

質問カードには「良い質問」を書くのであって、ふと思いついた疑問や教科書を読んでいてあなたが理解できなかった点についての質問を書くのではない。この違いを理解していないと思われる質問が多数あるようだ。

17S2037: ボーアモデルで得られたエネルギーと一致しているのに、電子はボーア軌道上に束縛されていないのはなぜなのでしょう。 **M:** 私は知りません。// ボーアモデルが一抹の心理を含んでいたからかもしれませんし、偶然かもしれません。

17S2051: 特にありません。[以下省略] **M:** そうですか。

18S2010: ボーアモデルを用いて得られたエネルギーは、実測値や波動関数を用いて得られたエネルギーに代用できるほど近い値をとるのか **M:** “代用” とは何のことか? // ボーアモデルで求めた水素原子のエネルギーと、水素原子の発光スペクトルとの関係を忘れたのか?

18S2014: 球面調和関数を極座標で表現できませんか **M:** 正気か? 教科書の表 6.x に記載の

18S2018: 水素原子のオービタルの形が立体としてプロットできるが、その立体の内側は電子がどのように存在してるといえるか。 **M:** そのプロットされてできる立体は、一体全体何なのか?

19S2003: 物理化学実験はどのような姿勢で挑めばよいですか。 **M:** シラバスおよび実験の手引きに記載されていますが、そのどこが理解できないのか?

19S2022: 章末問題 6・58 の昇降演算子の部分で、公式が何通りかあるのであれば、それらのいいとこどりをしてひとつの式に定めることはできないのでしょうか。 **M:** “いいとこどり” とは? 自分で考えてみればいいのでは? // これまで誰もそういうことを考えなかったとでも?

19S2049: ある水素型波動関数と、他の水素型波動関数が直交していることは何を示すか。 **M:** 水素型波動関数に限定する意味があるのか? // あるベクトルと別なベクトルが直交していることは何を示すか? // 数式に意味が自動的に付随するのではなく、人が意味付けをするのだから、自分で考えてみればいいのでは?

19S2051: 球面調和関数で原子の形が求められるが、実際のオービタルの形と同じであるかどうかは予測でしかないのでしょうか? **M:** 原子の形とは何か? どうやって観測すればよいだろうか? オービタルの形とは? どうやって観測すればよいだろうか?

20S2004: 角運動量 l_x, l_y, l_z がそれぞれ可換でなく、角運動量の二乗に可換であることの説明として、座標は人為的なもので観測者の見方によるという解釈は良いのでしょうか **M:** “座標は人為的なもので観測者の見方による” ことが、なぜ交換関係の説明になるのか? 一体どんな論理か?

20S2021: 角運動量の固有状態として j が整数であるものは球面調和関数として具体化されるが j が半奇整数のものが現れないのはなぜか **M:** ルジャンドル方程式の解法を吟味すれば、量子数の導入について明らかになるのでは?

20S2027: 昇降演算子はどんなときに使われるのですか? **M:** すぐに思い付くのは、状態を表す波動関数の量子数を上げたり下げたりするとき (量子数が変化する $\rightarrow$ 状態が変化する $\rightarrow$ 遷移). // 他にもあるか、勉強すれば分かるのでは?

20S2029: 量子力学の 1 番の発見はなんですか **M:** 本気か? 量子力学そのものでは? // 何を基準に順序を評価するのか?

20S2036: 角運動量が円錐の表面上を運動するとはどういうことか? また、そのことから現在対象にしている系についてどんなことが考察できるのか? **M:** 微妙に勘違いの予感. // “円錐の表面上を運動する” 様な運動はしていない。ここで扱っているのは時間に依存しないシュレーディンガー方程式なので (方程式に時間変数を含んでいない). // 磁気共鳴法の古典的なベクトルモデルでは、スピン角運動量が磁場中で歳差運動をしていると考える。また古典物理学では回っている独楽の歳差運動。

20S2037: 実空間にプロットする意味とは何なのでしょう。 **M:** 本気か? // 水素原子は実在する物質であり、その電子は原子オービタル波動関数によって状態が記述されている。波動関数の二乗は粒子の存在確率に比例するので、この場合は原子中の電子の存在確率分布を表している。実在する電子の密度分布を理解するために図示するのは有効だと思われるのだが.....?

20S2042: 水素原子の角運動量について、 L^2 の最小値が 0 になりこれが s 軌道になると記述してあったが、角

運動量が 0 で軌道運動していないのになぜ s 軌道が円形の軌道になるのでしょうか。 **M:** s-オービタルの何が円形なのか? // 角運動量がゼロの運動をしているのなら、電子は直線運動をしているとしか考えられない。

20S2046: 球面調和関数を三次元プロットすると s 軌道や p 軌道のようにプロットされますが、動径部分と角度部分が含まれるシュレーディンガー方程式をプロットするとどうなるのですか。 **M:** 自分でプロットしてみればいいのでは? // シュレーディンガー方程式をプロットするとは、どういうことか?

20S2047: 授業では水素原子における球面調和関数の話をしていますが、球面調和関数は水素以外のモデルにも適用できるのでしょうか? **M:** その系にどんなモデルを適用するのかは、人が決める。あなたが水素以外に適用すればいいのでは? // 教科書 8 章や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは?

20S2051: 角運動量を図にした際、L と z 成分が観測されるとすると、x、y 成分は +- で同じ確率で観測されるならば、x-y 面で円ではなく楕円を取ることはないのか? **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // x と y とに優劣は無いし、どの方向を x とするかも任意なのだが.....

20S2052: 角運動量は主にどのような方法で観測するのでしょうか? **M:** オービタルを占有している電子の話なので、荷電粒子が軌道運動をしているので、それは磁気モーメントを生じる。→ オービタル角運動量とスピン角運動量との相互作用によるスペクトルの微細構造や磁気共鳴など

20S2053: 講義でおっしゃっていた、 L_x , L_y の固有関数が別にあるとはどういうことですか? **M:** $\hat{L}_z$ の固有関数は $Y_l^0 \propto p_z$ ですが、これが $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ の固有関数ではないことは (自分で確認してみれば) 明らか。添え字を入れ替えれば、 $\hat{L}_x$ の固有関数は p_x , $\hat{L}_y$ の固有関数は p_y ということになる。

21S2001: 動径方程式でのラゲールの陪関数の役割は何ですか? **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // 解の一部でしょ。

21S2002: 不確定性原理の考え方から、量子力学では測定できるもののみが信用できると解釈しているのですが、教科書 p 220 の $|L| = (L^2)^{1/2}$ において、 L^2 は固有関数を求められたため信用できると思うのですが、L はどうして信用できる値となるのでしょうか。 **M:** “信用” というのは、少し違う。また、不確定性原理は測定値の信頼度とも違う。// 直接観測されない値については、別のモノから導出するしかないのでは?あるいは少し別なもので代用するとか。

21S2004: 球面上の粒子の運動について、

$$E = l(l+1)(\hbar/2\pi)^2(1/2I)$$

$l=0$ だと $E=0$ になってしまいますが、これは運動していないことになりますよね?しかし、図を描いてみると z 軸の量子数が 0 の時は x,y 平面に円が出来ました。これは矛盾していませんか? **M:** 別に。計算結果に誤りなければ、あとはその解釈の問題なのでは? // そもそも時間に依存しないシュレーディンガー方程式なので、粒子の運動の軌跡を求めているわけではないことに注意。

21S2005: デカルト座標系の x, y, z の軸は人が勝手に設定しただけで相違はないということだが、球面調和関数が L_z の固有関数であるのは、z 軸が x, y 軸と相違があることを意味しているのではないのですか? **M:** $\hat{L}_z$ の固有関数とは別の関数が、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_x$ の同時固有関数になっている。20S2053 参照

21S2006: 水素中の電子軌道の式が初めて立てられたのは、無機化学の視点からでしょうか?それとも量子力学の視点からでしょうか? **M:** 本気か? 電子オービタルの式は、どのようにして立てられたか? (オービタル波動関数の式がいきなり天下りに湧き出てきたはずはない。そうやって持ち出されても、正しいと認める根拠はなにもない。そもそも“オービタル波動関数”と呼んでいる時点で、何らかの知識を前提にしている。) // 無機化学の知識無しで式をたてることは出来るか?あるいは量子力学の知識無しで式をたてることは出来るか? // 式が正しいのは理由があるからであって、偉い先生が教科書に書いたからじゃない!!

21S2007: $\langle L_x \rangle$ と $\langle L_y \rangle$ の平均値が 0 であるために、図 6・1 のような円錐になるが、これは、他にも意味をあらわしているのか。 **M:** 自分で考えてみればいいのでは? // x 軸と y 軸の方向は特別な方向ではない。または、x 軸 y 軸の方向には任意性がある。

21S2008: 球面調和関数のプロットは何を目的としておこなうのか **M:** 関数の式を見ただけで、その関数がどのようなものか、あなたは容易に理解できますか? // 二次関数や三次関数など多項式で関数が与えられ

たら、上に凸なのか下に凸なのか、頂点の位置や x 軸を切る位置などなど、増減表を書いたり、関数の概形をスケッチしたりしないのですか？

21S2009: 球面調和関数の実数化は何を目的として行っているのでしょうか。 **M:** 20S2037 参照 // (*) 自由空間に存在している原子、孤立して存在している原子については、電子密度の分布は波動関数の二乗であり、オービタル関数は $\pm m$ の量子数を持つオービタルが縮重している複素関数の形であってもよい (シュレーディンガー方程式の解になっていれば)。しかし現実の原子は、孤立して存在していることはほとんどなく、特に私たちは物質中・分子中に存在している原子を取り扱っている。この場合、厳密に言えば原子は自由空間に存在しているわけではなく、周囲の原子により生じる電場中に存在していると言える。このとき原子オービタルは (縮重している複素関数の線形結合による) 実関数になっていて (これもまた同じ固有値に属しているのだが)、 σ 結合や π 結合などの結合様式に応じてオービタルのローブが特定の方向を指向している。このように分子が特定の立体構造をとるのは、原子オービタルが方向性をもっていて、相手原子のオービタルとの重なりによって結合を形成しているためである。球面調和関数を実数化することで、方向性を持った原子オービタルの様子が視認できる。

21S2010: ボーア模型で水素原子の量子力学的な側面が説明できるということは、逆に言えば、本来の水素原子がボーア模型と同じ様式で存在しているということになってしまうようで不思議なのですが、なぜこのようなことが起きているのでしょうか。 **M:** 本気か？ ボーア模型で水素原子の量子力学的な側面の全てが説明できるのか？ // 原子核の周りの電子の存在位置 (の分布?) やオービタル角運動量についての側面は正しく説明できるか？ // “一部分が一致したならば、その他の部分も一致しているはず” ということは論理的に保証されるのか？

21S2012: 粒子である電子には不確定性原理がある。それらからなる化学反応において、別の物質は生じず、常に一定の生成物ができるのはなぜですか。不確かさによる影響はほとんど無いのですか。 **M:** 本気か？ 本当に別の物質は生じないのか？ // 副生成物 と言ってみるテスト

21S2013: ラゲールの陪多項式は水素原子オービタルの動径部分を求めるとき以外にどのような場面で使われますか **M:** 私は知りません、調べて分かったら、教えてくださいネ。

21S2014: 角運動量の 1 成分の値を同時に精確に観測するのは可能であるが、他の 2 成分の値も同時に観測するのは不可能であるとありますが、このことは角運動量が円錐をくまなくなぞることによって関係しているのですか？ **M:** $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$ と講義でも説明したのだが、理解されていないようで残念。 // 20S2036 参照

21S2015: 球面調和関数を用いて、他の原子と結合がしやすい電子の位置等も求める事が出来ますか。 **M:** 勉強すれば分かるのでは？ // 21S2009 のコメント参照

21S2016: 教科書の問題 6-13 についてです。球面調和関数の演算子の $\hat{L}_z$ を省略しています。 $[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x = -\hbar^2 [(y \sigma_z - z \sigma_y)(z \sigma_x - x \sigma_z) - (z \sigma_x - x \sigma_z)(y \sigma_z - z \sigma_y)]$ を計算して $= -\hbar^2 (y \sigma_x - x \sigma_z)$ これは $-\hbar L_z / i$ となり、0 ではないので、 $L_x, L_y \rightarrow L_z$ のようなことが延々と起きるので、 L_x, L_y, L_z は各々の間で可換でないと言えるのですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // “ $L_x, L_y \rightarrow L_z$ のようなことが延々と起きるので” が意味不明。 // “可換でないのは交換子がゼロでないことからわかる” ってことが理解されていないようで残念。

21S2017: 演算子が可換なことによってどんなことが分かりますか。 **M:** 本気か？ 量子力学の基礎を復習する必要があるのでは？ // 演算子が可換なら、対応する物理量は不確定性関係にない。

21S2018: 厳密解や実験値と比較したとき、良い近似と判断できるような試行関数はどう選べばよいのですか **M:** 別に、好きにすればいいのでは？ // 系の性質をよく吟味して、それが反映されるようにする、とか。

21S2019: 動径方程式がどうして 6.45 のようになるのか、論理的に理解できません。 **M:** 本気か？ (6.45) 式の上で説明されているのだが、理解できないということか？ 自分の手を動かして計算してみればいいのでは？

21S2020: 球面調和関数の実数化はなにを目的でおこなっていますか **M:** 21S2009 参照

21S2022: 講義で取り上げた量子数のほかに、スピン量子数に依存する事はないのでしょうか。それともス

ピン量子数とは、オービタルが三つの量子数によって決定されたのちに考慮できるものなののでしょうか。

M: 教科書 8 章や参考書を読んで勉強すればいいのでは？

21S2023: 昇降演算子について、コンドン-ショートレー流を用いる場合の利点は何ですか。 **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。// 昇降演算子を球面調和関数に作用させた計算を、自分でやってみればいいのでは？ 複数の参考書も読めばいいのでは？

21S2024: 球面調和関数などの調和という言葉はどのような性質からきているのでしょうか。何が調和的なののでしょうか。 **M:** 20220517 の 18S2018 参照

21S2025: ラゲールの陪多項式から何がわかるのですか **M:** 自分で考えてみればいいのでは？ 自分で発見して楽しめばいいのでは？ // 動径方向の振動の様子, 節の位置など

21S2026: L_x と L_y の平均値が 0 になることから図 6.1 のような円錐で、角運動量を表していますが、この形をとったことで、他に意味はあるのでしょうか。 **M:** 20S2036 参照

21S2028: なぜ (6,45) 式が水素原子のボーア模型から得られたエネルギーと一致したのでしょうか。 **M:** 17S2037 参照

21S2029: ラゲールの陪多項式はシュレディンガー方程式の動径方向の解以外に何に用いられるのか。 **M:** 21S2013 参照

21S2030: 球面調和関数の符号の取り方について、コンドン・ショートレイ流の紹介がありましたが、この流儀はどのような場面の時に使えるのか。 **M:** 別に. TPO に応じて流儀を切り替えるのではなく, 論理的整合性のために一貫してひとつの流儀をとるのが普通では？

21S2031: 確率密度を考えるとなぜ球面調和関数を実数化してから 2 乗する必要があるんですか？ **M:** 本気か？ 量子力学の基礎 (例えば教科書 4 章) を復習する必要があるのでは？ // 粒子の存在確率と波動関数との関係は？

21S2032: p223 で「本当に驚くべきことに、このエネルギーが水素原子のボーア模型から得られたエネルギーと一致する」と言うところでなぜここまで驚いているのでしょうか。 **M:** 17S2037 参照

21S2033: 動径方程式で解いたエネルギーについて、ボーアモデルは実際の構造とは異なるのにエネルギーは一致するのはなぜか？ **M:** 17S2037 参照

21S2034: ルジャンドル陪関数が直交しなければいけないのは何故か **M:** 別に. 直交しなければいけないとか, そういう問題ではなく, ただ単にルジャンドル陪関数の持つ性質がそうであるという話.

21S2035: 可換であることのメリットは何か治 **M:** 21S2049 参照

21S2036: ラゲールの陪多項式が今回の動径方程式以外の場面で使われることはあるのでしょうか。 **M:** 21S2013 参照

21S2037: 原子のオービタルの形は実際に観測できますか？あくまでも、式から導出された理想的な形でしか表すことができませんか？ **M:** オービタルの形は観測量か？ 観測可能な物理量か？

21S2038: p220 のこの結果は、水素原子の磁器量子数に対する条件としてよく知っている、と書いていますがどういうことなのでしょう？ **M:** 文字通りのことだが, 何が分からないのか？ // 磁気量子数が $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ であることを, あなたは知らなかったのか？ ここで初めて知った知識か？

21S2039: なぜ昇降演算子は $L_x \pm iL_y$ という形をしているのですか？ // なぜ、 L_x と L_y の平均値が 0 というだけで円の形になるのですか？ **M:** 昇降演算子の定義なのだから, そこに疑義をはさんでも意味がない. 名称の由来としては, 講義でも説明したように, 球面調和関数の量子数 m を一つだけ増減するから. そしてそれはなぜかと聞かれても, 計算すればそうなることが分かるとしか言いようがない. // (+) 定義とか, 計算すれば導出される結果について, なぜそうなのかと問われても, 単にそうであるとしか言いようがない. 無意味な質問だ. // (+) “だけ” ではない. $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, $\hat{L}^2$ の固有値は $L(L+1)\hbar^2$, L_z の最大値は $L\hbar$ などから, $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2 = L(L+1)\hbar^2 - (L\hbar)^2 = L\hbar^2 \neq 0$ すなわち角運動量は z 軸に平行ではなく傾いていることがわかる. またこれは, 斜辺の長さが一定 (それ以外の辺の長さが L_x と L_y になる) の直角三角形をも意味している. また L_x と L_y に優劣がないことも自明なので, それらの平均値が 0 になることと合わせて, 角運動量の xy 平面への射影が円を描くと言える. (これって, そんなに難

しい論理だったでしょうか？ 新規な知識を必要としたのでしょうか？)

21S2041: 水素型原子の軌道のエネルギーは量子数 n のみに依存するが O 原子の 2s 軌道と 2p 軌道では 2 つのエネルギー準位は異なる。水素型原子以外だと量子数 l も軌道のエネルギーに影響するのでしょうか。

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？ // 多電子原子では電子間の相互作用がある。

21S2044: 式 6 磁 43 を解く過程のどこで n が $n \geq l + 1$ の条件を満足しなければならないことが分かりますか

M: 物理数学の参考書を読んで勉強すれば分かるのでは？ // ラゲールの陪多項式とラゲールの多項式の関係は、マッカーリ化学数学の (16.35) 式に示されているように $L_\nu^\alpha(x) = \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} L_\nu(x)$ であり、ラゲールの多項式 $L_\nu(x)$ は ν 次の多項式なので、 $\nu (= n + l) \geq \alpha (= 2l + 1)$, $\therefore n \geq l + 1$ であることがわかる。

21S2045: 球面調和関数の位相の表し方 (マッカーリ流, コンドン・ショートレー流など) ではどれが一番表しやすいのでしょうか？ **M:** 位相の表し方とは、何のことを言っているのか？ // “表しやすさ” は、どのように評価すればよいのか？

21S2046: ラゲール陪多項式が持つ物理的な意味は何ですか。 **M:** 19S2049 のコメント後半参照

21S2047: 222、223p で得たエネルギーが水素原子のボーア模型から得たエネルギーと一致とあるが、これは何故驚くべきことなのか **M:** 17S2037 参照

21S2048: ラゲールの陪多項式は中心方向の波動関数を求める以外にも使うことができるのか。 **M:** “中心方向の波動関数” とは何のことか？ // 21S2013 参照

21S2049: L^2 と L_z が可換であることにどんな意味があるのか **M:** 本気か？ 教科書 p.142 や参考書を読んで勉強すれば分かるのでは？

21S2050: 変分法を用いると近似の値が導出できるとあったが真の値により近づける方法はあるのか？ **M:** 微妙に誤解の予感。近似値とは何に対する近似なのか？ // ここで言っている“真の値”とは、何のことか？

21S2052: 角運動量 L を求める際に、 $\sqrt{L^2} = L$ は成り立たないのでしょうか。 **M:** 講義で教科書の図 6.1 に関連した説明をしたし、説明の文章もあるのだが、理解されていないようで残念。 // 21S2002 のコメント後半参照