

17s2001: 「四次元」とはどのようなものだと先生は考えていますか? M: 別に. 位置を特定するために四つの変数を必要とする空間. 『自分で考えればいいのでは?』

17s2003: 磁場によるエネルギー準位の分裂はスピン角運動量を考慮した場合とそうでない場合とどうちがうのですか? M: 講義での説明が全く理解されていなくて残念. // 角運動量がないということは, 磁気モーメントが zero ということ. ポテンシャルエネルギーは $V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$ であるので, ↑

17s2004: 教科書の図は実関数表現ですが複素関数表現をとることはありますか. またある場合はどのような場合ですか. M: 教科書や参考書を読んで, 量子化学をよく勉強すれば分かるのでは?

17s2005: 電子による遮へいと貫入の効果は波動関数上に現れますか. M: 仮説 1 の意味をよく考えれば分かるのでは? 『理解していない予感.』

17s2006: $2p_0$ のグラフは存在確率をもとに書いてあるが, どうして中心を通らないのですか? 2 つの領域に何か力が働いているのでしょうか? M: 何の話か? // その図が何を表わしているのか, ↑

17s2007: 図 6.7 に水素原子波動関数の三次元プロットがありますが, 同じように多原子分子でもプロットできるのででしょうか. M: できる・できないを個別に暗記しても無意味. プロット方法に基づいて, 自分で考えれば分かるのでは?

17s2008: ヘリウム以降の原子もシュレーディンガー方程式で厳密に解くことはできないのですか? M: できる・できないを個別に暗記しても無意味. 解ける理由・解けない理由を理解して, それぞれの場合について考える. 『のでは?』

17s2009: 1 つの原子に複数の電子があると, 電子管反発が生じるが, 他原子の電子は波動関数に影響をおよぼすのか? M: 電子間反発について理解不足の予感. 物理学の基礎も復習する必要がある ↑

17s2010: 実関数の形の原子オービタルの計算で教科書と違う流儀を使うのは何か先生なりのこだわりがあるのですか. M: 昇降演算子を作用させた結果が, Condon & Shortray の流儀でないときれない一般形で書けない.

17s2011: はじめに見た, 図 6.3 の確率密度のグラフについてですが, 最大値の部分に電子のある確率が一番高くなるということですか. そのグラフによって何がわかるのかがいまいまいわかりませんでした. M: 今更ですか. 波動関数の意味については, 教科書 4 章や参考書をよく読んで, しっかり復習しておく必要があるのでは?

17s2012: 磁場のあるところではエネルギー準位が分裂することをゼーマン効果と言いますが, 分裂したエネルギー準位が最も高いものについて, 電子のスピンによって発生した磁気モーメントが磁場と反対に近い向きを持っているということと合っていますか. M: 自分で判断できないのは ↓

17s2013: 原子番号 2 のヘリウム原子のシュレーディンガー方程式が厳密には解けないとなると原子番号 3 以上の原子でシュレーディンガー方程式が厳密に解けるものは存在するのか. M: 17s2008 参照 『なぜか?』

17s2014: 教科書 p.237 に電子間反発項があるためヘリウム原子のシュレーディンガー方程式が厳密に解けないとあるが, 様々な法則で電子間反発による例外が生じるのはこのためか? M: 意味不明. 様々な法則とか例外とかは, 何のことか?

17s2015: 三次元空間を表すためにもう 1 つ軸がいておっしゃっていましたが, もし追加できるとしたら, xyz ときて次は何という軸になるのですか. M: 別に. 自分定義の変数名など, 好きに選ばいいのでは? 『は何か?』

17s2016: 気体原子や気体分子は剛体球なのか? M: 自分で判断できないのはなぜか? // 剛体と ↑

17s2017: 図 6.5 水素原子オービタルの確率密度のプロットにあるように, 水素原子の電子は 1s に 1

つ存在すると思っていたのですが, $2s$ などの軌道にも存在するのですか. M: 教科書 1 章で見た水素原子の輝線の発光スペクトルがなぜ存在するのか?

17s2018: 図 6.5, 6.6 で, 規則性をもつのは何なのか? M: 意味不明. どんな規則の話か?

17s2019: 核質量 \gg 電子質量 であることから 3 体問題を 2 体問題と考えることは p.237 (6.65) が厳密に解けない要因の 1 つと考えられますか? M: 2 体問題なら厳密解が得られるのでは?

17s2020: 最初のグラフの時に, 2.1 からグラフの形が前のグラフとの形と傾向が違うが それはなぜか? M: 意味不明. 何のどんな話か?

17s2021: 図 6.3 でなぜ 1s だけ他と比較して特別値が高いのか? M: 別に. 普通でしょ? // そのグラフが他と比べて小さいのはどこか?

17s2022: He 以降の全原子は近似解になるんですか? M: 17s2008 参照

17s2024: スピン量子数は波動関数を解く際には用いられないとありましたが, どのようなときに用いるのですか. M: パウリの排他律とかフントの規則とか. もちろんハートリー・フォック法については, 教科書や参考書を読めば分かるのでは?

17s2025: 最初のグラフを説明するときに使用していたソフトを教えてください. M: 20180508 の 17s2010 参照

17s2026+: 教科書を見る限り, 電子間反発項の存在が厳密に解けない直接の原因であると思いましたが, 近似解を求める方法の一つに電子間反発項の平均を用いることは可能ですか. M: 色々な方法は, いつでもどこでも実行可能. ただしよい近似と悪い近似とがあるだけ. 極端な例では, 電子間反発項を無視する近似もありうる. 実測値との乖離が大きい, あまりよくない近似だが...

17s2027: この近似的方法を研究していた時代は, 手計算だったのですか? もうコンピューターなどを使っていたのですか? M: コンピュータが発明されたのは, いつ?

17s2028: 接面 [原文ママ] に電子は存在しないと授業内で説明があったが, $2p$ 軌道内を動きまわる電子がローブの片側からもう片方のローブに動く際, 接面を超える [原文ママ] ときにワープしてもう片方のローブへ移動する, ということか? M: 量子力学的な粒子は, 古典力学的な運動の軌跡をとらない. 教科書 3 章や参考書をよく読んで復習する必要があるのでは?

17s2029: 水素原子とその他の原子で確率密度プロットをしたときにどのような違いが見られるのか? M: 自分でプロットしてみれば分かるのでは?

17s2030: 多電子原子の波動関数のオービタル近似で, 近似の限界とは何でしょうか. M: (何でもかんでも w) 電子相関

17s2031: 波動関数の動径部分が軌道の大きさ, 原点からの距離を示しているのであれば, 角度成分の絶対値はなにを表しているのか. M: え? 宿題でやったでしょ?

17s2032: 原子を磁場中に置くと, エネルギーがぶんさんするのは, z の影響とはどういうことですか. M: 意味不明. “エネルギーがぶんさんする” とは, どういうことか? “ z の影響” とは, どういう影響のことか? // もしかして激しく誤解している?? 教科書や参考書をよく読んで考え直してみれ ↓

17s2033: なぜ l が大きくなるほど電子の存在確率のピークは内側にくるのですか? M: l が小さいものの方が動径方向の節の数が多くなり, 核に近い部分に確率密度の極大があることは, 講義でも紹介しました. それにもかかわらずエネルギーが同じということは..... 『ばいいのでは?』

17s2034: スピン量子数の話の中で, 「第 4 の自由度」という表現がありました, 自由度とは何ですか? M: 言葉の意味がわからなければ, 辞書を見ればいいのでは? // 物理学の基礎を復習する必要があるのでは?

17s2035: ヘリウム原子では, シュレーディンガー方程式は厳密に解くことができないが, ヘリウム原子

から電子が1つとれたヘリウムイオンの系では、水素原子のように、シュレーディンガー方程式を厳密に解くことができるのか。 **M:** 17s2008 参照

17s2036: ヘリウム原子のシュレーディンガー方程式が厳密に解けないことによる影響は何かあるのでしょうか。 **M:** 人・時・場合によるのでは？

17s2037+: p オービタルは基本的な形は同じで傾く角度が異なるだけですが、d オービタルはなぜ d_{z^2} だけ形が異なっているのでしょうか。 **M:** d_{z^2} オービタルの角度依存性は、本当は $3z^2 - r^2$ であり、 $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ であることを考慮すると、 $3z^2 - r^2 = (z^2 - x^2) + (z^2 - y^2)$ であって、四葉のクローバーの形が基本形です。

17s2038: 無機化学などで、原子(電子軌道)の空間的なひろがりという概念がありましたが、これは波動関数の動径部分の収束の速さによって決定されるのでしょうか？ **M:** 電子の存在確率密度が、有限区間に限定されていないことは、原子オービタルを習ったあとでは自明のことでしょう？

17s2039: ヘリウム原子は近似しなければ解けない。 $e^2/4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ が解くことを難しくさせているのは何故か。 **M:** 講義での説明が全く理解されていないようで、残念。// 水素原子などの解ける系では、偏微分方程式をどう処理したか？ 『る話か？

17s2040: 理論値と実験で出た値は どこまで差を認められるのですか。 **M:** 意味不明。だれが認め↑

17s2041: 教科書 p.237 の 6.7 で『厳密』という言葉について考えましたが、このように日常語と異なる意味だと分かるためには、勉強を通して経験的に身につけるしかないのでしょうか。 **M:** 日常とは異なる独特の語法というものはあるようです。

17s2042: 厳密に解けないというのは具体的にどういった場面か **M:** 17s2008 参照

17s2043: 前回の課題のような図形をパソコン上で表示するアプリケーションで有用なものを教えていただけませんか？ // 近似を利用する時は、どの程度正確であればよいのでしょうか？ **M:** 目的や使い勝手に応じて選べばいいのでは？ // 近似解を求めて、あなたは何をやりたいのか？

17s2044: p.229 の $\psi_{1s}(r, \theta, \phi)$ には θ と ϕ への依存性がないが完全な波動関数であることを強調するために、 r, θ, ϕ の依存性を表示してあるとあるが、 θ, ϕ の依存性を表示しないことで生じる問題はあるか？ **M:** へ？ 依存性は示されているでしょ？ 定数だと。

17s2045: [白紙] **M:** 提出物が要件を満足していない。

17s2046: p.237 に「 $M \geq m_e$ だから、電子の～のように書ける」とあるがこれ以外の方法でシュレーディンガー方程式を書くことはできるのですか？ **M:** (6.64) でしょ。// 国語力不足？

17s2048: 解析的に解けないものは厳密ではないとのことでしたが何かしらの近似を使って求められた解は全て厳密ではないということ間違いないでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ 講義でした説明の、どこが理解できなかったのでしょうか？

17s2049: ヘリウム原子のシュレーディンガー方程式は厳密には解けないとありましたが、前回の授業で水素原子の角度方向についての式を解くとき、初期位相の値は、物理的にはどれでもよいとして $\tau = 0$ と考えましたが、これは厳密に解いたとは言えないということでしょうか。もしそうなら、角度方向について厳密に解くことはできるのでしょうか。 **M:** でもそれは、方程式を完璧に満足する解でしょ？

17s2051: 原子番号が大きくなるにつれ、シュレーディンガー方程式の解は違いが大きくなると思いますが、すべての原子で実用的なのですか？人がつくりだした原子では使えますか？ **M:** 実用的かどうかの基準は何か？ // 自然法則に逆らうものを人為的に作れるのか？

16s2006: ゼーマン効果によると磁場が存在するときエネルギー準位が分裂するが、磁場はどのような条件で発生するのか。 **M:** 電磁気学を勉強すれば分かるのでは？

16s2009: 磁場をかけると、縮退していた軌道のエネルギー準位が分裂し、この場合にも構成原理が成り立つならば、磁場のオンオフによって外界とエネルギーを交換する熱媒体として使えないか。 **M:** 何がどうなって、熱媒体になるというのか？

16s2014: ヘリウム原子のシュレーディンガー方程式は厳密に解けないため、近似解を求めるとあるが、厳密な解が分からないのに、なぜ近似の解(値?)が分かるのか。変分法等は水素原子に適用できるのか。 **M:** 近似解を改良する系統的方法がある。 『する必要はある？

16s2019: $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{12}|}$ と $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}$ が同値な理由は何か。 **M:** 本気か？ベクトルについて復習↑

16s2023: 量子力学の分野では方程式を解くと近似解が出てくることが多く厳密には解けないものが多いと感じますが、逆に量子力学の世界で厳密に解ける方程式はあるのですか？(厳密に解けなくても十分ではありますが...) **M:** 他の古典物理学分野一般でも、厳密に解けないものはあるだろう。それぞれの分野でそれが多くかどうか、私は数えたことがないので知らない。厳密に解けることは、物理学的に、そんなに重視すべきことなのだろうか？

16s2026: 原子オービタルにおいて、実関数で表すか複素関数で表すか、どのような基準で決まるのか。 **M:** 当然、場合場合で適切な方を選ぶ。どちらでもよい場合もあるだろうが。// 重ね合わせの原理とか、縮重系の摂動とかもヒントになるかも。

16s2028: 三次元を二次元で表すには どうするのか？ **M:** 本気か？ 写生とか、見取り図を書いたりなどをしたことがないのか？

16s2040: 近似解でがまんすると言っていましたが、文献値や実験値で近似解でなく厳密解で描かれているものはあるのでしょうか。 **M:** そりゃ、場合によっては、あるかもしれませんネ。でも、それがどうかしましたか？

16s2044: 電子はエネルギー準位が低い軌道から順に入っていくが Cr の電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^1(3d)^5$ で、4s 軌道の方がエネルギー準位が低いはずなのに、4s 軌道に電子が入りきる前に 3d 軌道に電子が入っている。量子化学ではなぜこのようになるのか説明できるのか。 **M:** もちろん出来る。// 全エネルギーが最小になるようになる。

16s2046: 図 6.7 でオービタルについてよい表現ではないとあるが、それはなぜか。 **M:** キャプションに理由が書かれているのだが、どこが理解できないのか？ // 日本語力不足か？

16s2048: 表 6.5 の式は同じ量子数の違う原子にも応用できるのか。 **M:** ハミルトニアンは、どうなっているか？

16s2049: ゼーマン効果により、エネルギー準位の縮退が解けると、第一イオン化エネルギーの値も変化してしまうのか？ **M:** 電子が出ていくオービタルのエネルギーは変化するか？

15s3005: PC のソフトでも水素分子以外のシュレーディンガー方程式は解けないのか？ **M:** 原理の話をしているので、使用する道具は関係ない。// PC のプログラムにおける計算のアルゴリズムはどうなっているか？

15s3007: 厳密なものの紹介で微分・積分は少し違うかなと聞いていたと思うんですが、それは、 $\frac{d}{dx} x^2$ が $2x$ となるように微分する前と後で値が変わるからですか？ **M:** いいえ。四則演算などの操作を有限回おこなう、というところが気になります。

15s3014: 十分な桁で近似できればいいのであれば円周率を何十桁求めるのは使いどころがないのでしょうか。 **M:** 実用上(円の面積を求めるとか)は、適当な桁数があれば十分でしょう。しかし π に限れば、学術的な興味は永遠に尽きないでしょう。

15s3025: 図 6.3 においてピークが複数あるものがありますが、これは何を意味しているのですか？

M: ピークが複数ある。節がある。

『かるのでは？

15s3028: 重水素のシュレーディンガー方程式は厳密に解けるのか？ **M:** 自分で計算してみれば分↑

15s3030: [白紙] **M:** 提出物が要件を満足していません。

15s3048: 図 6.7 は角度部分の 3 次元プロットであるが、動径関数を含むとどのような図になるのか。

M: 自分で描いてみればいいのでは？

14s3019+: スピン量子数なぜ ± 1 ではなく $\pm \frac{1}{2}$ なのか。 **M:** オービタル角運動量の量子数 L, m_L の間の関係と同様の関係をスピン角運動量子数についても成り立つように考えた。 m_S の取りうる場合の数が $2S + 1 = 2$ 通りなので、 $S = \frac{1}{2}$ 。