## 構造物理化学 I (20210413) M: 以下は宮本のコメント

- **16s2052**: 変数分離の分離定数の決定は式を解いてみてきれいにまとまるような値にすると思いますが、それは経験則として導き出されたものですか? それとも式を解く前にこれが良いだろうと目星をつけれるものですか? **M**: つけれるものもあるかもしれないし, ないかもしれない. てゆーか, 自分で"解いてみてきれいにまとまるような値"と言っているのだが? 解く前にそれがわかるのか?? あなたは予知能力者か?
- **17s2007:** 演算子は何かをしなさいと言うことを表す記号と教科書にかかれていたのですが、法則や物理定数などに人名が用いられていたように、演算子にも用いられることがあるのでしょうか?またラプラス演算子は人名が用いられた名称なのでしょうか? **M:** 読書感想文(仮)のネタ発見?! //ラプラス,ハミルトン、エルミート等は全て人名.
- **17s2045:** 質問カードは評価の対象となるとおっしゃっていましたが、評価の対象とするため以外で質問カードを毎回とる意義はどのようなものがあるのでしょうか。授業内で説明がなかったので質問しました。 **M:** 講義サポート web ページに記載しています.
- **17s2051:** SI 単位系を用いる利点は何ですか? **M:** 体積の単位としてリットル L の代わりにデシメートルの三乗  $dm^3$  を使うことが SI 単位系を使うことだと勘違いしている人が多そうですが、SI 単位系の肝はそんな所にあるのではない. 最も重要なことは、電磁気学の単位について rational (合理的) であること. IUPAC のグリーンブック参照.
- **18s2003:** 水素原子のシュレーディンガー方程式で、分離定数を  $\hbar^2 \beta$  とするのはなぜですか?  $\beta$  だけでは不都合が生じるのでしょうか? **M:** 20s2011 参照
- **18s2010:** 今回の計算では水素と重水素で同じ解が出ると思うのですが現実ではその二つはどのように 異なっているのでしょうか **M:** 20s2017 参照
- **18s2014:** 原子核が水素以外の原子でも1電子だけなら求めることは可能ですか。 **M:** 自分で考えて 分からないのはナゼか? // 水素原子とそれらの原子とでは, 何が違うか? シュレーディンガー方程 式のどこをどう修正すれば良いだろうか? // "水素類似原子"で参考書参照
- **18s2029:** 1電子系ではない原子・分子(He 原子など)では、電子間反発があることでシュレディンガー方程式を厳密に解けないですが、厳密に解ける  $H_2^+$  などでは原子核同士の反発は考えなくてもよいのですか? **M:** 教科書 p.353 や参考書をよく読めばいいのでは?
- **18s2038:** 真空での誘電率のこと電気定数とも呼ぶことを初めて知ったがずっと前から使われていたのか。 **M:** ずっと前とはいつのことか? // 私は知りません. IUPAC のグリーンブックやその他の資料で調べてみればいいのでは?
- **18s2045:** 1) そもそもだが、2 つの系が +e と-e であること (よく知られていることではあるが) は、どのような研究結果や根拠に基づくものなのか疑問である。//2) ラプラス演算子が極座標系において $\theta$ と $\phi$ が可換でないということは、これらの計算結果が必ずしも対称でないことを示唆するものか。//3) 真空の誘電率が電気定数に変わった理由は何か。前者の方が直感的に理解しやすいように感じるが理由はあるのか。 **M:** 1) 質問が記載されていない. 科学史を勉強すればいいのでは? //2) 意味不明. "これらの計算結果"とは、何の計算のことか? //3) 18s2038 参照
- **18s2046**: 電子を含まない系 (例えば  $H^+$ ) では式 (6-2) からクーロンポテンシャルを除いた形を用いれば良いのか **M**: 正気か? // 系の全エネルギーは, どのようなエネルギーから成り立っているか, よく考えればいいのでは?
- **19s2003:** 分離定数を教科書  $(6\cdot 8)$  や  $(6\cdot 9)$  のように  $\beta$  単体ではなく  $\hbar^2\beta$  とした理由は何ですか? **M:** 20s2011 参照

- **19s2007**: 正の電荷を持つ原子核と負の電荷を持つ電子がくっつかずに距離を保っていられるのはどうしてですか。電子に遠心力が働くからですか。 **M**: 正気か? // それを解決するために量子力学が必要とされたのでは?
- **19s2011:** 重水素や三重水素のとき中性子が増加するだけなので、このときのハミルトン演算子は式 (6 磁 2) と同じになるということでしょうか? **M**: 20s2017 参照
- **19s2026:** 水素原子のシュレーディンガー方程式を解く時、原点に原子核を固定して考えていたのですが、なぜ勝手に固定して考えても良いのですか。 **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // 20s2017 も参照
- **19s2029:** 水素原子のシュレーディンガー方程式を解く際、3 次元空間だから 3 変数の波動関数を用いるとのことだったが、仮に 4 次元、5 次元とするとき変数を 4 つ、5 つと増やすと理論的にはその状態を求めることができるのか? **M:** "次元の数 (例えば三次元の 3)" とは何か? どういう意味をもつのか? // 自分で判断できないのはナゼか?
- **19s2031:** -1/4  $\pi$   $\epsilon$   $0 \cdot e^2/r$  と板書でありましたが、教科書は $-e^2/4$   $\pi$   $\epsilon$  0r とまとめてありました。わざわざ分けたのはそれぞれにどんな意味があるのですか? **M:** 19s2047 参照
- **19s2045:** 先生にとって構造物理化学にだけのある魅力はなんだと思いますか。 **M:** それを聞いてどうするというのでしょうか? // 自分にとっての魅力は自分で見つければいいのでは?
- **19s2046:** 核磁気共鳴装置 NMR は磁気モーメントを持つ物質に電磁波を照射して共鳴現象を観測する 装置ですが、『陽子数と中性子数が共に偶数で角運動量が逆の対を形成して打ち消し合う状態となりスピン量子数が 0 になるような原子核を持つ物質』を観測することは出来ますか? **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // スピン量子数がゼロであるとき、磁気モーメントの大きさは?
- **19s2047**: プロトン核によるクーロンポテンシャルエネルギーの値をクーロン定数の部分と  $e^2/r$  で分けていたのは計算する上で楽になることやわかりやすいことがあるからですか? **M**: 自分で判断できないのはナゼか? // 物理学で用いる数式は、記号の意味不明な羅列なのか?
- **19s2049:** 水素原子において重水素の場合、原子は陽子と中性子で構成されているが、中性子による電子の遮蔽などを考える場合はどういったシュレディンガー方程式について考えれば良いか。 **M:** 本気か? 電荷がゼロな中性子による電荷の遮蔽とは?? 物理学の基礎を復習する必要があるのでは?
- **19s2053**: 僕は原子核を固定する際に原子の中心に固定することをイメージしましたが、中心以外にも固定することは可能ですか? **M**: ゾンマーフェルトは、水素原子のボーアモデルを拡張し、電子は楕円軌道をとると考えた。これにより主量子数だけでなく副量子数も導入された(離心率・扁平率が異なる)。// 19s2026 も参照
- **20s2001:** 水素原子以外の原子でシュレーディンガー式を解く際、ハミルトン演算子のポテンシャルエネルギーの部分の値が変わるのだと思いますが、具体的にどこが違うのでしょうか? **M:** 別に,普通に考えればいいだけでは? // 20s2033 参照
- **20s2002:** 適切な都合の良い座標系を用いる場合にやってみればそれが都合の良い座標系かどうかわかると言っていましたが、やってみて都合の良い座標系でなければ同じ事を座標系を変えて都合の良いものが見つかるまで行う必要があるということですか。 M: 自分で判断できないのはナゼか? // 都合がよいかどうか、どうすれば判定できるか?
- **20s2003:** 水素原子を、最初に剛体回転子として計算してその後に動径部分を計算することはできないのですか? **M**: もしもそうやりたいのなら、自分で計算すればいいのでは? // こうやらなけれ

- ばいけないなどと思想統制されていないと思うのだが?
- **20s2005:** 幾何学的配置とはどういう意味なのでしょうか? **M:** コトバの意味か分からないのなら, 辞書を見ればいいのでは?
- **20s2006**: 極座標系を用いて、y 座標を表すとき、なぜ sin  $\theta$  は 2 乗されないのでしょうか? **M**: 本気か? // デカルト座標系と球面極座標系との対応の図を見てよく考えればいいのでは? // なぜ sin  $\theta$  が二乗されるのでしょうか?
- **20s2007**: ラプラス演算子は結局どの式を辿っていけば求められるのか分からなかった **M**: そうです か、しかし質問が記載されていません. // 20s2044 参照
- **20s2008:** 水素原子中の電子のスピンとは電子自身がずっと時計回りもしくは反時計回りのどちらかで自転しているという感じなのでしょうか?スピンしていないときもありますか?また、原子核もスピンしていますか?もししているとしたらその様子を観測することはできますか? **M:** "自転"は、あくまでも \*喩え\* の話であって、実際に古典的な剛体の自転運動を行っているわけではない. // 磁気共鳴法:-)
- **20s2009:** 水素原子以外の原子のシュレディンガー方程式は厳密に解くことはできますか? **M:** 20s2033 参照
- **20s2011:** なぜ、分離定数を h バーの  $2 \, \text{乗} \times \beta$  と表すべきなのか。また、 p.208 には h バーの  $2 \, \text{乗}$ は  $\beta$  に含まれていると書いてあるがどちらを使っても結果は同じになるのはどういうことか。 **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは? // 教科書の記述 " $\hbar^2$  は  $\beta$  の中に含めてある"とは、具体的にどういう数学的操作なのか?
- **20s2012:** シュレーディンガー方程式から求まるものについて水素原子のシュレーディンガー方程式を解くことによって求まるものがあるとおもいます。無機化学では、 主量子数、方位量子数、磁気量子数の3つを習いました。6章ではこれらについてわかるということでしょうか。またこれら以外のことについてもわかることはありますか? **M:** 教科書 6章を勉強すれば分かるのでは?
- **20s2013:** 水素原子のシュレディンガー方程式をデカルト座標系で解くのは難しいと言っていましたが、これは今まで習った内容だけでは解けないということですか? **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.  $\frac{1}{r} (= \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}})$  の項を、変数別の項に分けてみればいいのでは? // 大学以上の勉強で、"学校・教室で教わっていないから知らない"という言い訳が通用するのか? "学問の自由"って、何だ?
- **20s2015**: 教科書 p207 について、6 章 1 節のタイトルが「水素原子のシュレーディンガー方程式は厳密 に解ける」となっているが、水素原子以外のシュレーディンガー方程式は厳密には解けないのか一応、「厳密に」という言葉の意味を理解していないのかというような返しをされないために「厳密 に」という言葉の意味を調べたところ「細かい点まで見落とさず、またいい加減な扱いをせず、厳 しいさま」ということでした。ヘリウム原子などのシュレーディンガー方程式はやはり電子同士の 反発という""細かい点""まで考慮すると解けないのか **M**: 電子間反発のエネルギーは、それ以外 のエネルギー(運動エネルギーと核による電子のポテンシャルエネルギー)と比べて "細かい" (小さい?) だろうか? // 20s2037 参照
- **20s2016:** 水素原子以外の原子についてシュレーディンガー方程式を立てることは可能か? **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // シュレーディンガー方程式を立てることができる原子と出来ない原子が存在するならば,ある原子で可能かどうかを事前に判断しなくてはいけないことになる. 物理学・科学ってそういうものなのか? 物理学で方程式を立てる前に,神託が必要なのか? // 方程式

- の意味を考えないのか? // 20s2033 も参照
- 20s2017: 今日の講義で「水素原子の波動関数」について取り扱ったが、重水素、三重水素などの場合はどのように考えればよいのですか? M: 自分で考えて分からないのはナゼか? // 水素 (軽水素), 重水素, 三重水素は, 互いに何が異なるのか? // 教科書の章末問題 5.44-5.47 参照
- **20s2018:** 水素原子の考えを元に、他の原子でもシュレディンガー方程式を考えていった場合には、同じように角度部の方程式は剛体回転子の方程式と等しくなるのでしょうか? **M:** 教科書 8 章や参考書をよく読めばいいのでは? // 個別の事項を暗記するのではなく, なぜ角度部分の方程式がそうなるのかを理解することが重要.
- **20s2019**: 電気定数について前は真空の誘電率と言っていたとありましたが呼び方が変わったことに理由はあるのですか? **M**: 18s2038 参照
- **20s2020:** 剛体回転子の方程式を変数分離する際に、分離定数を  $m^2$  とおいて考えますが、ここで二乗を用いるのはなぜですか。 **M:** 本気か? // その先を自分で計算してみれば分かるのでは? 教科 書 2 章を復習する必要があるのでは?
- **20s2021:** 仮に水素原子ではなくヘリウム原子のエネルギーを求める際、1s 軌道に 2 つの電子が回って おりこの 2 つの電子スピンは反対方向を向いているが、求める際にスピン効果は関係あるのでしょうか? **M:** 教科書 p.237 や 8 章や参考書をよく読めばいいのでは?
- **20s2022:** 原点から電子までの距離が原子核の半径よりも小さい場合、波動関数の値は 0 になるのですか? **M:** なぜ波動関数の値がゼロになると考えられるのか? // フェルミ接触項 と言ってみるテスト:-)
- **20s2023:** 剛体回転子の波動関数の方程式と (6.10) の式が完全に同じになるということは水素原子は回転する二原子分子としても考えられるということですか? **M:** 何がどう "二原子分子" なのでしょうか? モデルという抽象化の意味を理解できないのか? // 自分で考えて分からないのはナゼか?
- **20s2024:** 本日の講義で習った水素原子の波動関数は水素が関係している化学反応にはどのように関与し、どのような影響を及ぼすのですか? **M:** 自分で色々と考えてみればいいのでは?
- **20s2025:** 水素原子よりも複雑な構造の原子で同様に考える場合、式はどの部分がどのように変化するのだろうか。もしくは全く異なるものになるのだろうか。 **M:** 20s2033 参照
- **20s2026:** 剛体回転子と式が同じになったのは、水素の原子モデルと剛体回転子のモデルが似たような形だからですか? **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // 20s2023 も参照
- **20s2027:**  $\theta$ 、 $\phi$ だけの関数が軌道の形を示し、rだけの関数が軌道の大きさを示しているのだと思いますが、波動関数になっているのは確率分布があることを示しているのですか? **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // 何がどう疑問なのかわからない.
- **20s2028:** 剛体回転子の方程式について、定数である $\beta$ に条件があったのですが、それは水素のシュレディンガー方程式をとく際に使われる $\beta$ にも条件がありますか?もしない場合は条件のある $\beta$ の含まれると条件のない $\beta$ の含まれる式が=になることを説明して欲しいです。 **M:** 剛体回転子における $\beta$ にどんな条件があったのか?
- **20s2029:** 電子は電磁波を放出しながらその分の運動エネルギーを失うのに軌道を保っていられるのですか。 **M:** 正気か? // それを解決するために量子力学が必要とされたのでは?
- **20s2030:** 水素原子が複雑な原子と言われるのはなぜですか?結合の仕方は2つの H が 1 個の電子を 互いに共有しあっているので、他の原子より簡単なのではないのか? **M:** 誰がどこでそのような ことを言ったのか? 言った人に聞けばいいのでは?

- **20s2031:** 今日の講義の水素原子について、プロトン核と粒子の一直線上の反対側に距離 r で同じ電荷量をもった何かを置いた場合ポテンシャルエネルギーがゼロになりハミルトン演算子が運動エネルギーに等しいと言う数式が成り立ちますか。 **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // その"何か"とは何か?電子の二倍は激しく動いていそうな何かを考える必要性があるのか?
- **20s2032:** 水素原子で、講義の中では核を原点に固定して考えていたが、核が原点に固定されている時といない時では最終的な値にどのような違いが現れてくるのか。エネルギー値に違いが出てくるのか、それとも違う部分に違いが現れてくるのか。 **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // 20s2017 も参照
- **20s2033:** 今日の授業では水素を用いて解いていましたが 1 番シンプルな例だと個人的には思っています。質問はここからなのですが電子の数が増えた場合この方程式はどのように変化してしまうのでしょうか **M:** 教科書 6 章末 p.237 や参考書をよく読めばいいのでは? // 多体問題 と言ってみるテスト
- **20s2034:** 水素原子のシュレーディンガー方程式を解くにあたってプロトンとの間の距離 r を変数としているが、球形のモデルで考えるのに r を定数とおいてはいけないのか **M:** 考えたければ自分で考えればいいのでは? 思想の自由はあるのだから. // モデルの意味を理解していない予感. // イケナイかどうかの判断基準は、神託なのか?
- **20s2035:** 水素原子オービタルの角度部分は剛体回転子の波動関数でもあるとあるが、水素原子において、調和振動子を用いた考え方はありますか? **M:** 私は知りません. 調べて分かったら, 教えてください. // そもそも何のどういう運動について調和振動子モデルを考えるのでしょうか? そもそも各モデルの意味を理解していない予感.
- **20s2036:** 教科書式  $(6 \cdot 16)$  の説明の「1 価の関数であるという要請から」という言葉の意味が分からなかったのですが、式から見て、「電子は原子核の周りを一周して元の場所に戻る」という条件を言っているという解釈でいいのでしょうか。また、もし水素イオンのシュレーディンガー方程式を考えるとしたら、ハミルトニアンはクーロンポテンシャルの項を失って運動エネルギーのみの式になるのですか。 **M:** 自分で判断できないのはナゼか? コトバの意味が分からなければ、辞書を見ればいいのでは? // 自分で判断できないのはナゼか? それは何のエネルギーを表すハミルトニアンか?
- **20s2037:** 水素原子のシュレディンガー方程式は厳密に解けるとのことですが、厳密に解けるとは具体的にどういうことかよく分かりませんでした。水素の原子核の動きなども考慮しても厳密に解けるということですか? M: ここで用いられている"厳密"は、"exact"の訳語で専門用語と言っていい。厳密に解くとは、数学の解析学的に方程式を解くという意味。 // 例えば方程式  $x^2=2$  の解として 1.41421356... は、何桁目まで行っても厳密解ではなく、厳密解は  $\sqrt{2}$ .
- **20s2038:** 剛体回転子の方程式と一致する解法の他はないのですか。 **M:** あるかもしれないが, 私は 知らない. // 解析解がきれいに求まっているのに, あえて別の解法を探す必要があるのだろうか?
- **20s2039:** 水素原子以外の原子についてもシュレーディンガー方程式で解けるのでしょうか? **M:** もしも,元素ごと系ごとに,全く別な方程式が必要だとしたら,それって科学なのか? // 種々多様な万物の背後に,共通の法則が潜んでいると考えるのが科学では?なるべく少数の法則で,なるべく多数の現象を記述・説明しようとするのが科学では?18s2014も参照
- **20s2040**: 変数分離するのに都合が良かったため極座標形を用いたとのことですが今後もし極座標形ではない変数分離するのに都合の良い形が発見された場合利用される可能性はありますか。 **M**: 既に十分に検討されている既知の問題について,新しい解法に意味があるだろうか? 得られる答えは,もうわかっているのだし. // そもそも新しい座標系や解法が発見される余地があるだろうか?

- 20s2041: 水素原子モデルではなく多電子原子を考える際に、電子同士の相互作用を近似ではなく正確に考慮しシュレディンガー方程式に取り入れられないのか。 M: 誤解の予感. 電子間の相互作用を近似で方程式に取り入れると、誰が言ったのか? // 20s2033 参照
- **20s2042:** 極座標系を使うのは、水素原子モデルがプロトンの周りを電子が球状に回転している形をしているため、考えやすいということでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // ちなみに"球状に回転"とは、どんな運動のことだろうか?
- **20s2043:** 水素における原子核とそのまわりにある電子はそれぞれ質量を持つために、万有引力もクーロンポテンシャルとともに働くと思ったのだが、万有引力は考慮する必要はあるのか? **M**: エネルギーの大きさを具体的に計算してみればわかるのでは?
- **20s2044:** ハミルトン演算子を極座標系で表したときに、どうしてあの形になるのかが分かりません。 x,y,z 座標をそれぞれ r,  $\theta$ ,  $\phi$  で表した後に、どうすればいいのでしょうか。 **M:** 教科書や参考 書を読んで勉強すればいいのでは? もしかして数学力が不足している? // 連鎖律 (多変数関数の合成関数の微分) を復習する必要があるのでは? 反応物理化学でもよく使っているはずでは?
- 20s2045: 水素原子が最もシンプル構造で、他の原子の電子についてはそれを拡張して考えることができる、ということから水素に注目していることは分かるのですが、電子の動きが特殊なもの、例えば金属の自由電子などは、また違ったモデルを考えるのでしょうか。 M: 何がどう特殊なのか? // 電子が、その時々で自分の置かれている状況を認識して、特殊な動きをするというのか?
- **20s2046:** 原点に核を固定して考えるのは簡単にするためだと思うのですが、固定しなかった場合、解に大きな違いはあるのですか? **M:** 20s2032 参照
- 20s2047: 等式を解く際にラプラス演算子の式を代入することで計算していましたが、今回のラプラス演算子の式はデカルト座標系の場合のみであると仰っていましたが、そうではない場合はどのような式を導入するのですか? M: "等式を解く", "ラプラス演算子の式を代入することで計算して", "デカルト座標系の場合のみ", "式を導入する" などなど, 全く意味不明. 根本的に勘違いしている予感.
- 20s2048: 極座標上の原点における電子の波動関数が有限を値を持つとすれば、それは貫入の性質なのだろうか? M: この質問では、"電子が貫入の性質を持つ \*から\*, 波動関数が極座標の原点で有限の値を持つ"という因果関係の是非が問われている。論理構成に非常に違和感がある。// すなわち、"方程式の解かどうかとは関係なく、現実の電子の性質によって波動関数が決定される"という論理がまかり通ると考えているらしい。
- **20s2049:** 剛体回転子では r は一定なので、R(r) は考えず  $\theta$  と  $\phi$  すなはち  $\Theta$  ( $\theta$ ) と  $\Phi$  ( $\phi$ ) だけ考えれば良いのではないのですか。 **M:** 質問の意図がわからない. 教科書 p.189 を見れば, R(r) を考えてなどいないが??
- **20s2050:** 波動関数を二乗はその点で電子を見つける確率になりますが、二乗する前のプラスやマイナスの符号が違うことは何か物理的な意味があるのでしょうか? **M:** 本気か? 教科書 4 章や 3 章をよくよく復習する必要があるのでは? // ある波動関数と,その定数倍だけ異なる波動関数とで,何か物理的な意味の違いはあるのか?
- **20s2051:** 核を原点に固定している場合、水素原子オービタルの角度部分は剛体回転子の波動関数であるが、核を固定しない場合も一致するのか? **M**: 20s2032 参照
- **20s2052:** 水素原子はプロトンと一つの電子でシュレディンガー方程式をたてましたが、ヘリウム原子を考える場合、二つの電子間のシュレディンガー方程式の引数は同じように $\phi$  ( $\mathbf{r}$ ,  $\theta$ ,  $\phi$ ) で考えますか? **M:** 意味不明 // "二つの電子 \*間\* のシュレーディンガー方程式" とは、何のことか?