

原子と分子の事始め

○松浦弘幸 1), 野田信雄 1), 小井手一晴 1), 根本哲也 1), 野田善之 1),
中野正博 2)

1 国立長寿医療センター・長寿医療工学研究部

(〒474-8511 愛知県大府市森岡町源吾 36-3)

2 産業医科大学医学部 (〒807-8555 福岡県北九州市八幡西区医生ヶ丘 1-1)

1. はじめに

我々は、相対論的な場の理論を用いて、原子・分子の構造を計算する全く新しい方法を開発してきた(Atomic Schwinger-Dyson Method, ASD). この方法では、相対論的な量子電磁気学のラグランジアンのみを出発点として、オイラー・ラグランジュの変分原理を通して、場の方程式を導出し、その後、真空の期待値を取ることで、平均場と、平均場からのゆらぎ(量子場)を分離する方法である。平均場からは、原子・分子に対する Dirac 方程(電子と核の方程式)と、電磁場の方程式が得られる。

最初、平均場の式を解くことにより、平均場中での原子・分子の構造が決定され、それを初期値として、“ゆらぎの場 Finite Schwinger-Dyson Eq.”の計算を行うことで、真空の偏極や、電子(陽電子、ホールを含む)の自己エネルギーの効果を取り込むことになっている。このおかげで、中・長距離相関を含む電子相関は、すべて取り込まれるようになった。我々の方法は、非摂動的な相対論的場の理論であり、電磁場-電子相関を無限大まで含む繰り込み理論であり、エネルギーや運動量に対する人為的なカットオフが無く、 10^{12}K 程度の温度まで(電弱統一理論の成立の下限まで)の成立が期待される。今回は、この理論に関し簡単に説明した後、それ以後の発展に関して報告する。

2. それ以後の発展

我々の開発した ASD 法の論理的な展開としては、4つの方向が模索されている。一つは、数値計算、一点繰り込み理論の拡張、有限温度での展開、そして、一般化座標による記述である。数値計算は、現在のところ進行中であり、一点繰り込み法の拡張では、ASD法は、摂動論と同様な高次相互作用の取り扱いをすれば、我々のASD法では、そのまま非摂動的に高次の項が、Vertex function の中に取り込んで行けそうなことが、判明してきた。また、有限温度での理論展開では、温度グリーン関数法は採用しなかった。温度グリーン関数を用いると平衡状態の記述には適するが、ダイナミックなゆらぎそのものが、見えなくなる可能性があるからだ。このために、平均場の段階から、フェルミ・ディラック分布を用いる方法を採用することにした。

今回は、その計算の一部を報告する予定である。

最後に、一般座標系への拡張は、一種の曲がった時空での場の量子論の記述の形式をとることになる。このために空間の計量テンソルを用いて、場のラグランジアンを記述する。その構成要素は、電子・陽電子に関する項、核に関する項、電磁場、電磁氣的相互作用、そして、ゲージ固定項が必要である。しかし、これらは、量子電磁気学の一般的なラグランジアンに登場していたが、今回は、計量テンソルと、その平方根に相当する tetrad が必要となる。

計量テンソルによる変分からは、空間の形状を決定する場の方程式が得られ、これにより電磁場で空間の構造が決定され、他方、物質や電磁場に関する変分からは、共変微分で記述された従来の方方程式に類似した電磁場と物質に関する方程式が得られる。今回は、以上の内容に関して、報告する予定である。