

16s2008: 選んだ試行関数により、エネルギーの次元が一致しないことはないのか M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // エネルギーはどうやって求めるか? 波動関数 (試行関数) の意味を理解していない?

16s2028: 教科書 p.263 式 (7.3) (7.4) 説明部分より、“見事な定理がある” とあるが、見事さというのはどのようなことであるのか。 M: 主観だから、感じ方は人それぞれでは? // それでも 簡潔・基本的・有用 などの観点から判断するのが一般的では?

16s2052: 先週の動径分布関数の課題の計算過程は示していただけないのでしょうか? M: へ? 普通に計算すればいいだけでしょ? 特別なテクニックは必要ないと思うが?

17s2007+: 「摂動が小さい」というのは、類似の別の系をいくつか用いて、比較することによって決まるのでしょうか。 M: (+) “小さい” は相対的な評価なので、比較の対象があるはず。ここでは別の系ではなく、非摂動項と比較しての話 (のはず)。

17s2028: 水素の電子軌道やボーア半径を求める際、原子核と電子では正電荷と負電荷を帯びているのに、電荷の影響を考えずにモデル化や式を作りましたが、なぜ高い精度でボーア半径が求められたり、電子の存在確率を求めることができたのでしょうか? M: 何かの勘違いでは? 電荷の影響を思いっきり考えているからこそそのクーロンポテンシャル項なのだが??

17s2029: 多くのパラメーターを含む試行関数を用いることでより良い結果を得られるとあったが、パラメータの数が多くない場合により厳密にすることは可能なのか。 M: 他に変える要素は試行関数だが? 系統的に試行関数の形を変えろとは、どういうことだろうか?

17s2037: 波動関数は電子の存在確率を表したもので、厳密に解を求めたとしてもあくまでそこにいる可能性が高いというだけで必ず存在するわけではないのに、厳密に解けないものに対して近似を使ってしまったらさらに曖昧なものになってしまわないのでしょうか。 M: 何かの勘違いでは? 印象だけでモノを言わないでほしい。// そもそも厳密解が得られたとしても、それは電子の存在確率を言うだけなので、曖昧だということになるが? // 例えば厳密解で電子密度 10 % が、近似解で 9 % と得られたとして、曖昧だろうか?

17s2045: 先日出された宿題を解いていて思ったのですが r の平均値を求めるためにもっと効率のいい求め方はありますか? 違う式など 計算量が多すぎて日が暮れてしまいます。 M: 数学力、計算力不足か? // 普通に 定義 に則って $4\pi \int_0^\infty \phi^2 r^2 dr$ と計算することの何が悪いのか?

17s2047: 全ての原子のシュレーディンガー方程式を解く場合においても、電子間反発項は無視できますか。 M: 別に、無視したければ無視すればいいのでは? // 無視するのに許認可が必要なわけではないし、無視できるかどうかの規則があるわけでもない。単にあなたが無視するかしないかを決めるだけ。

18s2004: 摂動法の補正は、どの程度の計算や変数で変分法と同じくらいの精度になりますか。 M: 勉強すれば分かるのでは? // 摂動の大きさ (小ささ?) は、変分における試行関数の優秀さに依存する話で、一概に言えるわけない。

18s2006: 変分パラメーターによる近似法により求められる基底状態エネルギーは、身近なものであるものだどのようなものに用いられるのでしょうか? M: どうしてこんなことを聞きたいのかわからない。// 厳密解として得られる基底状態エネルギーの用途と同じでは?

18s2009: 試行関数や変分パラメータを考える際には関数を複数用意して結果を比較するべきですか? M: 好きにすればいいのでは? // “〇〇するべき” などという規則はない。仮にあったとしても、従わないからといって罰則があるわけでもない?

18s2010: [白紙] M: 質問が記載されていない。

18s2014: 表に示されたグラフがある一定の領域で厳密解と大きく異なるのはどうしてですか M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // そりゃ関数形が違うからでしょ。

18s2018: 厳密にのように日常で使われる意味と異なるもののうち気をつけるべきものはなんですか M: 勉強すれば、色々出てくるのでは?

18s2027: ヘリウム原子は電子間反発項があり、厳密には解けないため近似的方法を使うことによって厳密解に近づけるということでしたが、電子数が増加するにつれてよりよい近似解を求めるのは難しくなっていきますか? M: 二電子の組み合わせの数が爆発的に増加するが、計算手順は変わらないのでは? それって“難しくなる”と言うのか?

18s2029: 近似的方法を用いた場合、その精度の良さは原子番号の大小関係なく同じなのか M: 勉強すれば分かるのでは? // 近似方法や、試行関数・摂動 の選び方によるのでは?

18s2030: ヘリウム原子のシュレーディンガー方程式を解くと近似解が得られるというのは、確率的な解であるということですか? M: 意味不明。// “確率的な解” とは何のことか?

18s2032: 近似的方法の中には、今回習った変分法と摂動論以外にもあるのでしょうか? M: あるかもしれません。// 調べて分かったら、教えてくださいネ

18s2034: 教科書 7 章の初めに「基底状態エネルギーの上限」とあるが、基底状態エネルギーは上限、下限という幅のあるものなのか M: 国語力不足か? // 変分原理を理解していない? // 近似値 E_ϕ が得られたら、厳密解 E_0 はどこにあると考えられるか? というだけの話なのだが。

18s2038: 変分法を用いたヘリウム原子の基底状態エネルギーを求め方でパラメーターとして有効核電荷 Z を用いたがこれは十分正確になると思われるが誤差としてなにが考えられるのか M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // ある種のモデル化をしているのだから、その段階で真の姿から切り落とされている要素が存在するのは確実なのでは?

18s2043: 試行関数のパラメータを増やしたい時は、どのようにすればよいですか? M: 勉強すれば分かるのでは? // レイリー・リッツの変分法 と言ってみるテスト

18s2045: 様々な近似的方法で得られた解で最も適当であると判断するには、どのような方法があるのでしょうか。 M: 変分法で試行関数を決めた状況では明らかでは? // 教科書 p.263 の“ほとんど望みの精度で解くことができる” の意味を理解していない?

18s2046: 厳密な波動関数や式を解かず簡略化した式を解くのは、正確ではないもののその波動関数や式が描く概形を知るためなのか M: たった一つの目的に限る必要はないのでは?

19s2001: 変分原理での近似値は必ず真値より値が大きくなるのですか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 変分原理を (ただ暗記するのではなく) しっかりと理解してください。

19s2002: ある系の基底状態において、エネルギー E_0 とハミルトニアンは等しくなりますか。 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以前に、演算子と固有値を理解していない??

19s2004: 変分原理でエネルギーが低いほど良い近似になるのはなぜですか? M: 自分で考えてわからないのはなぜか? 19s2001 参照

19s2005: 変分原理で近似するとき、この範囲内の数値であればより良い結果である、と判断する基準はあるのか M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // もしも判断の基準があったとして、その基準値のわずかに手前とわずかに外とで、解に本質的な違いがあるだろうか?

19s2006: ヘリウムのシュレーディンガー方程式を近似して求めた解で基底状態に最も近い近似解と基底状態のエネルギーの差はどれくらいなのか。 M: 実測値は知られている。教科書や参考書を読め

ばいいのでは？

19s2007: 水素原子の基底状態の近似関数によってエネルギーが -0.4244Eh だとわかりましたが、この値は結局、実際の値に近いのですか？ **M:** 19s2006 参照

19s2009: 変分原理は無限次元空間におけるエネルギーにも対応しているのでしょうか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // “無限次元空間におけるエネルギー” とは、何のことか？

19s2010: 一価、連続、有限な関数は他にどのようなものがありますか？ **M:** 本気か？ そんなものいくらでもあるのでは？ // 自分で考えてわからないのはなぜか？

19s2011: 最後のスライドの出てきた“Z = 2 の水素型波動関数”の Z は、6 章でやった水素型原子の波動関数の核の原子番号 (=Z) と同じものですか？それとも有効核電荷の Z ですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // その二つは、式のうえで何が違うのか？

19s2012: 電子間反発の式にあることでどうして厳密に解けなくなるのでしょうか？ **M:** 多体問題と言ってみるテスト

19s2013: 変分法による近似関数の中に波動関数ではないものはあるのですか？ **M:** は？ 何のために変分法を用いているのか？

19s2014: ヘリウムの原子核と 2 つの電子について換算質量の考え方を用いることは出来ないのですか。 **M:** 多体系が解けないのはなぜだと思っているのか？ // 換算質量を暗記するのではなく、二原子分子の運動で、換算質量が導出された過程を理解していないのか？

19s2015: 電子の存在が最も確率の高い距離を決めるのに平均値に注目する以外の方法はあるのか **M:** 何かの勘違いでは？ // 集団の最頻値と平均値は全く別物だが??

19s2017: 近似的方法を使って正しい数値と一致することはありますか？また一致するとしてそのときはどんな場合ですか？ **M:** 教科書 pp.266-267 や参考書を読めばいいのでは？

19s2018: 変分法で厳密解が解くことの出来ない原子のエネルギーを求める時、その近似解がどの程度の誤差があるを確かめるには実験値からしか求めることが出来ないのでしょうか？ **M:** ここで“誤差”の意味は？

19s2019: 変分法で試行関数が分からない場合はどのような過程で求めるのですか。 **M:** 分からないのなら、求めようがないのでは？ // 変分法の要点を全く理解していない??

19s2021: 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、よりよい結果を得ることができるのはなぜですか？ **M:** ラグランジュの補完法と言ってみるテスト

19s2022: 近似的方法によってシュレーディンガー方程式をほとんど解くことができるが、それよりもっと細かく正確な数値で表すことができるようになる方法は今後現れるのでしょうか。 **M:** 国語力不足か？ // 教科書 p.263 の“ほとんど望みの精度で解くことができる”の意味を理解していない？

19s2023: ヘリウム原子を水素原子に近似すると電子間相互作用によっての誤差が生じることがわかりましたが、電子間相互作用を無視できる限りにおいて、全ての原子が、水素類似原子と近似可能ということになるのでしょうか。[追記は省略] **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ 論理的に明らかでは？ // 17s2047 も参照

19s2024: 水素原子の基底状態に対する最適化された試行関数と厳密な波動関数を比較した時に $r/a_0 = 0$ 付近で、 $r/a_0 \rightarrow 1$ の時と比べ、値に大きな差が生じるのか。 **M:** そんなものは、試行関数の取り方に依存する話であって、一概に言えるわけがないのでは？

19s2025: ボーア半径が 1 より小さい領域でズレが少ない関数を求めたいときどのような条件の関数を選べば良いのでしょうか手当たり次第計算してみるしかないですか **M:** 自分で考えてわからな

いのはなぜか？ // 厳密解に似た形という条件の関数を用いればいいだけでしょ？

19s2027: なぜ、ヘリウム原子のハミルトン演算子において電子間反発の項を無視できるのですか。 **M:** 17s2047 参照

19s2028: 変分法と摂動論以外で近似解を求める方法がありますか？ **M:** 18s2032 参照

19s2030: 変分パラメーターが増えると、より正確な値に近づくことができるのか？ **M:** 教科書 pp.278-279 や参考書を読めばいいのでは？

19s2031: 変分原理での良い近似関数とは基底状態のエネルギーとの差はどれくらいが理想なのでしょう。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // そんなの 0 % が“理想”に決まってるでしょ。

19s2032: シュレーディンガー方程式を解けない系において、近似解を求めた時、その解の精度を確かめることはできますか。 **M:** 教科書 p.263 の“ほとんど望みの精度で解くことができる”の意味を理解していない？ // 近似の精度を向上させる系統的な方法が知られているので、精度の異なる解を求めて比べれば、精度の低い方の解がどの程度の精度なのかがわかる。

19s2033: 無機化学 1 にも動径分布関数に関する公式が登場し、最外殻電子の存在確率についてとても簡単な式で計算されていましたが他の電子の存在確率についてもスレーターの原理を用いることで簡単な公式にすることはできませんか？ **M:** 動径分布関数に関する公式とは？ 最外殻電子の存在確率についての簡単な式とは？ // 自分で計算してみればいいのでは？

19s2034: たった 1 個の電子の増加で解析的に解くことはできないとありましたがその原因である電子間反発を考慮した上で近似的に求めた電子軌道の詳細について各オービタル形が前回の講義で学習したものとどれくらい一致しますか？ **M:** 系が異なるのだから、一般の原子の原子オービタルと水素型原子の原子オービタルとで、オービタルは違って当然。そこで、同じところはどこで、最も異なるところはどこか？

19s2035: ある近似がよい近似かを判断するとき、実験値と比べる方法があると思います。しかし、実験値が分からない場合はどのようにしてよい近似かを判断すればよいのでしょうか。 **M:** 19s2032 参照

19s2036: なぜ、エネルギーを最小にするだけで、近似の関数のグラフが求まるのか？ **M:** 変分法を全く理解していない？ // エネルギーを最小にするということは、試行関数を最適化して変分パラメータを決定すること。

19s2037: 教科書 pp.243-244 の 6.40 に $\langle r \rangle^2$ を求める一般式が与えられており、 Ψ_{210} について具体的に検証しろとあるが、 $\langle r \rangle^2$ の持つ物理的意味とは何か。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 距離 (電子の核からの距離) の平均値の二乗でしょ？ (教科書には違うものが書かれているような気もするが.....)

19s2038: 近似した解がより良い近似だと判断できる基準は、厳密な解と具体的にどのくらいの差までですか？授業では「有効数字が 6 桁で～」のように先生がおっしゃっていたような気がしますので、詳しく教えていただけますでしょうか。 **M:** 何かの聞き違い・勘違いでは？ // 例えば 5 % error までという基準が仮にあったとすると、5.00001 % error の解は良い近似とは言えないと判定されるが、その判断に意味があるのか？

19s2039: 式 7・18 では 2 個の波動関数の積である ϕ を用いて積分を行いエネルギーを求めています。が、 r_1 と r_2 の各々の積分結果の積では基底状態のエネルギーの近似値を求められないのでしょうか。 **M:** 自分で計算してみればいいのでは？

19s2040: 厳密解が分からないものの解を求めた時、その値が正しいか判断するにはどうしたらいいで

すか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // (計算に誤りなければ) 近似法の理論通りに正しく近似解が得られているはずでは？

19s2041: 試行関数とそれが属するエネルギーについてのシュレーディンガー方程式の解を任意に数学的に操作して、より厳密な波動関数を求めるようなこと、また、その関数是有用ですか。 **M:** “解を任意に数学的に操作” するとは、どういうことか？ // 近似解としてよいものが得られれば、そりゃ有用でしょうね。

19s2042: 教科書ではヘリウム原子の基底状態のエネルギーを求めるのに変分法を使って-2.8477 という値が出たが、最も精度が高い計算結果は-2.9037 とあいます。これは、変分法とは違うまた別の方法で解いたのでしょうか。 **M:** 表 8.2 参照

19s2043: 電子間反発の項を無視してシュレーディンガー方程式を解いた後に、電子間反発について補正することで近似できるのでしょうか **M:** それが“摂動法”の考え方。

19s2044: よりよい試行関数を選ぶにはどのように考えれば良いのですか？ **M:** 19s2032, 19s2047 なども参照

19s2045: 近似法を用いることによってシュレディンガー方程式で解析的に解けない系を全て近似解として求めることが可能になるのか？ **M:** 全てについて解いてみたことは無いので、わかりませんが ; -p

19s2046: ルジャンドル陪関数の符号のつけ方には規則がありますがラゲール陪多項式にも符号のつけ方に規則はありますか？ **M:** $L_{\alpha}^{\beta}(\rho)$ の位相 (最高次の項の符号) は、 $\rho \rightarrow 0$ の近傍で $L_{\alpha}^{\beta}(\rho) > 0$ となるようにとっている。

19s2047: 水素原子の基底状態のところで現実に近い関数が良いといっていました、現実に近い関数の意味を教えてください。 **M:** 国語力不足か？ // 現実を表している関数, 厳密解の関数, 真の関

数, etc.

19s2048: 数ある近似的方法の中で、変分法と摂動論の二つがよく用いられるのはなぜですか？ **M:** 最初に用いた人に聞いてみればいいのでは？ :-p // (たぶん) 昔から知られていて、近似の系統的な改良方法も知れていて、理論的にもしっかり整備されていて、などなどと予想されますが。

19s2050*: 変分法の近似が最小値であるものが最良の基底状態エネルギーであるということのはわかりましたが、励起状態で考えるとどのような近似をとりますか。 **M:** いちいち別の方法を開発して適用するのって、どうよ。なぜ既存の手段を活用しようと考えないのか？ // 基底状態 (S_0) に直交するような試行関数を選べば、第一励起状態 (S_1) が得られ、さらに両者に直交するような試行関数を選べば第二励起状態 (S_2) が得られ、..... (教科書 p.138 参照)

19s2051: 作用が最小になるような運動が実現される原理が変分原理ならば、その反対となる原理はあるのでしょうか。 **M:** 本気か？ 正気か？ // そんな現象は起こるのか？

19s2052: 教科書では「厳密に」などの専門用語に関して詳しく触れていないと思うのですが、専門用語を詳しく説明している参考書はありますか？/今回授業で行った波動関数の近似で私は結構差があると思ったのですが、一般的にどのくらいの差までが近似できているといえるのでしょうか？ **M:** 丁寧に教科書や参考書を読んでいれば、自然と身につくのでは？ // 19s2038 参照

18s6025: 教科書では、厳密に求まる水素原子の波動関数と比較することで、近似的に求めた波動関数の誤差を計算できました。しかし、実際には厳密に求められない波動関数を持つ原子・分子について近似的な波動関数を求めなければならず、厳密なものとの比較ができません。このとき、どれくらいのパラメータを導入してそれらを最適化すれば厳密に求められる波動関数との誤差が許容範囲にある、と言えるのでしょうか。 **M:** 19s2038 参照 // あなたは何をやりたいのか？ 許容範囲は、状況や目的に応じて様々では？