

- 17s2007:** 今回水素原子のオービタルの動径方程式ということでしたが、ラゲールの陪多項式は二原子分子や多原子分子にも応用できるのでしょうか。また、これは前回の質問についてなのですが、授業の板書や教科書をもう一度確認してみたところ、先生のおっしゃるとおり勘違いをしていることがわかったので、改めて勉強したいと思います。 M: 教科書や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは? // ラゲールの (陪) 関数はラゲールの (陪) 方程式の解である。これはルジャンドル関数がルジャンドル方程式の解であったことと同じ。すなわち二原子分子や多原子分子の問題がラゲールの方程式で記述されるのであれば、ラゲールの関数がその解であることになる。
- 18s2003:** 球面調和関数の符号の取り方について、コンドン・ショートレイ流の紹介がありましたが、この流儀はどのような場面において有用なのでしょうか? 符号が反転しても物理的な意味に違いはないと思いますが、計算過程などにおいて何かしらの不都合が生じるために用意されているということですか? M: 原子オービタルの実数化の場面以外にも、昇降演算子を作用させたときの挙動 (公式) や球面調和関数の複素共役にも違いが出てくる。
- 18s2014:** 今回の講義で求めた電子軌道は 1 電子のみの波動関数を示しているのですか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // どんな系を対象として、シュレーディンガー方程式はどうなっていたか?
- 18s2018:** 教科書の動径波動関数が大雑把だと言っていましたが、どうしてそうってしまったのでしょうか。 M: 著者に聞けばいいのでは? :-p
- 18s2029:** 電子の存在確率を求める式では動径部分 r にはよりますが角度部分によらないで求められるのはなぜですか? M: 自分で判断できないのはなぜか? // 電子の、どんな存在確率を問題としていたか?
- 18s2038:** 軌道同士が相互作用した場合、動径波動関数の確率密度は計算的に求めることはできるか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 確率密度と波動関数との関係は?
- 18s2045:** 1) 実関数の形をとるために、複素関数の和と差をとるということについて、意図的な辻褃合わせのようにも感じるが、辻褃合わせとそうでないものの違いは一体どこなのでしょう。 // 2) 経験則的に無機化学や有機化学ではオービタルの形を学習した (講義でも触れた通り) だと思うが、混成軌道についてはどのような理解を物理化学的解釈に基づくことができるのか。 M: なにがどう “つじつま合わせ” なのか? 何と何のつじつまを合わせているのか? // 20s2034 参照
- 18s2046:** 縮退している軌道が分裂し縮退がとける現象 (例えば、ヤーンテラー効果) は全てゼーマン効果に基づいて起こるのか。 M: 本気か? // 異なる現象だから異なる人名に由来する名称がついているのでは?
- 19s2005:** 電子密度が最大となる r を求めることの意味は何ですか M: 別に。最大となる所は最大となる所でしょ。それ以上でもそれ以下でもない。 // 教科書や参考書をよく読んで勉強すればいいのでは? // 意味は自分で色々考えればいいのでは? 自分独自の意味を見つければいいのでは?
- 19s2007:** どうして水素原子オービタルの動径方程式で受け入れられる波動関数を得る E_n が一価連続有限でなければいけないのですか M: 滅茶苦茶な勘違いの予感。 // 固有値が一価有限連続とは、どういうつもりか?
- 19s2011:** 確率密度の平均値と確率密度の最大値にはどのような活用法があるのでしょうか? M: 19s2005 参照
- 19s2017:** 今回 3 つの量子数に依存するとなりましたが、今回の 3 つの他にスピン量子数がありますがスピン量子数に依存することはないのですか? M: スピンについて、よく勉強すれば分かるのでは? // そもそもスピンという自由度は何なのか?
- 19s2022:** 球対称ではない s オービタルも存在しうのでしょうか。 M: 本気か? 自分で判断できないのはなぜか? // s オービタルに対する 1 (方位量子数) は? 球面調和関数 (の角度依存性) は?
- 19s2026:** 水素原子オービタルの確率等高線地図によって水素原子の軌道の形が確率的に示されていますが、この軌道上に 1 つの電子が存在するとしたとき、この電子の運動の向きや運動量については分からないということですか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 量子力学的粒子についての観測可能は物理量 (observable) は、その粒子の状態をあらわす波動関数 (オービタル) を用いてどのようにして求められるか?
- 19s2029:** 電子がボーア軌道に束縛されていないのに、ボーアモデルと同じ形になるのか? M: 意味不明。何の形の話か?
- 19s2031:** ゼーマン効果は世の中でどのように利用されていますか? M: 教科書 14 章や参考書をよく読めば分かるのでは? // 20s2002 参照
- 19s2040:** ゼーマン効果でエネルギーの縮退が解けて異なるエネルギーを持つとき、その差は何ですか。 M: 19s2031 のコメント参照
- 19s2045:** ゼーマン効果は電子のスピン他に、中性子や陽子の核スピンにも適用できるのか? M: 19s2031 参照
- 19s2047:** ゼーマン効果で縮退していた 2p を磁場があるところにおくと縮退が解けたのですが、縮退が解けたものを磁場のないところにおき直すと縮退し直すのですか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // 系の状態は、その状態に至る経路によって違うのか?
- 19s2051:** すべての電子の存在確率は波動関数で表わされるのでしょうか? M: 正気か? // もし、存在確率を波動関数で表すことができない特別な電子があったとすると、その特別な電子は普通の電子と何が違うのだろうか? 特別な電子の存在確率は何で表されるのだろうか? (それとも、そんな特別な電子の存在確率は無い (?) :-p)
- 19s2053:** ボーア半径とシュレーディンガー方程式での 1s 電子の存在確率が最大になる半径が一致していますが、これは水素原子のみに現れるものですか? だとすれば、なぜ他の原子は一致しないのですか? M: 他の原子の 1s 電子の存在確率が最大になる半径もボーア半径になると期待されるのはなぜか? 他の原子の 1s 電子についてのシュレーディンガー方程式は、水素原子のそれと同じなのか? どこが違うだろうか?
- 20s2001:** ラゲールの陪多項式はどのようにすれば求められるのでしょうか? M: 自分で調べようとしませんか? // 理工系の数学 A の教科書や物理数学についての参考書をよく読めばいいのでは? // $L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$, $L_n^a(x) = \frac{d^a}{dx^a} L_n(x)$ と書いてみるテスト

- 20s2002:** 磁場があるときにゼーマン効果が縮退が解けるのはなぜか。 **M:** 教科書 p.226 に記載されているように、問題 6.43-問題 6.47 を参照しても理解できないということか? // 19s2031 も参照
- 20s2003*:** 磁場中の水素原子のエネルギーは m に依存しているとありますが、磁場があるかないかで反応が起こりやすくなったり起こりにくくなったりすることはあるのですか? **M:** 化学反応に磁場効果が見られることはあります。しかし存在するとしても非常に小さい効果だったと思います。
- 20s2004:** ゼーマン効果において、分裂したエネルギー準位それぞれが非常に接近した状態ならば縮退している状態に近似できないでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか? // 近似できるかどうか、誰が判断するのか? “近い、似ている” に客観的実実が存在するのか? (神が近似の可否を判断するのか?)
- 20s2005:** 水素原子に $3s$ 軌道や $3p$, $3d$ 軌道は存在するのですか? **M:** 本気か? 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の解はどうなっていたか? 水素原子の輝線スペクトル (教科書 1 章) で観測される輝線は、どの状態間の遷移に相当するか?
- 20s2006:** なぜ L_x と L_z は同一方向を向けないのでしょうか? **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // あるベクトルの大きさと、その成分の一つ (例えば z 成分) が同じ大きさの時、そのベクトルはどちらを向いているか?
- 20s2007:** ラゲールの陪多項式はシュレーディンガー方程式の動径方向の解以外に何に用いられるのか **M:** 私は知りません、調べて分かったら教えてください
- 20s2008:** 電子を区別することはできないと本で見ました。しかしパウリの排他原理では 4 つの量子数すべてが同じになることはないとされています。同じ状態のものがないということは区別できているように感じられますが、区別ができないとはどういう意味ですか。// 電子が核からどのくらい離れたら、 H が H^+ になったと言えますか。不確定性原理から電子の位置ははっきりと決められないので、原子であるかとイオンであるかの境界もはっきりとは決められませんか。 **M:** 前半について: どういう状況にある何をどう区別するのか、緻密な議論ができていない。(参照した書籍の記述の不備か、暗黙の了解を知らないか) // 教科書 p.310 にもある通り、パウリの排他律の話は“同じ原子の中の任意の二つの電子”の話であって、これら是指摘の通り 4 つの量子数を用いて状態を区別できる。また区別できないことについては、同ページの (8.32) と (8.33) のように電子を交換しても同じ状態であること、すなわち交換前後で区別がつかない (または、交換したのかしていないのか分からない) ということ。あるいは、同じ状態にある 2 つの電子は区別できない。//// 後半について: 本気か? // 自由空間に孤立して水素原子が存在している場合、電子と核との間の引力は、どのくらい離れたら、なくなると言えるか? 実際の実験系の分子中に存在している水素原子の場合は、どうか?
- 20s2009:** ゼーマン効果はなぜ起こるのですか? **M:** 20s2002 参照
- 20s2011:** p.228 の本文では完全な水素原子波動関数は三つの変数 (r, θ, ϕ) に依存しているとありますが、水素に類似した原子や他の原子では依存する変数は異なるのですか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // その 3 つの変数は、何を表しているのか? 波動関数は、何を変数として持つ関数か? 教科書 4 章や参考書をよく読んで復習する必要があるのでは?
- 20s2012:** $R(r)$ の規格化を参考書を見ながら順に解いていくと、 N の値が $+$ になりそれを $R(r)$ の式に代入すると最終的な答えが一だけになっている。なぜ $-$ が採用されているのか。 **M:** 意味不明。 N とは何か? // ある波動関数の定数倍だけ異なる関数は、物理的にどんな意味があるか? // 作図してみれば見当がつくのでは?
- 20s2013:** ラゲールの倍多項式はどのような計算で求められますか? **M:** 20s2001 参照
- 20s2015:** 教科書 p227 図 6 磁 2 のように磁場中で縮退が 3 つに分裂することで、 $2p$ 軌道とは違った軌道の形になるのか。 sp や sp^2 や sp^3 混成軌道では p 軌道よりもエネルギー準位が低くて、軌道の形はひょうたんの片方が大きく、もう片方が小さいような形になっていたが、これと似たような形になるのか。 **M:** 磁場の効果を含めたハミルトニアン固有関数は、もちろん元の原子オービタル関数そのままではない。
- 20s2016:** オービタルは n, l, m の 3 つの量子数に依存するとのことですが、スピン量子数が何らかの形でオービタルに影響を及ぼすということはないのですか? **M:** 本気か? 教科書に書いてある説明が理解できないのか? // 19s2017 参照
- 20s2017:** 動径関数と角度関数を考えて水素原子オービタルの確率密度を図 6.5 で作図しているが、他の原子のオービタルとは何が異なる点があるのか? **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか? // 他の原子ではシュレーディンガー方程式は水素原子のそれと同じか?
- 20s2018:** 磁気量子数について、説明した際に、ゼーマン効果が出てきましたが、磁場があるという状態は元素がどのような状態の時なのでしょう。 **M:** 日本語が通じないようで、残念。// それとも磁場がわからないならば、物理学の基礎 (電磁気学) を復習する必要があるのでは?
- 20s2019:** ラゲールの陪多項式を調べると $Ln(x)$ の形しか出てこなかったのですが授業で扱ったラゲールの多項式はどのように求められるのでしょうか **M:** 調べ方が下手なのでは? // 20s2001 参照
- 20s2020:** エネルギーがボーア模型で得られたものと一致するのは何故ですか。 **M:** ボーア模型が真理の一端を示している (?)
- 20s2022:** エネルギー順位は磁場があると縮退していたものが分裂するとありましたが、磁場の強さなどによってエネルギー順位が全てバラバラになったり、一部縮退したものが残るなどの変化はないのでしょうか。 **M:** 19s2031 参照
- 20s2023:** 先生が書いた (6.47) 式には z がありますが教科書にはありませんでした。この z はなんですか。 **M:** なぜその場で質問しなかったのでしょうか? // 表 6.5 や 表 6.6 参照 // 水素類似原子の話は、講義でもしたつもりですが、伝わってなくて残念。参考書も読んでいるのだろうか?
- 20s2024:** p オービタルでは図 6・4 からわかる通り 3 つは角度が違っただけでどれも同じ形をしています。 d オービタルにおいてはなぜ d_{z^2} のみ角度だけでなく、形も違ってくるのでしょうか? **M:** d_{z^2} と $d_{x^2-y^2}$ は O_h 点群では同じ既約表現 e_g に属していることに注意。// $3z^2 - 1 = 3z^2 - (x^2 + y^2 + z^2) = 2z^2 - (x^2 + y^2) = (z^2 - x^2) + (z^2 - y^2)$
- 20s2025:** 原子から放出される電磁波のスペクトルは磁場があると複数のスペクトルに分裂し、このことをゼーマン効果というのが、磁

場ではなく電場中におくと、どうなるのだろうか。 **M:** シュタルク効果 と言ってみるテスト

20s2026: ゼーマン効果についてなのですが、半導体に磁場をかけると、電子軌道が分離すると知ったのですがそれはなぜですか
M: 19s2031 参照

20s2027: ゼーマン効果でエネルギー準位が出てきましたが、水素原子も電子が遷移するのですか？ **M:** 本気か？ // 水素原子で遷移が起これないとする根拠は何か？ 教科書 1 章や参考書も良く読めばいいのでは？ // 20s2005 も参照

20s2028: 3 つの量子数について、電子の角運動量などの式には虚数が入ってきたりと複雑なのに、なぜ量子数 n, l, m に当てはまる数字は自然数や、整数などの切りのよい数字ばかりなのでしょう？ **M:** シュレーディンガー方程式を解く過程をよく検討してみれば分かるのでは？ 教科書や講義では示していませんので、自分で参考書を読んで勉強してください。

20s2030: d オービタルの 1 つに $d(3z^2-1)$ とありましたが、 $d(z^2)$ としなかったのはなにか意図があるのですか？ **M:** 球面調和関数の角度部分は $3\cos^2\theta - 1$ だが？

20s2031: sp 混成軌道のような物理的現象ではどのような波動関数になり、 n, l, m の値がどのような関係になるのか。今回の講義で 6.47 式などに Z という値があり、教科書にはないのはなぜですか。数字も少し違ったと思いますが、もしかしたら画質が悪くて見間違いかもしれません。 **M:** 20s2034 参照 // 後半については 20s2023 参照

20s2032: ゼーマン効果に関する質問です。 $n=2$ の 4 つの状態のエネルギーは全て等しいので、この 4 つの適当な組み合わせで作られる 4 つの状態ならば、全て固有状態で得られる。また、 $2s$ と $2p$ を重ねたものは、原子核の位置からずれた所に重心をもつ。そのような状態が磁場のない時でも定常状態として存在しうるのは、 $n=2$ に励起された水素が自発的に分極して、電気的雙極子モーメントを持つからだと考えられる。では、 $n=2$ に励起された水素が自発的に分極できるのはなぜか。 **M:** たしかに自由空間に孤立して存在している水素原子の $n=2$ の 4 つの状態の適当な線形結合も固有状態ではあるが、自発的に分極して雙極子モーメントを持つ構造が存在することは現実的だろうか？ 優先的に雙極子モーメントを持つ特別な方向が存在するだろうか？ → どの方向にも等しい確率で雙極子モーメントを持つ → 量子力学的な共鳴状態

20s2034: 混成軌道についての式は、いくつかのオービタルの式を合成することで求められるのですか。 **M:** 教科書 pp.403-414 や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは？

20s2035: ゼーマン効果についてで磁場中ではエネルギー準位が分裂して低いエネルギー準位から電子が上向きと下向きにそれぞれ一つずつ入りますが、磁場がないときはどのように存在していますか？ **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 磁場があろうとなかろうと、普通の順番で入るのでは？

20s2036: 水素原子オービタルは、主量子数、角運動量量子数、磁気量子数の 3 つの量子数に依存するとありますが、電子のスピン量子数は考慮しなくてもよいのですか。 **M:** 19s2017 参照

20s2037: エネルギーはボーア模型で得られたものに一致するが、円軌道に束縛されてるわけではないと注意書きしていたところがよく分からなかったのですがどういうことですか？ **M:** 日本語力不足か？ 文字通りの意味だが？ // 水素原子の電子の状態は波動関数によって記述されるが、ではその時に電子の分布はどうなっているか？ 円軌道上にのみ分布しているか？

20s2039: 水素原子以外の原子は全て近似的に解くことができるのでしょうか？ **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // もしも近似的に解ける原子と解けない原子があったとすると、その本質的な違いは何だろうか？ 核の電荷が異なると近似ができない？ 電子の数が増えると近似ができない？

20s2040: 教科書 p.227 図 6・3 の水素原子波動関数の動径部分に付随する確率密度で $2s$ や $3s$ のグラフの極大になる点の一つだけではないのは動径節があるからで動径節がある軌道の場合、必ず極大が一つだけではないグラフの形になりますか。 **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // “節”の意味は？ // もしかして数学の基礎 (関数とグラフ?) の復習が必要か？

20s2041: ゼーマン効果について、磁場の強さが微妙な時は縮退が中途半端に解けたりするのだろうか。 **M:** “磁場の強さが微妙な時”とは、どういう時のことか？ // 20s2002 参照

20s2042: (6.43~45,47) 式において、教科書の式には Z の記号がなかったのですが、表の 6.5 より Z が原子番号を表しており水素原子は 1 だから省略してるということなのでしょう。それとも他の理由があるのでしょうか。 **M:** なぜそう言う記述なのかは、著者に聞けばいいのでは？ // ちゃんとした国語力があれば、教科書本文は“水素原子”について記述しているが、表 6.5 や表 6.6 等は“水素型原子”について記しているという違いが判るはずなのだが、 $Z=1$ のときの数式を“ Z を省略した”と認識するようでは、やはり国語力不足の可能性もありそんな予感。

20s2043: 水素原子において 2 つの波動関数が直交するということは、具体的に水素のどのような性質を示しているのか？ **M:** 教科書や参考書をよく読んで、量子力学の基礎を理解する必要があるのでは？ // それぞれの波動関数で表される二つの状態は全く別の状態

20s2044: 軌道の形は三つの量子数から決定できますが、軌道の正の部分と負の部分はどのように区別するのですか。 **M:** “区別する”とは、何をやりたいのか？ // 波動関数の物理的な意味は？

20s2045: 磁場中で原子のエネルギー状態に差が出るということは、 $E=mc^2$ から原子の質量も変化するのですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 数式に従って論理的に考えればいいだけでは？

20s2046: 教科書 p.224 に「関数の前にある階乗は、 r での積分に関して $R_{nl}(r)$ が規格化されていることを保証する因子」とありますが、これはなぜですか。 **M:** 本気か？ 文字通りの意味だが、何がわからないのか？ // 計算すれば分かるのでは？ // 規格化とは何か？ もしもその因子が無ければ、 $R_{nl}(r)$ は規格化されているか？

20s2047: ラゲールの陪多項式の教科書中の文面にある、関数の前にある階乗が r での積分に関して $R_{nl}(r)$ が規格化されていることを保証する因子である、という表現について、なぜその階乗が規格化を保証する因子になっているのですか？ **M:** 20s2046 参照

20s2048: 縮退が解ける前と後で、その原子の性質は変化するか？ **M:** 自分で色々と考えてみればいいのでは？ // 電子密度分布はどうなるか？

20s2049: これまでは $n=1$ の時の水素原子のみで色々な講義で議論してきたのですが、 $n=2,3$ の時の水素原子についても考えるのは

なぜですか。 **M:** 20s2005 も参照

20s2050: 磁気量子数 m の数は合計で奇数個になるのに、異常ゼーマン効果が起こるとエネルギー準位が偶数個に分裂するのはなぜですか？ **M:** 正常ゼーマン効果と関連する軌道角運動量量子数 L は非不整数 (non-negative integer) だが、異常ゼーマン効果と関連する電子のスピン角運動量量子数 S は半整数である。特に後者が半奇数 (half odd, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$) のときに $2S + 1$ は偶数になる。

20s2051: 6・46 に $1s$ 状態は分裂しないとあり、 $1s$ 状態は縮退していないため分裂しないというのは理解できる。しかし、ゼーマン効果について他にも調べてみると、原子を磁場中に置くと、スピンの向きによってエネルギー準位が変わると説明しているものもあった。 $1s$ 軌道にはスピンの向きが異なる電子が2つ入るならば、 $1s$ も分裂するのではないだろうか？ **M:** それはスピン磁気量子数 m_S に由来する分裂であって、電子の状態を指定する三つの量子数 (n, l, m) に由来する分裂ではない。

20s2052: 水素型原子の波動関数で得られる電子の存在確率は、水素原子 (球体) 内で電子が見つかる確率ということですか？ **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 波動関数 $\psi(r, \theta, \phi)$ の変数の定義域は？ 水素原子内に限定する必要があるのか？ 水素原子内と水素原子外の境界はどこか??