

16s2008: 図 6-3 の縦横軸ともに a_0 で割る理由は何にか M: “物理量 = 数値 × 単位” または “数値 = 物理量 / 単位” であって、グラフの軸には数値を目盛る、というだけでは? // のはずだが, すると a_0 ではなくて a_0^{-1} が正しい??

16s2028: s, p, d, f, g,... であるのに、e がないのはなぜか。 M: 教科書 p.226 をよく読めばいいのでは? // それ以降はアルファベット順なのだが、アルファベット順であるという以上に詳しい記述を見たことがない。そこで少し続きを考えることにすると、いずれ既出の p や s に出会うわけだが、その時にはそれらはスキップするというのが素直な考えだろう。そして z まで進んだ次は、最初の a にもどることが予想される。しかしそこまでいくと、主量子数はいくつになるだろうか? そしてアルファベットを一巡した後はどうするのだろうか? そしてそこまで電子が詰まるとすると、一体全体、何個の電子があることになるだろうか?. 原子番号いくつの元素ということになるだろうか?? 未来永劫に完璧なルールが必要だろうか?

16s2040: 水素と重水素では原子オービタルは同じになるのでしょうか M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // ハミルトニアンは何が違うか? 月は地球の周りを回っているのだろうか? それとも地球が月の周りを回っているのだろうか?

16s2052: 水素原子の 1s 軌道の動径分布関数によれば、化学反応などでよく書かれる H^+ は H である可能性もあるということでしょうか? 電気的に考えれば、例えば 5 ボーア半径も離れていれば H^+ と e^- とに分かれているとみなせるのでしょうか。 M: H^+ でなくて H だと言って、何かメリットがあるのか? H^+ であるとしたメリットと比べてどうか? // 基底状態の水素原子が非常に遠方に電子を持っている確率はどれほどだと、化学反応を考えるときに無視できない影響があるのか?

17s2007: 今日は体調があまり優れず、授業に集中できなかったので、理解を深めてから改めて質問をさせていただきます。申し訳ございません。 M: 質問が記載されていない。

17s2029: オービタルは 3 つの量子数に依存するということがあったが、スピン量子数には依存しないのか。 M: 自分で考えて分からないのはなぜか? 教科書や参考書をよく読めばいいのでは? // 私たちの宇宙である三次元空間内に存在する粒子の状態 (運動) を記述するのに、いくつの自由度が必要だと考えられるか? 教科書 p.308 や参考書に書かれている通り、スピン量子数 m_S は *第四の* 自由度である。

17s2037: 量子数のうち、オービタルに依存するのは主量子数、角運動量量子数、磁気量子数の 3 つだとあるが、スピン磁気量子数はオービタルに影響しないのはなぜか。 M: 17s2029 参照

18s2003: なぜ、p オービタルは動径関数を含まないのですか。 M: 何かの勘違いでは? // 教科書 p.236 の表 6-6 や参考書をよく読めばいいのでは? // 教科書 p.231 の最初の行に “p オービタルの角度部分は” とハッキリと記されているが?

18s2004: ボーアモデルと動径方向の確率分布で解が異なるとき、どちらが実際の値に近いことをどう判断しますか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // ボーアモデルでは電子の “軌道面” を考えているし、また電子はハッキリした軌跡をもつし。

18s2006: 多体問題で、惑星以外について考えることはありますか? M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // もしかして “多体問題” という言葉の意味を理解していない?

18s2009: 確率密度が最大の値と平均値はそれぞれにどのような優位性があり活用するべきであるのか? M: 最頻値と平均値, どちらも集団を代表する値として用いられることがある。

18s2018: 分子の存在確率を出す事は例えば何をする時に使うことができますか。 M: 意味不明。分

子の存在確率とは?

18s2027: 球面調和関数は教科書では 2 次元、3 次元で表されていることが多いですが、1 次元としてプロットすることはできますか? M: 自分でやってみればいいのでは?

18s2030: 前回の球面調和関数のプロットの宿題は参考書も読みながら行いました。座標を求めるときの r に、 Y^2 の値を入れて計算し、参考書のプロットの断面図と同じになりました。今回の講義で私の宿題の回答を間違えていたのはわかったのですが、 r に Y^2 の値を入れた場合のプロットは何を表すのですか? M: あなたがどの参考書を見たのかわかりませんが。// 何を表すか、自分で考えてわからないのはなぜか? // あなたがプロットしたものを表しているだけでは?

18s2032: オービタルは 3 つの量子数に依存し、形が決まるとありましたが、スピン量子数はオービタルの形を左右しないのですか? M: 17s2029 参照

18s2034: 水素の原子波動関数は主量子数、角運動量量子数、磁気量子数に依存するが、スピン量子数は水素原子オービタルにどのような影響をするのか? M: 17s2029 参照

18s2038: 教科書の図 6.7 がよい表現ではないとあり d_{z^2} オービタルが xy 平面にドーナツ状になっているのはなにか根拠があってなのか。 M: 描いた人に聞けばいいのでは? // 何をどう作図するのか、雰囲気には騙されずに、数理的に正確に。

18s2045: 動径分布関数が $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p$ と主量子数が大きくなるにつれて鋭いピークから山なりの細かいピークになることで相互に確率分布が大きく存在するような r の値が見られたが、これがエネルギーにも関連すると考えると、例えば第一イオン化エネルギーなどといったものとの関連性はないのか。 M: 意味が分かりにくい。 “山なりの細かいピーク” とはどういうことか? “相互に確率分布が大きく存在する” とはどういう意味か? // 電子分布とエネルギーは、そりゃ関係あるでしょうね。当たり前では?

18s2046: P_x 軌道と P_y 軌道が $m = \pm 1$ の線型結合で表されているが、 m の数字が異なる場合のとき、(例えば $m = 3$ と $m = -1$) には線型結合となる組み合わせは 1 つも存在し得ないのか。 M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // なぜ m の数字が同じものを組み合わせることで実数化できるのか? // 波の重ね合わせとは何か? 数式で表すとする??

19s2001: 1 の値を表すアルファベットが s,p,d,f,g の後、h,i,j... とアルファベット順に続くということですが、a,b,c 等はありませんか M: 16s2028 参照

19s2002: 教科書 p.232 図 6-5 水素原子オービタルのプロットについて、教科書にそのプロットの方法の説明があり、その説明文中に「ある代表的な値を計算し」とあるのですが、その代表的な値とは何のことなのでしょう。 M: 国語力不足か? // 元の英文は “we can divide space into little volume elements and compute the average or some representative value of $\psi^*\psi$ within each volume element” なので、誤訳とまでは言えないが “体積要素内における $\psi^*\psi$ の平均値あるいは他の代表値” といったところか。// 集団の代表値としては、例えば 平均値・中央値・最頻値 など。今回の場合は他にも、領域の中央の位置における値とかも考えられる。

19s2004: 水素の 1s 状態に対して電子が r と r の間に存在する確率を r で微分することで 1s 電子を見つける確率が最も高い r を求めることができるのはなぜですか? M: 本気か? // 関数の極値は、どうやって求めるか?

19s2006: オービタルは 3 つの量子数 (n,l,m) に依存するが、スピン量子数はオービタルに影響を与えることはないのか。 M: 17s2029 参照

19s2007: $2s$ $3s$ $3p$ 軌道にはどうして電子の存在確率が 0 である場所があるのですか。 M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // 箱の中の粒子のときにも、基底状態以外の状態には 節 (node) が

あった. // $E = \frac{hc}{\lambda}$ で、波長が短い方がエネルギーが高い.

19s2009: ゼーマン効果は電子のスピンだけではなく、中性子や陽子の核スピンにも適用されるのですか？ **M:** ゼーマン効果は軌道角運動量に由来する磁気モーメントのせい. スピン角運動量はそれらとは別で、それによるエネルギー準位の分裂は、やはりゼーマン効果という.

19s2010: オービタルは 3 つの主量子数 l, m, n に依存するとあるが、スピン量子数は何に基づいて考えられるのか？ **M:** 17s2029 参照 // スピンによる磁気モーメント

19s2011: 完全な波動関数とは一般式ということですか？ **M:** 全然違う. 国語力不足か？ // 教科書 p.225 の“完全な波動関数”の前までで、水素原子の波動関数を $\Psi_{nlm} = R_{nl}\Theta_l^m\Phi_m$ と因数分解して、一変数に関する方程式を順に解いてきた.

19s2012: p.223 の 2p と p.233 の 2p とで色の濃くなっている方向が縦方向から横方向になっているのは、なぜですか。 **M:** 意味不明. どこの何の話か？

19s2013: 量子数にはスピン量子数もありますが、これは全波動関数 ϕ_{nlm} と関係があるのですか. また、関係があるとするならば、それはどのような関係なんですか。 **M:** 17s2029 参照 // 独立しているという関係 :-p

19s2014: 波動関数を足したり引いたりすることで混成軌道や結合を表せるのは何故ですか？ **M:** 本気か？ // 波の合成

19s2016: 円や球を考えるのに周期的境界条件を用いていますが、これら以外にこの条件を用いる場面はありますか？また、あるとしたらそれはどのような場面ですか？ **M:** 自分で考えて、調べればいいのか？ // 同じ構造が、縦横高さ方向に繰り返している構造とは？

19s2018: 現実の原子の場合のオービタルを考えると、他の電子や原子の影響を計算に入れて計算しますか？それとも、安定した環境下でのそれぞれの原子のオービタルを求めますか？ **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 現実の原子は、他の電子や原子の影響を受けているのか？ もしも影響を受けているのなら、それを考慮しない計算は、いったいどんな意味があるのか？

19s2019: 磁場中の場合ではゼーマン効果が加味されるが、磁場が存在しない場合と比べると原子においてどのくらいのエネルギー差が生じるのか。 **M:** 19s2050 参照

19s2020: ヘリウム原子は水素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ないため近似法を用いるとあるが、電子をもっと多くもつ原子でも用いることができるのでしょうか。それとも別の方法を用いるのでしょうか。 **M:** 何を用いるという話か？ // 厳密に解くことが出来なくて、近似法も使わないとすると、いったい何をすればいいのか？ // もしかしたら“近似”の意味を理解していない？

19s2021: ゼーマン効果と呼ばれる、磁場が存在するときの準位の分裂はなぜ起こるのですか？ **M:** 19s2050 参照

19s2022: この世には、オービタルの数は無限に存在しているのでしょうか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 状態は量子数 (n,l,m) によって区別できるが、量子数の取りうる値の範囲は？

19s2024: $\psi_{1s}(r,\theta,\phi)$ には θ と ϕ への依存性が無いにもかかわらず、式 (6・54) で依存性を示しているのか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 依存性がないという依存性？

19s2025: 軌道角運動量が z 軸に沿うことがないので磁気量子数が軌道角運動量を超えることがないとありましたが絶対値 $\sqrt{l(l+1)}$ と磁気量子数 l [原文ママ] の差はなにを表しているのでしょうか **M:** 教科書 pp.221-222 や参考書を読めばいいのでは？

19s2026: 2s-オービタルの形で、球対称であるにもかかわらず節が存在するのはなぜですか。 **M:** 19s2007 参照

19s2027: ゼーマン効果によって、エネルギーがmに依存するとあるが、mに依存することで原子にどのような影響があるのか。 **M:** 19s2050 参照

19s2028: ゼーマン効果はなぜ起こるのですか？ **M:** 19s2050 参照

19s2029: 球面調和関数のグラフを書いたところ、 $l=1$ のときの p 関数は、緯度経度を求めるのに使えるか、電子の S 軌道のように感じたのですが、実際のところ何に使えるのでしょうか？ **M:** 意味不明. 緯度経度を求めるために球面調和関数を用いるとは、例えば具体的に何をどうするというのか？

19s2030: オービタルは主量子数、角運動量量子数、磁気量子数の 3 つの量子数によって決まるということだったが、スピン量子数はオービタルの形に影響はないのか？ **M:** 17s2029 参照

19s2031: 常磁性の酸素原子でゼーマン効果は働きますか？ **M:** 19s2050 参照

19s2032: 絶対零度における原子では、電子のスピンが停止して、磁場が存在しなくなるということはありませんか。 **M:** 本気か？ スピンが停止するとはどういうつもりか？ // スピンは質量や電荷と同じく、ミクロな粒子を特徴づける基本的な性質 (状態) のひとつ. ところで、ミクロ粒子である電子の、質量が停止したり (= 質量が消失する) 電荷が消失したりすることは、あるのだろうか？

19s2033: 水素の原子波動関数は 3 つの量子数に依存するとあるが、その 3 つに含まれないスピン量子数とは何も関係がないんですか？ **M:** 17s2029 参照

19s2034: オービタルについて電子の存在が最も確率の高い距離を決められるということは平均値に注目すれば必ずわかるものなのですか？ **M:** 18s2009 参照

19s2035: 水素原子のシュレーディンガー方程式の解き方では、他の原子のシュレーディンガー方程式は厳密には解けない。その理由は近似しているからとあるが、近似することでどこが厳密でなくなるのですか。 **M:** 本気か？ // 日本語力不足？ // “近似”の意味を理解していない？

19s2036: 個人的に s

jp

d... の軌道の順に電子の存在する範囲が広いものと捉えていましたが、動径分布関数によると逆のようになっていました。これは、動径関数に具体的な数を代入して解くことで詳しく理解することが出来ますか？ **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // “電子の存在する範囲”とは、具体的にどこのことか？ 個人的な勝手な思い込み・誤解を直せてよかったね. // 宿題でもあったが、最頻値や平均値で、どうか？ 水素型オービタルではなくて、多電子原子のオービタルではどうか？

19s2037: 実際の空間では原子自体が運動するので、プロトンの存在確率を考えて、それを基準として電子の存在確率を考えることで一つの原子の存在確率があきらかになるのでしょうか。 **M:** 自分で考えてみればいいのか？ // ムズカシくて、何をやりたいのか 分からない.

19s2038: 角運動量量子数の値を文字で表す時、s, p, d, f, g という順に割り当てられていますが、なぜ s から始まるんですか？ そしてなぜその次は p, d, f と続くんですか？ **M:** 16s2028 参照

19s2039: 動径関数と球面調和関数の積によって求められた波動関数は水素類似原子をモデルとしているが、実際の原子は電子が複数ある。そのような場合、電子間反発によって軌道の形に変化が起きることがあるのか。 **M:** 教科書 8 章や参考書をよく読めばいいのでは？

19s2040: 2s や 3s などの確率分布関数で節ができるのはなぜですか。 **M:** 19s2007 参照

19s2041*: 線形結合とは、オービタルの実数化のためになされる数学的記述にすぎないのですか。それではない、別の物理的意味はあるのですか。 **M:** ある種の対称性の場 (結晶場など、 O_h 対称場など) では、実数化されたオービタルが、点群の既約表現の基底関数になっている。つまりこちら

がリアルな姿と言えるだろう。現実と実数の掛詞 :-)

19s2042: f オービタルの時に出てきた cubic set は f オービタル以外でも使うことができるのでしょうか？ **M:** 何を聞きたいのか理解できない。// f オービタルは、他のオービタル (例えば d オービタルや g オービタル) とは異なるのだから、他のオービタルにあの f ようなオービタルができるわけがない。すなわち p オービタルに p_{xy} オービタルなど存在するわけないし、d オービタルに d_x が無いのと同じこと。

19s2043: 動径分布関数をプロットすると節の数が $(n - l - 1)$ になるが、その法則は何を意味するのか？ **M:** 自分で考えてみないのはなぜか？ // 勉強方法を間違えていないか？ // 角度方向の節の数 l と合計すると、節の数は $n - 1$ 個

19s2044: ラゲールの陪多項式はどのようにして導かれたのですか **M:** 私は知りません。調べてなかったら、教えてくださいネ :-) // ラゲールさんに聞く :-p とか、物理数学の参考書を読んでみればいいのでは？

19s2045: 角運動量に応じて $l(l+1)\hbar^2$ が依存しないのはなぜですか。 **M:** 意味不明

19s2046: S オービタルでは電子の角運動量は 0 ですが、電子が S オービタルにある限り磁性は持てないのでしょうか？ **M:** いいえ。// 教科書 p.308 や参考書を読めばいいのでは？ // 電子はそれ自身で磁気モーメントを持つ。

19s2047: 動径方向の確率密度分布がわかったことによって導き出したことは何かありますか？ **M:** そりゃあるでしょうね。自分で考えてわからないのはなぜか？ // 遮蔽とか貫入とか、教科書や参考書を読めばいいのでは？

19s2048: ボーアモデルが誤りであるとされるまでは、正しいと信じられていたと思うが、その期間に何らかの矛盾などは生じていなかったのですか？ **M:** もちろん、ボーアモデルが完璧ではないこ

とは、すぐに明らかになった。教科書 p.27 や参考書を読めばいいのでは？

19s2049: S オービタルには角運動量は無い事が分かったがそれによって他のオービタルに対し何か特異性をもたらすのだろうか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 教科書 p.226 にゼーマン効果の話が記載されているが、裏返せば、s-オービタルは磁場中でも準位が分裂しないという特異性を持つ。

19s2050: 磁場がないときには単一波長であったスペクトル線が、原子を磁場中においた場合には複数のスペクトル線に分裂するとあるが、なぜ磁場中では分裂するのですか。 **M:** 章末問題 6.43, 6.44, 6.45, 6.46 参照 // オービタル磁気モーメントと外部磁場との相互作用。

19s2051: 電子が最も見つかる可能性の高い半径と平均半径の具体的に違いはなんですか？ **M:** 18s2009 参照

19s2052: d_{z^2} の形で穴があいたように表記される図が存在するのはなぜか？ // 水素の 1s 状態で無限遠までいかなければ電子の存在確率が 0 にならないというのは式としては理解できたが、現実世界における無限遠とはどの程度のことをさしているのだろうか？また、それを実験的に証明することは可能なのだろうか？ **M:** 現に存在しているのだからしょうがない。描いた人に聞けばいいのでは？ // 本気か？“無限遠”の意味を理解していない？

18s6025: $Y_l^m(\theta, \phi)$ と $Y_l^{-m}(\theta, \phi)$ は、外部磁場が加わるとゼーマン効果によってエネルギーが異なるため、これらの一次結合を考えても、関数を実数化できません。この時、 $Y_l^m(\theta, \phi)$ と $Y_l^{-m}(\theta, \phi)$ の形は分らないのでしょうか？ **M:** 一次結合により実数化できるかどうかと、エネルギーが同じか異なるかは関係ないのでは？ // $Y_l^m(\theta, \phi)$ の形と言っても、そもそも複素関数の形って何？そもそも、たとえ一次結合で実数化できたとして、その実関数の形って元の複素関数の形とは違うものでしょ??