)$$

$$\frac{dw_2}{dx} + \frac{w_1 - w_2}{2} + \frac{1}{x}((\gamma - \kappa)w_2 + Bw_1) = 0 \quad (5.65)$$

$$A \equiv \frac{Z\alpha\lambda\hbar}{E/c + mc}, \quad B \equiv \frac{Z\alpha\lambda\hbar}{E/c - mc} \quad (5.66)$$

$$w_1 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad w_2 = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \quad (5.67)$$

$$na_n - \frac{1}{2}(a_{n-1} - b_{n-1}) + (\gamma + \kappa)a_n + Ab_n = 0 \quad (5.68)$$

$$nb_n + \frac{1}{2}(a_{n-1} - b_{n-1}) + (\gamma - \kappa)b_n - Ba_n = 0 \quad (5.69)$$

両式の和を取ると,

$$\frac{a_n}{n + A + \gamma - \kappa} = -\frac{b_n}{n - B + \gamma + \kappa} \equiv c_n \quad (5.70)$$

$$\frac{c_n}{c_{n-1}} = \frac{n - 1 + \gamma + (A - B)/2}{n(n + 2\gamma)} \equiv \frac{n - 1 + a}{n(n - 1 + b)} \quad (5.71)$$

一般に，漸化式が次のように与えられる関数を合流型超幾何関数と定義する．

$$\frac{c_n}{c_{n-1}} = \frac{n-1+a}{n(n-1+b)} \quad (5.72)$$

すなわち合流型超幾何関数は具体的には次の級数で与えられる

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} \sum c_n x^n &= {}_1F_1(a; b; x) = 1 + \frac{a}{1 \cdot b} x + \frac{a(a+1)}{1 \cdot 2 \cdot b(b+1)} x^2 + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b)}{n!\Gamma(a)\Gamma(b+n)} x^n \end{aligned} \quad (5.73)$$

この級数解表示の収束性は $n \rightarrow \infty$ で

$$\frac{c_n}{c_{n-1}} \sim \frac{1}{n} \quad (5.74)$$

だから，収束半径は無限大である．したがって，超幾何関数の級数表示はすべての x について成り立つ．

$$\begin{aligned} w_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+A+\gamma-\kappa) c_n x^n \\ &= x^{1-(A+\gamma-\kappa)} \frac{d}{dx} \left(x^{A+\gamma-\kappa} {}_1F_1(a; b; x) \right) \end{aligned} \quad (5.75)$$

$$\begin{aligned} w_2 &= \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n = - \sum_{n=0}^{\infty} (n-B+\gamma+\kappa) c_n x^n \\ &= -x^{1-(-B+\gamma+\kappa)} \frac{d}{dx} \left(x^{-B+\gamma+\kappa} {}_1F_1(a; b; x) \right) \end{aligned} \quad (5.76)$$

しかし，その漸近形は

$$\frac{1}{c_0} \sum c_n x^n \approx \sum x^n \frac{1}{n!} = e^x = e^{2\lambda r} \quad (5.77)$$

なので， G_{lj}, F_{lj} とともに，無限遠での境界条件を満たさなくなる．

$$G_{lj}, F_{lj} \sim e^{\lambda r} \quad (5.78)$$

これはエネルギーが特別の値でない限り，一般解のうちの指数関数的に増大する解を必ず含むということを表わしている．したがって，束縛状態としては，有限級数で切れる場合だけが可能となる．

5.5 水素型原子のエネルギー準位

合流型超幾何関数の級数が n' 次の多項式になった場合を考える．

$$n' + a = 0, \leftrightarrow c_{n'} \neq 0, c_{n'+1} = 0, \quad n' = 0, 1, \dots \quad (5.79)$$

$$n' = -a = -\gamma - \frac{A-B}{2} = -\gamma - \frac{Z\alpha}{2} \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} \right) \quad (5.80)$$

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n'+\gamma} \right)^2}} \quad (5.81)$$

$$\gamma = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2} \quad (5.82)$$

$${}_1F_1(a = -n'; b; x) = \frac{\Gamma(b)n'!}{\Gamma(b+n')} L_{n'}^{(b-1)}(x) \quad (5.83)$$

$$n = n' + |\kappa| = n' + j + \frac{1}{2} \quad (5.84)$$

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}} \quad (5.85)$$

$$n = 1, 2, \dots, \infty, \quad \frac{1}{2} \leq j \leq n - \frac{1}{2} \quad (5.86)$$

ただし $0 \leq l \leq n - 1$ でなければならない。

$$E_{n,j} = mc^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] + O(Z\alpha)^6 \right) \quad (5.87)$$

$$E_0 = mc^2 \sqrt{1 - (Z\alpha)^2} \quad (5.88)$$

$$u(r) \sim \frac{1}{r} r^\gamma, \quad r \sim 0, \quad \gamma = \sqrt{1 - (Z\alpha)^2} \quad (5.89)$$

6 スカラー場の量子化

これまでは、相対論的な波動方程式の解は系の状態を表す波動関数であるかのように考えてきた。しかし、スカラー場を表すクライン・ゴールドン方程式にしたがう場 $\phi(t, \mathbf{x})$ は、そのままでは確率解釈が困難である。しかも、量子力学の基本原理由れば、すべての波動は同時に粒子を表す。そこで、クライン・ゴールドン場 $\phi(t, \mathbf{x})$ がスピン 0 の粒子を与えるように新しい考え方を導入する。この立場では、量子力学の座標が演算子に格上げされたのと同様に、 $\phi(t, \mathbf{x})$ は演算子に格上げされる。その意味で、この手続きを第二量子化とも呼ぶ。一般に古典力学系は、座標とそれに対する運動量を用いたハミルトニアンによって、運動を解くことができる。それに対して、量子力学では、座標 x や運動量 p は演算子であり、互いに交換しない。座標と運動量の交換子 $[x, p]$ がプランク定数 \hbar に比例するという事実が、量子力学の基本原則と考えることができる。より一般には、座標という具体的な意味は持たない場合にも、力学変数 $q^i, i = 1, \dots, N$ を座標とみなし、それに対する運動量 $p_i, i = 1, \dots, N$ を考える。場についても、場を「座標」とみなし、それに対する「運動量」を定義し、それらの間に交換関係を設定する。この際、各空間点 \mathbf{x} に独立の力学変数があるのが場 $\phi(t, \mathbf{x})$ なので、各空間点 \mathbf{x} は「座標」の種類と見ればよい。この手続きの結果、場の演算子は粒子の生成・消滅を表す演算子となる。

(1.3) 節で導入したクライン・ゴールドン方程式 (1.42) はスピン 0 の粒子を記述する。変分原理を用いてこの方程式を出す作用 S は

$$S_{\text{scalar}} = \int dt d^3x \frac{1}{2} \left(\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \phi(x)}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \phi(x))^2 - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 (\phi(x))^2 \right) \equiv \int dt L \equiv \int dt d^3x \mathcal{L}_{\text{scalar}} \quad (6.1)$$

ラグランジュ密度 \mathcal{L} を空間積分したものがラグランジュ関数 L であり、それを時間で積分すると作用となる。この作用が最小になることを要求すると、場の運動方程式が得られる。それがクライン・ゴールドン方程式である。

$$-\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \phi(t, \mathbf{x}) + \Delta \phi(t, \mathbf{x}) - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \phi(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (6.2)$$

ここで $\Delta \equiv (\nabla)^2$ 。

量子力学では、ラグランジュ関数 L は力学変数 (一般座標) $q^r, r = 1, \dots, N$ とその時間微分 (一般速度) $\dot{q}^r \equiv dq^r/dt, r = 1, \dots, N$ の関数である。

$$L(q, \dot{q}) \quad (6.3)$$

共役運動量 p_r を次のように定義し、

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^r} \quad (6.4)$$

一般座標演算子とその共役運動量演算子との間に次の交換関係を仮定する .

$$[q^r, p_s] = i\hbar\delta_s^r, \quad [q^r, q^s] = 0 = [p_r, p_s] \quad (6.5)$$

さらに, 速度 \dot{q}^r から運動量 p_r への変数変換を行うと, ハミルトニアン H が得られる .

$$H(q, p) = \sum_{r=1}^n p_r \dot{q}^r - L(q, \dot{q}) \quad (6.6)$$

これにならって, 場 $\phi(t, \mathbf{x})$ に対する運動量 $\pi(t, \mathbf{x})$ を定義する . 力学変数の種類のラベル r の代わりに空間座標 \mathbf{x} ごとに運動量が次のように与えられる .

$$\pi(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(t, \mathbf{x})} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi(t, \mathbf{x})}{\partial t} \quad (6.7)$$

場の演算子と場の共役運動量演算子との交換関係は

$$[\phi(t, \mathbf{x}), \pi(t, \mathbf{y})] = i\hbar\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\phi(t, \mathbf{x}), \phi(t, \mathbf{y})] = 0 = [\pi(t, \mathbf{x}), \pi(t, \mathbf{y})] \quad (6.8)$$

ハミルトニアンは

$$H = \int d^3x \pi(t, \mathbf{x}) \dot{\phi}(t, \mathbf{x}) - L = \int d^3x \frac{1}{2} \left(c^2 \pi^2 + (\nabla\phi)^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi^2 \right) \quad (6.9)$$

力学変数の時間依存性は場の方程式 (6.2) で与えられるから, 座標表示から波数表示に移った方が便利である . 状態の数を精密に数えることができるように, 空間の体積を有限にして考えるとよい . 各方向に長さ R の区間を考え, 場は周期的と仮定する[†] .

$$\phi(t, x, y, z) = \phi(t, x + R, y, z), \quad (6.10)$$

y, z 方向についても同様の式が成り立つ . x 方向に波数 k_x で進む波は $e^{ik_x x}$ であり, 境界条件 (7.34) を満たすためには $k_x R$ が 2π の整数倍でなければならない . さらに一辺 R の区間で規格化するために, x, y, z 方向すべてを考えて全空間の体積 $R^3 = V$ を用いると

$$\frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{R} \mathbf{n}, \quad n_i \in \mathbf{Z}, i = 1, 2, 3 \quad (6.11)$$

この波数の固有関数で場を展開すると

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{k}}(t) \quad (6.12)$$

展開係数の時間依存性は場の運動方程式から決まる .

$$-\left(\frac{1}{c} \frac{d}{dt}\right)^2 \phi_{\mathbf{k}}(t) - \mathbf{k}^2 \phi_{\mathbf{k}}(t) - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi_{\mathbf{k}}(t) = 0 \quad (6.13)$$

次のように振動数を定義する

$$\omega_{\mathbf{k}} \equiv c\sqrt{\mathbf{k}^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2} \quad (6.14)$$

正振動数解 $e^{-ic|\mathbf{k}|t}$ と負振動数解 $e^{ic|\mathbf{k}|t}$ の二つが, この方程式の独立な解である . 一般解はそれらの線形結合なので, 規格化定数を後で相対論的な不変性が見やすくなるように選び, さらに展開係数 $a_{\mathbf{k}}$ が無次元になるように, 規格化定数を決めると

$$\phi_{\mathbf{k}}(t) = \frac{\sqrt{\hbar c}}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} (a_+(\mathbf{k})e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + a_-(\mathbf{k})e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}) \quad (6.15)$$

[†]最終的には体積が十分大きい極限に興味があるとすると, 他の境界条件を採用しても, 結果に変わりはない .

ここで得られた係数 $a_+(\mathbf{k}), a_-(\mathbf{k})$ は時間によらない定数で、波数の関数である。さらに、実スカラー場 ϕ は実数だから、正振動数解と負振動数解は次のように複素共役の関係にある。

$$(a_-(-\mathbf{k}))^\dagger = a_+(\mathbf{k}) \equiv a(\mathbf{k}) \quad (6.16)$$

したがって、スカラー場は

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sqrt{\hbar c}}{\sqrt{V} 2\omega_{\mathbf{k}}} \left(a(\mathbf{k}) e^{-ik^\mu x_\mu} + a^\dagger(\mathbf{k}) e^{ik^\mu x_\mu} \right) \quad (6.17)$$

ここで、スカラー粒子の4元波数ベクトル k^μ と4元運動量ベクトル p^μ を次のように定義した。

$$k^\mu = (c|\mathbf{k}|, \mathbf{k}), \quad p^\mu = \hbar k^\mu \quad (6.18)$$

場の運動量 $\pi(t, \mathbf{k})$ は

$$\pi(t, \mathbf{x}) = -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sqrt{\hbar}}{c} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{V}} \left(a(\mathbf{k}) e^{-ik^\mu x_\mu} - a^\dagger(\mathbf{k}) e^{ik^\mu x_\mu} \right) \quad (6.19)$$

場の演算子とその共役運動量演算子の間の交換関係 (6.8) は展開係数演算子の間の次の交換関係と同値である。

$$[a(\mathbf{k}), a^\dagger(\mathbf{l})] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}, \quad [a(\mathbf{k}), a(\mathbf{l})] = 0 = [a^\dagger(\mathbf{k}), a^\dagger(\mathbf{l})] \quad (6.20)$$

この交換関係は、調和振動子の生成消滅演算子の交換関係と同じであり、 $a(\mathbf{k})$ が粒子の消滅演算子、 $a^\dagger(\mathbf{k})$ が生成演算子であることを示している。これを証明するには、波数固有関数の完全性を用いるとよい。

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{R} e^{i2\pi n(x-y)/R} = \delta(x-y) \quad (6.21)$$

ハミルトニアン (6.9) を展開係数演算子で表すと

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} (a^\dagger(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + a(\mathbf{k})a^\dagger(\mathbf{k})) = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(a^\dagger(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right) \quad (6.22)$$

最後の項の和は無限大だが、定数なので、真空のエネルギーの再定義に押し付けて無視することができる。これを零点エネルギーと呼ぶ。

7 電磁場の量子化

7.1 マックスウェル (Maxwell) 方程式とゲージ不変性

古典電磁気学の電場 \mathbf{E} と磁束密度 \mathbf{B} が満たすマックスウェル (Maxwell) の方程式の第1の組は

$$\text{div} \mathbf{B} = 0, \quad (7.1)$$

$$\text{rot} \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (7.2)$$

与えられる。電場 \mathbf{E} 及び磁束密度 \mathbf{B} に対して電束密度 \mathbf{D} 及び磁場 \mathbf{H} は

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (7.3)$$

与えられる。ここで ϵ, μ は物質の性質によって決まる定数であって、それぞれ誘電率、透磁率と呼ばれている。我々はミクロの世界の基本法則に興味があるので、媒質中の電磁気学ではなく、真空での電磁気学を考える。したがって、真空での誘電率、透磁率を主に用いる。真空中の誘電率、透磁率は ϵ_0, μ_0 のように、添え字 0 をつけて表す。

マクスウェルの方程式の第2の組は、電束密度 \mathbf{D} と磁場 \mathbf{H} が物質分布によってどのように決まるかを表わす。

$$\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho, \quad (7.4)$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} - \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j} \quad (7.5)$$

ここで、物質は電荷密度 $\rho(t, \mathbf{x})$ で分布しており、それらの電荷の速度分布が $\mathbf{v}(t, \mathbf{x})$ 、すなわち電流密度が $\mathbf{j} = \rho\mathbf{v}$ であるとした。第(7.5)式の div をとったものに第(7.4)式の時間微分をとったものを加えると連続の方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\mathbf{j} + \frac{\partial\rho}{\partial t} &= \left(\operatorname{div}\operatorname{rot}\mathbf{H} - \operatorname{div}\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t}\operatorname{div}\mathbf{D} \right) \\ &= \operatorname{div}\operatorname{rot}\mathbf{H} = 0 \end{aligned} \quad (7.6)$$

ここでベクトル場の rot の div は必ず0になることを用いた。マクスウェル方程式が成り立つためには物質分布がこの連続の方程式を満たしていなければならない。

マクスウェルの方程式の第1の組の第1式(7.1)によると、磁束密度 \mathbf{B} は div をとると0になる。このようなベクトルは必ず或るベクトル場 \mathbf{A} の rot として表わせる。

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}. \quad (7.7)$$

このベクトル場 \mathbf{A} をベクトルポテンシャルという。さらにマクスウェルの方程式の第1の組のもう一つの式(7.2)で、磁束密度をベクトルポテンシャル \mathbf{A} で表わすと、

$$\operatorname{rot}\left(\mathbf{E} + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right) = 0. \quad (7.8)$$

rot をとると0になるようなベクトルは必ず或るスカラー場 ϕ の grad として表わせる。従って

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad}\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}. \quad (7.9)$$

この ϕ のことをスカラーポテンシャルという。このようにマクスウェルの方程式の第1の組を解くことによって、電場及び磁場をポテンシャルの微分で表わすことができる。これによってマクスウェルの方程式の第1の組(7.1)(7.2)は自動的に満たされてしまうので、以下では不用になる。従って、マクスウェルの方程式の第2の組(7.4)(7.5)だけを考えればよい。ポテンシャルを用いて表わすと

$$\epsilon\left(-\operatorname{div}\cdot\operatorname{grad}\phi - \frac{\partial}{\partial t}\operatorname{div}\mathbf{A}\right) = \rho, \quad (7.10)$$

$$\frac{1}{\mu}\operatorname{rot}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{A} + \epsilon\left(\frac{\partial}{\partial t}\operatorname{grad}\phi + \frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}\right) = \mathbf{j}. \quad (7.11)$$

しかし、ここで注意しなければならないのは、与えられた電磁場を表わすポテンシャル ϕ , \mathbf{A} はただ一つには決まらないということである。すなわち、ポテンシャルに次のような変換を施しても同じ電場 \mathbf{E} と磁束密度 \mathbf{B} を与える。

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \operatorname{grad}\Lambda, \quad \phi \rightarrow \phi + \frac{\partial\Lambda}{\partial t}. \quad (7.12)$$

この変換を(電磁場の)ゲージ変換という。

古典電磁気学では、電場 \mathbf{E} や磁束密度 \mathbf{B} だけが物理量であって、ポテンシャル \mathbf{A} や ϕ は単に記述の便宜のために用いるだけの道具であるとする立場に立つこともできる。その立場に立てば、ゲージ不変性という不変性は便宜的に導入されただけで格別の物理的意味は持っていないことになる。しかし、実際には量子論を構成しようとするとき、どうしても電場や磁場だけで理論を記述することができない。また、実験的にもボーム・アハロノフ(Bohm-Aharonov)効果として知られている現象では、ポテンシャルによって初めて記述できる量子効果が直接観測にかかるようになっていく(より正確には通常関数としてのポテンシャルそのものが観測にかかるというわけではなく、ソレノイドなどの磁場の周りを一周回ったときのポテンシャル)

ルの積分が観測にかかる。)そこで、量子論ではポテンシャルそのものを、基本的な力学変数として考えざるを得ないことになる。従って、ゲージ不変性も記述の便宜のために登場してきただけの対称性ではなく、電磁場の量子論の基本的な対称性としてとらえなければならない。

4次元的な記法を用いると、上に見た方程式の記述を簡単にすることができる。ベクトル・ポテンシャルと電流及び電荷密度は4元ベクトルを成している。

$$A^\mu = \left(\frac{\phi}{c}, \mathbf{A}\right), \quad j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}), \quad (7.13)$$

電場及び磁場は、場の強さとよぶ次のような2階の反対称テンソル $F_{\mu\nu}$ の成分になっている。

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = \begin{pmatrix} 0 & E^1/c & E^2/c & E^3/c \\ -E^1/c & 0 & -B^3 & B^2 \\ -E^2/c & B^3 & 0 & -B^1 \\ -E^3/c & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

場の強さ $F_{\mu\nu}$ を用いるとマクスウェル方程式の第1の組は

$$\varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu F_{\nu\sigma} = 0 \quad (7.15)$$

である。ここで $\varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau}$ は4階完全反対称テンソルで $\varepsilon^{0123} = +1$ という値をとる量である。ベクトル・ポテンシャルはマクスウェル方程式の第1の組の解として導入した量であるから、ベクトル・ポテンシャルで表わすと(7.15)式は恒等式になってしまう。

$$\varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu F_{\nu\sigma} = \varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu (\partial_\nu A_\sigma - \partial_\sigma A_\nu) = 0 \quad (7.16)$$

このような恒等式は、いわゆるビアンキ (Bianchi) の恒等式と呼ばれる恒等式の1種である。マクスウェル方程式の第2の組は

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = \frac{1}{c^2 \epsilon} j^\nu \quad (7.17)$$

ゲージ変換は

$$A^\mu \rightarrow A^\mu + \partial^\mu \Lambda, \quad (7.18)$$

以上のような電磁場の基本方程式(マクスウェル方程式)を導くためには、物質場と電磁場の相互作用を別にして、電磁場の作用だけを考えると、次のように与えられる。

$$\begin{aligned} S_{em} &= \int d^4x \frac{1}{2} c\epsilon \left(\left(\frac{\mathbf{E}}{c}\right)^2 - \mathbf{H}^2 \right) \\ &= - \int d^4x \frac{c\epsilon}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \\ &= - \int d^4x \frac{c\epsilon}{4} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \end{aligned} \quad (7.19)$$

ポテンシャル A_μ はゲージ変換のもとで不変ではなく、ゲージ変換のパラメータ $\Lambda(x)$ の微分が付け加わる。しかし、場の強さ $F_{\mu\nu}$ はゲージ変換のもとで不変である。従って、運動方程式だけでなくこの電磁場の作用そのものがゲージ変換(7.12)のもとで不変になっている。これに物質場とそれが電磁場と相互作用することを表す部分を付け加え、全作用が得られる。最小作用の法則によれば、作用を最小にするようなポテンシャル A_μ が実現する。従って、全作用をポテンシャル A_μ について変分すれば運動方程式(マクスウェル方程式)が得られる。また、

ゲージ変換の不定性を除くためにいろいろなゲージを選んでやることができる。相対論的な変換性はこわしてしまうが、電磁場の持つ物理的自由度をもっともはっきりさせるには、次のようなクーロン・ゲージが便利である。

$$\text{div} \mathbf{A} = 0. \quad (7.20)$$

以下ではこのゲージを用いて電磁場の量子化を行う。

もうひとつのよく用いられるゲージとして、相対論的な共変性をはっきりさせる、次のようなローレンツ・ゲージがある。

$$\partial_\mu A^\mu = 0. \quad (7.21)$$

7.2 自由電磁場の量子化

簡単のために真空中の電磁場，すなわち電荷などの物質がまったくない場合を考えよう。この自由電磁場の場合に電磁場の量子化を行ってみる。クーロン・ゲージ

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad (7.22)$$

では自由電磁場のマックスウエル方程式のうち (7.10) 式は

$$\epsilon_0 \operatorname{div} \cdot \operatorname{grad} \phi = 0 \quad (7.23)$$

となる。この解は一意的で、無限遠で $\phi \rightarrow 0$ とすると、

$$\phi = 0 \quad (7.24)$$

となる。したがって、マックスウエル方程式の残る式 (7.11) は

$$\frac{1}{\mu_0} \operatorname{rot} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{A} + \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (7.25)$$

通常のベクトル量 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \dots$ に対して

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} + \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \quad (7.26)$$

が成り立つのにヒントを得て計算すると微分演算子についても同様の式が成り立つ。

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -(\nabla \cdot \nabla)\mathbf{A} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) = -\Delta \mathbf{A} + \nabla(\operatorname{div} \mathbf{A}) \quad (7.27)$$

これを用いると、クーロンゲージ (7.22) では (7.25) 式は、光速 c で動く波動を表す方程式になる。

$$-\Delta \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0, \quad c \equiv \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (7.28)$$

これが電磁波である。

クーロンゲージ (7.22) では、電場 \mathbf{E} と磁束密度 \mathbf{B} はベクトルポテンシャル \mathbf{A} で次のように表わされる。

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \quad (7.29)$$

電磁場の作用をベクトルポテンシャルで表すと

$$\begin{aligned} S_{em} &= \int dt d^3x \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2 \right) \\ &= \int dt d^3x \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{\mu_0} (\operatorname{rot} \mathbf{A})^2 \right) = \int dt d^3x \mathcal{L}_{em} \end{aligned} \quad (7.30)$$

この作用からベクトルポテンシャルの共役運動量を定義すると、

$$\mathbf{C}(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}_{em}}{\partial \dot{\mathbf{A}}(t, \mathbf{x})} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (7.31)$$

もしもクーロンゲージ条件を忘れると，量子化条件は

$$[A^i(t, \mathbf{x}), C^j(t, \mathbf{y})] = i\hbar\delta^{ij}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [A^i(t, \mathbf{x}), A^j(t, \mathbf{y})] = 0 = [C^i(t, \mathbf{x}), C^j(t, \mathbf{y})] \quad (7.32)$$

しかし，クーロンゲージ条件を満たすために，この交換関係には修正が必要であることを後で見ることにしよう．

一方，電磁場のエネルギーは，電場の強さの 2 乗と磁束密度の強さの 2 乗の和で与えられる．

$$\begin{aligned} E_{em} &= \int d^3x \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2 \right) \\ &= \int d^3x \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{\mu_0} (\text{rot} \mathbf{A})^2 \right) \end{aligned} \quad (7.33)$$

波動方程式を解き，正確に取り扱うために，空間の体積を有限にして取り扱う．一辺の長さ R の中に電磁波があり，境界では周期的であるとしよう．

$$\mathbf{A}(t, x, y, z) = \mathbf{A}(t, x + R, y, z), \quad (7.34)$$

y, z 方向についても同様の式が成り立つ．波動方程式を解くには座標 \mathbf{x} からフーリエ変換して波数 \mathbf{k} の関数として表す方がよい． x 方向に波数 k_x で進む波は $e^{ik_x x}$ であり，境界条件 (7.34) を満たすためには $k_x R$ が 2π の整数倍でなければならない．さらに一辺 R の区間で規格化されているとすると， x, y, z 方向すべてを考慮して全空間の体積 $R^3 = V$ を用いると

$$\frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad n_i \in \mathbf{Z}, i = 1, 2, 3 \quad (7.35)$$

この波数の固有関数を用いてベクトルポテンシャルを展開する

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) \quad (7.36)$$

ベクトルポテンシャルの展開係数 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$ の時間変化は波動方程式 (7.28) から決まる．

$$\mathbf{k}^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t^2} = 0 \quad (7.37)$$

振動数 $\omega_{\mathbf{k}}$ を用いて

$$\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}| \quad (7.38)$$

一般解は正振動数解 $e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}$ と負振動数解 $e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}$ の線形結合で与えられる．相対論的変換性が見やすいように，また，展開係数演算子が無次元になるように規格化定数を選ぶと，

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{a}_+(\mathbf{k}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + \mathbf{a}_-(\mathbf{k}) e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \quad (7.39)$$

ここで得られた係数 $\mathbf{a}_+(\mathbf{k}), \mathbf{a}_-(\mathbf{k})$ は時間によらない定数で，波数の関数である．さらに，ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は実数だから，正振動数解と負振動数解は次のように複素共役の関係にある．

$$(\mathbf{a}_-(-\mathbf{k}))^\dagger = \mathbf{a}_+(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{a}(\mathbf{k}) \quad (7.40)$$

したがって，ベクトルポテンシャルは

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V^{1/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{a}(\mathbf{k}) e^{-ik^\mu x_\mu} + \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{ik^\mu x_\mu} \right) \quad (7.41)$$

ここで，光子の 4 元波数ベクトルを次のように定義した．

$$k^\mu = (\omega_{\mathbf{k}}, \mathbf{k}) \quad (7.42)$$

ここで得られた交換関係はクライン・ゴールドン場が3成分ある場合と同じである。したがって、その場合と同様に、ベクトルポテンシャルの場 \mathbf{A} とその共役運動量 \mathbf{C} の間の交換関係 (7.32) をその展開係数演算子 $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ の間の交換関係に翻訳すると、次の関係が同値であることがわかる。

$$[a^i(\mathbf{k}), a^{j\dagger}(\mathbf{l})] = \delta_{ij}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}}, \quad [a^i(\mathbf{k}), a^j(\mathbf{l})] = 0 = [a^{i\dagger}(\mathbf{k}), a^{j\dagger}(\mathbf{l})], \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (7.43)$$

これは電磁場がベクトル粒子であることに対応して、3成分の粒子の生成演算子 $a^{i\dagger}$ と消滅演算子 a^i があることを示しているが、クーロンゲージ条件で修正されることを後で見る。

ここで、クーロンゲージ条件 (7.22) を課すことによる修正を求めよう。クーロンゲージ条件は波数表示では

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{k}) = 0 \quad (7.44)$$

これは光子を表すベクトルポテンシャルが、進行方向の成分を持たない横波であることを示している。したがって、クーロンゲージ条件を満たす光子は3自由度ではなく、2自由度だけである。生成消滅演算子の交換関係 (7.43) に対しては、3自由度ではなく、2自由度とするだけで正しい交換関係が得られる。

$$[a^i(\mathbf{k}), a^{j\dagger}(\mathbf{l})] = \delta_{ij}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}}, \quad [a^i(\mathbf{k}), a^j(\mathbf{l})] = 0 = [a^{i\dagger}(\mathbf{k}), a^{j\dagger}(\mathbf{l})], \quad i, j = 1, 2 \quad (7.45)$$

座標表示での交換関係 (7.32) は、クーロンゲージ条件を満たさない非物理的状態を取り除くと、修正される。正しい交換関係は

$$[A^i(t, \mathbf{x}), C^j(t, \mathbf{y})] = i\hbar \left(\delta^{ij} - \frac{\nabla^i \nabla^j}{(\nabla)^2} \right) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [A^i(t, \mathbf{x}), A^j(t, \mathbf{y})] = 0 = [C^i(t, \mathbf{x}), C^j(t, \mathbf{y})] \quad (7.46)$$

実際、電場と磁束密度もクーロンゲージ条件から

$$\text{div}\mathbf{E} = 0, \quad \text{div}\mathbf{B} = 0 \quad (7.47)$$

また、電場と磁束密度を具体的に波数での展開係数 $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ で表すと、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V^{1/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2\omega_{\mathbf{k}}}} \omega_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{a}(\mathbf{k}) e^{-ip^\mu x_\mu / \hbar} - \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{ip^\mu x_\mu / \hbar} \right) \quad (7.48)$$

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V^{1/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{k} \times \left(\mathbf{a}(\mathbf{k}) e^{-ip^\mu x_\mu / \hbar} - \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{ip^\mu x_\mu / \hbar} \right) \quad (7.49)$$

電場と磁束密度が波数ベクトル \mathbf{k} と直交し、互いに直交することが、この式からわかる。

電磁場のエネルギー (7.33) をこの生成消滅演算子 $a^i(\mathbf{k}), a^{i\dagger}(\mathbf{k})$ で表そう。

$$\begin{aligned} E_{em} &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \sum_{i=1,2} (a^{i\dagger}(\mathbf{k})a^i(\mathbf{k}) + a^i(\mathbf{k})a^{i\dagger}(\mathbf{k})) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\sum_{i=1,2} a^{i\dagger}(\mathbf{k})a^i(\mathbf{k}) + 1 \right) \end{aligned} \quad (7.50)$$

ここでも最後の項は無敵大だが、真空のエネルギーの定義に吸収することで捨てることができる。