

## Neumann-Wigner および Schrödinger の原論文の 記述に関する考察

○野平 博之<sup>1</sup>、野平 俊之<sup>2</sup>

<sup>1</sup>埼玉大名誉, <sup>2</sup>京都大エネ研

[h.nohira@jcom.home.ne.jp](mailto:h.nohira@jcom.home.ne.jp)

1. さきに、福井理論と Woodward-Hoffmann 理論の統一理論に関連して、軌道相関図に非交差則を適用する必要がないこと<sup>1)</sup>、および時間依存の Schrödinger 方程式と云えども非定常状態を正確には記述できないこと<sup>2)</sup>を指摘した。これらの問題に関して提唱者である Neumann-Wigner および Schrödinger がそれぞれの原論文でどのように述べているかを明らかにすると共に、量子化学反応動力学との関係について考察する。

2. Neumann と Wigner は、“Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen” という論文<sup>3)</sup>で Fig. 1 を挙げ、主に断熱変化における系のエネルギー  $E$  の挙動を論じている。しかし、その後半の数行に「変化の速度が大きい場合、エネルギーは非交差とはならず、 $E_2 \rightarrow E_1$  のように変化する」と述べている。その後、この記述が顧みられることなく無視されてきたのは、化学素反応の速度が的確に認識されてこなかったためと思われる。

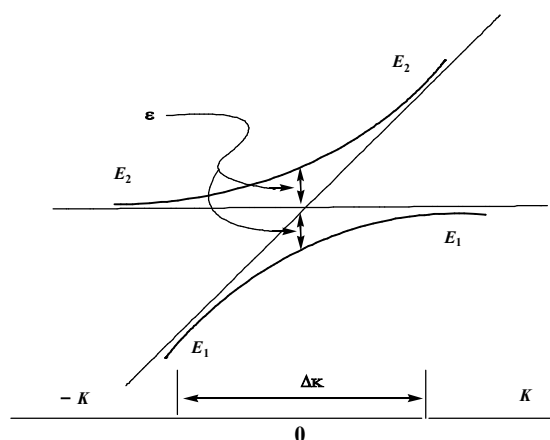


Fig. 1 The electronic state diagram shown in the Neumann-Wigner's paper<sup>3)</sup>.

3. Schrödinger は“Quantisierung als Eigenwertproblem” という論文<sup>4)</sup>の中で、微分形の時間依存波動方程式(1)の解に関して、「時間  $t$  について、エネルギー  $E$  に関する周期因子(2)で表される解ではなくて、4 次の波動方程式をつかみ出さなければならないが、これには成功しなかった」と述べている。その後、この記述がどのように受け止められているのであろうか。ここでは、式(3)を用いた微分演算法<sup>5)</sup>、および広く用いられている式(4)の適用例<sup>6)</sup>の奇妙さについて考察する。

$$\Delta\psi - \frac{2(E-V)}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

$$\psi \approx e^{\pm \frac{2\pi Et}{h}} \quad (2)$$

$$i \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2\hbar} \omega^2 x^2 \psi \quad (3)$$

$$\psi(r,t) = \sum_n C_n(t) \phi_n(r) e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

[文献]

1) 野平博之、第12回理論化学討論会、1B6b (2009, 東京大) および H. Nohira, T. Nohira, *J. Theor. Comput. Chem.* **11**, 379 (2012). 2) 野平博之、野平俊之、日化 92 春年会、2A4-15 (2012, 慶応大). 3) J. von Neumann, E. Wigner, *Z. Physik*, **30**, 467 (1929). 4) E. Schrödinger, *Ann. Physik (4)*, **81**, 109 (1929). 5) L. Susskind, A. Friedman 共著、森弘之訳、スタンフォード物理学再入門、量子力学、pp. 287-288, 日経 BP 社, 2015. 6) D. J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics A Time Dependent Perspective*, pp. 7-10, University Science Books, 2007, 同、山下ほか訳、入門量子ダイナミクス、時間依存の量子力学を中心に (上) pp. 8-12, 化学同人、2011.