

# 巨大分子の電子状態 II

福留秀雄(基研)

(8月24日受理)

前の論文<sup>(1)</sup>(以後 I として引用)で電子相関の一般理論を与えたが、この論文では I の方法を規則的な helical homopolymer に対して適用する。不規則な一次構造を持つた natural 生体高分子の研究に先出つて、規則的な polymer を研究しておくことは多くの点で有用である。生体高分子と類似の規則的な高分子としては合成核酸及び合成 polypeptide が作られており、その性質がいろいろ研究されている<sup>(2)</sup>。この論文及び後続の論文では主として合成 homopoly-nucleotides 及び alternating polynucleotide (Kornberg の AT copolymer<sup>(3)</sup>) についての計算を行う。合成核酸の性質については物によつて差があり、それを定量的に調べることによつて核酸内部での電子の状態について多くの情報を引出すことが期待出来る。特に光吸収における hypochromicity 及び熱変性温度の物による差は電子の相関が大きくきいていると考えられるので<sup>(4)</sup>有用な情報源となろう。この論文では § 1 で helical homopolymer の Hartree-Fock 函数及び相互作用核を求め、§ 2 で I の方法に基づいて電子の固有状態の計算を行う。ここ迄は本質的に一次元の結晶と同じである。ここでわれわれの方法によつて exciton 及び plasmon がどのような関係にあるかが明らかにされる。§ 3 で光との相互作用について論ずる。Helix polymer では並進対称性を持つ系とは異なり電子-空孔対の total momentum が 0 及び  $\pm 2\pi/\sigma$  ( $\sigma$  は隣接 unit 間の回転角) の状態がきくことが示される。(±は光の円偏光の向きによる)。そして光吸収における hypochromism の式が導かれる。§ 4 で分子間力の計算を行う。

## § 1 Hartree-Fock 函数と相互作用 kernels

ここでは N 個の同じ unite が helix になつている homopolymer を考える。隣接 units は helix axis の方向に距離 a の間隔を置いて配列し、かつ  $2\pi/\sigma$  づつ helix axis の回りに回転しているとする。DNA-B form の

福留秀雄

polynucleotide の場合  $a = 3.36\text{\AA}$ ,  $\sigma = 10$  である。周期的境界条件をつけると helical homopolymer の対称性は

$$(1.1) \quad \alpha x = \omega x + a, \quad \alpha^N = 1$$

なる変換  $\alpha$  により生成される  $N$  次の Abel 群である。ここに  $a$  は helix axis 方向の大きさ  $a$  の並進,  $\omega$  は helix axis の回りの  $2\pi/\sigma$  の回転である。ここで定義により

$$(1.2) \quad \omega a = a, \quad \omega^\sigma = 1$$

なる性質を  $\omega$  は持っている。変換 (1.1) に対する対称性から Hartree-Fock 関数は

$$(1.3) \quad \phi_a(k, x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{ikn} \phi_a(\omega^{-n}x - na)$$

の形に与えられる。ここに (dimensionless の) 運動量  $k$  は

$$(1.4) \quad k = 2\pi \frac{M}{N} \quad M = 0, 1, \dots, N-1$$

なる値を取る。Index  $a$  は band を区別するもので、band は separated unit における molecular orbital の数だけ存在する。Wannier 関数  $\phi_a$  としては隣接 unit 間の M.O. の重なり小さい核酸などの場合には separated unit の M.O. を取ることが出来る。Hartree-Fock energy も同様に Bloch 近似

$$(1.5) \quad W_a(k) = W_a^{(0)} + W_a^{(1)} \cos k$$

で充分である。Homopolynucleotides の band 構造については文献(5)を参照されたい。

Homopolymer の Hartree-Fock 関数は band index  $a$  及び momentum  $k$  によつて指定されるが filled bands を  $a, b$  empty bands を  $f, g$  等で表わすことにする。(1.3)より相互作用 kernel は

$$(1.6) \quad \langle fl, ak | G | bk', gl' \rangle$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{m, n \\ m', n'}}^{N-1} e^{-iml + ink + im'l' - in'k'}$$

$$\times \iint \phi_f^*(\omega^{-m}x - ma) \phi_a(\omega^{-n}x - na) \phi_g(\omega^{-m'}x' - m'a) \phi_b^*(\omega^{-n'}x' - n'a) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

$$= \delta(l-k-l'+k') \frac{1}{N} \sum_{s=-N+1}^{N-1} e^{is(l-k) + irk - ir'k'}$$

$$\times \iint Q_{fa}^{(r)*}(x) Q_{gb}^{(r')}(\omega^{-s}x' - sa) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

ここに

$$(1.7) \quad Q_{fa}^{(r)}(x) = \phi_f(x) \phi_a^*(\omega^r x - ra)$$

異なる unit 間の M.O. の重なりが小さい時には (1.6) における  $r, r' \neq 0$  の項は省略出来て (1.6) は

$$(1.8) \quad \langle fl, ak | G | bk', gl' \rangle = \delta(l-k-l'+k') G_{fa, gb}(l-k)$$

となる。ここに

$$(1.9) \quad G_{fa, gb}(k) = \frac{1}{N} \sum_{s=-N+1}^{N-1} e^{isk}$$

$$\times \iint Q_{fa}^{(0)}(x) Q_{gb}^{(0)}(\omega^{-s}x' - sa) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

(1.7) より unit 間の M.O. の重なりを無視する近似で相互作用 matrix  $I, J$  は

$$(1.10) \quad \left\{ \begin{array}{l} I(fl, ak; gl', bk') = \delta(l-k-l'+k') I_{AB}(l-k; k, k') \\ J(fl, ak; gl', bk') = \delta(l-k-l'+k') J_{AB}(l-k; k, k') \end{array} \right.$$

ここに A, B は band index の対  $fa, gb$  を表わし、電子-空孔対の singlet state に対し

$$(1.11) \begin{cases} I_{AB}(K; k, k') = 2G_{fa, gb}(K) - G_{fa, gb}(K+k+k') \\ J_{AB}(K; k, k') = G_{fa, gb}(K+k+k') - G_{fg, ab}(k-k') \end{cases}$$

である。(1.11)における exchange 項及び Coulomb 引力項に対しては(1.9)の展開における  $s \neq 0$  の項は電子と空孔が異なる unit に属している状態に対応する。ここでわれわれは電子-空孔対が同一の unit に属している状態のみを取る tight binding の近似を行おう。このことは(1.11)における exchange 項、Coulomb 引力項に対して(1.9)の  $s = 0$  の項のみを取ることを意味する。従つて

$$(1.12) \quad I_{AB}(K; k, k') \simeq I_{AB}(K) \\ = \frac{1}{N} \iint (2Q_{fa}^{(0)*}(x) Q_{gb}^{(0)}(x') - Q_{fb}^{(0)*}(x) Q_{ga}^{(0)}(x')) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv' \\ + \frac{2}{N} \sum_{s \neq 0} e^{isk} \iint Q_{fa}^{(0)*}(x) Q_{gb}^{(0)}(\omega^{-s}x' - sa) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

$$(1.13) \quad J_{AB}(K; k, k') \simeq J_{AB} \\ = \frac{1}{N} \iint (Q_{fb}^{(0)*}(x) Q_{ga}^{(0)}(x') - Q_{fg}^{(0)*}(x) Q_{ab}^{(0)}(x')) \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

この近似では  $I$  は電子-空孔対の total momentum  $K = \ell - k$  のみに依存し、 $J$  は momentum に依存しない値を取る。更に  $J_{AB}$  については(1.13)より Coulomb 引力項が  $A = B$  の時大きな値を持ち ( $Q_{ff}^{(0)}$  の値は恒に正、 $Q_{fg}^{(0)}$  等は場所により符号を変える)  $A \neq B$  の項はこれに対して小さいと考えられる。従つて  $J_{AB}$  を

$$(1.14) \quad J_{AB} \simeq \delta_{AB} J_{AA} = -\delta_{AB} \frac{1}{N} \iint Q_{ff}^{(0)}(x) Q_{aa}^{(0)}(x') \frac{e^2}{|x-x'|} dv dv'$$

と近似して良いであろう。

## § 2 固有状態

固有状態を求めるために方程式 (I 2.11) 及び (I 2.12) を解かねばならな

い。先づ方程式 (I 2.11) は (1.13) (1.14) を使うと次のようになる。

$$(2.1) \quad (W_A(K, k) - \epsilon_{A\rho}(K)) x_{A\rho}(K, k) + J_{AA'} \sum_k x_{A\rho}(K, k') = 0$$

$$W_A(K, k) = W_f(K+k) - W_a(k)$$

今考えている系では電子-空孔対の total momentum が保存するから方程式は  $K$  の値の異なる状態毎に分離する。方程式 (2.1) における indices  $A, \rho$  の意味は (I 2.11) におけるものと異つてすることに注意。Ansatz (1.14) により (2.1) では異なる transition 間 (異なる  $A$ ) の干渉はない。固有値  $\epsilon_{A\rho}(K)$  に対する方程式 (I 2.27) は

$$(2.2) \quad 1 = J_{AA'} \sum_k \frac{1}{\epsilon_{A\rho}(K) - W_A(K, k)}$$

となる。(2.2) は (2.1) に対する厳密な固有値方程式である。(2.2) は exciton に対する Slater-Shockley の方法で導かれる固有値方程式と同じ形をしており文献(6)における方法と似た方法で解くことが出来る。(2.2) は band 状態に対応する  $N+1$  コの解

$$(2.3) \quad \epsilon_{A\rho}(K) = W_A(K, k) + O\left(\frac{1}{N}\right)$$

を持つ。 $W_A(K, k)$  が minimum になる  $k$  に対する状態から exciton 状態が band 底より下に生ずる。Exciton 状態に対しては (2.2) を次のように変換する。

$$1 = J \sum_k \frac{1}{\epsilon - W} = \frac{NJ}{\epsilon - W_{\min}} \Delta$$

$$\Delta = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{-W_{\min}}}{\epsilon - W}$$

$\epsilon < W_{\min}$  だから  $0 < \Delta < 1$ 。従つて

$$(2.4) \quad \epsilon_{A\rho}(K) = [W_A(K, k)]_{\min} + NJ_{AA'} \Delta(K)$$

$W$  が (1.4) で与えられる場合  $\Delta$  は簡単に計算出来ないが band 内での level

福留秀雄

density が一定とすると(2.2)の和を積分で置き換えて(2.2)は

$$1 = \frac{NJ}{d} \ln \frac{W_{\min} - \epsilon}{W_{\max} - \epsilon}$$

$$d = W_{\max} - W_{\min}$$

となる。従つて

$$\epsilon = W_{\min} - \frac{d}{e^{-\frac{d}{NJ}} - 1}$$

よつて

$$(2.5) \quad A = -\frac{d}{NJ} / (e^{-\frac{d}{NJ}} - 1)$$

を得る。

次に振幅  $x_{A\rho}(K, k)$  は(1.2.28)により次のように与えられる。

$$(2.6) \quad x_{A\rho}(K, k) = \frac{J_{AA} C_{A\rho}(K)}{\epsilon_{A\rho}(K) - W_A(K, k)}$$

$$C_{A\rho}(K) = \left\{ \sum_k \frac{J_{AA}^2}{(\epsilon_{A\rho}(K) - W_A(K, k))^2} \right\}^{-1/2}$$

(2.2)より

$$(2.7) \quad \sum_k x_{A\rho}(K, k) = C_{A\rho}(K)$$

(2.7)と完全性条件

$$\sum_{\rho} x_{A\rho}^*(K, k) x_{A\rho}(K, k') = \delta_{kk'}$$

より  $C_{A\rho}(K)$  に対して

$$(2.8) \quad \sum_{\rho} C_{A\rho}^2(K) = N$$

を得る。次に(2.2)式を  $J_{AA}$  で微分することによつて

$$(2.9) \quad C_{A\rho}^2(K) = \frac{\partial \epsilon_{A\rho}(K)}{\partial J_{AA}}$$

なる関係を得る。(2.8)式より

$$P_{A\rho}(K) = C_{A\rho}^2(K)/N$$

を電子-空孔対が状態  $\rho$  へ励起される確率と解釈することが出来るが、exciton 状態に対しては(2.4), (2.5), (2.9)より

$$(2.10) \quad P_{Ae}(K) = \left( \frac{d_A(K)}{2NJ_{AA}} \right)^2 / \sinh^2 \left( \frac{d_A(K)}{2NJ_{AA}} \right)$$

を得る。(2.10)より電子-空孔対の coulomb energy  $NJ_{AA}$  に比べて band 幅  $d_A(K)$  が小さい時には電子-空孔対は殆んど exciton 状態に励起されることがわかる。

さて次に方程式(1.2.12)について考える。相互作用matrix  $\mathcal{J}$  は次式で与えられる。

$$(2.11) \quad \mathcal{J}_{AB}(K; \rho\sigma) = \sum_{kk'} x_{A\rho}^*(K, k) I_{AB}(K) x_{B\sigma}(K, k')$$

$$= C_{A\rho}(K) C_{B\sigma}(K) I_{AB}(K)$$

ここで(2.7)を使つた。従つて(1.2.12)は

$$(2.12) \quad (\epsilon_{A\rho}^2(K) - E_\lambda^2(K)) y_{A\rho, \lambda}(K)$$

$$+ 2 \epsilon_{A\rho}^{1/2}(K) C_{A\rho}(K) \sum_{B\sigma} I_{AB}(K) \epsilon_{B\sigma}^{1/2} C_{B\sigma} y_{B\sigma, \lambda}(K) = 0$$

となる。固有値方程式(1.2.29)は

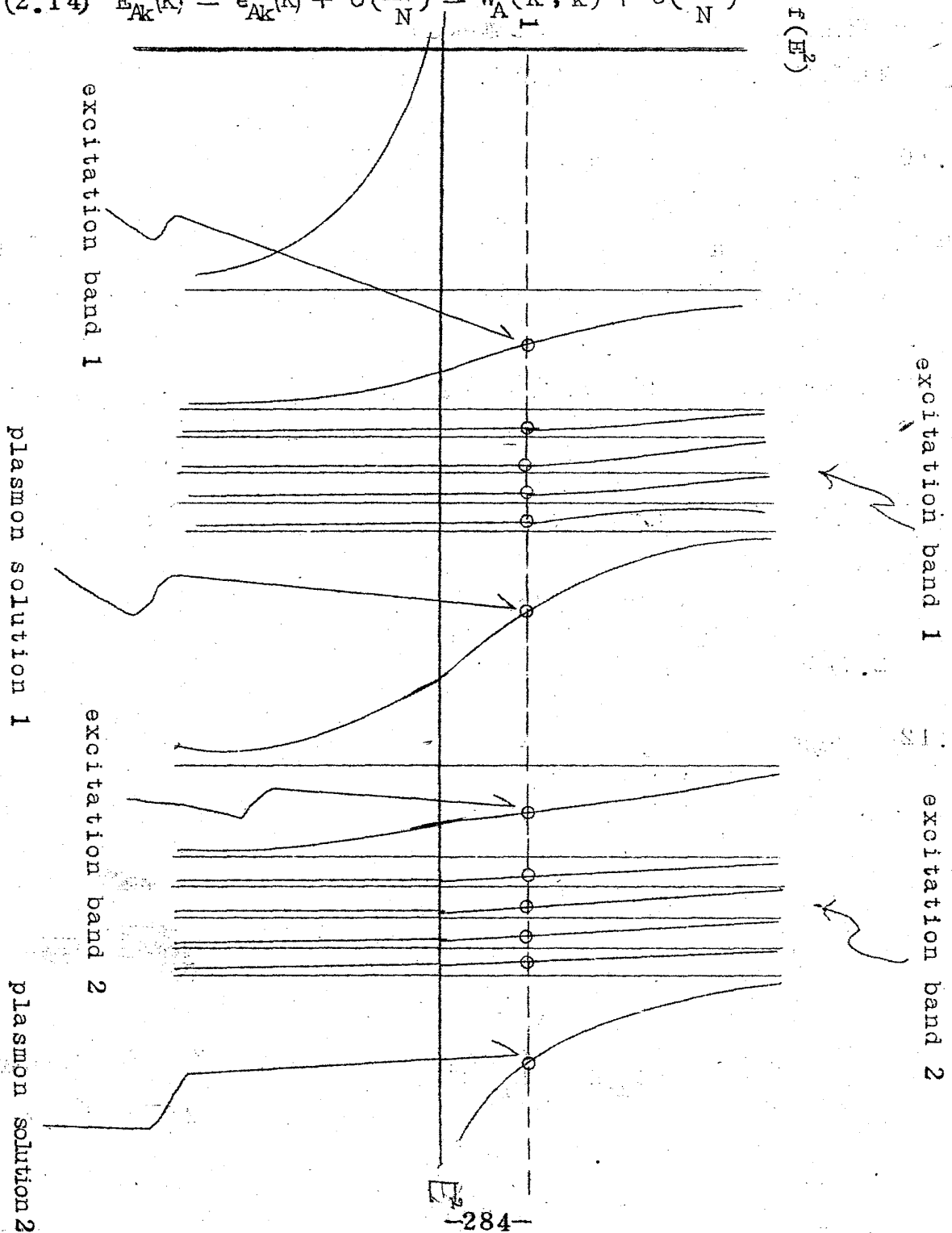
$$(2.13) \quad 1 = \sum_A I_{AA}(K) \sum_\rho \frac{2\epsilon_{A\rho}(K) C_{A\rho}^2(K)}{E_\lambda^2(K) - \epsilon_{A\rho}^2(K)}$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{A,B} (I_{AA}(K) I_{BB}(K) - |I_{AB}(K)|^2) \sum_\rho \frac{2\epsilon_{A\rho}(K) C_{A\rho}^2(K)}{E_\lambda^2(K) - \epsilon_{A\rho}^2(K)} \sum_\sigma \frac{2\epsilon_{B\sigma}(K) C_{B\sigma}^2(K)}{E_\lambda^2(K) - \epsilon_{B\sigma}^2(K)}$$

福留秀雄

となる。Band の数が有限の時異なる excitaton A の数は有限で(2.13) は有限項で閉じる。(2.13)の右辺を  $E_A^2(k)$  の函数としてみると  $\epsilon_{AA}^2(k)$  に pole を持ち図の様に振舞う図には  $I_{AA}(k) > 0$  の場合が記してある。図から解かるように方程式(2.13)は band solution

$$(2.14) \quad E_{Ak}^2(k) = \epsilon_{Ak}^2(k) + O\left(\frac{1}{N}\right) = W_A^2(k, k) + O\left(\frac{1}{N}\right)$$





他に excitation band から離れた解を持つている。

その第一は方程式(2.1)の解としてすでに現われていた exciton solution で  $I_{AA}$  の符号によらず band の下に出る。これに対して方程式(2.12)の段階で初めて現われる解は  $I_{AA}(K) > 0$  の時 band の上に  $I_{AA}(K) < 0$  の時の band の下に (exciton solution よりはず必ず上に) 現われるもので、これは plasma 振動状態に対応する解である。Exciton 及び plasmon 状態に対して(2.13)を解く為に(2.13)を次のように変形しよう。Transition A に属する固有値を  $E_A$  と書くことにする。

$$(2.14) \quad 1 - \sum_{B \neq A} (I_{BB} - \frac{1}{2} \sum_{C \neq A} (I_{BB} I_{CC} - |I_{BC}|^2)) \sum_{\sigma} \frac{2\epsilon_{C\sigma} C_{C\sigma}^2}{E_A^2 - \epsilon_{C\sigma}^2} \sum_{\rho} \frac{2\epsilon_{B\rho} C_{B\rho}^2}{E_A^2 - \epsilon_{B\rho}^2}$$

$$= (I_{AA} - \sum_{B \neq A} (I_{AA} I_{BB} - |I_{AB}|^2)) \sum_{\sigma} \frac{2\epsilon_{B\sigma} C_{B\sigma}^2}{E_A^2 - \epsilon_{B\sigma}^2} \sum_{\rho} \frac{2\epsilon_{A\rho} C_{A\rho}^2}{E_A^2 - \epsilon_{A\rho}^2}$$

異なる transitions A, B 間の energy gap が大きく band 幅が小さい時には  $E_A, \epsilon_{B\sigma}$  をその第一近似値である  $W_A^{(0)}, W_B^{(0)}$  で置き換えて

$$(2.15) \quad \sum_{\sigma} \frac{2\epsilon_{B\sigma} C_{B\sigma}^2}{E_A^2 - \epsilon_{B\sigma}^2} \approx \frac{2W_B^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_B^{(0)2}} \sum_{\sigma} C_{B\sigma}^2 = \frac{2NW_B^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_B^{(0)2}}$$

(2.15)を(2.14)に代入して

$$(2.16) \quad 1 = L_{AA} \sum_{\rho} \frac{2\epsilon_{A\rho} C_{A\rho}^2}{E_A^2 - \epsilon_{A\rho}^2}$$

を得る。ここに

$$(2.17) \quad L_{AA} = (I_{AA} - \sum_{B \neq A} N (I_{AA} I_{BB} - |I_{AB}|^2)) \frac{2W_B^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_B^{(0)2}}$$

$$\div (1 - \sum_{B \neq A} N I_{BB} \frac{2W_B^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_B^{(0)2}})$$

$$\approx I_{AA} + \sum_{B \neq A} N |I_{AB}|^2 \frac{2W_B^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_B^{(0)2}}$$

ここで  $|N I_{CB}| / (W_A^{(0)} - W_B^{(2)}) \ll 1$  として、この2次以上の項を省略した。

福留秀雄

Exciton 状態と plasmon 状態に対して(2.16)を解くために(2.16)の和を exciton 状態と band 状態の和に分けよう

$$\sum_{\rho} \frac{2\epsilon_{A\rho} C_{A\rho}^2}{E_A^2 - \epsilon_{A\rho}^2} = \frac{2\epsilon_{Ae} C_{Ae}^2}{E_A^2 - \epsilon_{Ae}^2} + \sum_k' \frac{2\epsilon_{Ak} C_{Ak}^2}{E_A^2 - \epsilon_{Ak}^2}$$

この第二項を近似的に計算する為  $C_{Ak}^2$  をその平均値  $1-p_{Ae}$  で書き換え level density 一定として和を積分に置き換えて

$$\begin{aligned} \sum_k' \frac{2\epsilon_{Ak} C_{Ak}^2}{E_A^2 - \epsilon_{Ak}^2} &= \frac{N(1-p_{Ae})}{d_A} \int_{W_{Amin}}^{W_{Amax}} \frac{d\epsilon^2}{E_A^2 - \epsilon^2} \\ &= \frac{N(1-p_{Ae})}{d_A} \ell n \frac{E_A^2 - W_{Amin}^2}{E_A^2 - W_{Amax}^2} \end{aligned}$$

よつて(2.16)は

$$(2.18) \quad 1 = N L_{AA} \left( \frac{2\epsilon_{Ae} p_{Ae}}{E_A^2 - \epsilon_{Ae}^2} + \frac{1-p_{Ae}}{d_A} \ell n \frac{E_A^2 - W_{Amin}^2}{E_A^2 - W_{Amax}^2} \right)$$

となる。

次に振幅  $y$  は(1.2.30)より次の様に与えられる。

$$(2.19) \quad y_{B\sigma, A\rho}(K) = \frac{\sqrt{2} \epsilon_{B\sigma}^{1/2}(K) C_{B\sigma}(K)}{E_{A\rho}^2(K) - \epsilon_{B\sigma}^2(K)} L_{BA}(K) D_{A\rho}(K)$$

ここに

$$\begin{aligned} (2.20) \quad L_{BA} &= \left\{ I_{BA} - \sum_{C \neq B} (I_{CC} I_{BA} - I_{BC} I_{CA}) \frac{2N W_C^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_C^{(0)2}} \right\} \\ &\quad \div \left\{ 1 - \sum_{C \neq A} N I_{CC} \frac{2W_C^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_C^{(0)2}} \right\} \\ &\approx I_{BA} + \sum_{C \neq A} N I_{BC} I_{CA} \frac{2W_C^{(0)}}{W_A^{(0)2} - W_C^{(0)2}} \end{aligned}$$

$$(2.21) \quad D_{A\rho}^{-2}(K) = \sum_{B\sigma} \frac{2\epsilon_{B\sigma} C_{B\sigma}^2}{(E_{A\rho}^2 - \epsilon_{B\sigma}^2)^2} |L_{BA}|^2$$

$$\approx \sum \frac{2\epsilon_{A\sigma} C_{A\sigma}^2}{\sigma (E_{A\sigma}^2 - \epsilon_{A\sigma}^2)^2} L_{AA}^2$$

(2.20), (2.21)において(2.17)で使ったと同じ近似を用いた。(2.21)式は(2.16)式を  $L_{AA}$  によつて微分することにより得られる式

$$\sum \frac{2\epsilon_{A\sigma} C_{A\sigma}^2}{\sigma (E_{A\sigma}^2 - \epsilon_{A\sigma}^2)^2} L_{AA}^2 = 1 / \frac{\partial E_{A\sigma}^2}{\partial L_{AA}}$$

より

$$(2.22) \quad D_{A\sigma}^2(K) = \frac{\partial E_{A\sigma}^2}{\partial L_{AA}}$$

とも書くことが出来る。

以上に導びいてきた式は band 幅が非常に小さく

$$(2.23) \quad d_A \ll |NJ_{AA}|$$

が成り立つ時には非常に簡単になる。この時には  $p_{Ae} \approx 1$  で exciton 状態以外の状態を無視することが出来る。そして方程式(2.1), (2.12)の解は次のように与えられる。

$$(2.24) \quad \left\{ \begin{array}{l} \epsilon_{Ae} = W_A^{(0)} + NJ_{AA} \\ x_{Ae}(K, k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \\ E_{Ae}^2(K) = \epsilon_{Ae}^2 + 2NL_{AA}(K)\epsilon_{Ae} \\ y_{Be, Ae}(K) = \frac{2\epsilon_{Be}^{1/2}\epsilon_{Ae}^{1/2}}{E_{Ae}^2(K) - \epsilon_{Be}^2} NL_{BA}(K) \\ = \frac{2\epsilon_{Be}^{1/2}\epsilon_{Ae}^{1/2}}{\epsilon_{Ae}^2 - \epsilon_{Be}^2 + 2NL_{AA}(K)\epsilon_{Ae}} NL_{BA}(K) \end{array} \right.$$

実際の polynucleotide では(2.23)が成り立っているかどうか疑わしいが第一近似として(2.24)式は有用であろう。 続く

福留秀雄

参 考 文 献

- 1) 福留秀雄 物性研究 Vol12 No5
- 2) R. Steiner and R.F. Beers; Polynucleotides Elsevier '61
- 3) A. Kornberg; Enzymatic Synthesis of DNA '62
- 4) H. DeVoe and I. Tinoco; J. Mol. Biol. (62) 4 500-517  
518-527
- 5) J. Ladik and K. Appel; J. Chem. Phys. (64) 40 9 2470
- 6) Y. Takeuchi; Prog. Theory. Phys. (57) 18 421

訂 正

前号 Vol 2 No 5 の論文に誤りがあるので訂正します

256 頁 8 行目 ヘモグロビンの 2 つのヘム → 4 つのヘム

(2.26)式右辺 →  $V_{\rho\tau}V_{\tau\lambda} - V_{\tau\tau}V_{\rho\lambda}$

(2.29)式右辺第三項に 1/2 をかける

(3.13)式右辺第三, 第四項に 1/2 をかける

§ 4 (4.2), (4.4), (4.7), (4.11)式で

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{q}} \rightarrow \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{qcV}} \quad (V \text{ は normalization volume})$$

(4.3), (4.5), (4.8)式で

$$\frac{e^2}{2m^2} \frac{\sum q'}{qq'} \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{qq'}} \rightarrow \frac{e^2}{2mc} \frac{\sum q'}{qq'} \frac{2\pi\hbar}{W\sqrt{qq'}}$$

(4.13)式で

$$\frac{e^2 q}{2\pi m^2 \hbar c} \rightarrow \frac{(2\pi)^2 e^2}{m^2 c^2 q}$$