17s2007: Pl(x) (l は下付き文字) が直交系であり、なおかつ一般的な規格化も行えるため、クロネッカーのデルタが用いることができると考えたのですが、これは波動関数を二乗にすることと関係があったりするのでしょうか。 **M:** 一体全体, どうしてそういう論理になるのだろうか? どんな関係を想定しているのだろうか? 論理不明.

17s2045: 0 の階乗が 1 で定義されただけのものならば暗記するしかないのではないのでしょうか？ **M:** なぜそう定義するのか, 理解する必要があるのでは? // そもそも定義だけなら勝手にすればいいのだが, 普通はほかの知識との整合性があるように定義した方が都合がいいし使い勝手がいい. わざわざ不都合や矛盾を含むように定義する必然性がないし, そんなことをしたら役に立たなくなる.

17s2051: レポートの球面調和関数のプロットは、Excel などを使っても良いのでしょうか？ **M:** それをここで聞くのはナゼ? // 何点ねらいの質問ですか?

18s2003: 球面調和関数をルジャンドル倍関数の関係式として (6.30) 式にまとめる過程についての質問です。Θ には l と m の成分があって Θ l,—m—(θ) であるのに対し、Φ には m の成分しか無く Φ m(φ) となるのはなぜですか？ **M:** 角度部分の方程式を解いていく論理の過程をよーーーく考えれば分かるのでは?

18s2014: クロネッカーの δ についての式はありますか。 **M:** どんな式を期待したのだろうか? // クロネッカーのデルタ記号の意味を, 微妙に誤解している予感.

18s2029: 球面調和関数から電子のオービタルの形が分かり、さらに動径方程式を合わせた波動関数から各オービタルにおける電子の存在確率がわかりますが、電子が結合に使われたり、原子がカチオンになるときに電子が飛び出す場合は存在確率の高いところにいる電子から積極的に使われるのか、それとも存在確率の高さに比例して電子の使われやすい場所が決まるのか、また、ある原子が電子を受け取ってアニオンになる場合、受け取った電子はオービタル内の電子の存在確率が高いところに入るのか、電子密度の低い場所に入るのか。 **M:** 化学についての既知 (既習) の知識との整合性を全く考えないのだろうか? 中性原子がカチオンになる現象において重要な概念は何か? このとき, どの電子が放出されるのか? 高校化学レベルでどのように学んできたのか?

18s2038: ルジャンドル倍関数の関係式において n も l 同様に m が n 以下という条件が必要であるか。 **M:** どの関係式の話か? 文字が l であることに意味があるのか?

18s2045: 1) ルジャンドル多項式が偶奇性を持つことで、どのように応用が可能でしょうか。 // 2) ルジャンドル陪関数が、たとえば P1,2(x)=3cos θ sin θ について、私は 3/2sin2 θ と表記する (その方が関数周期がわかりやすいと考えるため) が、授業と教科書では角度を揃える方向で纏めている。このようにする理由はあるのか。 **M:** 20s2032 参照 // どのような意味があるのか, 自分でよくよく考えればいいのでは? 教科書や参考書も良く読めばいいのでは?

18s2046: ルジャンドル多項式の偶奇性が l の偶奇と一致するがこれは計算をした結果一致したのか、それともそうなるように定義した上で一致しているのか。 **M:** 導出過程を理解すれば分かるのでは? // 物理数学の参考書を参照するように講義で説明したのに理解されていなくて残念.

19s2005: ルジャンドル多項式の性質として偶奇生がありましたが、これは計算する上で影響を与えますか **M:** 20s2032 参照

19s2007: 前回の φ の式と今回のルジャンドル方程式をどう計算したら球面調和関数のような形になるのですか。 **M:** 本気か? 教科書 (6.11) 式の周辺や参考書をよく読めばいいのでは?

19s2011: 球面調和関数は水素原子以外の原子に応用することは出来るのでしょうか？このとき、他の条件は付け加えるべきなのでしょうか？ **M:** 本気か? // 無機化学や有機化学でも出てきた 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, ... といった原子オービタルは, 一体全体何だと思っているのか?

19s2017: ルジャンドル多項式の偶奇性はどのように活かすことができますか？ **M:** 20s2032 参照

19s2029: 本日の講義で、ルジャンドル方程式の性質に解が偶奇性を持ち, 直交するとあったが、これによってどのようなことがわかるのか？また、何に使われているのか？ **M:** 20s2032 参照

19s2031: 僕は個人的に 0!＝0 は物理的に無意味であるため、0!＝1 と定義したのではないかと思いますが、先生はどう考えていますか？ **M:** 本気か? // そもそも 0!＝0 が物理的に無意味とはどういうことか? // 数の構造・論理が物理現象に依存しているとはどういうことか? // 17s2045 も参照

19s2045: ルジャンドル多項式が直交系の性質をもつ事は化学的にどのような事に役立っているのですか？ **M:** 20s2032 参照

19s2046: 球面調和関数の方程式はどのように導出されるのですか？ **M:** 教科書や参考書をよく読めばいいのでは? // 教科書の論理の流れを全く理解できていない??

19s2047: 球面調和関数に関して剛体回転子であることは分かるが、なぜ関数 Y に $(2\pi)^{-1}$ ではなくて $(2\pi)^{-1/2}$ を掛けているのか。 **M:** 20s2049 参照

19s2049: 良い質問をするためには、どのような学習が必要か？ **M:** 独創性や創造性が期待されるところで, マニュアルを求めるとは?

19s2051: ルジャンドル倍関数が直行しなければならないのはなぜですか？ **M:** ルジャンドル方程式を固有値方程式と見ると......

19s2053: 動径関数のグラフで負の部分を取った所は、電子の数はどうなっているのでしょうか？波の状態が負になっているだけで振幅によって電子の存在確率は決まるのでしょうか？ **M:** 本気か? 正気か? // 教科書や参考書をよく読んで, 波動関数の意味をよーーーく復習する必要があるのでは?

20s2001: ラージ Φ が l に依存しないのはどうしてなのでしょうか？ **M:** 変数分離の過程をよく読んで考えればいいのでは?

20s2002: ルジャンドル陪関数は m ≠ 0 のときの解であるのに、教科書の表 6.2 で m=0 の場合のルジャンドル陪関数が載っているのはなぜか。 **M:** 本気か? 両者は排他的なものなのか? 統合化とか一般化とかを, 考えないのか? 考えてはいけないのか? // どうして知識をバラバラのままにしておくのか?

20s2003: 混成軌道の形は、球面調和関数の他にどのような考え方や知識を使えば求めることができますか？ **M:** 20s2020 参照

20s2004: θ の範囲が 0 から 2 π でなく π なのは何故ですか **M:** 本気か? // θ がどこの角度なのか, よく考えてみれば分かるのでは?

20s2005: 球面調和関数は水素以外の原子でも成り立ちますか？その場合は換算質量を用いるのですか？ **M:** 19s2011 参照 // 換算質量は, どういうときに何のために用いられるのか?

20s2006: ルジャンドル多項式は m ＝0 のときしか出てこないと書いているのに m が 0 じゃないときに用いられるのはなぜですか？ **M:** 20s2002 参照

20s2007: even 偶数と odd 奇数とは何ですか **M:** 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?

20s2008: 2s 軌道と 2pz 軌道の三次元モデルを重ねると見た目は重なっているのに、これら 2 つの波動関数の重なり積分は 0 で相互作用を及ぼさないのはなぜですか。 // 陽子は 3 つのクォークから成り立っているようですが、クォークの形は球ですか。もし球だとしてその 3 つを組み合わせても球の形にはならないと思われるので、陽子は球ではないということになると思います。その 3 つのクォークを内面に含む球として陽子を定義して水素型原子のシュレディンガー方程式を解いているのですか。もしそうだとしたら球面内のクォークの入っていない部分はただの空気ということになるのですか。フェルミ接触相互作用というのを調べたら s 軌道の電子は原子核内部で存在確率が 0 ではないと出てきたのですが、クォークの入っていない隙間に電子が入り込む可能性があるということですか。 **M:** 二つの波動関数が同一の空間を占めていることと, それらの間の重なり積分がある (ゼロでない) こととは, 全く別のはなし. てゆーか, そもそも波動関数は全空間に広がっているわけだが...... // 水素原子のシュレーディンガー方程式において水素原子核をどう考えていたか, クォークの隙間に空気があるとか, ... // もしも水素原子核が三つのクォークに相当する球を内部に含む球とするならば, 球の内部のどこにクォークが存在するかによって, 球体に電荷の偏りが存在することになるのでは?

20s2009: ルジャンドル陪関数はルジャンドル多項式を用いて定義されているとありますが、ルジャンドル多項式の性質はルジャンドル陪関数にも当てはまりますか？ **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは?

20s2011: 陪関数はどのような意味を持つ関数であるのか。 **M:** 数学的関数にそれ自身の固有な物理的意味はない. 適用される物理現象に応じてそれぞれ意味を持つ.

20s2012: 化学結合をする際に化学結合が起こりやすい軌道を球面調和関数から求めることはできますか？ **M:** 既習の化学についての知識を利用するつもりはないのだろうか? 高校化学レベルでは, 化学結合にはどこの電子が使用されることになるのか? // 19s2011 も参照

20s2013+: 球面調和関数の位相の表し方にはマッカーリ流やコンドン・ショートレー流などがあるみたいですが、どれが一番表しやすいのでしょうか？ **M:** 表記の二つの流儀の何が異なるのか, 調べてみてはいかがか.

20s2015: 我々が最終的に求めたいのは水素原子の波動関数 Ψ で、今回の講義までで $\Phi(\phi)$ と $\Theta(\theta)$ が分かったわけだが、わざわざ球面調和関数 $Y(\theta, \phi)$ として $\Phi(\phi)$ と $\Theta(\theta)$ をまとめなくても、あとは動径方程式 R(r) を求めて R と Θ と Φ を掛ければ Ψ が分かると思うのだが、Φ と Θ を球面調和関数 Y でまとめた理由は何か？まあ、球面調和関数 Y が何か重要な意味を持っているからそうしたのだろうが.... だとすると、球面調和関数はどんな重要な意味を持っているのか？まあ、それも今回課されたレポートをやってみれば分かることなのかもしれないが.... **M:** 教科書や参考書をよく読んで考えればいいのでは? // 球面調和関数は教科書では何に用いられているか?

20s2016: これまでは関数の絶対値の 2 乗を用いて規格化を行っていましたが、今回ルジャンドル多項式については単純に関数の 2 乗を用いて規格化を行っています。これは、ルジャンドル多項式が虚数項をもたないためですか？ **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 二通りの計算をやってみて比べてば分かるのでは?

20s2017: ルジャンドル多項式の解が、l が偶数のときは偶関数、奇数のときは奇関数になることは、水素原子のオービタルに具体的にどのように影響しますか？ **M:** 20s2032 参照

20s2018: ルジャンドル方程式ででてくる文字で、水素型原子について考えるときに、どのような場合で文字の値が変化するのでしょうか。 **M:** 意味不明. どの文字の話か? どんな値の話か?

20s2019: ルジャンドル多項式は偶奇性がありますが偶奇性があることに理由はありますか、たまたま偶奇性ができたのでしょうか **M:** 20s2032 参照

20s2020: 球面調和関数は水素型原子の軌道だけでなく、他原子の s 軌道や p 軌道、d 軌道などを示すことができますが、sp 混成軌道などの複雑な軌道を示すことはできますか。 **M:** 教科書 10 章や参考書をよく読んで勉強すれば水素原子の重要性をより理解できるのでは?

20s2021: なぜ l ≠ n の時、ルジャンドル多項式は直交系とされているのか？ **M:** 微妙に勘違いの予感. // “直交系” の意味を確認する必要があるのでは?

20s2022: ルジャンドル多項式とルジャンドル陪関数で求められるものは、物理的な意味が違うのでしょうか？ **M:** 両者は互いに何が異なるのか? 両者は排他的なのか?

20s2023: 6.28 式でクロネッカーのデルタを使うのは l=m の時にそれがなかったら 0 にならないからですか？ **M:** 微妙に勘違いの予感. // $l = m$ の時に (6.28) 式はゼロになるのか?

20s2024: 本日の講義ではルジャンドル多項式について教科書 p.212 のように直行することや parity があることを教わりましたが、これからは化学にどのように役立つのですか？ **M:** 20s2032 参照

20s2025: クロネッカーのデルタについて、以前箱の中の粒子の波動関数の規格化直行系の条件を表現する時 (p139) に用いて、今回も $Y(\theta, \phi)$ の規格化直行系を表現する際に用いたが、このような条件のときに有用な記号として使われているのか。もしくはたまたま規格化直行系に使われていただけで他にも多くの場合に使うことができるのか。 **M:** 物理数学の参考書を読んで考えれば分かるのでは?

20s2026: ルジャンドルの多項式の母関数が分かるとどんなメリットがあるのか。 **M:** 母関数はどんなところでどのように使われ

ているか?

20s2027: ルジャンドル多項式とエルミート多項式に関連はありますか？ **M:** 物理数学の参考書をよく読んで考えればいいのでは? // 直交多項式と言ってみるテスト

20s2028: X = cos θ とおいていますが、これを X = sin θ とおくとどのような変化が怒るのでしょうか？そもそも成り立ちませんか？ **M:** 別に普通では? // 自分で置き換えて計算してみれば分かるのでは?

20s2030: 3 次元における球面調和関数についての完全直交性は、1 次元、2 次元についても同じことが言えるのか？ **M:** 本気か? // 一次元や二次元の球面調和関数とは?

20s2031: ルジャンドル陪関数では m の値はマイナスにならなかったのにも関わらず、球面調和関数では m の値がマイナスになるのは物理的現象にどのような影響があるのですか。 **M:** 20s2011 のコメント参照

20s2032: ルジャンドル多項式は直交性と偶奇性をもつと先生は講義の中でおっしゃっていましたが、このことは化学にどのように応用されるのですか。私は、波動関数が重なるということが化学に応用できるのではないかと考えたのですが、波動関数が重なるということから何が分かるのですか。 **M:** 様々なところで出てくる重なり積分の重要性について, あるいは量子化学のあらゆる場面で登場する各種の積分の計算結果がゼロかどうかが運命の分かれ道であることについて, 教科書や参考書をよく読んで勉強すれば, 偶奇性の重要性が理解できるのでは?

20s2034: ルジャンドル多項式が偶関数のときと奇関数のときで物理的意味はどのように異なるのか。 **M:** 20s2032 参照

20s2035: 直交しているとありますが、直交することでどのような情報を得ることが出来ますか？同じ状態にはならないという意味なのですか？ **M:** 20s2011 のコメント参照

20s2036: ルジャンドル多項式の偶奇性について教科書中でも授業中でも取り上げられていましたが、偶関数か奇関数かによって何がわかるのですか。 **M:** 20s2032 参照

20s2038: 球面調和関数だと言うのはどの点から分かるのでしょうか。 **M:** 本気か? // 球面調和関数の定義は?

20s2040: 元素番号の大きい人工で造られた原子が長時間形を保つことが出来ないのは球面調和関数の条件を満たすことが出来なくなるからですか。 **M:** 本気か? // “球面調和関数の条件” とは, 一体全体何を想定しているのか?

20s2041: 球面調和方程式が球の表面について規格化直行しているとは何を示しているのか。ルジャンドル方程式は固有値方程式なのか。 **M:** 積分の式をよく見て意味を考えればいいのでは? // 後半について, 自分で判断できないのはナゼか?

20s2042: ルジャンドル陪関数を、表 6.2 にて cos θ、sin θ で表していますが、なぜ l=1、—m—=0 のとき x=cos θ と表すことができるのでしょうか。 **M:** 本気か? // 教科書 p.211 をよく読めばいいのでは?

20s2043: ルジャンドル方程式の解が偶奇性を持ち、直交するとあったのだが、これによってどのようなことが化学的に理解することができ役に立つのか？ **M:** 20s2032 参照

20s2044: 無機化学の授業で主量子数や方位量子数から、軌道を決定する方法を学んだのですが、球面調和関数でも ℓ や m を決定すると同じような軌道を描くということでしょうか。 **M:** 軌道を決定するとはどういうことか? // 教科書 6 章や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは?

20s2046: 球面調和関数は電子軌道を表していますが、結合性軌道や反結合性軌道も表すことができるのですか？ **M:** 教科書 9 章や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは?

20s2047: クロネッカーのデルタが、式の場合分けを不要にする記号のようなものとありましたが、解をだす時にはクロネッカーのデルタはかかれていませんでした。クロネッカーのデルタは計算途中のどこでなくなるのですか？ **M:** 計算過程で文字式の文字に数値を代入したら, 文字がなくなるのは当然では?

20s2048: 解が 0、すなわち二乗しても 0 となることはそこに粒子が存在しないという物理的意味はもたないのか？ (6・30) を (6・6) に代入し、(6・4) を使った R(r) に対する方程式を用いれば、シャボン玉のように原点からの距離を変える粒子 (風などの外的要因あり) について求められるのか？ **M:** 前半について, 自分で判断できないのはナゼか? // “シャボン玉のように原点からの距離を変える粒子” とは, 何のことか? 粒子＝シャボン玉 という意味か? 微妙に勘違いの予感.

20s2049: 球面調和関数に関して剛体回転子であることは分かるが、なぜ関数 Y に $(2\pi)^{-1}$ ではなくて $(2\pi)^{-1/2}$ を掛けているのか。 **M:** 意味不明. どこに書いてある式の話か?

20s2050: 反水素も光を吸収するということは、反水素の性質などもシュレディンガー方程式を用いて導くことができるのでしょうか？ **M:** 水素と反水素との違いは何か? シュレーディンガー方程式によって記述できない粒子はあるのだろうか?

20s2051: 式 (6・25) はどのように導かれるのか？ **M:** “マッカーリ 化学数学” の 直交多項式の章を読んで勉強すれば分かるのでは?

20s2052: （６・２７）式から（６・２８）の式を導出するためになぜ微分体積要素を使うのですか？ **M:** 教科書をよく読んで考えればいいのでは? // その式を導出するために, 微分体積要素を使ってはいない.