

17S2051: 特にないです M: 質問が記載されていない

18S2014: 試行関数は実際の値に近ければどんな式でもあてはめてもよいのですか。 M: あなたの言う“実際の値”とは何か? また“どんな式でも”と言っても、常識的な妥当性というものは考慮するのでは?

18S2018: 厳密解がわからないのであるならば、使用する試行関数がどれだけ良いかの判断が難しいと思うのですがどうなのでしょう。 M: そうですね。良さの程度を評価するのは難しいでしょうね。でもそれって、必要か? // 21S2039 参照

19S2004: 変分法は変分パラメータを増やすと値は厳密解に近づいていくのはなぜですか? M: 自分で考えてみればいいのでは? // パラメータが多いということは、調整するポイントが多いということ。

19S2022: 変分法の試行関数として、ガウス関数以外では何があるのでしょうか。 M: 好きにすればいいのでは? 試行関数なのだから、何でも試してみればいいのでは? 勉強すれば分かるのでは?

19S2049: 教科書 p277 には「励起状態のエネルギーの上限のもっとよい値を得る方法がある」とあるがそれは何か。 M: 自分で考えてみればいいのでは? // 先験的な知識を試行関数に反映すればいいのでは?

19S2051: 実験値と厳密解 (または近似解) ではどちらのほうが有利な値なのでしょう。 M: 意味不明。“有利”とは、何のことか?

20S2001: 変分法、摂動法の他にガレルキン法という方法があることを知ったのですが、この方法が扱われないのはなぜなのでしょう。知名度が無かったり、導出法が難しいからでしょうか? M: 量子力学の教科書に載っていないからでは? 私たちが解きたい問題はハミルトニアン固有値問題なので、固有関数だけでなく固有値も未知である。

20S2004: 変分パラメータの数は試行関数による近似解の精度に関係しますか。 M: 19S2004 参照

20S2006: ガウス関数とはどのように導出されるのですか? M: 導出するとか、意味不明。// 正規分布としてよく知られた関数なのでは?

20S2010: 変分パラメータを多く含む試行関数はどのようにつくればよいのでしょうか。 M: 勉強すれば分かるのでは?

20S2027: 電子の分布の様子が水素原子のように予想できない原子のエネルギーを求める場合、試行関数はどうするのですか? この場合、適当に試行関数を決めてエネルギーを求めたなら、その精度はどう判断するのですか? M: どうするか、自分で判断できないのはなぜか? // 18S2018 参照

20S2029: 確率密度関数を変数分離できることと任意の変数で確率分布が独立であることは同値ですか M: 意味不明“任意の変数で確率分布が独立”とは、どういう意味か?

20S2036: 変分原理について、基底状態とある波動関数の時のエネルギーでは基底状態のエネルギーの方が小さいという当然のことを何故わざわざ原理としているのか。 M: 複数の近似波動関数から最適なものを選ぶ指針になる。基底状態だけでなく励起状態についても求める指針になる。// 重要だからでは?

20S2042: 試行関数において、変分パラメーターを複数用いることもあったと言っていたが、変分パラメーターを複数用いることでなぜより厳密解に近い近似解を得ることができるのでしょうか。 M: 19S2004 参照

20S2046: 真の値が分からないのであれば近似的に求めても、その値が実際に近似できているかどうか分からないのではないのでしょうか。 M: 18S2018 も参照 // もともと近似解を求めようとしているのだから、解らしいと思われる試行関数を選べばいいのでは?

20S2047: 原子番号が増えていくにつれて近似の精度に変化はでたりするのですか? また、原子番号の変化に応じてどのような近似法を取るのがよい、などあるのですか? M: 21S2015 参照 // 近似法の優劣についても講義で説明したのだが、伝わっていないようで残念。

20S2051: 基底状態エネルギーに近い値を得るのに、変分法では試行関数を変えて近似解を求めていくが、実験的にはどのように求めるのか? M: 自分で考えてみればいいのでは? // H ならイオン化エネルギー, He なら第一イオン化エネルギーと第二イオン化エネルギーの和, などが考えられる。

20S2052: 変分法と摂動法どちらを用いることが多いですか M: 統計をとったことがないので、私は知りません。

- 20S2053:** パラメーターが複数になったら、どんな式の形をとるのか？ **M:** 試行関数なので、好きにすればいいのでは？
- 21S2001:** 厳密解が分からないものの解を求めた時に、その値で良いかどうかはどう判断すればいいのか。
M: 20S2046 参照
- 21S2002:** ある 1 つの系について変分法や摂動法で求めた近似解を、他の系の近似解を求めるときに、その値を確かな（既知の）値として用いることはできるのでしょうか **M:** できるできないではなく、あなたがそうするかどうか。// 電子相関を考える MP2・MP4 法は、ハートリー・フォック法による解をゼロ次の解として用いる摂動法。
- 21S2003:** より良い近似が得られる方法はパラメーターを増やすこと以外にありますか？ **M:** 教科書の例題でもあったように、先験的な知識を活用して、近似関数の形を予想すればいいのでは？
- 21S2004:** シュレーディンガー方程式を望みの精度で解くのに必要な試行関数で、存在する元素の未だに求められていない試行関数はありますか？ **M:** 私は知りません。調べて分かったら、教えてください。
- 21S2005:** 試行関数として、ガウス関数のほかに用いられるものはどんなものがありますか？ **M:** 19S2022 参照
- 21S2007:** 変分法で微分して 0 になる α を求めてから $E_{\min}$ を求めていたが、なぜ微分して 0 になる α は最小値なのか、これが最大値になることはないのか。 **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 講義で説明したのに、伝わっていないようで残念。高校数学でも関数の増減、極大・極小・停留点、上に凸・下に凸・変曲点等を学んでいるのでは？
- 21S2009:** ガウス関数の他に、試行関数として用いられることが多い関数はどんなものがありますか？
M: 19S2022 参照
- 21S2010:** 変分法の試行関数としてどのようなものを使うかを考える際は、限られた情報、条件を踏まえた上で推測をして関数を考えるしかありませんか。 **M:** 勉強すれば分かるのでは？ // リッツの変分法 と言ってみるテスト
- 21S2012:** 物理学として、原子のシュレディンガー方程式の高精度な近似解を求めることができるのなら厳密解は必要ないのですか。それとも、近似解だけではなく、最終的には厳密解も求めたいのですか。 **M:** 目的に応じて必要なことをすればいいのでは？ あなたが求めたければ求めればいいのでは？
- 21S2013:** 教科書により多くのパラメーターを含む試行関数を用いるともっとよい結果が得られるとありますが、パラメーターを増やすことができない場合はあるのですか **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 新しい項を好きなだけ付け加えればいいのでは？ 新しい因子を好きなだけ付け加えればいいのでは？
- 21S2014:** 変分法で任意の状態を指定した時にそれがあまり基底状態のエネルギーにちかくない時でも近似値として考えられるのですか？ **M:** できるできないではなく、あなたが考えるかどうかでは？
- 21S2015:** 本日の講義で、近似の精度について話していましたが、原子番号の増変は近似の精度に影響しますか。 **M:** 影響するとあなたが予想した根拠は何か？
- 21S2016:** 教科書 p284 問題 7-3 についてです。教科書 p264 (7-6) 式を用いてハミルトニアン演算子がわかり、問題から試行関数 $\phi(x) = 1/(1 + \beta x^2)^2$ とわかる。これを用いて、教科書 p263 の (7-3) を計算するところで、 $E\phi = 7\beta h^2/10\mu + k/10\beta$ を得ることができました。ここから調和振動子の基底状態エネルギーを変分法で計算できませんでした。次はどのような操作をすればいいですか？ **M:** 本気か？ 章末問題 7-3 は調和振動子の系だが、(7-6) 式のハミルトニアンは調和振動子のモノか？ // 教科書や参考書をよく読めばいいのでは？ 計算手順を暗記しても意味はほとんどない。変分法の原理を理解すれば、どういう計算が必要かがわかるのでは？
- 21S2017:** 変分法について、教科書の p.266 に「より多くのパラメーターを含む試行関数を用いることで、もっとよい結果を得ることができる。」とありますが、パラメーターを増やすこと以外によりよい結果を得ることのできる方法や条件はありますか？ **M:** 21S2003 参照
- 21S2018:** 変分法と摂動論は場合によって使い分けるものなのですか。それとも人それぞれ好きな方を使って

良いのですか **M:** 誰が許可・禁止するのか? 規則・罰則があるのか?

21S2019: 変分法の内容において、(計算ミスを除いて) エネルギーが期待値から大きく外れた場合は、どのように対処するのですか。 **M:** 自分で考えてみればいいのでは? // 期待値が誤っていたか、計算値(試行関数)が不適切だったか。あるいはハミルトニアン(系の物理モデル)が不適切・不十分だったか。

21S2020: レイリーリッツの変分法はどのように考えられた方法なのですか **M:** “どのように”とは、何を聞きたいのか? // レイリーやリッツに聞けばいいのでは? :-p

21S2023: 試行関数に関して $dE(\alpha)/d\alpha$ がゼロになるように α を決める際、ゼロになるのが必ずしも極小値とは限らないと思うのですが、その場合はどのように考えるのですか。 **M:** 21S2007 参照

21S2024: 近似的方法はすべての原子について用いることは可能ですか **M:** 20S2047 参照

21S2025: $H\phi = E\phi$ のエネルギー固有値の最小値と比較する際、試行関数を用いますが試行関数を Φ とすると $c\phi$ の線形結合で表していますがこれだと任意の関数になってないと思います。実際にはどのような関数を試行回数として表すのでしょうか。 **M:** 意味不明 //

21S2026: 教科書第7章の冒頭部分に変分法と摂動法の二つがよく使われる近似的方法とありますが、それはなぜでしょうか。 **M:** 私は理由を知らないが、教科書では現実はどうだということを記述しているだけ。歴史的な慣習とか、以前から知られている手法なのでその性質や理屈がよく知られているとか。

21S2028: $dE(\alpha)/d\alpha = 0$ が極大値のみを持つ場合はどのように最小値を求めるのでしょうか。 **M:** 本気か? 関数 $E_\phi(\alpha)$ が最小値を持たない場合があるのか?

21S2029: 摂動法における考え方を変分法で利用することによって近似値を求めることが容易になったり、またはより真値に近づくことができるか? **M:** 摂動法と変分法のそれぞれを勉強すれば分かるのでは?

21S2031: 変分法の試行関数において、実験値に近い解が得られても波動関数が現実的でない時、その解は使えないのですか **M:** 自分で判断できないのはなぜか? // その波動関数で求めた電子密度分布などに、意味はあるのか?

21S2032: 変分法と摂動法に優劣はありませんが、それぞれ長所と短所はありますか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // そりゃあるでしょうね。

21S2033: p271 に電子間反発の項を無視すればとありますが、なぜ無視することができるのですか? **M:** 本気か? 日本語力不足か? // “無視すれば”とは仮定法でしょ? 仮定するだけなら、好きにすればいいのでは?

21S2034: 近似的方法で今回は変分法と摂動法が出てきたが、他にもいくつか方法がある中でこのふたつが使われるのにはなにか理由があるのか。それとも何となく選ばれたものなのか。 **M:** 21S2026 参照

21S2035: 理論値と実験値を比較した場合における良い近似と言えるような試行関数は、どのように選ばばよいのか。 **M:** 21S2003 参照

21S2036: 摂動法と変分法は、どのように使い分けるとよいのでしょうか。 **M:** 勉強すれば分かるのでは? // 判断できなければ、両方やればいいのでは?

21S2037: なぜ微分してゼロになるように α を決めた時、最小値のみに限られるのですか? **M:** 21S2007 参照

21S2038: p227 の (6.63) の式をほとんどの化学者は用いると書いてあるが、それ以外の化学者は何を用いるのか? **M:** それって重要な問題か? // 著者が何を想定しているか分からないが、ある分子軌道計算プログラムでは $x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$ という 6 個の d オービタルを用いることがある。

21S2039: 十分に精度のいい近似解が得られると仰っていましたが、厳密な解が分からないのに、どうして精度の良さが分かるのですか? **M:** 系統的に精度を高める手法があるので、それで順次精度を高めまる様子を見る。18S2018 参照

21S2040: r が大きくなるにつれて 0 に近づくような関数で、ガウス関数より最適なものはありますか **M:** 本気か? 自分で判断できないのはなぜか? // そりゃあるでしょうね。系にもよるけど。

21S2041: コンピュータを使って変分法でよりよい近似を得たいとき、どのような情報を入力すればより良い試行関数を導出してくれるのでしょうか。 **M:** コンピュータは単なる道具なので、コンピュータを用いた

からといって良い試行関数が得られるというわけではない。

21S2043: 変分法で解を求める際に試行関数の予想として、『原子核の近くに電子が局在化していること』がなぜ基底状態に近いという仮説が立てられたのですか。 **M:** 正気か? // 水素原子のボーアモデルでも軌道半径が小さい方がエネルギーが低いことになっているが.....?

21S2044: 変分原理を用いるのに適した場合にはどのようなものがあるのですか **M:** 21S2036 参照

21S2045: 厳密解がないときに、求められた解が近似解だと分かるのは何故ですか? **M:** 18S2018, 20S2046 参照

21S2046: 金属原子などの電子授受が容易な系の基底状態エネルギーを求める際にも、変分法を利用することはできますか。 **M:** 本気か? 系によって利用できたりできなかったりすると考える理由は何か?

21S2047: 変分原理が得られ、等式は $\Phi = \Psi_0$ 、すなわち厳密な波動関数の時にだけ成立するとあるが、この時の厳密な波動関数とはどういうことなのか。 **M:** “ $\Phi = \Psi_0$ ”の何が分からないのか? // 厳密解が得られた。

21S2048: 基底状態エネルギーを求める際に変分パラメータを含む際に、より多くのパラメータを含む方がより正確に求まるとあるが何回用いるのが普通なのか。 **M:** 意味不明。回数は何を意味するのか? // 得られた解ではなく回数 (意味不明だが) で近似値を評価するのか?

21S2049: 試行関数にはガウス型、ローレンツ型以外にはどのようなものがありますか **M:** 19S2022 参照

21S2050: 励起状態のとき エネルギーの上限の近似値があらくなるのはなぜか **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか? // より激しく振動する波動関数の方が、細かいところまで合わせにくいのは自明では?

21S2052: 水素原子よりも複雑な場合には、厳密に解くことができないとありますが、厳密に解くことができるものは水素原子や水素類似原子以外にないのでしょうか。 **M:** 本気か? 正気か? // 箱の中の粒子, 調和振動子, 剛体回転子 などについて学んできたのではなかったのか?