

Scaled Schrödinger equation と静電力理論、SAC-CI 理論の複合理論

(量子化学研究協会・研究所¹⁾) ○中辻 博¹

Scaled Schrödinger equation, ESF and SAC-CI combined theory

(¹*Quantum Chemistry Research Institute, Kyoto, Japan*) ○Hiroshi Nakatsuji¹

In natural science, the so-called “*God Equation*” is important. Newton’s equation of motion is an example. It is solvable and its exact solutions on astronomy were useful for preparing calendar and space rockets. On the other hand, for chemical worlds, quantum mechanics is the principle and so the exact solutions of the Schrödinger equation (SE) are crucial. However, unfortunately, this equation was considered “insolvable” for long, except for the hydrogen atom. In 2004, however, the theory for solving the SE was discovered by one of the authors by introducing the scaled Schrödinger equation (SSE) which is equivalent to the SE but does not diverge in the exact variational formula. Here, we propose a new theory that solves the SSE in the frame work of the Hellmann-Feynman theorem, SAC/SAC-CI theory, and Free Complete-Element (FC) Theory. The theory has been successfully applied to the ground state, singlet & triplet excited states and ionized states of benzene, pyridine, N₂, CO and other molecules.

Keywords : *Exact Solutions of Scaled Schrödinger Equation; Electrostatic Force (ESF) Theory; SAC/SAC-CI theory for Ground, Excited, Ionized and Anionized States of Many Molecules*

自然科学ではいわゆる「神の方程式」が重要である。シュレーディンガー方程式 (SE) は化学を支配する式といわれるが、変分法でその exact な解を求めようとするとその変分式は無限大に発散する欠陥を持つ。演者は SE に代る正しい式・スケールドシュレーディンガー方程式 (SSE) を 2004 年導入しこの困難を解決した。この SSE は正確に解け、一般解法として自由完員関数理論 (Free Complete-element theory) を提案した。これにより量子の世界も、古典世界のニュートン方程式のように、「解ける exact な理論体系」を得た。この理論で Li₂ 分子の 9 個の基底・励起状態のポテンシャルカーブを計算すると、実験による詳細なカーブが驚くほど完全に再現された。「量子の世界」を本理論により exact に研究していく道が、確かに、開かれたのである。

本講演では、この理論に演者の「静電力理論」と、基底・励起・イオン化状態に対する SAC/SAC-CI 理論とを結合し、正確・有用・かつ汎用性のある新しい理論体系を構築したので報告する。この新理論を benzene、pyridine、N₂、CO 等に応用すると、上記の全ての状態のスペクトルを全て正確に再現し、理論の超正確な予測性が確認された。このように、この新理論は、極めて安定に効率よく、原子・分子の基底・励起・イオン化状態の超正確な波動関数を計算でき、極めて有用である。

1) H. Nakatsuji, “Scaled Schrödinger equation and the exact wave function”. *Phys. Rev. Lett.* 93, 030403 (2004). doi:10.1103

2) H. Nakatsuji and H. Nakashima, “Potential curves of the lower nine states of Li₂ molecule: Accurate calculations with the free complement theory and SAC/ SAC-CI theory”. *J. Chem. Phys.* 157, 094109 (2022). doi:10.1063/5.0101315