

2-3 -1. Nonrelativistic vs Relativistic Spectrum

水素様原子の \$Z\$-スカラー \$\rightarrow Z=1, m = \frac{m_e}{2}\$
 \$\rightarrow Z=2, m = \frac{m_e}{2}\$
 \$e^+e^-\$ 対生成

① Schrodinger equation の 1次元 - スカラー \$\rightarrow\$ Sch. eq. & Dirac eq. の 差は \$\dots\$

$$\left[-\frac{\Delta}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi r} - E_{n,l} \right] \psi_{n,l}(r) = 0 \quad [e^+e^- \text{ の場合, } Z=1, m = \frac{m_e}{2}]$$

$$-\Delta = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{r^2}, \quad \hat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad \left[E_{n,l} = -\frac{m(Z\alpha)^2}{2n^2} \right] \quad \left[\frac{m\alpha^2}{2} = 13.6 \text{ eV} \right]$$

② Klein-Gordon equation の 1次元 - スカラー \$\leftarrow\$ \$Z\alpha\$ を定数 (\$Z=1, \alpha\$), 定数 = 結合定数 \$\rightarrow\$ \$Z\alpha\$ の効果の重要。

$$\left[(E + \frac{Z\alpha}{r})^2 + \Delta - m^2 \right] \phi = 0$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2 - Z^2\alpha^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha E}{r} - (E^2 - m^2) \right] \phi = 0 \quad [e^+e^- \text{ の場合, } Z=1, m = \frac{m_e}{2}]$$

Schrodinger eq. を以下の形式に変換したものを。

$$\hat{L}^2 \rightarrow \hat{L}^2 - Z^2\alpha^2 \equiv \lambda(\lambda+1) \rightarrow l - \lambda = \delta l \equiv \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} + O(\alpha^4)$$

$$\alpha \rightarrow \alpha \frac{E}{m}$$

$$\xi \rightarrow \frac{E^2 - m^2}{2m} \rightarrow \frac{E^2 - m^2}{2m} = -\frac{mZ^2\alpha^2}{2} \frac{E^2}{m^2} \frac{1}{(l - \delta l)^2}$$

$$\rightarrow \left[E_{n,l} = m - \frac{mZ^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{mZ^4\alpha^4}{n^3(2l+1)} + \frac{3}{8} \frac{mZ^4\alpha^4}{n^4} + O(\alpha^4) \right]$$

③ Dirac equation の 1次元 - スカラー

④ 4次元表示を使う

特に Klein-Gordon eq. は, \$\frac{e}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \pm i e \sigma \cdot \mathbf{E} = \mp i Z \alpha \frac{\sigma \cdot \mathbf{r}}{r}\$ (Spin term) ではない。

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\hat{L}^2 - Z^2\alpha^2 \mp i Z \alpha \sigma \cdot \mathbf{r} \right) \frac{1}{r^2} - \frac{2Z\alpha E}{r} - (E^2 - m^2) \right] \psi_{\pm} = 0$$

\$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} = \hat{L} + \frac{\sigma}{2}\$ かつ \$\hat{J}^2 = \hbar^2 j(j+1)\$, (\$j = m, -j \le m \le j, \hat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)\$) の固有値 \$E_{\pm}\$ の部分空間も存在。 \$\Rightarrow\$ の部分空間で, \$\hat{L}^2 - Z^2\alpha^2 \mp i Z \alpha \sigma \cdot \mathbf{r}\$ は以下の固有値 \$E_{\pm}\$。

$$\hat{L}^2 - Z^2\alpha^2 \mp i Z \alpha \sigma \cdot \mathbf{r} = \begin{pmatrix} (j+\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2}) - Z^2\alpha^2 & \mp i Z \alpha \\ \mp i Z \alpha & (j-\frac{1}{2})(j+\frac{1}{2}) - Z^2\alpha^2 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = (j \pm \frac{1}{2}) - \delta_j, \quad \delta_j = \frac{Z^2\alpha^2}{2j+1} + O(Z^2\alpha^4)$$

$$\left[E_{n,j} = m - \frac{mZ^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{mZ^4\alpha^4}{n^3(2j+1)} + \frac{3}{8} \frac{mZ^4\alpha^4}{n^4} + O(\alpha^4) \right] \quad [e^+e^- \text{ の場合, } Z=1, m = \frac{m_e}{2}]$$

\$\square\$ \$Z=137\$? \$\delta_j\$ が虚数になる。(\$Z\alpha \approx 137\$)

Figure 2-2 に 2つの状態のエネルギー差を示している。 [Schrödinger eq. の解法, 11-12の節を参照]

$$E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) \approx \frac{m\alpha^4}{32} = 4.53 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad [e^+e^- \text{ 対生成, } \frac{9.57}{2} \times 10^{-5} \text{ eV}]$$

(*) (=の結果は, L-S 結合を施した Schrödinger eq. の摂動解と一致する)



次に, 2つの状態=固有値に対応する固有関数を求める。

$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix}$ とおいて, $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2$ の固有関数に求めたいものを求める。

$$\hat{L}^2 \psi_{lm}^{(\pm)} = l(l+1) \psi_{lm}^{(\pm)}, \quad \hat{J}_z \psi_{lm}^{(\pm)} = m \psi_{lm}^{(\pm)}, \quad \hat{J}^2 \psi_{lm}^{(\pm)} = j(j+1) \psi_{lm}^{(\pm)}$$

$$\psi_{lm}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} a_{lm} \psi_{lm}^{(+)}, \\ b_{lm} \psi_{lm}^{(-)} \end{pmatrix} \text{ とおいて, 上の条件を課すると, } \psi_{lm}^{(+)} = (2l+1)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} (l+m+\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \\ (l-m+\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (j=l+\frac{1}{2})$$

↑ 球面調和関数

$$\psi_{lm}^{(-)} = (2l+1)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} (l-m+\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \\ -(l+m+\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (j=l-\frac{1}{2})$$

$$\psi_{lm}^{(+)} = \hat{U} \psi_{lm}^{(-)} \text{ とおくと phase を変える。}$$

次に, Ψ を求める。 $E\Psi = (\frac{1}{2}\alpha\cdot\nabla + \beta m - \frac{Z\alpha}{r})\Psi \equiv H\Psi$ (Dirac eq.) は空間反転対称性

がある; $\beta \psi_{lm}^{(\pm)}(\vec{r}) = \pm \psi_{lm}^{(\pm)}(\vec{r})$ のパリティ偶, 奇の2つの固有状態がある。

$$\psi_{lm}^{\pm} = \begin{pmatrix} \frac{i6lj(r)}{r} \psi_{lm}^{\pm} \\ F_{lj}(r) \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \psi_{lm}^{\pm} \end{pmatrix} \text{ とおく。 } H = \begin{pmatrix} m - \frac{Z\alpha}{r} & \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \\ \hat{\sigma} \cdot \hat{r} & -m - \frac{Z\alpha}{r} \end{pmatrix} \text{ とおいて, 固有値方程式を解く。}$$

$$\begin{cases} (E - m + \frac{Z\alpha}{r}) G_{lj}(r) = -\frac{dF_{lj}(r)}{dr} \mp (j + \frac{1}{2}) \frac{F_{lj}(r)}{r} \\ (E + m + \frac{Z\alpha}{r}) F_{lj}(r) = \frac{dG_{lj}(r)}{dr} \mp (j + \frac{1}{2}) \frac{G_{lj}(r)}{r} \end{cases} \rightarrow \text{この解法は, (2-94)}$$

④ Hyperfine structure

非相対論的の近似を用いる。 $\hat{H}_{\text{Hf}} = -\frac{e}{2m} \vec{\sigma}_e \cdot \vec{B}, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad \vec{A} = -\frac{1}{c} \vec{u}_p \times \nabla \frac{1}{r}$

$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{p}) / r^3, \quad \nabla^2 \vec{A} = -\vec{p}, \quad \vec{p} = -m \times \nabla \delta^3(\vec{r})$ とおくと,

$$\hat{H}_{\text{Hf}} = \frac{e}{\hbar c m} \vec{\sigma}_e \cdot (\mu_p \nabla^2 - (\mu_p \cdot \nabla) \nabla) \frac{1}{r} \rightarrow \hat{H}_{\text{Hf}} = -\frac{e}{3m} \vec{\sigma}_e \cdot \mu_p \delta^3(\vec{r})$$

$$\langle \hat{H}_{\text{Hf}} \rangle = \frac{e^2}{12\pi \hbar c m p} g_p \vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p |\psi(0)|^2, \quad |\psi(0)|^2 = \frac{me\alpha^3}{\pi}$$

Energy Splitting

$$\Delta E_{\text{Hf}} = \frac{4}{3} me\alpha^4 \frac{m_e}{m_p} g_p = 5.89 \times 10^{-6} \text{ eV}$$