

松浦弘幸 1), 中野正博 2) 根本哲也 3)

1) 政研大、2) 産医大、3) 都立高専)

我々は、相対論的場の量子論の一種である原子シュウィンガー・ダイソン法(ASD 法)を考案し、電子物性や電子材料特性を計算するアルゴリズムを提案した。ASD 法は、電子とフォトンのカップルした一連の方程式により記述され、非摂動論的な計算手法で電子とフォトンの自己エネルギーを計算する方法であった。このために、ハートリー・フォック法を超える高次相関が自動的に取り込まれた。有限多体系の電子理論である ASD 法と、本来のシュウィンガー・ダイソン法の間には、重要な相違が存在した。それは、フォトン場の凝縮、及び対称性の破れにより、所謂、クーロンポテンシャルとなった。凝縮したフォトン場の扱いは、電子・フォトンのカップルした方程式を伝播汎関数微分法に基づいて導出された。凝縮した場の扱いは、自然にタドポールのエネルギーとなり、これは、ハートリーのエネルギーであることが示された。フォトンの伝播関数は、射影演算子と逆行列を用いて計算された。ASD 法と他の伝統的な方法、つまり平均場近似、あるいはハートリー法、ハートリー・フォック法などとの相違と類似性に関する議論を行った。

ASD 法が矛盾なく現実の物理量を与えるためには、繰り込みの可能性を示すことは重要である。さらに、物質中では、粒子-反粒子相互作用や粒子-ホール相互作用は常に存在し、これらは電子やフォトンの自己エネルギーとして、質量、電荷などに平均場近似からの数値的なずれを与える。我々は、本論文で ASD 法は、非摂動法的に繰り込み可能であることを示した。また、凝集したフォトン場の存在は、クーロン場となり、さらに電子やフォトンに質量シフトを生じさせる。これらの自己エネルギーを質量シフトと見なすことにより、相互作用のある電子場やフォトン場の方程式は、物理的質量を持つ自由粒子の運動（一般化された場の方程式）として記述される。この方程式のグリーン関数を用いれば、分子や物質が一般外場ポテンシャル中に存在する場合の状態を、厳密に書き下すことが可能となる。