

**16s2028:** 球面調和関数をプロットする課題においてこういったことを気付くことが期待されているのか。 M: 自分でやって気づいてください。

**16s2040:** 任意の動径部分に関する確率密度を足し合わせることは可能でしょうか M: 何をやりたいのか分かりませんが、自分で計算してみればいいのでは？

**16s2052:**  $R_{nl}(r)$  はなぜ規格化されているといえるのか M: 規格化したから、// 自分で計算してみれば分かるのでは？

**17s2007:** 座標系には「デカルト座標系」と「極座標系」がありますが、式を立てるとき、座標系の選択はどのように考えるべきでしょうか。 M: 別に、好きにすればいいのでは？“こう考えなければイケナイ”などという規則などないので。// 物理系の特徴をとらえた座標系を用いれば、理解が容易になる、かもしれない。

**17s2028:** 角運動量の成分の  $L_z$  のみが  $\phi$  の式で表されるのは  $L_x, L_y$  とどのような違いから起こるのでしょうか？  $L^2$  が  $L_z$  と可換であることと関係があるのでしょうか？ M:  $\phi$  は  $z$  軸周りの回転角度であって、 $x$  や  $y$  のそれじゃない。

**17s2029:** ルジャンドル多項式  $P_l(x)$  が直交しているのはなぜなのか。 M: そういう風に作られたから。// マッカーリ化学数学の 8 章など参照

**17s2037:** Condon&Shortley の流儀を用いなかった場合、どのような問題が起きるのか M: どこが変わるかは、講義で説明した。物理的には何も変わらないが、表記が変わるだけ。それが不都合かどうかは、人それぞれの感じ方による。

**17s2045:** 球面調和関数のグラフは三次元で表したものと二次元で表したものとがあると思うのですが、どのように違うのですか？ M: 自分で考えて分からないのはなぜか？ // もちろん、次元が違う。

**17s2047:** ルジャンドル多項式はどのような物理学の問題で使いますか。 M: 教科書 p.211 に“(ルジャンドル方程式は) 極座標系を使って表されるいろいろな問題に出てくる。”とあるが？ // 色々な問題を考えてみたり、物理の本を見たりすればいいのでは？

**17s2051:**  $\Theta$  の解 (3/3) のページにおいて符号のつけ方が二通りあると書かれていますが、どのようなときに使い分けるのでしょうか。 M: 17s2037 も参照。// 物理系は何も変わらないので、好きな方を使えばいいのでは？ // ただし、場合によって使い分けたりしないで、一貫して使う。数理論理的に矛盾しないように。

**18s2004:** 動径方程式の解を求めるためのエネルギーの電子状態は、励起状態のときと基底状態のときでどのように変わりますか。 M: 意味不明。何の励起状態の話か？

**18s2006:** 教科書 p.222 の 氏鹽召垢舘呂任  $x$  とか  $y$  とか  $z$  とかの見分けがつかない璽 とありますが、回転する系にはどのようなものがありますか？また、それもやの平均値は 0 になるように考えるのですか？ M: 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 剛体回転子は回転する二原子分子のモデルだと教科書 5 章で学んだはずでは？ // 平均値については、何の話か分からない。

**18s2009:**  $L^2$  と  $L$  の一成分を同時に観測することはできるとありますが、 $L$  の二成分だけをを同時に観測できるのですか？ M: 別に、普通に観測すればいいだけでしょ。// 不確定性関係について、復習する必要があるのでは？

**18s2010:** 動径方程式のラグールの陪関数の役割 M: 質問になっていない。

**18s2014:** 今回出てきたルジャンドル陪関数やラグール陪関数は証明する必要性がありますか。 M: 何をどう証明するという話か？ // 必要だと思えば、すればいいのでは？

**18s2018:** 今回の授業の中でやったものは具体的に何を調べるときに使うのでしょうか。 M: 調べ

るって、何の話でしょうか？

**18s2027:** 動径方程式において”波動関数として許容される解” は具体的にどういうものを示すのでしょうか。 M: ルジャンドル方程式の所でも言ってたし、教科書 pp.126-128 あたりを読めば分かるのでは？ // 一価、有限、連続

**18s2029:** 原子核の周りの角運動量を持たないという状態は、原子が静止しているということですか？また、その時原子はある決まったエネルギー状態で存在していることから定常状態でありますか？ M: 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 静止しているとすると、位置と運動量の両者が確定しているが？

**18s2030:** 教科書にルジャンドル方程式は古典物理学でよく知られたとありますが、量子力学であまり知られなかったのは真の値が求められないからなのですか。 M: 著しく勘違いか？ // 量子力学であまり知られないとは、一言も書かれていない。また、量子力学と古典力学は排他的に対立しているわけではない(対応原理 と言ってみるテスト)。

**18s2032:** ルジャンドル陪関数が直行していなければならないのは、なぜでしょうか？ M: 17s2029 参照 // “直行” とは？

**18s2034:** 球面調和関数についてもコンドン・ショートレーの流儀で考えた場合、どのように影響するのか？ M: 17s2051 参照

**18s2038:** 周期的境界条件を円や球体以外に使う例はありますか？ M: そりゃあ、あるでしょうね。// 参考書を見たり、自分で考えてみればいいのでは // 単位構造が繰返し繋がっている系。

**18s2040:** 教科書 214 ページに(球の表面にわたって規格化直交しているので、球面調和関数) とあるのですが、これはプロットしたグラフのどの点でも規格化直交しているということですか？ M: グラフの各点ごとに規格化直交しているとは、一体全体どういうことか？ // 規格化とか直交とか、よくよく復習が必要なのでは？

**18s2043:** ルジャンドル多項式やルジャンドル陪関数が直交系なのはなぜか？ M: 17s2029 参照

**18s2045:** 角運動量の 2 乗演算子の固有関数が球面調和関数になり、各成分の固有関数は  $L_x, L_y$  の固有関数でないことは、各成分において変数独立であるという事でよいのか。 M: 全然違う。// 演算子が交換関係に無い事の意味、交換関係にあることの意味を複数する必要があるのでは？

**18s2046:**  $L^2$  と  $L_x, L^2$  と  $L_y$  のときにも可換であるが球面調和関数関数が異なるのはそれぞれの固有値が異なるためなのですか M: 全然違う、勘違いも甚だしい。//  $\hat{L}_z$  は  $\phi$  だけの演算子であってその固有関数は  $\phi$  だけの関数であるが、 $\hat{L}_x$  や  $\hat{L}_y$  についてはそうじゃない。// デカルト座標系では  $x, y, z$  は等価であって優劣はないが、極座標系の  $r, \theta, \phi$  は非等価だ。

**19s2001:** なぜ球面調和関数により水素の原子オービタルが求まるのですか M: シュレーディンガー方程式を解いてきた過程を復習する必要があるのでは？

**19s2002:** 球面調和関数は原子軌道を計算すること以外に、何かに使われることはありますか。 M: 17s2047 参照

**19s2004:** 球面調和関数でどんな軌道も求めることができるのですか？ M: 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 球対称な系は？

**19s2005:** 極座標の体積要素の角度部分に対して規格化直交しているということと、球の表面にわたって規格化直交しているということは式としてどう結びつのか。 M: 何の話か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 球の表面ということは、原点からの距離、すなわち動径は一定ということ。この時に考えられる変数は？

**19s2006:** 電子が 2 個以上存在する原子では電子間の反発が起こるが、その電子間の反発を考慮して、

水素原子のようにシュレディンガー方程式を解くことができるのか。 **M:** 教科書 6 章の最後の節と 8 章や参考書を読めばいいのでは？

**19s2009:** 回転半径は変化するが、角運動量は変化せずに保存されるのはなぜですか？ **M:** 何の話か？ // 運動量保存則・角運動量保存則は、エネルギー保存則と並んで、私たちの世界を支配する重要な保存則。

**19s2010:** 6. 14 式において右辺にマイナスがつくのはなぜですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 偏微分方程式を解くときに用いる変数分離法を復習する必要があるのでは？ // 2.6 式の形の微分方程式の解き方を復習する必要があるのでは？

**19s2011:** 「 $\hat{L}^2$  と  $\hat{L}_z$  が可換であり、球面調和関数は同時固有関数になっている」ということは、球面調和関数は同時固有関数であり、 $\hat{L}^2$  と  $\hat{L}_z$  が可換になっている、という逆もあり得るのでしょうか？ **M:** 何がどう逆なのでしょう？ // 論理学の基礎を復習をする必要があるのでは？

**19s2012:**  $\Psi(r, \theta, \phi)$  の因数分解で出てきた動径関数の解の二乗で電子の存在確率を求めることができるということですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 教科書 3-4 章や参考書を読めばいいのでは？ 波動関数の意味は？

**19s2013:** 球面調和関数は規格化直交系を形成することを示す式において、右辺が  $\delta \ln \delta mk$  とありますが、その式における  $\delta$  の意味とはなんですか。 **M:** 教科書 4.5 節や参考書を読んで、規格化直交を復習する必要があるのでは？

**19s2014:** 現実の原子について考える場合、多数の電子同士の影響も計算に入れる必要はありますか。 **M:** もしも影響を入れなければ、多電子原子は水素原子と同じになってしまうが？ 電子間の相互作用の大きさは、無視できるほど小さいのだろうか？ 19s2006 参照

**19s2015:** 球面調和関数は水素以外の原子や分子にも対応させられるのか。させられる場合どのような要素が新たに加わるのか。 **M:** 19s2004, 19s2014 など参照 // 水素原子とそれ以外の原子とで、何が違うか？

**19s2016:** 教科書の 6・1 と 6・7 のタイトルにある厳密に解ける、厳密に解けないとはどういうことなのですか？ **M:** この文脈で言う“厳密”は exact に対応する言葉で、日常語ではなく専門用語 (technical term) である。例えば簡単な方程式  $x^2 - 2 = 0$  の厳密な解は  $x = \sqrt{2}$  だ。一方  $x = 1.41421356\dots$  は、小数点以下 100 万桁まで求めたとしても、厳密な解ではない。日常的には後者はとても正確な値と言えらるだろうが、// 解析学的手法 (四則と開平、場合により微分や積分を有限回用いる) により得られる解が解析解で、これを exact solution (厳密解) という。すなわち、厳密であるか無いかの二択であって、ほとんど厳密などという表現は、専門用語としてはない。(もしもそのような記述があれば、それは日常語。)

**19s2017:** 節の部分での電子の存在確率が 0 ということでしたが、これは節面を挟んでの電子間の移動は起こらないということですか？ **M:** 構造物理化学 I で、何度も質問されたような気がする。// 電子は古典的な軌跡を持つような運動をしない。節に向かって近づいてきて、節を通り越して向こう側へ通り抜けるような、古典的な運動はしない。// 波動関数の二乗が、電子を見つける確率に比例しているというだけ。

**19s2018\*:** 球面調和関数はオービタルの軌道とその電子の存在確率を求めるとのことですが、他の原子とどのように結合するのかなどの結合のしやすい電子の位置などの判断も球面調和関数から求めることは可能ですか？ **M:** 化学結合の形成には電子が重要であって、例えば共有結合は、二原子間で電子を共有することにより形成されることは、高校化学でも学習済みのはず。裏を返せば、共有される電子を持たない場合には、結合を形成することができない。ここで電子が球対称な殻では

なくて、方向性のある分布をしていることを学修すれば、結合を形成できる方向とそうでない方向の別があるとわかる。このために、たとえば  $sp^2$  混成にある炭素まわりの結合角が  $120^\circ$  となる。

**19s2019:** 球面調和関数が直交性を示す場合、原子オービタルはどうなるのですか。 **M:** 何を聞きたいのか分からない。// 直交性を持たない場合は無いので、直交していない時と比べてこうだとは言うことができない。

**19s2020:** 球面調和関数は水素原子よりも複雑な原子や他の原子に使うことは可能でしょうか。 **M:** 19s2015 参照

**19s2021:**  $x$  と  $y$  と  $z$  の三方向を区別できないということが  $(2l+1)$  重の縮退度を説明するとはどういうことですか？ **M:** 説明が不十分なようだが、 $l=1$  の場合は容易に想像できるはず。すなわち  $l=1$  のときに  $2l+1=3$  であり、 $x, y, z$  の区別がつかず、 $l=2$  のときの  $x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$  の区別がつかなくて (実際には独立なのは 5 個までなので、普通はたがいに直交するように  $x^2 - y^2, 3z^2 - r^2, xy, yz, zx$  を選ぶ)、以下続く。

**19s2022:** シュレーディンガー方程式や球面調和関数を活用すれば、どんなに複雑な分子でも解くことは可能なのでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // “シュレーディンガー方程式は、量子力学系のマスター方程式である。”との理解が不十分なのでしょうか？

**19s2023:** 動径関数のグラフのマイナスの部分は何を表しているのでしょうか。また、動径関数は水素原子以外の解も導けるのでしょうか。 **M:** 波動関数の基本を復習する必要があるのでは？ 波動関数において、関数の値が負の部分は、どういう意味だったか？ // 質問の後半については、意味がとりにくい。関数が解を導くとは、一体何を言いたいのか？

**19s2024:** 教科書に記載されている表 6・6 の関数は表 6・5 と等価であるにもかかわらず、ふつう化学者は表 6・6 にある実関数を使うという記述があるが、それは何故なのか。 **M:** 化学者は普通、抽象的な関数そのものよりも現実の空間に存在している分子や電子について考えるのでは？

**19s2025:** 非定常状態では線型結合解が不必要なのはなぜですか **M:** 誰がそんなことを言ったのか？ 言った人に聞けばいいのでは？

**19s2026:** 角運動量の各成分を表記したもので、極座標系よりもデカルト座標系のほうが単純でわかりやすいと思ったのですが、この場合でも一般的なのは極座標系の表記なのですか。 **M:** 別に、好きにすればいいのでは？ // 座標系なんて、人間が考えやすいように、物理系そのものとは全く独立に、恣意的に選ばれるものだから。

**19s2027:** 角度部分の方程式で、 $\beta = l(l+1)$  としていますが  $\beta$  の値はどのようにして求められるのですか。 **M:** 方位量子数 (オービタル角運動量子数、 $l =$  非負の整数) の値を決めれば  $\beta$  が決まる。そういう意味の式でしょ？

**19s2028:** 水素原子のシュレーディンガー方程式を解くことの他に、ルジャンドル多項式はどのような問題で使われるのですか？ **M:** 17s2047 参照

**19s2029:** 球面調和関数はどのような場合でも、規格化直交系をなすのですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 教科書や参考書の記述を注意深く読めば分かるのでは？ // “どのような場合でも”って、同じ一つの関数が、ある時は規格化されていて別の時には規格化されていないってことがあるとでも、それ一体なあに？

**19s2030:** ヘリウムのシュレーディンガー方程式は厳密に解けないと言っていました、厳密に解けない原因は何か？ **M:** 19s2006 参照

**19s2031:** 動径関数の節の数には規則があると言いましたが、なぜそのような規則があるのですか？ **M:** 理由も何も、現実の一連の関数の間に規則がある。// 方程式 (代数方程式?) の次数と解の数と

