構造物理化学 II (20220412) M: 以下は宮本のコメント

- **16S2008**: 量子化すると計算が複雑化するのはなぜですか。 **M**: 意味不明. 何の計算がどう複雑化したというのか?
- **16S2052:** 水素原子のエネルギーは解析的にはシュレディンガー方程式によって導出できますが、実験的には どのように測定しているのでしょうか **M:** 微妙に勘違いの予感. "水素原子のエネルギーはシュレーディンガー方程式を解析的に解くことで理論的に得られる. (解析的じゃなくて近似的に解くのでもよい. いずれにしてもシュレーディンガー方程式を解いて得られる.)" // 教科書を見ると, 光電子分光法 (XPS など) で多電子原子や分子の電子のエネルギーを測定している. 水素原子についても同じ手法が使えると思われる.
- **18S2010**: 実際の電子の振る舞いとは異なるにも関わらず回転体としての計算で波動関数を表すことができるのはなぜか **M**: 意味不明. 回転体うんぬんとは何のことか?
- **18S2014:** 水素原子のハミルトニアンについてですが、原子核を固定してそのエネルギーをゼロにすることはできませんか。 **M:** 正気か? ゼロでない有限の値のエネルギーを持つものを, 勝手にゼロにしていいのか?
- **18S2018**: 教科書に載ってる式では▽の箇所が1つだったのに対し授業では2つなのは何故ですか。 **M**: 意味不明. "▽の箇所が1つ"とか "2つ"とは, どういうことか?
- **19S2003**: 読書感想文や期末レポート等の期限遅れは、どれ位の日数でどれ位の減点等がされるのでしょうか。 **M**: 何点狙いの質問か? // 期限内に提出すれば減点など関係ないのでは?
- **19S2004:** 重水素や三重水素の時もハミルトン演算子の式は水素原子と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ナゼか? // 重水素や三重水素は, 軽水素と何が違うか?
- **19S2022:** ラプラス演算子を使わずにシュレーディンガー方程式を解く方法も存在するのでしょうか。 **M:** ラプラス演算子を *使って* *解く* には, 何をどうすればいいのか?
- **19S2049:** 電子同士の電気的作用により、原子によって同一の軌道の範囲が変化することは有り得るか(例:ランタノイドのランタンを除く元素の 4f 軌道の広さは等しいか)。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはナゼか? // "ランタノイド収縮" と言ってみるテスト
- **19S2051:** 原子核を中心以外にとって式に表せることはできるのでしょうか? **M:** 本気か? 自分で判断できないのはナゼか? // 二原子分子を剛体回転子モデルで考えるとき, 原子核を中心以外にとるには, 何をどうすればいいか?
- **20S2001:** オービタルは s,p,d…と増えますが、それは有限なのでしょうか?また、オガネソンよりも原子番号の大きい元素を作ることは理論上可能なのでしょうか? **M:** 原子オービタルについては,教科書や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは? // 原子番号の大きい元素については,原子核物理学を勉強すれば分かるのでは? 核図表 (nuclear chart) と言ってみるテスト
- **20S2006**: 極座標において、xy 平面からの角度を使わないのは何故ですか? **M**: 何点狙いの質問か? そう決めた人に聞けばいいのでは?
- **20S2010:** p.211 の 1 行目の「この x を直交座標の x と混同してはいけない」とありますが、x を区別せず同じ文字にしたのは何か意図はあるのでしょうか。 **M:** 著者に聞けばいいのでは?:-p
- **20S2021:** 多電子系の近似動径波動関数の最適化について SCF 法以外にありますか? **M:** 教科書や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは? // 普通に変分とか摂動とかでいいのでは?
- **20S2027:** 水素原子のハミルトニアンにラプラス演算子を用いるデメリットはないのですか? **M:** 正気か? // メリットとかデメリットという以前に, 運動エネルギーを表すのにラプラス演算子を用いる以外の選択 肢があるのか?
- **20S2029:** シュレディンガー方程式が解けることに意味はありますか。 **M:** 正気か? // 量子力学において, シュレーディンガー方程式を解く以外に物理量を求める方法があるのか? (仮説 3,4) 状態関数を用いずに,

系の状態を知る・記述する方法があるのか? (仮説 1)

- **20S2036:** 本来ハミルトニアンを考えるなら水素原子の陽子の分のエネルギーも考えなければならないが教科書では無視されているのは、陽子の質量が電子に比べて極めて大きいため近似が可能だからか。 **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 教科書 p.207 をよーーーく読めばいいのでは? // 問題 6.35 を参照するように記述があるが、見たり考えたりしないのだろうか?
- **20S2037**: ラプラスの悪魔の概念でなぜりんごを人と宇宙に置き換えて唱えているのかと思っていましたが ニュートンのベクトル計算のラプラス演算子だから関連しているってことなのでしょうか **M**: 意味不明
- **20S2042:** 水素原子は複雑な原子や分子の雛形とみなされると説明されているが、電子が 2 つ以上の多体問題では水素原子のオービタルや性質はどのように扱われるのでしょうか。 **M:** 教科書 8 章や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは?
- **20S2046:** 混成軌道も水素原子のシュレーディンガー方程式から考えられるのですか。 **M:** 教科書 10 章や 参考書を読んで勉強すれば分かるのでは?
- 20S2047: 授業中に、水素原子のもつ運動エネルギーを核 (M) の分、電子 (m) の分にわけて表記をしていましたが、あのような表記をしたのは何か理由があるのですか?教科書では、プロトンを原点とした極座標系で考えて式を立てており、教科書の方がより簡潔でいいと思いました。授業の板書はプロトンを原点として考える、という条件を設けないありのままの基本式として紹介したかったのかな、とも思ったのですがどうでしょうか。 M: 20S2036 参照
- **20S2051:** 原子について理解することで物質のさらなる理解に繋がるならば、原子よりも小さいものを理解していけばさらに物質の性質や振る舞いへの理解に繋がるのか?本質から離れていくことはないのか? **M:** だから, クウォークやら何やら, 究極の粒子を探す研究が進められているのでは?
- **20S2052**: 陽子を固定して考えるのは何故ですか **M**: 20S2036 参照
- **20S2053:** 核が原点に固定されていない場合はどんな式になるのですか? **M:** 20S2036 参照
- **21S2001:** SI 単位系を採用している為に因子 $4\pi \epsilon$ o が出てくるのはなぜですか? **M:** 電磁気学を勉強すれば分かるのでは? // (元の) アンペア (A)の定義から $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ N A⁻² となり, それとマクスウェルの関係 $\epsilon_0\mu_0 = 1/c_0^2$ から ϵ_0 が決まる.
- **21S2002**: 今回出てきたラプラス演算子はベクトルの演算子だということですが、このベクトルが表している ものは、水素を剛体回転子と見たときの回転の向きを表しているのでしょうか? **M**: 全然違う. 物理学 の基礎を復習する必要があるのでは? // 関数の勾配
- **21S2003**: 他の原子でも水素原子の考えを元にシュレディンガー方程式を考える場合に角度部の方程式は剛体回転子の方程式と等しくなるのか? **M**: 自分で判断できないのはナゼか
- **21S2004**: 水素原子の波動方程式のみ方向に依存しない解を持ち、他の原子は方向性を持つと思いますが、方向性が大きくなるにつれてシュレーディンガー方程式は厳密には解けなくなっていくのですか? **M**: "他の原子は方向性を持つ"と思う根拠は何か? // 方向性が大きいとか小さいとか, どういうことか?
- **21S2005:** 講義内でラプラス演算子をデカルト座標系で表したのはなぜですか。 **M:** 別に. (3.45) の復習をしてはいけないのか?
- **21S2006**: 化学を学ぶときには物理が必要になりますが、物理を学ぶときに化学は必要になりますか? **M**: 必要な時も、必要でないときも、色々あるのでは?
- **21S2007**: 教科書に水素原子オービタルの角度の部分は剛体回転子の波動関数でもあるとあったのだが、水素原子において、調和振動子を用いて考えることはできるのか。 **M**: 正気か? 何をどうモデル化するのか, よーーく考えればいいのでは?
- **21S2008:** 軌道の形が解析的に解けるとはどういうことか? **M:** 勘違いの予感 // 私は"方程式が解析的に解ける"と言った. // "軌道" はシュレーディンガー方程式の解の波動関数のこと.
- **21S2009:** 水素原子のシュレディンガー方程式は解析的に解けるとあったが、つまり総合的に (古典的な公理的方法で) 解くのは不可能ということですか? **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 意味不明. "総合的に (古典的な公理的方法で) 解く"とは, 何をどうすることか? どういう意味か? // "解析的に解く"の

意味を講義でも説明したのだが伝わっていなくて残念.

- **21S2010**: 今は水素原子以外のシュレディンガー方程式は厳密には解けないということですが、例えばヘリウム原子であれば厳密に解けるようになる可能性はありそうですか。 **M**: 本気か? // "多体問題" と言ってみるテスト
- **21S2012**: ある水素原子内における原子核とその周りに存在する電子の間にも、それらが水素原子を形成するための力を媒介する粒子が存在するのですか。 **M**: 標準理論では自然界の四つの力のそれぞれにそれを媒介する粒子があるというのが常識では?
- **21S2013**: 極座標やデカルト座標を使い分けるときのポイントは何ですか **M**: 別に, これを使わなければいけないなどという規則はないのだから, あなたの好きにすればいいのでは? 都合が悪ければ, 別なものを使えばいいのでは?
- **21S2014**: 水素原子のシュレディンガー方程式を解くのに極座標のラプラス演算子を使っているのは、水素原子の 1 S 軌道が球状だからですか?? **M**: 本気か? // それでは, 答えを知ってから方程式を解くための座標系を選ぶということになるのでは?
- **21S2015**: 水素原子のハミルトン演算子を構成する演算子に、逆三角形型の記号のラプラシアンが選ばれたのには何か理由はあるのですか。 **M**: 本気か? // 必要なもの (微分演算子) を必要なところ (運動エネルギーの演算子 (運動量の二乗)) で用いることに、それ以上の理由が必要なのか? 何の疑問があるというのか?
- **21S2016**: S 軌道に一つの電子 (ボーアの原子模型) と原子核 (プロトン) からなる水素原子において解析 的に解くことができるなら、一族の原子にも似たような解き方を適用できますか?またその時に、教科書 の 207 ページ式(6.1)の e プロトンの電荷を変更するだけですか? **M**: 自分で考えて方程式を組み立 てればいいだけでは? // 自分で解いてみればいいだけでは?
- **21S2017**: 解析的に解くことができる系は水素、調和振動子、剛体回転子以外にもありますか? **M**: 自分で 考えて分からないのはナゼか? // 既修の知識を活用すればいいのでは? それで不足だと思うのなら, 勉強 すればいいのでは?
- **21S2018**: 水素原子の問題では、電磁気学から決まるクーロンポテンシャルを用いますが、このとき陽子と電子の互いの位置は確定しているのでしょうか? **M**: 正気か? 水素原子って, そういうふうに陽子と電子の位置が固定されているものなのか?
- **21S2019:** 「水素原子は他の元素の原子とは違って解析的に解くことができるもの」と言われているが、そのようにできることによって、他の原子と比べて水素だけ特別な性質や能力は備わっていたりするのか。 **M:** 本気か? // 系の持つ性質が, 方程式の解法に依存するということか? 複数の解法で解いたら, その系の性質はどの解き方に依存するのだろうか?
- **21S2020:** ボーアモデルは直感的にわかりやすいと仰っていましたがどうしてそのように考えたのですか **M:** 本気か? // あなたにとって, ボーアモデルは直感的に分かりやすくないのでしょうか?
- **21S2022:** 量子力学の世界では、しばしば古典力学でも利用する公式を使うことがありますが、逆は起こりえません。「これは古典力学では使えない」「量子力学では使えない」というような、具体的な線引きというのは存在するのでしょうか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはナゼか? 物理学の基礎を復習する必要があるのでは? // 古典力学と量子力学との違いは何か?
- **21S2023:** 水素原子において核が原点に固定されている場合と固定されていない場合では、エネルギーの違い 以外に異なる点はありますか。 **M:** 20S2036 も参照
- **21S2025**: ラプラス演算子の記号について調べたら今日習った記号のほかにデルタのような形の記号を用いてもできると書てあったのですがこの 2 つの記号の違いってなにかあるんですか? **M**: 本気か? あったらどうで, なかったらどうだというのか? // なにかあったとしたら, それでも同じものを表すと言えるのか?
- **21S2026:** 水素原子の電子のスピンというのは電子が時計回りか反時計回りのどっちかで常時原子核を中心に 公転しながらかつ自転もしている感じでしょうか。 **M:** 全然違う. // 教科書 8 章や参考書をよーーーく 読んで勉強すれば分かるのでは?

- **21S2028:** $(6 \cdot 6)$ の変数分離で $Y(\theta, \phi)$ としたのはなぜですか。 **M:** 別に. 記号に意味を付けるのはあなたなのだから、好きにすればいいのでは? // 慣習
- **21S2029:** 教科書の p 207 に SI 単位を採用しているとありますが、SI 単位を用いることによって利点はあるのですか? **M:** 本気か? 物理現象は単位系に依存しないので (単位系は人が恣意的に採用している者なので), 好きにすればいいのでは? // その中でも特に SI の特徴は何か? 物理学の基礎 (というか科学の基礎の基礎) を復習する必要があるのでは?
- **21S2030:** なぜ水素原子より複雑な原子や分子のシュレーディンガー方程式は解くことはできないのですか? **M:** 誤解の予感. 誰もそんなこと言っていない. // "多体問題は一般に解析的に解くことができない" と言っただけ. // 特殊な例では解けるかもしれないし, 解析できでない解き方で解けるかもしれない. もしかして論理力不足か? // 21S2031 も参照
- **21S2031:** 水素原子のシュレーディンガー方程式は厳密に解けるとあるが、多電子原子のシュレーディンガー方程式は近似などを用いれば高い精度で求められますか? **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 教科書 7 章や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは? // 21S2030 も参照
- **21S2033**: マクロな系であれば運動を考えるときニュートンの運動方程式を用いるが、どの程度の大きさと質量をもてばニュートンの運動方程式を適応することができるのですか。 **M**: 本気か? // 仮にできるできないの境界線があったとして、その直前と直後で本質的に何が違うのか?
- **21S2034:** 先生はいつ定年退職する予定か。// ウイルスはタンパク質の殻を持っているが、電力や磁力などで変化や破壊して、無毒化できないのか。 **M:** それを聞いてどうするのだろうか? // 自分で考えてみればいいのでは? // もしも可能ならば、既にやられているのでは?
- **21S2035:** 水素原子のシュレーディンガー方程式は厳密に解けるとあるが、他の原子についてはシュレーディンガー方程式は厳密に解けるのか治 **M:** 21S2010 参照
- **21S2036**: 水素以外の原子で他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原子はありますか。 **M**: 21S2010 参照
- **21S2037**: 教科書ではプロトンを原点として極座標系を考えているのに対して、講義中に記されたシュレーディンガー方程式では質量中心を原点として考えていると思います。計算量だけで考えると前者の方が簡潔だと思ったのですが、質量中心を原点とした極座標系を使うべき利点はありますか? **M**: 本気か? // 計算量の過多はどう違うのか? // 教科書の章末問題 5.44-5.47 参照
- **21S2038**: 原子の中で最も基本となる原子は水素原子って言ってたんですけど、その次に基本となる原子といったら何だと思いますか? **M**: 個人の意見を聞いてどうするのか? // 三体以上は多体問題とひとくくりされるのでは?
- **21S2039:** 物理法則は必ず成り立つ事を人が表したものなのに、原子が物理法則に従って振る舞うとか運動すると言うような言い表し方をするのはどうしてですか? **M:** 本気か? // 人が表さなくても, 系は物理法則に従って振る舞うのでは?
- **21S2040**: クーロンポテンシャルの符号がマイナスなのはなぜですか。 **M**: 本気か? 物理学の基礎を復習する必要があるのでは?
- **21S2041:** 水素分子の波動関数は水素原子のもののような完全な球形ではなく少し歪んだ形になると思いますが、このときそれぞれの水素原子については教科書 6 章に記載されている方法で波動関数を求めることができるのでしょうか? **M:** 少しひずんだ形とは, 具体的にどういう形のことか? そのように考えた根拠は? // 自分で求めてみればいいのでは? // 水素分子中の水素原子の波動関数が, (単体の) 水素原子そのものの求め方と同じ方法が適用できると考えられる根拠は何か?
- **21S2042:** 水素より複雑な原子、分子で軌道が円ではない場合は境界条件はどう変わりますか? **M:** 本気か? // そもそも, 水素原子の軌道は円なのか? // 境界条件を自分で考えて分からないのはナゼか?
- **21S2044:** 水素原子のシュレディンガー方程式を説明する際に使われていたモデルは将来的には正しくないということでしたが、このモデルはどの段階までは使ってもいいのでしょうか **M:** "モデル"というコトバの意味を理解しているのだろうか? // 何をどうモデル化するのか?

- **21S2045**: 教科書 p.207 に「水素原子のシュレディンガー方程式は厳密に解ける」とありますが、方程式が"厳密に"解けるとはどういうことですか? // また、水素原子以外のシュレディンガー方程式は厳密には解けないのでしょうか? M: 講義で説明したのに、全く理解されていないようで残念. // $x^2=2$ という方程式の解を考える. 厳密な解は $x=\pm\sqrt{2}$ であり、 $x=\pm1.41421356...$ は、たとえこの先に百万桁の数字が続いていたとしても、それは厳密解ではない. // 21S2046 参照
- **21S2046**: 教科書中には、水素原子のシュレーティンガー方程式は厳密に解けるとあります。講義では、解析的に解けるとありましたが、「厳密に」と「解析的に」では言葉の意味が違うのではないかと思います。水素原子の細かいところまで導けることを表しているのですか。 それとも、固定された値 (1 など) や一般解などを表しているのですか。 M:「厳密に」と「解析的に」の言葉の意味が分からなければ、辞書や専門書を見ればいいのでは?
- **21S2047**: 講義ではシュレーディンガーの方程式は厳密に解けるとあったがこれは原子核を固定して考えており、本来であれば原子核は動きのあるものだと思います。そこでシュレーディンガーの方程式に原子核の挙動も考慮すると厳密に解くことはできるのでしょうか。 M: 20S2036 参照 // 厳密に解ける理由は何だろうか?
- **21S2048:** たくさんある原子の中で最初に水素原子のオービタルを求めるのはなぜか。 **M:** 講義で説明したのに,全く理解されていないようで残念. // 教科書 p.207 の一行目もよーーーく読んで考えればいいのでは?
- **21S2049**: 電子が水素原子よりも多い場合、シュレディンガー方程式は解析的に解けませんが、陽子が多くなった場合には解けるのでしょうか。 **M**: "陽子が多くなる"とは,原子番号が大きくなるという意味か,それとも水素原子核の数が多くなるという意味か? // それぞれについてシュレーディンガー方程式を考えて書き下してみればいいのでは?
- **21S2052:** 水素原子は電子が 1 個であるため多体問題とはならず解析的に解くことができますが、核に中性子が含まれる場合も解析的に解くことができますか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはナゼか? // どういうモデルを考えて, それによってシュレーディンガー方程式はどうなるのか?