

相対論的量子力学を補完する方程式

須藤晃俊

相対論的波動方程式であるディラック方程式の係数 α_i と β を決定する際に、ディラックは、その方程式がクライン-ゴールドン方程式を満すと仮定した。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 $E^2 = c^2 p^2 + E_0^2$ を量子化した式である。

そこで、本論も著者が別の論文で導いた水素原子内の電子のエネルギーと運動量の関係式 $E_{re,n}^2 + c^2 p_n^2 = E_0^2$ を量子化して、クライン-ゴールドン方程式と類似した方程式を導いた。そして、その方程式を満たすような相対論的波動方程式をディラック方程式を参考にして予測し、その係数を決定した。水素原子内の電子の状態を記述する場合、ディラック方程式では方程式にポテンシャル・エネルギーの項を挿入する必要があった。

しかし、本論では相対論的波動方程式の中にポテンシャル・エネルギーの項を挿入するのではなく、ディラック方程式の係数 α_i を変更することによって、ポテンシャル・エネルギーが挿入されたディラック方程式と、同等な方程式を導いた。

この二つの方程式は、物理的に同等とみなすのが自然と考えられる。しかし、もし両式の間で優劣が存在するとすれば、本論は本論で導いた方程式の方が優れていると予測する。

キーワード：アインシュタインのエネルギー-運動量の関係式；水素原子；特殊相対論；相対論的エネルギー；相対論的量子力学；ディラック方程式；クライン-ゴールドン方程式

1. 序 論

特殊相対論で最も重要な公式の一つは、次の関係式である。

$$E^2 = c^2 p^2 + E_0^2. \tag{1}$$

ここで、 E は物体、または粒子の相対論的エネルギー、 E_0 は静止質量エネルギーである。

現在では、自由空間の粒子のエネルギーと運動量を記述する式は、アインシュタインの関係式(1)であるが、原子内の電子の振る舞いを記述する方程式は、ディラック方程式に代表される量子力学であるとの見解が定着している。

しかし、著者は別の論文で、ディラック方程式の有効性は認めた上で、対称性の観点

から、「自由空間で成立するアインシュタインの関係式に類似した関係式が、水素原子内でも成立していないか？そして、もしそのような関係式が成立しているとすれば、それは一体どんな関係式か？」との設問を設定した。

そして、著者は水素原子内の電子で成立する、次の関係式を導いた[1].

$$E_{re,n}^2 + c^2 p_n^2 = E_0^2, \quad n=1,2,\dots \quad (2)$$

ここで、 $E_{re,n}$ は水素原子内に拘束されている電子の相対論的エネルギーである。

さらに、 $E_{re,n}$ は次のように定義された[2].

$$E_{re,n} = E_0 + K_n + V(r_n) \quad (3a)$$

$$= E_0 + V(r_n)/2 \quad (3b)$$

$$= E_0 + E_n, \quad n=1,2,\dots, \quad E_n < 0. \quad (3c)$$

水素原子内の電子の運動を記述するには、関係式にポテンシャル・エネルギーを組み込まなければならない。

ポテンシャル・エネルギーは、目に見える形では式(2)の中に現れない。しかし、 $V(r_n)$ に対応する量は、式(3a)の定義によって、始めから $E_{re,n}$ の中に組み込まれている。

相対論的波動方程式であるディラック方程式の係数を確定する際に、ディラックはその方程式がクライン-ゴールドン方程式を満すと仮定した。しかし、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量子化した式である。

そこで、本論も著者が導いた式(2)を量子化してクライン-ゴールドン方程式と類似した方程式を導くことにする。そして、その式を満たすような相対論的波動方程式を予測し、その係数を決定する。

II. ディラック方程式とその係数の確認

本章では次章の議論に備え、量子力学の教科書を参考にして、ディラック方程式とその係数について確認しておく。

式(1)に量子化の手続きを施すと、次のクライン-ゴールドン方程式が得られるのは、周知のことである。

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \psi + m^2 c^4 \psi. \quad (4)$$

この方程式は、波動関数を相対論的に解釈したものであるが、この解釈は一般的なシュレーディンガー方程式の波動関数の解釈と、つじつまが合わなかった。

相対論的波動方程式を見つけるという問題に対して、ディラックは次のハミルトニアン形式を出発点に選んだ。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H\psi(\mathbf{r}, t). \quad (5)$$

運動量と質量の項に関して線形であるようなハミルトニアンの内で、最も簡単なのは、次のものである。

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2. \quad (6)$$

この式を式(5)に代入すると、次の式が得られる。

$$(E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta mc^2)\psi = 0. \quad (7)$$

さらに、式(7)の E と \mathbf{p} に対して次の置き換えを行う。

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (8)$$

すると、量子化された次の式が得られる。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi = 0. \quad (9)$$

ディラックはこの欠陥を解消するための正しい方程式は、次のような形式であるに違いないと推測した[3]。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-i\hbar c \left(a_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + a_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + \beta mc^2 \right] \psi. \quad (10)$$

この式は、式(9)を書き替えたものである。

そして、ディラックはこの新しい方程式はクライン-ゴールドン方程式を満たしているはずだから、そうなるように未知の係数 a_i と β を決めてやれば良いと考えた。

ディラックは次のような係数 a_i と β を得た。

$$a_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad a_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$a_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

この係数は、次の条件から求めた。

$$\left. \begin{array}{l} a_i^2 = 1 \\ a_i a_j + a_j a_i = 0 \\ a_i \beta + \beta a_i = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{array} \right\}, \quad i, j = 1, 2, 3 (i \neq j). \quad (12)$$

波動方程式(9)で記述される粒子が電荷 e を持っているときには、常套手段として、次の置き換えを採用すれば、相対論的不変性を破壊しないで、電磁ポテンシャルを式(9)に含ませることができる。

$$c\mathbf{p} \rightarrow c\mathbf{p} - e\mathbf{A}, \quad E \rightarrow E - e\varphi. \quad (13)$$

ここで、 E と \mathbf{p} は式(8)の演算子を表している。

中心力場 ($\mathbf{A} = 0$ で φ は球対称) のような特別な場合には、 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$, $\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(r)$ であるから、次の式が得られる。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (14)$$

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V.$$

ただし、 $V = e\varphi$ 。

この式を(9)のように表現すれば、次のようになる。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 - V \right) \psi = 0. \quad (15)$$

式(2)と式(15)から導かれる水素原子のエネルギーの比較については、Appendix で行う。

III. 新関係式の量子化

本章では、新しく得られた関係式(2)の量子化を試みる。いま式(2)を量子化すると、次の式が得られる。

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \hbar^2 c^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \psi + m^2 c^4 \psi. \quad (16)$$

この式は、式(1)を量子化して得られたクライン-ゴールドン方程式(4)に対応する式である。本論では、ディラック方程式に代わる相対論的波動方程式を予測し、その波動方程式が式(16)を満たすよう、その係数を決定する。

ディラック方程式(10)と区別するため、本論で導く方程式の係数は、次のように a'_i と β' をもつと仮定しよう。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-i\hbar c \left(a'_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + a'_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + a'_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + \beta' mc^2 \right] \psi. \quad (17)$$

式(10)は式(9)を書き替えたものであるが、式(17)は次の式を書き換えたものである。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \mathbf{a}' \cdot \nabla - \beta' mc^2 \right) \psi = 0. \quad (18)$$

式(17)の演算子の部分のみを取りだし、両辺を 2 乗した方程式を作ると、次の式が得られる。

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = & \left[-\hbar^2 c^2 \left(a'_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + a'_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + a'_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 - i\hbar c \left(a'_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + a'_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + a'_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \beta' mc^2 \right. \\ & \left. - \beta' mc^2 i\hbar c \left(a'_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + a'_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + a'_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + \beta'^2 m^2 c^4 \right] \psi. \end{aligned} \quad (19)$$

この式の左辺は、クライン-ゴールドン方程式や式(16)と同じになるから、この右辺が最終的に、式(16)の右辺と同じになれば良い訳だ。

次に、式(19)の右辺を展開すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = & \left[-\hbar^2 c^2 \left(a_1'^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + a_2'^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + a_3'^2 \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) - \hbar^2 c^2 (a_1' a_2' + a_2' a_1') \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \right. \\ & - \hbar^2 c^2 (a_2' a_3' + a_3' a_2') \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_3} - \hbar^2 c^2 (a_3' a_1' + a_1' a_3') \frac{\partial}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ & - i\hbar mc^3 (a_1' \beta' + \beta' a_1') \frac{\partial}{\partial x_1} - i\hbar mc^3 (a_2' \beta' + \beta' a_2') \frac{\partial}{\partial x_2} \\ & \left. - i\hbar mc^3 (a_3' \beta' + \beta' a_3') \frac{\partial}{\partial x_3} + \beta'^2 m^2 c^4 \right] \psi. \end{aligned} \quad (20)$$

式(16)と式(20)が同じになるためには、係数 a'_i 及び β' は、次の条件を満足する 4 行 4 列のマトリックスでなければならない。

$$\left. \begin{array}{l} a_i'^2 = -1 \\ a_i' a_j' + a_j' a_i' = 0 \\ a_i' \beta' + \beta' a_i' = 0 \\ \beta'^2 = 1 \end{array} \right\}, \quad i, j = 1, 2, 3 (i \neq j). \quad (21)$$

この条件を満たし、しかもすっきりした組み合わせのものは、次のようなものである。

$$\begin{aligned} a_1' &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & a_2' &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ a_3' &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \beta' &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (22)$$

これより、 $\beta = \beta'$ であることが分かる。したがって、式(18)は次のようになる。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha}' \cdot \nabla - \beta m c^2 \right) \psi = 0. \quad (23)$$

式(15)は式(9)のハミルトニアンに V の項を挿入した式である。一方、式(23)は式(9)の係数を a_i (11) から a_i' (22) に変更した式である。この係数の変更が、式(9)のハミルトニアンにポテンシャル・エネルギーを組み込んだことに対応している。

IV. 結 論

水素原子内の電子のふるまいを記述するディラック方程式は、次の式で与えられる。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta m c^2 - V \right) \psi = 0. \quad (24)$$

ただし、

$$\begin{aligned} a_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & a_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$a_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (25)$$

この場合は、自由空間で成立するディラック方程式(9)の係数は変えずに、ハミルトニアンに $-V$ の項を付加することによって、問題を解決している。

しかし、本論は、次の方程式も、水素原子のエネルギーを記述できることを明らかにした。

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha}' \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi = 0. \quad (26)$$

ただし、

$$a'_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad a'_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$a'_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (27)$$

ディラック方程式(9)には、ポテンシャル・エネルギーが組み込まれていないので、式(15)では、 V の項を挿入する必要があった。しかし、式(2)の場合、 V は始めから E_{re} の中に組み込まれている。したがって、式(2)を量子化して導いた式(16)を満たす式(17)に、 V の項を改めて付加する必要はない。

本論で導いた波動方程式(26)では、ディラック方程式(9)の中に $-V$ を挿入するのではなく、方程式の係数を(11)から(27)に変更することによって、ポテンシャル・エネルギーを方程式に取り込んだ。

しかしながら、これはディラック方程式を否定するものではない、むしろ、本論で得られた係数を持つ式も、ディラック方程式の一つであると考えられる。

量子力学の方程式を取り扱う方法として、シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示がある。前者は、波動関数(状態)の時間変化を計算する方法であり、後者は、状態は

一定に保って、演算子の時間変化を考えて計算する方法である。本論で採用した方程式(24)と既存の方程式(15)の関係も、この二つの表示の関係と類似している。

このことを考慮すると、水素原子内の電子の状態を記述する式として、式(26)と式(24)は同等とみなすのが自然かも知れない。しかし、もし両式の間に関係が存在するならば、本論は本論で導いた式(26)の方が、優れていると予測する。

その理由は以下の三つである。

- (1) 式(24)を導く出発点となる式が、式(1)であるのに対し、式(26)を導く出発点となる式は、式(2)である。
- (2) 式(26)は、式(24)よりシンプルである。
- (3) 著者が別の論文で導いた水素原子のエネルギーの近似値は、ディラック方程式から導くより、はるかに簡単に求めることができる。

Appendix

シッフの教科書[3]では、式(15)から出発して複雑な計算を行い、最終的に次の水素原子のエネルギーの固有値を得た。

$$E = m_e c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{(s+n')^2} \right]^{-1/2}, \quad n' = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A1})$$

また、式(A1)の正しい量子数は、次で与えられる。

$$s = \sqrt{k^2 - \alpha^2}, \quad n = n' + |k|. \quad (\text{A2})$$

(A1)を α^2 のべきに展開すると、エネルギー準位の微細構造が明らかになる。

いま式(A2)を(A1)に代入し、 α^4 の項まで取ると次の式が得られる。

$$E \approx m_e c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (\text{A3})$$

n は主量子数、 n' は動径量子数である。そして、 $|k|$ は正の整数値をとることができる。式(A3)は、エネルギーが $|k|$ の増加と共に増加することを示している。

式(A3)で $n/|k|=1$ のときには、右辺第3項のカッコ内は $1/4$ となり、(A3)は次のようになる。

$$E_n \approx m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{8n^4} - \dots \right). \quad (\text{A4})$$

次は、式(2)から水素原子のエネルギーを求めよう。まず、(2)は次のように書き替えることができる。

$$E_{re,n} = (m_e c^4 - c^2 p_n^2)^{1/2} \quad (\text{A5a})$$

$$= m_e c^2 \left(1 - \frac{p_n^2}{m_e^2 c^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{A5b})$$

ところで、著者は論文[1]で、本論の式(2)から、次の関係式を導いた。

$$p_n^2 = \left(\frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{\alpha^4}{4n^4} \right) (m_e c)^2. \quad (\text{A6})$$

$\alpha^4 = (5.325 \times 10^{-5}) \alpha^2$ だから、ここで、 $\alpha^4 / 4n^4 \approx 0$ と近似すれば、式(A6)は次のように書ける。

$$p_n \approx \frac{\alpha m_e c}{n} \quad (\text{A7a})$$

$$= \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e e^2}{n\hbar}. \quad (\text{A7b})$$

ただし、 α は次の微細構造定数である。

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}. \quad (\text{A8})$$

そこで、近似式である式(A7a)の関係を利用すると、次の式が得られる。

$$E_{re,n} \approx m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{A9})$$

ここで、二項定理の展開式を利用すると、次の式が得られる。

$$E_{re,n} \approx m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{8n^4} - \dots \right). \quad (\text{A10})$$

ディラック方程式では式(15)から出発して、複雑な計算によってエネルギー準位を求めたが、先の論文[1]で導いた式(A5b)からは、そのエネルギーを簡単に求めることができる。

ただし、式(A5b)は量子化された式ではないから、式(10)のエネルギー値は、縮退した状態にある値が、得られるだけである。

しかし、式(A7a)の近似式を用いずに、式(A5b)の p_n^2 に式(A6)の値を代入すれば、次の正確な値が得られる。

$$E_{re,n} = m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2} + \frac{\alpha^4}{4n^4} \right)^{1/2} \quad (\text{A11a})$$

$$= m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} \right). \quad (\text{A11b})$$

このエネルギーを古典量子論のエネルギー E_n で記述すると、次のようになる。

$$E_n = -(m_e c^2 - E_{re,n}) = -\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2n^2} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (\text{A12})$$

古典量子論では、近似を取って水素原子のエネルギーを求めるのにも係らず、 E_n が正確な値と一致してしまうのは、皮肉である。その理由は、以下のような理由による。

古典量子論では、先ず次の近似を用いる。

$$K_n \approx \frac{p_n^2}{2m_e}. \quad (\text{A13})$$

次に、この式の p_n に、近似値である式(A7a)を代入すると、次の値が得られる。

$$E_n = -K_n = -\frac{1}{2m_e} \frac{\alpha^2 m_e^2 c^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (\text{A14})$$

この値は、式(A10)と一致する。

結局、古典量子論では二度近似を用いたことで、最終的に得られる解が、正しい解と一致してしまうのである。

なお、式(23)から水素原子のエネルギーを導く作業は、別の論文で行うことにする。

参考文献

- [1] K. Suto, Phys. Essays **24**, 301 (2011).
- [2] K. Suto, Phys. Essays **22**, 135 (2009).
- [3] L. I. シッフ「量子力学 下」(吉岡書店), p545.