

16s2028+: 計算されたものが十分に近似できているかはどのように感じればいいのか。 M: 直感的に決定した近似値ではなく、理論的に求められたのだから、得られた近似値には普遍性がある。それが、科学を数学という言葉で記述したことの利点である。

16s2052: 摂動法の得意な解法を身に着けていれば問題が複雑化しても同じ方法で解けますか M: 意味不明。“摂動法の得意な解法”とは何のことか？

17s2007: シュレーディンガー方程式の近似解は変分法や摂動法によって導かれるが、放射性元素でも何か特別な値の変化など起こらず、同じように導くことができるのでしょうか。 M: 意味不明。なぜここで放射性元素が出てくるのか？

17s2028*: 6章では、ヘリウム原子のシュレディンガー方程式は厳密には解けないこと、そして電子間反発項がその原因である旨が記載されているが、摂動部分のハミルトニアンだけで E の値を求めることで、おおよそ電子間反発項の値を求めることはできないのでしょうか？ M: 摂動エネルギーって、そういう意味でしょ？ // 電気的物性・磁気的物性などについて、注目する相互作用を摂動として扱うことは、よくある。

17s2029: 摂動論は縮退の有無によって扱い方が変わるのか。 M: 自分で勉強すれば分かるのでは？ // 20200609 の 19s2030 参照

17s2037: λ は何次の式まで求めればよいのか。 M: 教科書 p.263 の“近似的方法を使うことによってシュレーディンガー方程式を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？

17s2045: 量子力学の世界において、近似解法はどのくらいの数がありますか？ M: 数えたことがないので、私は知りません :-p // その世界は、どこからどこまであるのか？

17s2047: 質問が思いつきませんでした。 M: 質問は積極的に作り出すものです。ポーっとしていて思い浮かんでくるものではない。

17s2051: 基底状態エネルギーは摂動論において何次まであるのか。 M: 自分で考えてわからないのはなぜか？ // λ でべき級数展開できることの意味を理解していない？

18s2003: 摂動論では逐次補正は急速に小さくなっていくとありますが、なぜそのようなことは起こるのでしょうか。 M: 20200609 の 17s2029 参照 :-p

18s2004: 3次以降の摂動の計算は誤差にどの程度影響しますか。 M: 自分で判断できないのはなぜか？ // 問題によって異なるだろう。

18s2006: 7章の最初のページに「近似的方法のうち、最もよく使われる変分法と摂動論の二つを説明する」とありますが、変分法と摂動論以外ではどのような近似的方法があるのでしょうか？ M: マイナーなものにどんなものがあるのか数え上げるよりも、主要なものをしっかり理解して使えるようになった方が、利するものが大きいのでは？

18s2009: 非摂動や高次の摂動の重要性も分け方次第でどのようにでも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？ // 狙ってどうこうできる訳ではない (解が未知なのだから) が、依存性は当然あるだろう。

18s2010: He のエネルギーの計算の重水素、水素アニオンとの違いは何か M: 本気か？ // 自分で計算してみればいいのか？ そもそもモデルの段階で違いは明らかでは??

18s2014: 摂動の値はどこまで許されるものですか M: 意味不明。誰が、何を、どういう権限で、許すという話か？

18s2027: 今回の摂動法で λ をパラメータとして解いていく方法は非常にわかりやすかったです。

マッカーリサイモンの教科書では省略されていますが、この解き方はどの教科書を参考にされたのですか？ M: 普通に量子化学の参考書に書かれている。アトキンスの基礎物理化学 にも載ってるし。 // 自分で色々見比べて読んでみればいいのか？

18s2029: 変分法と摂動論はそれぞれどのような時にどちらを使ったほうがより良いとありますか？ M: 別に。好きにすればいいのでは？ // 20200609 の 18s2029 参照 // 17s2028 参照

18s2030: 摂動ハミルトニアンにかけたパラメータ λ の範囲が 0~1 というのは、電子存在確率 0~100% の意味を表しているのですか？ M: 自分で判断できないのはなぜか？ // ハミルトニアンは常に電子のことについてのみ記述しているわけじゃない。 // 19s2040 参照

18s2032: 摂動項と非摂動項の差が大きくなるとどうなるのでしょうか。また、差が小さい時は大きい時と比べてどう変化しますか。 M: 何がどうなるという話か？ どう変化するって、何が？

18s2034: 教科書に「逐次補正は急速に小さくなって先に進むにつれて重要ではなくなる」とあるが、重要になるときはしないのか。 M: ここで言う“重要”というのは、価値判断の話ではない。エネルギーに対しての寄与の程度の話。つまり大きな値であれば重要、小さな値ならば重要でない、という言い方をする。 // 教科書 p.281 にあるように、非調和振動子の $\frac{1}{6}\gamma x^3$ の非調和項は一次の摂動がゼロで二次の摂動はゼロでないということはある。 // 18s2003 も参照

18s2038: 摂動法の逐次補正は急速に小さくなって先へ進むにつれて重要でなくなるということだが大きくなることはないのか。 M: 18s2034 参照

18s2040: 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: 18s2046 参照

18s2043: 教科書 p.281 ページに「全基底状態エネルギー」とありますが、基底状態エネルギーは系ごとに決まっているので 1 つの事象について「全」を使うのは納得できないのですが、これは認識に誤りがありますか？ M: しかしここで説明しているように、摂動論はエネルギーを部分に分けて、それを逐次求めていく近似の方法だ。 // なお原文は“the total ground-state energy through first order”である。

18s2045: 摂動法における誤差は、どのように求められますか。 M: 本気か？“誤差”とは何か？

18s2046: 摂動論を用いて摂動の補正を行なった波動関数を変分法により近似的な値 (例えばエネルギー) を求めると摂動の補正を行う前よりも必ず正確になるのか M: 意味不明。具体的に何をどうする計算をするのか？

19s2001: 変分法あるいは摂動法では、試行関数はどのようなものでもいいですか。 M: 自分で判断できないのはなぜか？ // 摂動法における試行関数とは？

19s2002: 摂動論で、何次の近似解を求めるときにコンピュータを用いるのですか。 M: 何のためにコンピュータを用いるのか？ コンピュータについて、何かの勘違いでは？

19s2004: 例では一次元の箱の中の粒子でしたが、ほかの次元でもできますか？ M: 自分で計算してみればいいのか？

19s2005: 摂動論についての説明の中で、何らかの意味で類似性のある別の系、とあるが系の類似性はどう判断するのか M: “何らかの意味で”とあるので、類似性を感じられれば何でもいいのか？ // ていうか、摂動法の原理から考えれば、何でもいいのか？

19s2006: ヘリウム原子のシュレーディンガー方程式を厳密に解くことが出来ない直接の原因の電子間反発項を 1 次の摂動論で考えたにも関わらず誤差が 5% あるということは電子間反発以外に原因があると思うのですが、他にどのような原因があるのですか。 M: 教科書 p.283 の、一次の摂動

論の次の記述を読めばいいのでは? // 一次の摂動では十分ではなかったということか。

19s2007: 未知の系の波動関数とエネルギーを展開するときに使った λ はどういう意味を持った文字なのですか。 **M:** 摂動によるエネルギーの補正項や波動関数の補正項を求めるために利用するパラメータ。

19s2009: 変分法はすべての関数に使用す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? // 変分パラメータを持たない関数では最適化のやりようがないのでは?

19s2010: 逐次補正が急速に小さくなって先へ進む場合と徐々に小さくなって先へ進む場合でどのくらい値に差がでるのか。 **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは?

19s2011: もし異なった波動関数でエネルギーが同じ場合、その波動関数は λ が 0 次の波動関数と等しくなるのでしょうか **M:** 意味不明。どういう状況なのか、何の話なのか? // 縮重している状態であれば、異なる複数の波動関数が同じエネルギーに属している。

19s2012: 求める関数によるとは思いますが、補正項を増やすことでどれくらい精度が上がるのですか。 **M:** 17s2037 のコメント参照

19s2013: どのような次元の空間内の波動関数を用いた問題にも変分法や摂動法が適用されるのか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか?

19s2014: 厳密に解けない系も近似的方法を用いて方程式を解くことが出来たが、電子のスピンについては考えなくてよいのですか? **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか? // どういう系について、どういう物理量 (演算子) を問題にしているかによるのでは?

19s2015: 摂動法にてどの程度の誤差なら許せるか、どの程度正確であれば良いかというのを決められるようになるためにはどうすればいいのか。計算する機会を増やせばそのうち分かるようになるのか? **M:** 誰が許すのか? // あなたは、問題にしている系において、解にどの程度の誤差を許容するのか?

19s2016: 非摂動部分の計算にさらに近似法を使っていいのか、それとも非摂動部分を厳密解がわかる部分までにとどめる必要ががあるのか。 **M:** 19s2044 参照

19s2018: λ を 0 から 1 へ変化するとき、少しずつ変化させると言っていましたが、これは逐次補正により少しずつ変化させるという意味ですか?それとも、逐次補正を入れて計算するのは可逆的な変化であるなどの別の意味が込められているのでしょうか? **M:** なんだか著しく誤解している予感。// 逐次補正はハミルトニアンに対してするものじゃないし。それから、逐次補正が可逆とか、どういう意味でしょうか。数学的な計算は、必要十分条件でつなげて進めていくから、当然可逆だし。

19s2020: 摂動法で、励起状態のエネルギーは求められるのでしょうか **M:** 摂動論ではエネルギーや波動関数をパラメータ λ でべき級数展開して $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \dots$ や $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \lambda^3 \psi_n^{(3)} + \dots$ とするわけだが、この時に展開される状態 n に制限があったか?

19s2021: 底が傾いた 1 次元の箱の中の粒子のエネルギーを変分法でも求められますか? **M:** 自分で計算してみればいいのでは?

19s2023+: 例えば、摂動論を用いて論文を書くとすると、最低限何次まで補正することにより、得ることができた結果の信頼性を示すことになるのでしょうか。 **M:** 微妙に勘違いの予感。// 計算結果の信頼性と摂動の次数とは、全く独立な話。

19s2024: 何故、氏諱☒垢い璽 1 次元の箱の中の粒子について考えたのか。 **M:** 別に。ただそういう問題だというだけ。

19s2025: 近似について調べたら WKB 近似という新しい近似を見つけたのですがこれは 3 つ目の近似法ですか。それとも摂動法の一部として考えられるのでしょうか。 **M:** 名前だけを暗記しても意味はない。内容を調べてみればいいのでは? // 量子力学をどう理解するかという視点での近似。

19s2027: 摂動法の補正項を授業でやった方法ではなく、さらに近似を使って求めることはできるのか。 **M:** 近似解の近似解を求める? // 例えば、二次の摂動エネルギーは状態の数だけ和をとるのだが、ゼロ次を箱の中の粒子や調和振動子とすると無限個の和をとることになる。

19s2028: 摂動論において、逐次補正はなぜ急速に小さくなっていくのですか? **M:** 18s2003 参照

19s2029: リッツ変分法は日常生活においてどのような場面に応用されていますか? **M:** 私は知りません、調べて分かったら、教えてくださいネ :-)

19s2030: 新たに別の未知の系の解を求める際、求めた近似解を既知の解として扱い、摂動法を用いて解くことができるのか? **M:** 19s2044 参照

19s2031: 底が傾いた一次元の箱の中の粒子を図であらわすとどのようになりますか? **M:** 普通の箱の中の粒子の問題で、粒子を図で表すとどうなるか? // 波動関数を図示してみれば?

19s2032: 摂動法でヘリウム原子の 1 次の補正エネルギーが $5/8ZE_H$ であると求められましたが、これと有効核電荷に関係はありますか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか? // 摂動論で有効核電荷の概念が導出されるのか?

19s2033: 摂動法では逐次補正を求めて足し合わせいましたが λ が常に 0 から 1 の範囲にあるということは摂動法による近似値は常に観測される値よりも小さいということですか? **M:** λ は、補正項を求めるための式を導くのに使用しただけ。

19s2034: 非摂動ハミルトニアンにおいて縮退の有無を考えるとそれぞれにおいて摂動論はどう適応されるか。 **M:** 17s2029 参照

19s2035: 授業で摂動論をやりましたが、補正項をふやしていくにつれてどの程度近似がされるのでしょうか。 **M:** 19s2012 参照 // 17s2037 のコメント参照

19s2036: 初めからハミルトニアの中に補正值部分が含まれているものはいいが、非調和項のような後付けされる補正值はどのようにして求めるのか? **M:** 勘違いでは? // ハミルトニアンに補正などないが? // 後付けとは?

19s2037: 例として摂動項の係数をあえて $1/2, 6/1, 1/24$ とした意図はなにか。 **M:** 著者に聞けばいいのでは? // テイラー展開 $1/2!, 1/3!, 1/4!$

19s2039: 摂動法で求めたエネルギーの Z に変分法で求められた有効核電荷の値を入れてみたのですが、 $Z=2$ の時より実験値からのずれが大きくなりました。摂動法ではどの原子でも有効核電荷の考えが使えないのでしょうか。また、使えないのであればなぜ使えないのかを教えてください。 **M:** 何かの勘違いでは? ヘリウム原子について変分法で求めたエネルギーで $Z_{\min} = 27/16$ の代わりに $Z = 2$ を代入すれば、1 次の摂動法で求めたエネルギーに一致しているが?

19s2040: λ の値を 0~1 とするのは逐次補正が小さくなっていくことを表しているのですか。 **M:** 全然違う。摂動論の補正項求める手順を復習すれば分かるのでは?

19s2041: 近似的方法を用いて求められる波動関数は定常状態のものに限られますか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか? // 変分法や摂動法の論理に、時間に依存するかどうかの要素が含まれてるか?

19s2042: λ を 0 から 1 に少しずつ変化させるとあるが、 $\lambda = 1$ の時に知りたい系の波動関数とエネルギーが得られるのだから、そのまま 1 を代入してはいけないのでしょうか。また、変化させていく値は範囲の中で自分の好きなように変えていったいいのでしょうか。 **M:** λ に 1 を代入する

ということは、それって解が未知の系の波動関数とエネルギーということ。

19s2043: 教科書 p.280 . に出てくる非調和振動子は、二次の補正項まで考える必要があったが、三次、四次の補正項が必要となる系はどのような系か。 **M:** 何かの勘違いでは? // どこをどう読むと二次の補正項まで考える必要があることになるのか?s

19s2044: 摂動法で近似解を求めた系を他の未知の系を摂動法で求めるときの既知の系として扱うことはできますか **M:** Post-HF 法のひとつに、HF 法で求められた解をゼロ次の波動関数を用いて電子相関を求める方法がある (cf. p.317, p.461).

19s2045: 摂動法を用いて近似解を求めるときに発散が生じてしまったらどのようにしたらいいのか? **M:** 量子力学の基礎を理解していない? 教科書 四章を復習する必要があるのでは? // 波動関数は有限で規格化可能でなければならない。

19s2046: レイリー・リッツの変分法で 1 次元の箱の中の粒子について考えましたが、2 次元や n 次元についても解くことは可能ですか? **M:** 自分で考えてみれば分かるのでは?

19s2048: 教科書中に「摂動論の基本的な仮定は、逐次補正は急速に小さくなって先へ進むにつれて重要ではなくなる」とありますが、このように仮定できるのはなぜですか? **M:** 18s2003 参照

19s2050: 教科書に逐次補正は急速に小さくなって先に進むにつれて重要ではなくなるとあるがなぜですか。 **M:** 18s2034 参照

19s2051: 変分パラメータとは物理的にどんな意味をあらわしますか? **M:** 自分で考えてわからない

のはなぜか? // 扱う問題に依存する話なのでは?

19s2052: 変分法においては複数の変分パラメータを含む試行関数で長い変分計算をすることによってより厳密に求めることができ、摂動論では逐次補正項を増やして計算することでより厳密に求められるということがわかりましたが、研究者の方々が近似を行う場合も個人の好きなほうを選んでいるのでしょうか?それとも対象とする系に応じて決めているのでしょうか? / 読書感想文のために岩波科学ライブラリーの「おなかの赤ちゃんは光を感じるか」という本を購入したのですが、この場合物理、科学、化学の対象となっているのでしょうか?生物学の要素が強いから不適切になってしまうのではないかとって質問しました。 **M:** 適所適材. 18s2029 参照 // サポート web ページに本の種類についての記述がある。自分で判断してください。

18s6025: 教科書例題 7.6 箱の中の粒子について なぜポテンシャルエネルギーは位置 x によって異なる一方、摂動計算によって求められた 1 次までの範囲でのエネルギー準位 E_n は定数 $V_0/2$ だけ増加するのでしょうか? そもそもここでの E_n とは、 n 番目のエネルギー準位にある箱の中の粒子の持つエネルギーを指すのでしょうか。それとも n 番目のエネルギー準位そのもののエネルギーを指すのでしょうか? (教科書 3・4 章、とりわけ p.132~133 を読んで、一応自分は前者であると判断しました。) **M:** 対象の粒子がある固有状態にある場合、その二つにどんな違いがあるのでしょうか?