1011

量子化学の幾何学的表現

青野茂行　　金沢大学名誉教授
aonosan2007@ybb.ne.jp

一般相対論

一般相対論では、Newton の第一法則と第二法則が合体している。空間は４次元的 Riemann 空間であり、その歪みが potential の役目をする。距離の不変量

$$ds^2 = g_{\mu\nu} du^\mu du^\nu, \tag{1}$$

を optimize して運動方程式 (geodistic equation) を導く：

$$\frac{d^2 u^\mu}{dt^2} + \Gamma^\mu_{\nu\rho} \frac{du^\nu}{dt} \frac{du^\rho}{dt} = 0. \tag{2}$$

空間は、点から点へ flame を変えてゆくから、Christoffel の三点記号はそれらの接続を与え、metric tensor, $g_{\mu\nu}$ の微分で表される。これを１次元調和振動子にあてはめてみる。

$$\frac{d^2 u^1}{dt^2} = \frac{1}{2} g^{11} \left(g_{00,1} + g_{11,1} \frac{du^1}{dt} \frac{du^1}{dt} \right), \tag{3}$$

一方、通常の力学から、

$$\ddot{u}^1 = -\omega_0^2 u^1. \tag{4}$$

二つを比べて、すなわち、空間方向には flat、時間方に歪んでいる：

$$\begin{aligned} & g_{11,1} = 0 \\ , \qquad & \frac{1}{2} g^{11} g_{00,1} = -\omega_0^2 u^1. \end{aligned} \tag{5}$$

量子化学

量子力学的場の理論では、ある粒子が condense した状態を vacuum と考えたい：例えば Dirac sea.

不変量として energy を考える。

$$H^0 = |r > \beta_{rs} < s| \tag{6}$$

これから得られる metric は

$$g_{ij} = \delta_{ij} \ |i >< j| \qquad i = \{occ\} \text{ まで} \tag{7}$$

及び、bond order

$$q_{rs} = \sum_i^{occ} < r|i >< i|s > \tag{8}$$

空間のゆがみは摂動 v の 2 次によって引き起こされる。

$$\begin{aligned}
\Delta E^{(2)} &= \frac{1}{2\pi i}\oint dz \frac{1}{2} v_{rs} G^0_{st} v_{tu} G^0_{ur}. \\
&= \frac{1}{2\pi i}\oint dz \frac{1}{2} v_{rs} \frac{< s|i >< i|t >}{z - \epsilon_i} v_{tu} \frac{< u|j >< j|r >}{z - \epsilon_j} \\
&= \sum_i^{occ}\sum_j^{un} \frac{v_{rs} < s|i >< i|t > v_{tu} < u|j >< j|r >}{\epsilon_i - \epsilon_j} \\
&= v_{rs}\Pi_{rs;tu} v_{tu}
\end{aligned} \tag{9}$$

ここで

$$\begin{aligned}
\Pi_{rs;tu} &= \sum_i^{occ}\sum_j^{un} \frac{v_{rs} < s|i >< i|t > v_{tu} < u|j >< j|r >}{\epsilon_i - \epsilon_j} \\
&= \sum_i^{occ}\sum_j^{un} v_{rs}\Gamma^{ij}_{rs;tu} v_{tu},
\end{aligned} \tag{10}$$

さらに

$$\Gamma^{ij}_{rs;tu} = \frac{< s|i >< i|t >< u|j >< j|r >}{\epsilon_i - \epsilon_j} \tag{11}$$

そして

$$\begin{aligned}
\Pi_{rs;tu} &= \sum_i^{occ}\sum_j^{un} \Gamma^{ij}_{rs;tu} \\
&= \overrightarrow{\partial}_{v_{rs}} E^{(2)} \overleftarrow{\partial}_{v_{tu}} \\
&= \overrightarrow{\partial}_{v_{rs}} q_{ut}
\end{aligned} \tag{12}$$

Polarizability は curvature, (rs) は座標の役目をしている。
　更に、対 (ij) は、radiative pertubation によって選択される。

$$\begin{aligned}
\Pi_{rs;tu} &= \frac{1}{2\pi i}\bar{\rho}(\omega_k)\int d\omega_k \sum_i^{occ}\sum_j^{un} v_{rs} < s|i >< i|t > v_{tu} < u|j >< j|r > \\
&\quad \times \left\{ \mathrm{P}\frac{1}{\epsilon_i - \epsilon_j + \omega_k} - i\pi\delta(\epsilon_j - \epsilon_i + \omega_k) \right\} \\
&= -\bar{\rho}(\omega_k)\frac{1}{2} v_{rs} < s|H >< H|t > v_{tu} < u|L >< L|r > .
\end{aligned} \tag{13}$$