

## 2A3b

### 非摂動論的物質構造計算

松浦弘幸<sup>1</sup>、○野田信雄<sup>1</sup>、小井手一晴<sup>1</sup>、根本哲也<sup>1</sup>、伊藤安海<sup>1</sup>、中野正博<sup>2</sup>(国立長寿医療センター研究所<sup>1</sup>、産業医科大学<sup>2</sup>)

E-mail:noda@nils.go.jp

従来の平均場や 1 ループ近似などの非相対論的計算方法は物質のバルク特性や非相対論的電子ガスの説明に成功を収めてきた。しかし、近年、超重原子の 1s 軌道の電子が相対論的効果の影響を受けることが実験で分かってきた。さらに、電子の長距離相関の補正が量子場の揺らぎに起因していることが知られている。これらの効果を説明するためには従来の非相対論的方法では難しく、相対論的効果を考慮する必要がある。また、分子間力の形を決定するためには、カシミア効果や分散力、遅延効果について考慮しなくてはならない。

我々は、相対論的な場の量子論に基づいた、非摂動かつ厳密な原子・分子の構造計算法 Atomic Schwinger-Dyson(ASD)Method を開発した。ASD 方法の特徴は従来の Hartree 方法や Hartree-Fock 方法、Random Phase Approximation を内部に包含しており、これらの方法を越えてさらにリング型高次相関を取り込んでいる。ASD 方法の出発点は単純であり、相対論的な QED ラグランジアンのみを唯一の出発点としている。このラグランジアンより変分原理を用いて、場の方程式が導出され、その真空期待値を取ることにより、馴染みのある Dirac 方程式や電磁場の平均場の式が現れる。さらに、この平均場に対して、電子、陽電子、ホール、そしてフォトンを用いた真空の偏極と自己エネルギーが計算される。これらの一連のゆらぎは、長・中距離相関を生じる根源となっている。今回はこの理論構成に関して詳細する。

#### 参考文献

H.Matsuura, T.Nemoto, N.Noda, K.Koide and M.Nakano:Relativistic Quantum Electrodynamics for Matters-(I) under the existence of external fields,INFORMATION, Vol.9, No.5,pp.697-706,2006

H.Matsuura, T.Nemoto, N.Noda, K.Koide and M.Nakano:Relativistic Quantum Electrodynamics for Matters-(II) Decomposition of Field Operators,INFORMATION, Vol.9, No.6,pp.813-820,2006