

16s2008: 粒子の数が 3 つ以上のハートリー積で交換に対して波動関数がマイナスとなるのはどうやって表現するのか M: 別に. 普通に交換すればいいのでは? $\phi_1(1)\phi_2(2)\phi_3(3)$ の電子 1,2 を交換すると $\phi_1(2)\phi_2(1)\phi_3(3)$

16s2028: ϕ の上下の棒の有無は何が違うのか M: 意味不明. 何の話か? // 初登場のその場で定義が示されているのでは?

16s2040: リチウムの 1 価の陽イオンはヘリウム原子と同じように空間部分と、スピン部分に分解できるのでしょうか M: 自分で判断できないのはなぜか? // 分解できる, 理由はなぜか?? // 計算してみれば分かるのでは?

16s2052: リチウム原子の行列式波動関数はどのようにして波動関数に戻して解くのでしょうか M: 著しく勘違いの予感. // 行列式波動関数は波動関数なので, “戻す” とか “解く” 必要など全くない.

17s2007: Na について黄色の輝線は実際は二重線になっていてシュレーディンガー方程式より与えられる解と異なる結果になって、これはスピンという第四の自由度によるものだという事だとありますが、スピンの影響も表すことができるようにシュレーディンガー方程式を立てることはできないのでしょうか。 M: 20200707 の 18s2032 参照

17s2028: 「He については、スピン部分を無視して空間部分だけを考えるとよかった」とのことですが、これはヘリウム原子核がボース粒子であることと何か関係があるのでしょうか? M: なぜそう言えるのかを講義で説明したし, 教科書にも記載されているのに, 全く理解されていないようで, 残念. // 教科書や参考書をよく読んで考えれば分かるのでは?

17s2047: ヘリウム原子が ϕ_2 を採用しなければならないことが実験的に知られているとあるが、どのような実験をしたのか。 M: 20200707 の 17s2037 参照. 教科書や参考書もよく読めばいいのでは? // 具体的な実験までは知らないが, パウリの排他原理に従うことが示されたとする予想. 本当のところは, 調べて分かったら教えてくださいネ // 読書感想文 (仮) のネタ?

18s2004: 基底状態のときと励起状態のときでオービタル近似はどう変わりますか。 M: オービタル近似が変わるとは? オービタル近似に何種類もあるというのか?

18s2006: 2 つの粒子の交換が対称、反対称であるという違いにより、化学現象や性質にはどのような影響をもたらすのでしょうか。 M: 17s2047 参照

18s2009: 1s 軌道に電子が 3 個や 2p 軌道に電子が 7 個入るようなことを考えると、行列式の列が二つ存在することになるのでそのような状態は存在しないといえるか? M: 自分で判断できないのはなぜか? 計算してみれば分かるのでは? // “列が二つ存在する” とは? そもそも $N \times N$ の行列式なら, 行も列も N 個あるのでは?

18s2014: 行列式波動関数は違う軌道が入り込んだら展開できないものですか M: “違う軌道が入り込んだ” とは, どういうことか? // 展開とは, どんな計算?

18s2018: 行列の縦がオービタル横が電子であるというのはどうやって決まったのでしょうか。偶然相性が良かったのでしょうか。 M: 講義では行列の話などしていませんか? // 行列式の性質として, 行と列を入れ替えても同じと説明したのだが, 伝わっていないで残念.

18s2027: He 原子はスピン部分を無視できるとありましたが、逆に空間部分を蒸ししてスピン部分だけを考えれば良い原子は存在しますか? M: 何を考える話だったか? // 波動関数は, 何を変数とするか?

18s2029: ある粒子が、ボース粒子かフェルミ粒子か判断するにはどのような測定を行って判断してい

るのですか? M: 17s2047 参照

18s2030: ボース粒子において、同じ量子状態の粒子があった場合、それらを区別する方法は全くないのですか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // “ミクロな同種粒子は互いに区別できない” を理解していない?

18s2032: 2 電子の交換に対する反対称とは、具体的にどのような操作をして電子を入れ替えるのですか M: 本質的に区別できないので, 実際に具体的な操作を行っても, その結果を確認することはできない.

18s2034: He はスレーター行列式をとくと因数分解して空間部分とスピン部分に分けられスピンを考えない形になるが、実際 He の 1s 軌道にはスピンの向きの違う電子が入っている。このように事実と計算で異なる意味を持つのはなぜか M: 微妙に勘違いの予感. // スレーター行列式は解かない. スピンを考えない形になるのはある計算をする場合の話. 1s オービタルの二電子が入って閉殻になっているという状況は同じ. 計算でもスピンを考えたければ考えても良い.

18s2038: スレーター行列式で同じ状態の電子があればその行列は 0 になるとあるが同じ状態の電子とはスピンの同じということか。他に同じ状態となる要素はあるか。 M: 行列の話はしていないか? 行列が (数字の) 0 になるとはどういうことか? // 自分で考えて分からないのはなぜか? // (原子内の) 電子の状態は, 何で指定されるか (参照されるか).

18s2040: フェルミ粒子とボース粒子の交換によって対称、反対称になる他の違いはあるのか M: 勘違いの予感. // フェルミ粒子とボース粒子の交換などしないか?

18s2043: フェルミ粒子とボース粒子は交換によって、対称、反対称になる、半奇数か整数か以外に違いはあるのか? M: 17s2047 参照

18s2045*: $\Psi(1,2)$ と $\Psi(2,1)$ が区別できないとあるが、量子数が定義できるのに区別できない原因は何か M: では, それぞれの量子数はいくつか?

18s2046: 第 4 の自由度としてスピン量子数が与えられていたが、第 5、第 6 と自由度が増して新たな量子数が増える可能性はあるのか M: 可能性はゼロではないが, 現在の所, それを示唆する実験事実は無いのでは?

19s2001: スレーター行列式以外に多粒子系の状態を記述する波動関数は表せますか。 M: 日本語がオカシイ. 勉強すれば分かるのでは?

19s2002: 教科書 p.311 で、ヘリウム原子の基底状態の波動関数として Ψ_2 を採用しなければならないことが実験的に知られている。とあるが、どのような実験を行うとこの結果が導かれるのか。 M: 17s2047 参照

19s2004: Li について空間とスピンに因数分解できないというのはどういうことですか M: He について因数分解できる様子を理解していない? 教科書の記述を眺めるだけではなく, 自分の手を動かして計算する.

19s2005+: 2 電子系では空間部分とスピン部分に分解できるが一般には分解できない (p.313) というのはどのように重要なのか。 M: 因数分解できる時とできない時とで, 計算の手間はどれだけ違うか? // 簡単なものを用いて説明し・理解し, それを一般の場合の代表と考えるのは科学では普通だが, 原子のエネルギーを HF 法で求めようとするときに, H や He では一般の原子 と言いはない。 [ここまでの二つは容易に想像できるはずでは? もしそうじゃないなら, ナゼ?] // (+) He についてはクーロン積分 $J_{12} = \iint \phi_1^*(1)\phi_2^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_1(1)\phi_2(2) d\tau_1d\tau_2$ だけだが, Li 以上では交換積分 $K_{12} = \iint \phi_1^*(1)\phi_2^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_2(1)\phi_1(2) d\tau_1d\tau_2$ が発生する.

19s2006: 電子において、スピンの値 (s) は $1/2$ であるが、陽子のような他のフェルミ粒子の s はどのように求められるのか。 // ナトリウムの原子スペクトルは黄色い二重線であり、シュレーディンガー方程式で与えられる解と異なるが、スピンの影響を考慮してシュレーディンガー方程式を立てることはできないのか。 **M:** 発生する原子の項の数や、(スピン角運動量 S の z 成分の取り得る場合の数は $2S + 1$ なので) スペクトル線の分裂の数からわかるかも。磁気モーメントの大きさ $\sqrt{S(S+1)}$ からわかる? // 17s2007 参照

19s2007+: 今回行列式を用いて波動関数を表したのは比較的電子の数が少ない He と Li でしたが、もっと原子番号が大きい遷移元素などでも同じ方法で波動関数を表すのですか。 **M:** (+) 元素ごとに波動関数の作り方が異なるという必然性はあるのだろうか? 科学の方法として、あの元素の時はあある、この元素の時はこうすると、元素の種類によってそれぞれ異なる方法をとることは、適切だろうか。

19s2009: スレーター行列式の線形結合が反対称性を示すのはなぜなのでしょう? **M:** 講義でも教科書でも、スレーター行列式の線形結合など作りませんでした? // 自分で考えて・計算してみても分からないのはなぜか? 反対称性を証明してみればいいのでは? // スレーター行列式が、任意の 2 電子の交換に対して反対称なので、その線形結合も反対称になるのは自明では?

19s2010: 電子に区別をつけることはできないが、もしつけられるとしたら容易に波動関数を求めることが可能なのか。 **M:** 自分で求めてみれば分かるのでは? // 区別できる時とできない時とで、電子の振る舞いに違いはあるのか? 一電子波動関数に違いはあるのか? // 区別できる時に、電子 1 と電子 2 とで、基底状態のエネルギーや波動関数は、互いに異なるのか? そのときに、両方の粒子が共に電子であると、何を根拠に言えるのだろうか。

19s2011: Li のときの電子の入れ替えは $1s$ の空間部分で行うと思うのですが、 N 電子系の時、電子の入れ替えは 1 つの空間でのみ起こるものですか? それとも、複数の空間で電子の入れ替えが起こるのですか? **M:** 何でそういう話になるのか分からない。 // Li については、 $\Psi(1, 2, 3) = |1s\alpha(1) 1s\beta(2) 2s\alpha(3)|$ なので、電子の交換は 3 個の電子の間で起こる (なぜ電子 1 と電子 2 との間のみで入れ替えするのか分からない)。 // N 電子系の時の 1 つの空間とは何か? 私たちの宇宙・世界は、ひとつの三次元空間だが、それとは別の空間があるという話か? どういう SF ですか?

19s2012: スピン部分と空間で因数分解が出来るモノと出来ないモノはそれぞれ計算しないと分からないのですか? それとも族などのグループによって分けること出来るのでしょうか。(規則性みたいなものがあるのか) **M:** 講義で説明したし、教科書や参考書にも記載されているのに、全く理解されていないようで残念。 // 一度自分の手を動かして計算してみれば、規則を理解できるのでは?

19s2013: エネルギーについて考えるとき、スピン部分を無視して考えることが出来る原子は He 原子以外にあるのですか。 **M:** 19s2012 参照

19s2014: 偶数子の電子の系ではスレーター行列式は空間部分とスピン部分に分けられるということですか? **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは? // 19s2012 参照

19s2015: つじつまの合う場の方法というのは、判断の仕方がよく分からない。 **M:** 何を判断する話か、意味不明。

19s2016: この先、電子に新たな量子数が追加される可能性はありますか。それとも今の状態で十分なのでしょう。 **M:** 18s2046 参照

19s2018: 電子軌道が縮退をしている状態でも電子を同じ状態とみなして計算することが可能ですか? **M:** 意味不明。 // “同じ状態”とは、何と何とが同じというのか? 計算するとは、何を計算するののか?

19s2019: スピンが 1 や $1/2$ というのは何を基準にした時の数ですか。 π 中間子のスピンの値が 0 であるのはなぜですか。 **M:** 19s2006 参照 // 素粒子物理学を勉強すればいいのでは? (スピン $1/2$ のクォーク 2 個から成る複合粒子だから)

19s2020: 通常のシュレーディンガー方程式にはスピンが含まれていないが、スピンを考慮する場合どうするのでしょうか。別の新たな方程式を用いるのでしょうか。 **M:** 17s2007 参照

19s2021: ブラックホールにパウリの排他原理は関係ありますか? **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか? // パウリの排他原理が対象としているのは、どのような粒子か?

19s2022: Fe(II) と Fe(III) のような価電子が二つ存在する原子において、スピンはどのような影響を与えるのでしょうか。 **M:** 本気か? // 化学の基礎を復習する必要があるのでは? // 価電子とは何か? 価電子の数とは?

19s2023: 行列式波動関数はパウリの排他原理を満足するという根拠に基づき理解したのですが、 N 電子系に一般化するために N 行 N 列の行列式を用いるときに規格化定数が $1/\sqrt{N!}$ となるのは、結論へのつじつま合わせのためでしょうか。 **M:** どんな結論のことを言っているのか? つじつま合わせとは何か? // 講義では説明を省略したので、行列式波動関数は規格化されているとは限らないものであった。しかし教科書や参考書をよく読めば、ある条件のもとに規格化されている行列式波動関数の規格化定数として $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ が付いている。そういった *条件* を見落とすな!! 算出の根拠がある規格化定数である。

19s2024: フェルミ粒子とボース粒子の違いは、実際にどのような影響を与えるのか。 **M:** 17s2047 参照

19s2025: シュテルンゲルラッハの実験について銀粒子の磁気モーメントが 2 つの状態しかありえないことが分かり、結果的にそれはスピンの存在を示していたというふうに解釈したのですが、なぜスピンが磁性を決めるのでしょうか **M:** 私たちの世界がそうなっている、としか言いようがない(?) 電子の磁気モーメントが 2 通りの値だけをとる理由を説明するために、第四の自由度であるスピンを導入した。

19s2027: 教科書 p.313 でスレーター行列式において、He では空間部分とスピン部分に分解できるが一般には分解できないことは重要であるとあるがどうして重要になるのか。 **M:** 19s2005 参照

19s2028: フェルミ粒子とボース粒子はどのようにして区別するのですか? **M:** 17s2047 参照

19s2029: 粒子には対称のものと反対称のものが存在していることは理解できましたが、日常生活においてその差がわかるものは何がありますか? **M:** 私は知りません。調べて分かったら、教えてください

19s2030: スピンを考慮したシュレーディンガー方程式を立てることはできないのか? **M:** 17s2007 参照

19s2031: ボース粒子でスピン数が 0 とありましたが、具体的にどんな粒子がありますか? **M:** 自分で調べようとしするのはなぜか? // 19s2019 参照

19s2032: 今日の授業で、スレーター行列式から、同一のスピンオービタルに 2 個の電子が入らないという条件が得られました。ボース粒子でも、同じように行列式から条件を得ることはできますか。 **M:** 本気か? 自分で判断できないのはなぜか? // そもそもボース粒子の波動関数を、スレーター行列式で表すのか? なぜ電子の波動関数をスレーター行列式で表すのか?

19s2033: 今日の授業で出たスピン以外の 3 つの自由度は xyz 座標でしたが 3 次元空間ではなく 4 次元空間に電子があった場合自由度は座標軸 4 つとスピンを合わせて 5 つになるのかそれともスピ

ンが 4 つ目であるため 4 つのままですか？ **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 4 次元空間内で運動する物体の位置を記述するために、自由度はいくつ必要か？ もしも 5 次元空間に電子があった場合 “スピンの自由度であるため、自由度は 4 のまま” でよいか？ // 4 次元空間にある電子とは、何か？ 私たちの世界とは異なる世界の話、SF の話か？ フィクションなら、何でもアリでは？

19s2034+: 電子が 3 個以上の原子だと因数分解できず、スレーター行列式を解かなければ先へ進めませんが、そこで行列式を求めた後にスピン部分をどう変形して波動関数を求めるのですか。またそれをどうつじつまが合うように解いていくのですか。 **M:** 微妙に勘違いの予感。スレーター行列式は解かない。(方程式などではないので) 解く必要はない。スレーター行列式は、それ自身で波動関数である(行列式を用いて表記された波動関数)ので、ここから何か別の波動関数を求めるわけではない。(+) つじつまのあう場の方法で仮定された波動関数は、何のどんな波動関数だったか？ スレーター行列式においてそれはどれか？

19s2035: 量子力学において、反対称性を示す波動関数というのはどのようなことを表しているのか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 波動関数の反対称性は反対称性、それ以上でも以下でもない。ちなみに、波動関数の(物理的な)意味は？ それに対して、波動関数の符号が反転することの意味は？

19s2036: 任意の 2 つの電子の交換に対して波動関数は反対称であり、エネルギー的にも等価と考えることができますが、電子が励起して、他の軌道に移動する時、この 2 つの電子の間に優位性がありますか？ **M:** あなたの言う“優位性”とは、何のことか？ // “同種粒子は区別がつかない”の意味を理解していない予感。// 二つの波動関数 $\psi(1,2) = 1s(1)2s(2)$ と $\psi(2,1) = 1s(2)2s(1)$ は、同じ状態を表しているか？

19s2037: 励起状態の原子においても、行列式波動関数は基底状態の原子と同じ結果を導くことができるのか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 同じ結果とは、どういう結果のことか？ // パウリの原理は、励起状態の原子においては成り立たないのか？ その理由は？ 電子は、原子が基底状態か励起状態かを認識して、パウリの原理に従うかどうかの行動を変化させるのか？

19s2038++: 行列式で求めた波動関数もエネルギーを求める計算をする時には、再びハートリーフォックのつじつまの合う場の方法で行うのですか？ **M:** あなたは、どういう方法で系のエネルギーを求めたいのか？ どんな試行関数を用いた変分法？ 何を摂動とした摂動法？ それともオービタル近似・平均場近似を用いた最良の計算？ // (++) あ、もしかして..... HF-SCF 法で、“フォック演算子を用いた HF 方程式を解く”の過程で具体的に何をするのか、全くわかっていない人が多数なのかしら？ ガッカリ orz // フォック演算子は一電子演算子であり、HF 方程式は一電子についての方程式である、ということをつきつめて忘れてしまっているのかしら？ ガッカリ orz // 例えば教科書 p.307 にあるように、一電子波動関数 $\phi(1)$ をスレーターオービタルの線形結合の形として、係数と指数を変化させている。すなわちこれらが変分パラメータだということで、この段階で変分計算を行って解を求めているということだ！

19s2039: スレーター行列式で求められた波動関数の空間部分の最適な形を決定するためにハートリーフォック方程式のつじつまの合う場の方法を使うとありますが、この時スピン部分で考慮することなどはありますか。 **M:** スピン関数は規格化直交しているという仮定なので、スピン関数によって生き残る積分・消滅する積分があることになる。19s2005 参照

19s2040: すべての原子でスペクトルは 2 重線になりますか。 **M:** なぜそうなると思ったのか？ // Na の D 線は $(3p)^1 \rightarrow (3s)^1$ の遷移に相当するが、これが 2 重線になるのはなぜか？ その仕組み

を理解すれば、他の原子でどうなるのかわかるのでは？

19s2041: オービタルが空間的に重なったとき、その重なったものの中の局在的な箇所には 2 個以上の電子は収容できますか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // オービタルの一部分に電子が局在することは可能か？ そもそもオービタルって何なのか？ “その重なったものの中の局在的な箇所”って、結局空間内のある特定の場所・エリアという意味でしょ？

19s2042: スピン量子数が 0 ということは、自転していないということでしょうか。また、スピン量子数 0 は計算式や測定などに影響はありますか。 **M:** “スピン(自転)はたとえ”だということが、まだ理解できないようで、残念。// 電子のスピン角運動量と関係のある物性がある。たとえば電子のスピン角運動量がゼロということは、磁気モーメントがゼロということ。

19s2043: Li 以降の原子の全てが、スピン部分と空間部分で因数分解できないのでしょうか **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // Li で因数分解できない理屈を理解していないようで、残念。

19s2044: 新たな粒子が見つかった時ボース粒子とフェルミ粒子はどう区別するのですか **M:** 17s2047 参照

19s2045: スレーター行列式はパウリの排他原理を全て満たすがその逆は成り立つのか？ **M:** 微妙に勘違いの予感。// パウリの排他原理は、“全て”と言われるほど独立した多くのことを述べているのか？ 教科書 p.311 の仮説 6 は、そんなに複雑なのか？

19s2046: 非相対的なシュレーディンガー方程式には電子のスピンが内在していないのはなぜですか？ **M:** シュレーディンガーに聞けばいいのでは？ :-p // シュレーディンガーがシュレーディンガー方程式を考えたときには、まだ粒子の波動性を記述する波動方程式が存在していない段階だったので、それを記述することに注力されていたと考えられる。// 読書感想文(仮)のネタ？!

19s2047: 「電子はフェルミ粒子で任意の 2 個の電子の交換に対して波動関数は反対称でなければならない」と書いていたがなぜ交換しないといけないのかわかりませんでした。 **M:** 別に、あなたが交換したくしなければする必要はない。しかしだからといって他人の可能性を禁止する理由もない。あなたが交換する必要性を感じなくても、自然の法則はあなたの意志とは無関係にできているし、自然があなたの期待どおり・意志の通りに振る舞う保証もない。

19s2048: He の波動関数について、 $\Psi(1,2) = c \Psi(2,1)$ での c を求める際に、 $c^2 = 1$ となるというのはどのようにして導かれたのですか？ **M:** 講義で、二電子の交換を二回行くと元に戻ると説明したのだが、理解されていないようで、残念。// $\psi(1,2) = c\psi(2,1)$ に $\psi(2,1) = c\psi(1,2)$ を代入すると $\psi(1,2) = c^2\psi(1,2)$ が得られる。これのどこが難しいのか？

19s2049: スピン量子数が受け入れられたのは何が起こったからか？ **M:** 20200707 の 17s2029 参照

19s2050: 「2 電子系では空間部分とスピン部分へ分解できるが、一般には分解できないことは重要である」とあるが、どのような点から分解できないのが重要なのですか。 **M:** 19s2005 参照

19s2051: 変分法、摂動論これ以外に近似する方法はありますか？ **M:** 色々あるかもしれない。調べて分かったら、教えてくださいネ // ひとつは、微分方程式の数値解法。シュレーディンガー方程式は数学的には二階の偏微分方程式なので。

19s2052: 1922 年にナトリウムの原子スペクトルの実験が行われ、その 3 年後の 1925 年にパウリの排他原理が発表されているが、パウリはこの短期間でどのような行程でこの原理を求めたのだろうか？ / また、この原理は当時どのように考えられていたのだろうか？ **M:** 19s2049 参照

18s6025: 1) 教科書 p.310 では、 Ψ_1 と Ψ_2 が、 $\phi(1,2)$ と $\phi(2,1)$ からなる可能な一次結合の候補であることを示した上で、「ヘリウム原子の基底状態の波動関数として実験結果から $\Psi_2 = \phi(1,2) - \phi(2,1)$ を採用しないとイケない」、とありました。講義では、パウリの排他原理の反対称性

を満たすように系の波動関数 Ψ を作ると、 $\Psi = \phi(1,2) - \phi(2,1)$ のようになる、と習いました。結局、教科書のように「実験によって Ψ を決定」と、講義のように「パウリの排他原理を満たすように Ψ を決定」の、どちらによって Ψ が採用されたのでしょうか？ // 2) 教科書 p.313 の式 (8.41) の下の説明に、「 \dots 二電子系では空間部分とスピン部分へ分解できる

が、一般には分解できないことは重要である」とありますが、なぜ重要なのでしょうか？ **M:** 1) 別に、どちらでもいいのでは？ だって、実験で何がわかって、そこから何が言えるかを考えれば、どちらでも同じことですよ。 // 2) 19s2005 参照