

構造物理化学 I (20211221)

M: 以下は宮本のコメント (* はちょっとイイかもしれない質問, + は私のコメントに注目)

- 17S2022:** 三角関数の含まれる波動関数を規格化するとき $r^2 \sin \theta$ をつけるのはどうしてですか?
M: 必要だからつけるのでは? // 三角関数を含むからと言って必ずそれを付ける訳じゃない. 例えば一次元の箱の中の粒子問題では, それを付けない.
- 18S2003:** 空間の基底状態を記述するにはやはり規格化や直交を利用するのがベストなのでしょうか? ほかに方法はありますか? **M:** ベストかどうかの判定基準は? // “空間の” 基底状態とは? 場の量子論・第二量子化の話か??
- 18S2010:** ブタジエンの 2,3 つ目の炭素に水素以外の元素が配位していた場合も似た波長の光を吸収するのか
M: 本気か? 有機化学で置換基効果を習わないのか? // “似た波長” か否かの判定基準は?
- 18S2014:** 波動関数の 2 乗と粒子の存在確率が比例してその比例定数が 1 でなくても、波動関数の規格化は行えますか。 **M:** 本気か? 自分で計算してみれば分かるのでは? // “規格化” の意味を理解していない予感.
- 18S2018:** 不確定性原理を考慮しなければならない分野はどんな分野ですか。 **M:** 自分で考えてみればいいのでは? // 不確定性原理は量子力学の基本的要素の一つなので, 量子力学が必要になる場面では全て不確定性原理を考慮していることになる. 量子力学は量子化学の基本であり, 量子化学は原子・分子の問題を考えるときには必要. そして物質は原子・分子からできているから.....
- 19S2004:** 規格化できる波動関数とできない波動関数の違いはなんなのでしょうか? **M:** 教科書 pp.126-128 や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは?
- 19S2005:** 箱の中の粒子の平均位置や平均運動量を求めることの意味は何ですか **M:** 別に. 現段階では, 量子力学の理解を深めるためでは? :-) // 種々の物理量が, 電子の位置や運動量に依存している. 物理学の基礎を復習する必要があるのでは?
- 19S2011:** 規格化されていない波動関数と規格化された波動関数は、どちらが正しいのかはどのようにして決めるのでしょうか? **M:** 教科書 4 章や参考書を読んで勉強すればいいのでは? // シュレーディンガー方程式の解はどちらか? ある関数がシュレーディンガー方程式の解 (与えられた微分方程式の解) になっているかどうか, どうやって確かめればいいのか?
- 19S2017+:** どうして空間の中で場所によって存在確率が変化するのですか? **M:** 別に. 自然はそうに出来ている. それが量子力学的粒子の振る舞いだとしか言いようがない. // もしもそうでなく振る舞うと思いついていたのなら, その認識が常に成り立つわけではないことを知り, むしろその根拠を深く考察すべき. // 波動関数の二乗が粒子の存在確率に比例するのだから, 波動関数が定数の関数でないならば粒子の存在確率が場所によって異なるのは極めて自然と言えるのでは (?)
- 19S2022:** ボルンの解釈において, 比例定数が 1 でない場合には粒子の存在確率を解くことはできないのでしょうか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // 比例定数が 1 でなければ何なのか?
- 19S2045:** 不確定性原理は原子や粒子などの微視的なものに使われるが、どの程度の大きさのもののまでが対象として使用できるのか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // 物体の大きさによって不確定性原理が働くかどうかが変わるのか? 仮に境目の大きさがあったとして, その境目よりわずかに小さい粒子とわずかに大きい粒子とで, 粒子の大きさ自体はほとんど変わらないにも関わらず, それらの振舞いが劇的に違うことになる.
- 19S2051:** 不確定性原理の右辺のプランク定数が与える影響はなんですか? **M:** 本気か? 教科書や参考書をよく読めば分かるのでは? // 不確定性関係にある二つの物理量について同時に測定したときのそれぞれの不確かさの積がゼロでない有限の値となる. ただしその値は, 日常の感覚としては非常に小さい.
- 20S2001:** 二次元の箱で粒子が二つ以上であると考えたとき、粒子の場所が入れ替わることもあると思うのですが、その場合は存在確率が 0 になることはないのでしょうか? **M:** 本気か? 自分で判断できないのはなぜか? // もしも波動関数に節があれば, 存在確率は...(?) あるいは逆に存在確率がゼロにならないなら節が存在してはいけないのだが, 絶対に存在しないという保証はあるだろうか? // 20S2035 も参照

- 20S2002:** 教科書 p87 にマックスボルンはシュレディンガーのこの解釈には論理的な難点があることに気がつきと書かれてあるがその難点とは何か。 **M:** 20211214 の 19S2026 参照
- 20S2003:** 量子数が大きくなると粒子は古典的に振る舞うようになるとありますが、 x の範囲を極限まで小さくしても粒子は古典的に振る舞うようになりますか？ **M:** 本気か？ 範囲によって粒子の振る舞いが変わるのか？ // 質問記載の例の場合、 x の範囲が極限まで小さいということは、位置の不確かさが非常に小さいということになり、ならば当然運動量の不確かさが大きいということになる。この時、ミクロな粒子に対する影響とマクロな粒子に対する影響は、それぞれどんな塩梅だろうか？
- 20S2006:** 規格化されない波動関数はどのような波動関数なのでしょう。 **M:** 19S2011 参照 // または 19S2004 参照
- 20S2007:** 教科書 39 ページに粒子の運動量の分散や標準偏差は運動量の測定時に含まれる不確かさであると記載されていた。この不確かさとは具体的にどういう意味か **M:** 場合によって不確かさの意味・具体的なものは違う。例として、教科書 pp.95-97 では標準偏差、初期のハイゼンベルクの γ 線顕微鏡の思考実験ではレンズの口径、他にも実験誤差 (ランダム誤差), etc.
- 20S2010:** 運動量演算子はどのような意味があるのですか。 **M:** 本気か？ 文字通り波動関数から運動量を得ることができる。// 教科書 4 章や参考書をよく読めば分かるのでは？
- 20S2011:** 本日の講義で、直鎖状の共役炭素の π 電子について考えました。構造が立体となるときは 1 又はエネルギーはどのように求めることができるのでしょうか。 **M:** 別に、シュレディンガー方程式を用いて普通に求めればいいのでは？
- 20S2012:** コンピューターを使って粒子の位置や動きを予測する時にも不確定性原理は必ず考えられていますか？ **M:** 本気か？ // 何をどう考えて計算するかは、道具に依存しない話では？
- 20S2016:** 波動関数の規格化には確率の和を 1 にする以外にどのような意味があるのですか？ **M:** 本気か？
// それだけではダメなのか？ // たとえば教科書 p.89 の (3.22) 式の任意定数 B を一意に $\sqrt{\frac{2}{a}}$ に決める。
- 20S2018:** なぜ電子の存在確率は場所によって変化するのでしょうか。 **M:** 19S2017 参照
- 20S2021:** 不確定性原理によれば、運動量と位置 2 つの不確かさの積の最小値がプランク定数程度になるそうですが、どのような意味があるのでしょうか？ **M:** 本気か？ いませら感があるが、教科書や参考書をよく読めば分かるのでは？ // 19S2051 参照
- 20S2024:** 波動関数の 2 乗を計算することによって粒子の確率分布を求めることができますが、確率的にしか求められず、正確に一点を求めることができないということは、我々がまだ知らない変数、法則があるということなのでしょう。 **M:** 隠れた変数理論は否定されている。// ベルの不等式
- 20S2026:** これまで習った過程で量子力学の全ての事象についての説明や証明は可能なのですか？ **M:** 教科書 4 章や参考書をよく読めば分かるのでは？
- 20S2028:** 平均運動量が 0 とは右向きと左向きが同じ確率ということでしたが、真上や真下にエネルギーをもつ粒子はどのように考えればいいですか？ **M:** “真上や真下にエネルギーをもつ” とはどういう意味か？ // 正気か？ いま議論の対象としている系はどんな系か？ // 一次元の箱の中の粒子は、どのように運動するか？
- 20S2029:** 波動関数が実数関数であるとき確率流密度が 0 なのは物理的意味はありますか **M:** ここでどうして“確率流密度”が出てくるのか？ どうして話を難しくするのか？ そして、波動関数が実関数が複素関数かで結論が違うのか？ // 微小領域への流れ込みと流れ出しの差し引きがゼロということで、定常的な流れを表していて、湧き出しも吸い込みも無いことを表しているのでは？ 別に特殊な話ではなくて、参考書に書かれていることだと思うが、何が分からないのか？
- 20S2030:** 一次元のシュレディンガー方程式について ポテンシャルが $V(x)=V(-x)$ のときの定常状態の波動関数は、 $\phi(x)=\phi(-x)$ 、 $\phi(x)=-\phi(-x)$ のどちらかですが、これは数学的な違いだけで、物理学的 (現象的) には同じですか？ **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 教科書では一次元の箱が $x: 0-a$ の領域だったが、これが $x: -\frac{a}{2}-\frac{a}{2}$ ならどうか？
- 20S2031:** 今は簡単である 1 次元の箱の中の粒子について考えているが、次元の数が増えると物理的に良いこ

とはあるのか。 **M:** 本気か? // 私たちのいる空間は何次元か? 私たちの世界の分子について考えると、電子の運動領域を何次元とすればよいか? // さらに多数の粒子 (電子) を考える場面では、何次元空間を考えればよいか? 多数の電子が関与する系を扱うとき、波動関数の引数はいくつあればいいか?

20S2035: 箱の中の粒子が2つ以上存在している場合、規格化するためにはどうすればよいか? **M:** その場合の波動関数は、何を引数として、何を意味するのだろうか? // 教科書 8 章や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは?

20S2036: 平均値を求める際、波動関数とその波動関数の複素共役で演算子を挟んで計算すると得られることが (3・35) から分かるが、なぜ仮説なのか。定理、定義のように確定していない理由はあるのか。 **M:** 教科書 p.95 に記載の通り、教科書 4 章 (p.133) や参考書をよく読めば分かるのでは? // “仮説” の用語は無用の混乱を招くので不適切、原文は postulate なのだから、“公準” または “公理” の方がよい。

20S2037: ボルンの解釈について波動関数とその共役関数は確率振幅と呼ばれてるのでそれ自体がなにかの確率分布だという解釈はできませんか? **M:** 微妙に誤解の予感。確率振幅なのは波動関数ではなくて波動関数の二乗 (または波動関数とその複素共役との積)。

20S2038: 平均値を求める際、なぜ規格化されている必要があるのでしょうか。 **M:** 別に。比例定数が分かっていたら、規格化されていなくてもいいのでは? // でも、比例定数が 1 であれば簡単だと思いますか?

20S2039: 物理量の期待値は演算子を波動関数で挟んで全空間で積分しますが、これは証明できるものなのでしょうか? **M:** 20S2036 参照

20S2040: 教科書の共役炭化水素中の π 電子をもつものの例としてブタジエンの吸収スペクトルの波数についての計算値と実測値の値の近さから“吸収スペクトルにある程度成功していることがわかる”と判断したのだと推測したのですがこれは主観的な感想であるとも思います。この「ある程度成功」は何を以って判断できますか。 **M:** 別に。主観 (“成功”) なのだし、程度問題 (“ある程度”) なのから、厳密な基準などなくでもいいのでは?

20S2041: 規格化について、自由粒子を考えるとどこまでも同じ周期の波が続いていて無限の範囲を考えても見出せる確率が同じく 0 の極限だと思うが、このように積分値が一定値にならない場合も規格化は行えるのか。 **M:** 進行波・平面波は、無限に広がり、あるいは無限に続くので、普通の意味では規格化できない。そこで適当な単位領域を考え、その範囲内で規格化するのがよくやられている。

20S2042: 箱の中の粒子という条件の場合一次元や三次元の運動量は $=0$ となりますが、同じ条件で時間に依存する場合のはどのようなのでしょうか。また、全空間の粒子の存在確率は時間に依存する場合でも 1 になるのでしょうか。 **M:** 粒子の数は時間経過とともに増減するだろうか?

20S2043: 規格化定数は、電子に対してどのような影響を与えるのか? **M:** 19S2011 参照

20S2046: 平均値が 3・36 式で表されるのはどうしてですか。 **M:** “現時点での仮説は” と書いてあるのだが、その意味が理解できないのだろうか? 教科書 p.133 や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは?

20S2047: 不確定性原理について、 x が仮に 0 だと仮定すると、 p の値は不確定さなしに決まってしまうとありましたが、これは $x=0$ だとすると p はどんな値をとっても左辺が 0 になってしまい、不等式をみたすことが出来ないため、位置 x が 0 の値をとることはない、という認識ですか? **M:** 激しく誤解の予感。// x と Δx とを区別できていないのでは? また事実認識においてもオカシイのでは? (前段の “～とありましたが” って、どこに書いてあった話か?)

20S2052: 平均の位置である場所に粒子がいる確率は 1 になりますか **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // 確率が 1 とは、どういう意味か? // 一次元の箱の中の粒子の平均の位置は? その位置での波動関数の二乗は、量子数 n の値が 1, 2, 3, 4,... の時にそれぞれいくらになるか?

21S2001: 波動関数の二乗をすることで 3 次元の箱の中の存在確率も求めることができるのでしょうか? **M:** 本気か? // 波動関数の二乗の意味が、箱の次元数で変わるのか? 逆に、存在確率を求めるのに、次元数毎にそれぞれ異なった式を用意しなければいけないのか? // 科学ってそういうもの?

21S2002: 今回、一次元の箱の場合も三次元の箱の場合も箱の中にはりゅうしがひとつだけでしたが、2つ以上粒子が存在すると仮定した場合、確率についてどう規格化すれば良いのでしょうか。 **M:** 20S2035 参照

- 21S2003:** 平均運動量が 0 ということは実際に粒子を測らなければどちらに運動しているか分からないのですか？ また一度測ってからその後の粒子の運動は予想できないのですか？ **M:** 本気か？ 確率・統計を復習する必要があるのでは？ // テストでクラスの平均点がわかっているときに、各個人の得点をどうやったら知ることができるか？ // 不確定性原理を理解していない予感
- 21S2004:** 粒子の平均運動量についての質問です。平均運動量がゼロになることは理解できましたが、ゼロにならないこともあるのでしょうか？ また、それはどのような時なのですか？ **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 平均運動量がゼロでないとすると、その粒子の集団 (の重心や平均の位置) はどんな運動をしていることになるだろうか？
- 21S2005:** 箱の中に 2 つ以上の粒子が存在すると仮定するとき、確率についてどのように規格化するのか？ **M:** 20S2035 参照
- 21S2006:** なぜ右向き回転の電子と左向き回転の電子が同じ確率で存在しているのですか？ **M:** どの粒子の回転の話か？
- 21S2007:** なぜ同じ空間でも場所が変わると粒子の存在確率が変わるのですか？ **M:** 19S2017 参照 // ちなみに“同じ空間”とはどういう意味か？ 箱の端と中央とでは、壁からの距離や箱の中の全体に対する相対位置が違うが？
- 21S2009:** 物質・粒子が本当に波として空間に全体的に存在していて、物質が他物質と反応する瞬間だけ波が変化すると考えることは可能ですか？ **M:** 本気か？ 思想信条の自由はあるのだから、考えるだけならいくらでも可能では？ // ただその考えが、意味があるのか、自然をうまく表現しているか、未知の現象を予想できるか、などは知らない。
- 21S2010+:** 量子力学的粒子が軌跡を描かないという話は不確定性原理から飲み込めるのですが、箱の中の粒子が存在確率が 0 である境界を通り抜けているような粒子の確率分布になるというのは不思議でなりません。 // これについての考え方というのは、人間がそういうように飲み込もうという結論に至ったゆえの意味づけなのでしょう。それとも、(言い方が難しいのですが) 粒子がその境界をテレポートのような事をするということが物理的に示されたゆえの意味づけなのでしょう。 **M:** (+) まず“飲み込む”という言い方は不適切で非常に不愉快です。物理学・自然科学は、何かを無批判に、考えもせず理解もせずに覚えるということではありません。(さらに“覚えこむ”となると、外からの強制力を感じます。) // 講義でも説明したつもりですが、多数回観測したら観測値の分布がそうなっている、という話です。これのどこが難しいのでしょうか？ // (+) “誰も見ていない時に月は存在するか？”に対して“わからない”が、標準的な量子力学の思想です。あるいは“観測されたもののみが実在する”との考え方ですので、“観測されていない時のことなど知らない”となる。ある瞬間に箱の左側にいた粒子が、別の瞬間に (節を越えて) 右側にいたとしても、その間のことは観測されていないので知らない、ということになります。
- 21S2012:** 不確定性原理において、粒子の運動量と位置の不確かさには反比例の関係があります。これは、どちらか一方が正確になればなるほど、他方は不確かになるということですが、この性質を何か利点として扱えるものはありますか？ **M:** 私は知りません、調べて分かったら、教えてくださいネ // 自分で考えて工夫してもいいのでは？
- 21S2013:** 直鎖状ではない共役炭化水素の π 電子の場合のエネルギーはどのように変化するのですか？ **M:** 自分でモデルを考えて、計算してみればいいのでは？
- 21S2014:** 平均の運動量を計算する際に運動量 p を虚数が入った式に変換していましたが、運動量が虚数であるとはどういうことでしょうか。想像がつかません。 **M:** 本気か？ 誤解の予感 // (+) もちろん、現実には観測される物理量が虚数であることはありえない。運動量 p を対応する演算子に置き換えただけ。教科書 p.129 や参考書を読んで勉強すればいいのでは？ // 基本的な波である平面波 $\exp\{i(kx - \nu t)\}$ を固有関数として、そこから運動量 $p = \hbar k$ を固有値として得るような演算子は何だろうか？
- 21S2015:** n が偶数の時の $1/2$ での粒子の存在確率は 0 であるのに、粒子の平均の位置は全ての n において $1/2$ であるのはなぜですか。 // また、粒子の平均の位置を考える場合は存在確率は考えないのですか？ **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 量子数 $n=2$ のときの波動関数の二乗のグラフを考

えてみればいいのでは？ 図形で見て、位置の平均値は？ この時、粒子の存在確率分布は考慮されていないのだろうか？

21S2016: 波動関数の二乗の微小区間の積分は波動関数のグラフの高さと見れるから、振幅の大きいところの存在確率が大きいのであって、粒子自体は波形の線上ではなく n の線上にあるときの確率ですね？

M: 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 波動関数の値は何を意味しているのか？ 一次元の箱の中の粒子は、どこを (どんな空間内を) 運動しているのか？ // もしも粒子が波線上を運動しているのだとすると、 x 軸に直交する方向の運動をもたらす力は何か？

21S2018: 不確定性原理についてですが、もし 1 個の電子をある場所に閉じ込めてしまえば、電子の位置、運動量が分かるので 不確定性原理は成り立たないのではないですか？ **M:** どうやって、どの程度の大きさの領域に閉じ込めるのか？ 電子はどの範囲の場所に閉じ込められているのか？

21S2020: なぜ粒子は一様に分布しないのですか **M:** 19S2017 参照

21S2022: そもそも話になるのですが、電子が一つの軌道に二つまでしか入れない理由は何故ですか？ 電子のスピンを考えた時、表面速度が時速を超える可能性があり、物理的にはありえない例えであるため、イメージとして覚えると教わりましたが **M:** イメージも何も、スピンは純粋に量子力学的事象なので、球体が自転しているような説明は本当は正しくなく、あくまでも“たとえ話”でしかない。三次元空間内に存在している電子の第四の自由度なので、電子の内部構造のようなものに由来すると考えざるを得ないが、しかし電子は素粒子なので内部構造を持たない。もちろん大きさも考えられない。繰り返すが、スピンは純粋に量子力学的事象なので、日常感覚と直結している古典力学的なイメージで考えることはできない。

21S2023: 波動関数を規格化できない場合はどのように粒子の存在確立を見出すのですか。 **M:** 19S2004 参照 または 19S2011 参照

21S2024: 規格化は絶対ですか。規格化しない考え方がある場合それは波動関数として正しいですか。 **M:** 19S2011 参照

21S2025: 量子力学について色々調べてたら量子もつれ (量子エンタングルメント) というものを見つけました。どれだけ遠くのところにおいても無限大の速度で伝達しているかのような不思議な現象と書いてありました。あまり理解できなかったので教えていただきたいです。 **M:** そうですか、しかし、質問が記載されていません。// EPR パラドックスとかベルの不等式とか言ってみるテスト // 読書感想文 (仮) のネタでは？

21S2026: n が ∞ になった場合、粒子が存在しない領域が多くなると思うのですが、そうなった場合は粒子が存在する確率を 0 としてもよろしいのでしょうか。 **M:** 正気か？ もしもあなたの主張が正しければ、量子数が異なる状態はエネルギーが異なるのだから、これはすなわち n が大きくなるようにエネルギーを与えると粒子が消失してしまうことになる。

21S2028: 箱が立方体になると対称性ができますが、それでなぜ縮退が起こるのでしょうか。 **M:** 本気か？ 教科書 pp.101-102 の説明文と図 3.6 の、何がわからないのか？

21S2029: 量子力学演算子の固有関数は直交するとありますが、固有関数もベクトルと同じように考えても良いのですか？ **M:** あなたの言う“ベクトルと同じ”が何を意味しているのか分かりません。// ベクトル空間と関数空間との対比を考えてみればいいのでは？

21S2030: 空間の中で場所によって存在確率に変化するのとはなぜか **M:** 19S2017 参照

21S2031: ブタジエンは 1 次元の井戸型ポテンシャルとして吸収スペクトルを求めることができたが、ベンゼンのような物質ではどのような境界条件から吸収スペクトルを求めることができるのか。 **M:** できるかどうか、自分で考えてみればいいのでは？ // 境界条件をこう考えなければいけないなどという規則はないので、自分で合理的なモデルを考えればいいのでは？

21S2032: 波動関数の解釈はボルンの解釈のように一人一人の解釈でもよろしいのでしょうか **M:** “一人一人の解釈”とはどういう意味か？ // 別に自分勝手な解釈を禁止する規則など無いが、他人に理解されないような意味不明な解釈や、他の事項と整合性のない独りよがりの解釈に、自己満足以外の意味があるとは思えない。

- 21S2033:** pp.92-93 に n が増加するにつれ確率密度は一様になるとあるが、粒子の存在領域を小さくしていけば同じように一様になるのか？ // 粒子の平均の位置や平均の運動量を求めるときどうして全空間で積分することで出せるのか？ **M:** 本気か？教科書に計算例があるのだから、自分で計算してみれば良いのでは？ // 質問の意味が分かりにくい。“粒子の存在領域を小さくして”とは、箱の大きさを小さくするという意味か？“同じように”とは、何と何とが同じなのか？ // 箱の大きさを変えると、確率密度分布が変わるのか？ // 20S2046 参照
- 21S2034:** 平均は、値を全て足して値の数分を割って出すもののため、 $\sum$ などを使えばいいと思ったのだが、積分を使ってなぜ出せるのか。 **M:** 本気か？和 $\sum$ と積分 $\int$ は、全くの別物なのか？ // 定積分と台形公式 (シンプソン公式等) との関係は？
- 21S2036:** 波動関数の規格化を行わずに計算を進めることはできますか。 **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは？ // 19S2011 参照
- 21S2037:** 教科書ではシュレーディンガー方程式を自由電子に適用させているが、極性分子の結合間のなどの電子分布はシュレーディンガー方程式では求められないのか？ **M:** 本気か？電子は自分が置かれている状況に応じてシュレーディンガー方程式に従うかどうかの振舞いを変えるのか？電子は自らが従う方程式を選ぶのか？
- 21S2039:** 平均の運動量を求める時に運動量 p を波動関数と波動関数の複素共役で挟み x について積分する式で p が $(-i\hbar(d/dx))$ という演算子になるのはなぜですか？ **M:** 21S2014 参照
- 21S2040:** 量子化について、今は箱の中の粒子について考えていますが、現実世界にも拡張できるのでしょうか。それともやはりミクロの世界でのみ成り立つのですか。日常でエネルギーが連続的に観測されるのは式 (3・21) で定義されたエネルギーのオーダーが普段使っているものと大きく異なるからなのでしょうか。 **M:** 質問の意味が分かりにくい。“現実世界にも拡張”とは、何を意図しているのか？教科書で直鎖共役炭化水素の π 電子の例が出てきたが、これは現実世界の話ではないということか？ // 微妙に誤解の予感。日常でエネルギーが離散的ではなく連続的に見えるのは、エネルギーのオーダー (大きさ) の話なのか、それとも離散的エネルギーのエネルギー間隔の大きさの話なのか？
- 21S2041:** 井戸の中の粒子の存在確率について、その運動量と井戸の広さが反比例するということは波動関数の波長は観測によって短くなるということでしょうか。 **M:** 言語明瞭, 意味不明。 // 運動量と井戸の広さが反比例するとは、どこで述べられているのか？それと粒子の存在確率が何の関係があるのか？ // さらに人が観測すると波の波長が変化するとはどういうことか？
- 21S2042:** 1次元の領域の中にある粒子の平均運動量が 0 になるのは分かりましたが、3次元においてはようになりますか？ **M:** 本気か？自分で計算してみれば分かるのでは？ // 教科書や参考書をよく読めばいいのでは？
- 21S2043:** 直鎖型の共役炭化水素中の π 電子が多いほど光を吸収する力が大きくなるのですか。 **M:** “光を吸収する力”とは何か？この世界を構成する四つの力 (重力, 電磁気力, 弱い核力, 強い核力) のどれのことか？ // 教科書 pp.89-90 のどの記述からどんな論理でそのような発想が導きだされるのか？
- 21S2044:** 波動関数はどのような条件下でも規格化されなければならないのですか **M:** 私は、全ての条件を検討したわけではないので、知りません :-p // 19S2011 参照, 19S2004 参照
- 21S2045:** 波動関数が規格化されなければいけないのはなぜですか？ **M:** 19S2011 参照
- 21S2046:** 規格化の有無に関わらず、波動関数をシュレーディンガー方程式に代入すると、系のエネルギーが単一の値として定まるのはなぜですか。 // 箱の中の自由粒子を議論するとき、境界条件として、固定端条件や周期的条件を用いますが、これらの使い分けはどのように行えばいいのですか。 **M:** ハミルトニアンが線形演算子だから。シュレーディンガー方程式が線形微分方程式だから。 // 別に、対象としている系に相応しいものを選べばいいだけでは？あなたは何について計算したいのか？それは箱の中に粒子が閉じ込められている系なのか、それとも繰返し周期構造を持っていて無限に長い構造をしている (そのように近似的に考えられる) 系なのか？
- 21S2047:** 箱の中の粒子では波動関数の規格化はできたが、考える粒子を自由粒子の波動関数といった何にも

縛られないものとした時に範囲が無限になり、規格化定数の値は (ほぼ) 0 になり、計算が出来なくなると思ったのが実際どうなのか。 **M:** 計算が出来なくなってしまうては困るのでは? じゃあなんとか我慢できるように工夫すればいいのでは? 20S2041 参照

21S2048: なぜ量子論的なある量と古典力学上の量との性質が異なるにもかかわらずに一定の対応が成り立つのか。 **M:** 本気か? 物理観がオカシイのでは? // 具体的に考えてみれば自明では? 例えば粒子の位置について、量子力学的粒子の位置と古典力学的な粒子の位置に対応関係があるというか、空間内の座標に、その位置に存在する物体に依存する訳がなく同じものであるのは自明では? またどちらについても時間は同じものだろう。すると速度・加速度や運動量・運動エネルギーも同等であることは自明では? またどちらの粒子についても電荷は同等な性質であり、クーロンの法則などは粒子のサイズに依存しない法則であるから、両者に対して同等に成立するのも自明では?? すると電流や電位差などとそれらの間の関連法則も同等に成り立つ (そもそも巨視的な電流は微視的な電子の流れなのだから、異なる法則に支配されると考える方に無理があるのでは?)。もちろん微視的な粒子の生成消滅が勝手に起こるわけないので、質量や電荷やエネルギーや運動量や角運動量等が保存するのも自明。というよりも物理法則の空間移動の対称性や時間反転対称性などの対称性から運動量やエネルギーの保存則などの各種の保存則が成り立つのだし.....

21S2049: 1,3-ブタジエンのモデルで、より正確な値を得るためには何を導入すれば良いですか。 **M:** 自由電子モデルを、より現実 に即したモデルに変更する。例えばポテンシャルを改善する。また π 電子モデルであっても 4 電子全てを考慮したシュレーディンガー方程式を用いて波動関数とエネルギーを求める (教科書 pp.89-90 では、1 電子系のエネルギー準位に 4 電子を入れた)、さらに σ 電子や価電子だけでなく内殻電子も考慮したり、C だけでなく H も考慮する、分子の幾何学的に正確な構造を反映させる、等々.....

21S2050: 不確定性原理について、不確かさ Δx の基準のようなものは何か **M:** 質問の意図がわからない。“ Δx の基準”とは、どんな答えを想定しているのか? // 不確かさの基準とは、例えば “ $\Delta x|0.000001$ であれば不確かとは言えない” 等の議論をしたいのだろうか?

21S2051: なぜ波動関数の 2 乗が粒子の存在確率になるのですか? **M:** 20S2036 参照 // 物理量 $\hat{A}$ の平均値が $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx$ で求められるのであるが、これと x の平均値が $\langle x \rangle = \sum_j x_j p(x_j)$ ($p(x_j)$ は確率) であることとの対比から、波動関数の二乗が確率と考えるのが素直である (cf. 教科書 B 章)。

21S2052: 教科書 p.93 に対応原理とあり、量子数の大きな極限で量子力学の結果と古典力学の結果が次第に一致するようになるとありますが、量子数が小さいと結果にどのようなずれが生じるのでしょうか。 **M:** 本気か? 量子力学的粒子の特徴的な振舞いを、教科書のついその直前までで説明してきたのではないのか? 教科書や参考書の説明の、何がわからないのか?