

17s2003: ヘリウム型原子の基底状態のエネルギーをもとめるときは電子間相互作用を考慮した方がよいのですか? **M:** 良し悪しの判定基準は, 実験事実. 教科書 p.270 や参考書を読めば分かるのでは? // どの程度影響するかは, その項の有無でどの程度エネルギーの値が変わるかを見ればよい.

17s2004: より正確な波動関数を求めるときにパラメータが多くなれば正確になると考えましたが, 何か不都合は出てきますか. **M:** 考えるのは, あなたの勝手だが, 他人に迷惑をかけないでネ. // 自分で考えてみればいいのでは?

17s2005: 変分法と摂動法以外にどのような近似的方法がありますか. **M:** 自分で調べて勉強すればいいのでは?

17s2006: 条件に $\dots > E_2 > E_1$ と組み入れたが, これはどのように作用しているのでしょうか? **M:** 意味不明. 何かを誤解している予感.

17s2007: 変分法 (variational method) は “method (方法)”, 摂動法 (perturbation theory) は “theory (理論)” である理由はなにかあるのでしょうか. **M:** 別に. いろんな言い方があってもいいのでは? // variational は形容詞, perturbation は名詞.

17s2008: ヘリウム原子の変分法においてなぜ電子間反発の項を無視することができるのですか? **M:** 別に. 好きにすればいいのでは? 良い近似か悪い近似かはあるが. // 17s2039 も参照

17s2009: 吸収される光の波長が赤外線・紫外線のとき目に見える補色はないように思えるが どうなるのか. **M:** 別に. 補色は補色でしょ.

17s2010: 変分法と摂動法は全ての多原子分子に適用可能なのですか. **M:** 自分で判断できないのはなぜか? // 適用できるできないを, 個別に判定して覚えるのは無意味.

17s2011: 今回は E_{exact} がわかっている水素原子でやったため 15 % error 程度高い近似値となったことがわかりましたが厳密解が未知の原子のエネルギーで近似解を求めるときは, どの程度の誤差があるかはわからないのですか. **M:** 判定基準は, あくまでも実験事実. しかし実験が困難な系もあったり, 常に実験値が存在するわけではない.

17s2012: 最近でも変分法を使って真の波動関数に近づけているのですか? **M:** 別に. 教科書で学ぶことは古くて今では使われていない事というわけではない.

17s2013: 電子間反発項が無い場合の解を考えるとということは電子間反発項が式全体に与える影響は小さいのか. **M:** 17s2003 参照

17s2014: 図 7.2 で関数が 0 に収束するのと ∞ なのは大きな違いだと思うが, なぜ構わないのか. **M:** 意味不明. 勘違いの予感. // 波動関数の条件は?

17s2016: 摂動法と変分法は何が違うのか. 小さい値を近似して正解を導くのであればほとんどどちらも同じでは? **M:** 近似するという意味では同じ. 山の頂上を目指すルートが違うようなもの. 勉強して違いを理解すればいいのでは?

17s2017: エネルギーの期待値が最小になるパラメータを選ぶには最小値を求めればよいのですか. また, 近似的方法を使えば多粒子系のもの全て近似解が求められるのですか. **M:** 質問があいまい. 何の最小値の話か? // 自分で考えて分からないのはなぜか?

17s2019: なぜ (7.7) で m が大きいほどエネルギーが高いのですか. **M:** パラメータ α の中に m_e^2 が含まれている. 計算してみれば分かるのでは?

17s2020: 水素原子の基底状態エネルギーについての変分計算が, 厳密な結果の 80 % まで近づいていると言っているが, これからさらに近づくことは可能なのか. また近づいていえるのはなぜか. **M:** そりゃ原理的には可能でしょう. 容易かどうかは別として. // 変分原理から, 低いエネルギー

を与えるものがより良い近似解.

17s2021: 水素原子の基底状態のエネルギーにおいて, 近似と実値の誤差が 15 % というのはあまりにも誤差が大きいに感じたが, 15 % の誤差は物理化学において誤差とよべるのか. **M:** 物理化学であろうがなかるうが, 誤差は誤差. // “誤差” の定義は?

17s2024: 厳密解と近似解の誤差が何 % までなら正しい近似であるといえるのですか. **M:** 講義中での説明を理解してただけでなくて残念. // 正しいかどうか, 価値観に客観的な基準はあるのか?

17s2025: ψ_0 を掛けて全空間について積分とはどういう意味なのでしょう. **M:** イマサラですか? // そういう積分は, これまで散々出てきたのだが. 教科書や参考書をよく読んでよく考えればいかがか. // 内積 (ボソツ)

17s2026: 電子間反発項が無ければ, 変数分離して, He^+ が 2 つとして解けるとありますが, 水素原子と水素様原子以外に, 電子間反発項が無い例はありますか. **M:** 本気か? 一電子系

17s2027: 実際ガウスが $\phi(r) = e^{-\alpha r^2}$ というガウス関数をつくった時, まさか量子力学の試行関数に使われるとは思ってもよらなかったことなのでしょう. **M:** ガウスは 18 世紀の人なので.

17s2028: 摂分法 [原文ママ] と変分法について, どちらがより優れているか, という質問は意味が無い, とのことだが, 近似解を調べる上で, どちらの式を用いるかの基準はあるか? **M:** 勉強すれば分かるのでは?

17s2029: 教科書の 7 章冒頭に変分法と摂動論の二つがよく使われる近似的方法とあるが なぜなのか. **M:** 事実を述べただけ. // 古くから知られていて, 近似解を改善する系統的な手順も知られているから, かも.

17s2031: H と同じ電子が 1 個の系ということで He^+ Li^{2+} などの例を挙げていたが, これらもまたシュレーディンガー方程式を厳密に解けるのはなぜか. 陽子の数が違うのに, なぜ同じく議論できるのかがわからない. **M:** 正気か? 複数個の陽子は, 原子の中でどのように振舞い, あつかわれるか. 個別の陽子の運動やそれらの電子に対するポテンシャルエネルギーを議論の対象にしているか?

17s2033: 試行関数を予想できないときの近似はできるのですか? **M:** 別に. “何らかの意味で真の波動関数に近い” ものを選べばいいので, 好きな関数を選べばいいのでは? // 教科書 p.277 からや参考書をよく読めば分かるのでは?

17s2034: 厳密解が分からないものについて解を求めたとき, その値で良いのかどうかはどのようにして判断するのですか. **M:** 変分原理, 実測値. 17s2024 も参照

17s2035: 変分法により, 近似解を求めるとき, 基底状態の系に対してはエネルギーの期待値が最も小さいものを選びますが, 基底状態ではない系のエネルギーの期待値を知りたいとき, 近似解はどのように選べばよいのですか. **M:** リッツの変分法とか, 教科書 p.138 とか.

17s2036: 変分パラメーターをより多く含むことで最もよい結果を得ることができるのですが, 変分パラメーターを多く含む ($N = 16$ など) 試行関数はどのようにたてるのですか. **M:** 17s2033 参照

17s2037: 水素原子以外の原子はなぜ厳密解が求められないのですか. **M:** 教科書 p.237, p.270 や参考書をよく読めば分かるのでは?

17s2038: 原子番号の大きな原子や, 高分子などの非常に粒子数の多い原子や分子では, 電子間反発などの影響がかなり大きくなりそうに思えますが, その場合でも常に水素と同様に考えられるのでしょうか? **M:** 意味がよく分からない. // 考えるだけなら好きにすればいいのでは? 良い近似かどうかは知らないが.

17s2039: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r_{12}}$ で電子間反発項を無視したが電子間反発の項はそこまで重要ではないということか。 **M:** 教科書の説明や参考書をよく読めば分かるのでは? // 文脈が読めない? // 17s2008 も参照

17s2041: 水素原子や調和振動子などは電子の分布が予想できるため、試行関数がすぐ見つかりますが、分布が予想できない場合はどうするのですか。 **M:** 分布が予想できない状況が想定できないのだが? // 17s2033 参照

17s2043: なぜ $E_0 = \frac{\int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau}{\int \psi_0^* \psi_0 d\tau}$ の分母を 1 とできないのでしょうか? // p.271 に $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r_{12}}$ を無視すれば とあるが無視できるほど小さな値なのですか? **M:** 規格化を理解していない? // 17s2039 参照

17s2045: 変分法で波動関数 ϕ の関数形がわからないとき E を求める式はどうなりますか。 **M:** 17s2033 参照

17s2046: p.263 で式 (7.2) の ψ_0 を何かほかの関数 ϕ におき換えてエネルギーを計算するとありますがどの関数にも通じるのですか? **M:** 国語力不足? 教科書や参考書をよく読めば分かるのでは?

17s2047: 変分法と摂動論の二つ以外にも近似的方法はあるのですか。またある場合、この授業で習いますか。 **M:** あるかもしれない。自主的に学ぶことは妨げない。

17s2048: 物理的考察から試行関数を選ぶとあったが自分の求める近似解とかけはなれた値が出てしまった場合 どうすればよいですか。 **M:** 意味不明。// 17s2033 参照

17s2049: He^+ , Li^{2+} ... は H と同様に厳密な解を得られるとありましたが、 He^+ は H と違い陽子を 1 つ多く持ちます。これが与える影響で厳密解が出せなくなったりはしないのでしょうか? 原子核 1 つとして考えてしまってよいのでしょうか? **M:** 17s2031 参照

16s2001: ある基底状態のエネルギーを出すとき、良い試行関数を選ぶにはどうしたらいいか。 **M:** 17s2033 参照

16s2006: 変分法で複雑な原子や分子のシュレーディンガー方程式を精度よく解く際、できれば、一番よい近似の値が出る試行関数を用いたいが、それはどのように判断するのか? また、教科書 p.264 の「何らかの意味で ψ_0 に近ければ近いほど…」の「何らかの意味」とは具体的に何か? **M:** 17s2033 参照 // 一概には言えないから「何らか」なのでしょう。

16s2009: 試行関数を探していく際に、始めに波動関数のグラフの形を考えてから、それに近い関数を見つけていくというような方法でも、試行関数を探す作業を減らすことができるのではないか。 **M:** それはできるかもしれませんが。でもそれって、講義でも説明したし、普通のことでは?

16s2017: p.271 の (7.15) 式の電子間反発の項を無視すれば、ハミルトン演算子はそれぞれの電子について分離でき、基底状態波動関数は (7.16) 式となるとあるが、何故無視できるのか。 **M:** 17s2008 参照

16s2019: $\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0$ のときの $E(\alpha)$ はなぜ極小値ではなく最小値なのか。 **M:** まあ、厳密にはそうですわね。

16s2026: $E(\alpha)$ を求める際、極小値をとるとあったが、極小値をとらないときは、試行関数を変えるのがよいのか。 **M:** 何のために極小値なのかを考えれば分かるのでは?

16s2028: 試行関数はどのように与えられればいいのか? **M:** 17s2033 参照

16s2040: 変分法を用いるのに適した式、適していない式はなんですか。 **M:** 自分で考えたり計算してみれば分かるのでは?

16s2044: 式 (7.19) から式 (7.20) に変換するときに $\frac{m_e e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ を単位として E を表すとあるが、なぜ $\frac{m_e e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ を単位として表すことができるのか。 **M:** 別に。好きな単位で表せばいいのでは? // 教科書 p.300 も参照

16s2046: より多くのパラメーターを含む試行関数を用いることでもっとよい結果になるとあるが、パラメータを含む試行関数が多い時により厳密にするにはどうするのか? **M:** 16s2006 参照

16s2048: 試行関数を選ぶときに「電子は核の近傍に存在している」とあったが、それはどこで判断するのですか。 **M:** 本気ですか? 基底状態の水素原子の電子が核の近傍に存在していない状況がありうるのか?

16s2049: 変分法を用いると、近似の値が導出できることが分かったが、真の値により近づける方法は何かあるのか? **M:** 17s2036 参照

15s3005: $E_\phi \leq E_0$ となった場合 E_0 : 真のエネルギーは真ではなくなるがそのような場合はないと言えるのか。 **M:** 正気か?“基底状態”の意味を理解していない予感。

15s3014: 近似であればいいとはいいますが厳密解が正しい値であるとうどう証明しているのでしょうか。 **M:** 厳密解は厳密解で、数学的には全く正しい。// 17s2034 参照

15s3025: 運よく厳密解が分かっているものがありました。それはどのようにして知り得たものなのですか? **M:** もちろんシュレーディンガー方程式を解析的に解いたんでしょ?

15s3028: 変分法はどの種類のものが精度が高いのか。 **M:** 変分法を細分化して分類することにどんな意味があるのか?

15s3030: 変分法と摂動法を使いわける基準を持ってたりしますか? また、どちらの方が扱いやすいと考えていますか? **M:** 別に。使いたい方、使える方を使えばいいのでは?

15s3048: 変分法において より厳密な解を得るためには 1 つの試行関数により多くの変分パラメータを入れればよいということですか? **M:** 教科書 (や参考書) の説明を読んで、自分で判断できないのはなぜか?

14s3019: 厳密解がわかっている場合の近似解は精度にかかわらず近似解と呼ぶんですか。 **M:** 本気か? 厳密解がわかっただけがいがいが、厳密解は厳密解で、近似解が厳密解になることはないでしょ? // 厳密解がわかっているときに、その厳密解を使わなければいけないという規則は無いでしょう。

14s3030: 核の近傍ではない所を非局在化している (電子が) ときには試行関数はある程度精密におくことができますか? **M:** 別に。好きに置けばいいでしょ。17s2033 も参照