

- 16s2052:** 積分要素に H_{21} と S_{21} はなぜ出てこないのですか M: 本気か? 講義でも説明したのだが、伝わっていないで残念. // 二つの行列要素 H_{ij} と H_{ji} との関係は?
- 17s2007:** 永年方程式から求められる解のうち、励起状態エネルギーの上限に相当する方は基底状態エネルギーの近似となる方に比べてかなり粗いものであると言われているのはなぜなのでしょう。また、その違いに意味があるのでしょうか。 M: “かなり粗い” と言われているのは教科書 p.277 であるが、そのことか? 講義で 1.2935 は第一励起状態 0.5 の近似値というよりも第二励起状態 1.25 の近似値とみなすべきだと説明したのだが、伝わっていないで残念. // 18s2003 も参照
- 17s2045:** 変分法と摂動論以外に近似解を求めることができる方法がありますか。 M: シュレーディンガー方程式を解くことは、数学的には微分方程式を解くことだから、微分方程式の数値的解法があることは講義でも説明したのだが、伝わっていないで残念.
- 17s2051:** p.276 では厳密解と非常に近い値が出ているが、原子番号が大きくなるにつれ厳密解との差も大きくなるのか。 M: 意味不明. // p.276 のどこに原子番号が関与するように書かれているのか? // 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”の記述の意味を理解できないのか?
- 18s2003:** 基底状態の近似値が厳密解とほぼ一致するのに対し、第 2 励起状態の近似値では誤差が大きくなってしまふのはなぜですか? 波動関数の節が多いことが関係しているのですか? 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”の記述の意味を理解できないのか? // 起伏に富んだ形の関数を多項式で近似する時に、何次の多項式を用いればよいだろうか? テイラー展開で何次の項までとれば良い近似になるだろうか?
- 18s2014:** 永年方程式とはどういう意味がありますか 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?
- 18s2018:** 小さい方のエネルギーを利用することはわかりましたが、大きい方のエネルギーは現実にはどう作用するのでしょうか。 M: “作用する”とは、何のことを言っているのか? // 教科書 p.277 にも記載されているように基底状態以外のエネルギーは励起状態のエネルギーということなのだが、励起状態のエネルギーから何が分かるだろうか?
- 18s2029:** 講義で用いられた試行関数の 1 つの解は確かに基底状態の近似解と言えるほど誤差は小さい。しかし、もう 1 つの解は第二励起状態に近い値を示している誤差が非常に大きい第一励起状態の近似解と見なすことはできないのか? M: 別に、好きなように見なせばいいのでは? // 波動関数の形から、そう見なすことは合理的か?
- 18s2038:** 教科書で第一励起状態の上限という書き方をしていたが上限が存在するような幅をもっているのか。 M: 20210615 の 17s2007 参照
- 18s2045:** 1) 結局励起状態の波動関数について、変分法を用いた場合は基底状態よりも精度としては良くないということか。 // 2) 変分原理を満たしていない解が得られることはあるのか。 M: 18s2003 参照 // 本気か? 変分原理が成り立つ理由を理解していない?? 講義でも説明したのだが、伝わっていないで残念.
- 18s2046:** 変分法で近似解を求める際には有効数字に基づいて解を出すのではなく、厳密解と比べて何桁目で異なる値が出るかまで調べるほうが良いのか M: 本気か? // 厳密解が分かっているなら、近似解を求める必要はないのでは?
- 19s2003:** 教科書 p.281 「本書では~1 次までの E しか求めない」とありますが、先生は 2 次以降の E を求めた/求めようとしたことはありますか? M: それを聞いて、どうするのだろうか? // 答えの yes/no で、あなたの行動や理解において、何かが変わりますか?
- 19s2005:** 永年方程式から求められる E のうち一方が、かなり粗いのに第一励起状態エネルギーの上限に相当していると言える理由は何ですか。 M: 20210615 の 17s2007 参照
- 19s2007:** 箱が二次元や三次元だった時もリッツの変分法を使って同じように解くことができますか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 手を動かして解いてみればいいのでは?
- 19s2011:** リッツの変分法で厳密解との誤差を求められたと思うのですが、その誤差は何によるものなのでしょう。 M: 近似波動関数は厳密解の波動関数とどれだけ異なっているか? 波動関数が表している“系の状態”は、どれだけ違うか?
- 19s2017:** N の数を増やすと変分法の精度が上がりますが、これで得られる誤差はどのくらいまで小さくなると良いといわれますか? M: 近似解は、どの位の誤差まで許容されるのか? // 良し悪しは、誰がどんな基準で判断するのか?
- 19s2022:** 変分パラメータ C_1 と C_2 両方について、規格化せずにそれぞれを得ることはできるのでしょうか。 M: 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // 規格化されている C_1, C_2 と、規格化されていない C_1, C_2 とは何がどう違うのか?
- 19s2029:** 変分原理により、近似解は厳密解以上にならなければならない、に近い値でなければならないために、授業内で得られた E_2 は第二励起状態の近似になったのか? M: 20210615 の 17s2007 参照
- 19s2031:** 5 次方程式までしか解の公式がないとありましたが、機械であれば解の公式がないにもかかわらず、5 次元以降を解くことが可能なのはなぜですか? M: 本気か? // 解の公式が存在することと、解が存在することは別の話だが?
- 19s2040:** 節が二つあることから第二励起状態であることを先験的に判断しましたが、未知の系の場合はどのようにするのですか。 M: 試行関数に、より一般的な関数を用いる. // 例えばフーリエ展開で、余弦関数だけでなく正弦関数も用いるなど.
- 19s2045:** 近似解で厳密解に近い良い値を出すためには試行関数をどのような工夫をして設定したらよいのでしょうか。 M: 先験的な知識を活用して厳密解に近い関数形を用いるか、あるいは逆に汎用性の高い関数を用いる.
- 19s2046:** 互いに相互作用する三体以上からなる系を扱う場合には多体問題が生じると思いますが、その場合にもリッツの変分法を用いれば多体問題も考慮した近似値が得られるのでしょうか。 M: 本気か? 自分で判断できないのはなぜか? // 自分で計算してみれば分かるのでは?
- 19s2047:** 授業の最後に最近の機械についての話をしていましたが、5 次元の空間についてわかったことなどはあるか気になりました。 M: “最新の機械についての話”とは? そんなこと言ったっけ? // いずれにしても、質問が記載されていません.
- 19s2049:** 変分法と摂動法はどちらも近似法として適切であるが、それぞれのメリットは何か? M: それぞれの特徴をよく学べば分かるのでは?

- 19s2051:** レイリーリッツの変分法のパラメータを増やす際に特に注意する点がありますか？ **M:** 常識で判断すればいいのでは？
// 汎用性を増やす方向で増やすのでなければ、増やす意味がない。
- 19s2053:** 試行関数が必要な状況の時、良い試行関数かどうかの判断は定めた試行関数の計算結果で判断するものですか？それとも事前におおよその見当はついているのでしょうか？ **M:** どんな計算結果で判断するのか？
- 20s2001:** 今回は 1 次元の箱について考えましたが、2 次元、3 次元と増えたらどのように計算すれば良いのでしょうか？ **M:** 別に、普通に計算すればいいのでは？
- 20s2002:** 変分パラメータを増やすほど厳密解に近づくのはなぜか。 **M:** 本気か？ // (変分パラメータに限らず、一般に) 調整するポイントが多いほど目標に合わせることができるのは、自明では？
- 20s2003:** エネルギー E は粒子の質量 m に反比例していることを利用して、軽水素と重水素をそれぞれイオンの状態にして 1 つの粒子と見なしてエネルギーの違いで区別することはありますか？ **M:** 意味不明、何をどうやって区別するのだろうか？ // 本当にエネルギーは粒子の質量に反比例しているのか？
- 20s2004:** 変分法によって得た二つの解のうち、基底状態エネルギーに相当する解でない方を、教科書では第 1 励起状態エネルギーの上限と表現していますが、この表現は適切ですか。 **M:** どこが不適切なのか？ // 20210615 の 17s2007 参照
- 20s2005:** 試行関数は境界条件に当てはまるものを思いつきやひらめきのようなもので考えたのでしょうか？ **M:** 初めから、どんな関数形でも好きにすればいいと言っているのだが、伝わっていないで残念。// 先験的な知識を活用したければすれないのでは？
// こう考えて試行関数を選ばなければいけないなどという制限は、変分法に含まれていないのだが.....
- 20s2006:** $E' = Em/h^2$ はどこからきたのでしょうか？ **M:** 別に、ただ単にそう定義しただけでしょ。
- 20s2007:** 求められた E の近似解では無い方は第一励起状態であったり、第二励起状態であったり、その解によって様々なのか？
M: 20210615 の 17s2007 参照 // “その解” は具体的に何を指すのか？
- 20s2008:** 最高被占軌道に電子が 2 つ入っている原子や分子について質問です。電子の位置は不確定なのに、ある 1 電子を励起させるとき、なぜその 1 電子にピンポイントでエネルギーを与えることができるのですか。// 多電子系で、ある 1 つの励起された電子が基底状態に戻るときに放出するエネルギーは、他の基底状態の電子に何か影響を及ぼしますか。例えば他の基底状態の電子が、放出されたエネルギーをもらって励起状態になることはあり得ますか。 **M:** 動いている電子を狙って (逃げる獲物を狙い撃ちするように) エネルギーを与えるという考え方は間違っている。自分でも言っているように波動性を持つ電子の運動の軌跡を追うことはできないため、前述のように狙い撃ちはできない。ボーアの振動数条件とか選択律とかを考える。// 本気か？ 質問文中にある状態は、別の状態として区別できるのだろうか？
- 20s2009:** 式 (7・37) の解でエネルギーの大きい方が第一励起状態エネルギーの上限に相当しているのはなぜですか？ **M:** 20210615 の 17s2007 参照
- 20s2011:** リッツの変分法で求めた E_2 は第一励起状態ではなく、なぜ第二励起状態になってしまうのですか？ **M:** 別に、リッツの変分法だから第二励起状態になるのではない。先験的な知識または波動関数の形からそう考えたと言っているのだが、どこが理解できないのだろうか？
- 20s2012:** シュタルク効果によってエネルギーが変化する場合の変分法とゼーマン効果の場合の変分法は同じ考え方で解いても良いのでしょうか？ **M:** シュタルク効果やゼーマン効果の話を変分法で解くことは、教科書のどこに書いてありましたか？ // 自分で考えて分からないのはなぜか？ 解いてみればいいのでは？ 解き方を考えるにあたり、だれかの許可が必要なのか？
- 20s2013:** 変分法と摂動論、数値計算によって方程式の解を求める以外にどのような近似的方法がありますか？ **M:** それを知ってどうするというのだろうか。// 従来から用いられてきた方法 (実績があり、現在でも広く用いられている考え方) や、最近の方法 (コンピュータの発達のため) で、何が不満なのか？
- 20s2015:** 式 (7・22) で当たり前のように変分パラメーター c_1 、 c_2 を関数 $x(a-x)$ と $x^2(a-x)$ に掛けた形で試行関数としていますが、このときの変分パラメーターは関数との掛け算でなくて足し算やべき乗でも大丈夫なのでしょうか。 **M:** 本気か？ 自分で計算してみれば分かるのでは？ // テイラー展開 (フーリエ展開、直交多項式で展開) とかをイメージすれば、どうするのが普通なのか？
- 20s2017:** 変分法によって誤差 0% となるような試行関数が仮に存在したならば、その関数は近似的な関数ではなく、波動関数としてみなして良いのか？それとも近似は近似のままなのか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 誤差がゼロだと、どうしてもわかるのだろうか？ 教科書の例題 7.1 参照。
- 20s2018:** 厳密解が分からない場合で、最終的な答えが基底状態や第一励起状態、第二励起状態であるというのはどのように決定するのでしょうか。 **M:** 本気か？ 変分原理を理解していないのか？ // 20210615 の 17s2007 参照
- 20s2019:** 第 1 励起状態の「上限」とはどういうことでしょうか。また、第 1 励起状態の上限というのは第 2 励起状態より小さいと決まっていたりするのですか？ **M:** 20210615 の 17s2007 参照 // 本気か？ 第一励起状態と第二励起状態の違いは何か？ それぞれの定義は何だと考えられるか？
- 20s2020:** 0.00144% しかずれていない近次解の試行関数 (最適化試行関数) と厳密な波動関数が、最大の部分 ($a/2$) 付近ではずれているように見えるが、0 や a に近づくに連れてほとんど一致しているように見えるのは何故ですか？ ($a=1$) **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 差についてプロットしてみればいいのでは？
- 20s2022+:** 永年方程式から変分パラメーターを求める際に虚数解が得られる場合はあるのでしょうか？ **M:** 教科書 4 章と線形代数を復習する必要があるのでは？ // ここであつかう永年方程式では行列要素が $H_{ij} = H_{ji}^*$ であり、元になった行列は一般にはエルミート行列である (当然、実行列ならば直交行列である)。エルミート行列の固有値は実数である (cf. エルミート演算子の固有値は実数である, 教科書 p.142)。
- 20s2023:** なぜ 7.37 の解は一方が基底状態のものと関係があり、もう一方が第一励起状態と関係があるのですか？普通ならどちらも同じ状態と関係があると思うのですが。 **M:** なぜ、“どちらも同じ状態と関係がある”と思うのが普通なのか？ 教科書 4 章を

よーーく復習する必要があるのでは？ // 永年方程式の二つの解 (E_1, E_2) からそれぞれ得られる試行関数 (ϕ_1, ϕ_2) を見比べると、もちろん $\phi_1 \neq \phi_2$ である (定数倍の違いは無視、ここでは二者は一次独立である)。異なる波動関数で表される二つの状態は、同じ状態と言えるのか？

20s2024: 教科書 p. 277 おいて「第二の解は E_2 の上限であるが、かなり粗い」とありますが、ここの粗いとは何をもって、もしくは厳密解とのどれほどの違いをもって粗いといっているのでしょうか？ **M:** “近似解がどれくらい厳密解に近ければ近似と言えるか” という話を講義で説明したのだが、理解されていないようで残念。// 同時に得られているもう一つの解や厳密解と比べて考えればいいのでは？

20s2025: 永年方程式と固有方程式は同じものか、また違うとしたらなにが違うのか。 **M:** 正気か？ // それぞれの方程式を並べて書いて比較すれば分かるのでは？ // 前回、回答を書き忘れていましたすみません。“ハイゼンベルク群” は、初めて聞きました。調べて分かったら、教えてくださいネ

20s2026: 解の公式で 5 次までは解けるとおっしゃってましたが、5 次以降の永年方程式はどうやって解けばいいのか。 **M:** 教科書 p.278 や参考書をよく読めば分かるのでは？ // そもそも 3 次の代数方程式の解の公式ですらかなり複雑なので、ほとんど使われないと思われるが.....

20s2027: 箱の中の粒子の試行関数のように厳密な関数と非常に値の近い関係の関数はほかにありますか？ **M:** 箱の中の粒子の試行関数だから厳密解と非常に近いわけではない。採用した試行関数の形が適切だっただけ。// 自分で勉強したり考えたりしてみればいいのでは？

20s2028: 励起状態が複数存在するのは何故か **M:** 定義により、エネルギーが最も低い状態が基底状態であり、それ以外の状態は励起状態である。もしも励起状態が一つしか存在しないのなら、系の状態は合計二個に限られる。系の状態が二個に限定されなければいけないという理由はあるのか？

20s2029: 永年方程式の永年はどういう意味ですか。 **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？ // ここで用いられる secular (永年) は、元は天文学の用語

20s2030: 摂動法において古典的摂動法と量子力学的摂動法の違いはあるのですか？ **M:** 摂動も元は天文学の用語だそうです。天文学方面で具体的にどんな計算をするのか分かりませんが、量子力学と考え方 (運動を主要なものと小さい摂動に分けて考える) は同じようです。// 違いなど、調べて分かったら、教えてくださいネ

20s2031: 今回の試行関数では、基底状態と第二励起状態の E が得られたが、試行関数から得られる E は、物理的に意味のあるものしか得られないのですか。 **M:** 20s2022 参照

20s2032: 変分法で求めた基底状態のエネルギー値は厳密値とほぼ一致しているのに、同じ式で求めた第 2 励起状態のエネルギー値が少し異なっているのはなぜか。 **M:** 18s2003 参照

20s2034: リッツの変分法の過程で二つの変分パラメーターの比が求まるが、この関係性に何か意味はあるのか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 今回の例で言えば、試行関数に対する f_1 と f_2 の寄与の比率でしょ

20s2035: 励起状態のエネルギーの上限のよい値を得る方法として式 (7・25) で N の値を大きくする方法は可能ですか？また N の値を大きくすると解が増えますが、 $N=2$ の時の解から予想してこれは第三励起状態や第四励起状態などの励起状態の厳密解の近似解になりますか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 20210615 の 17s2007 参照

20s2036: 永年方程式の解が虚数となる場合はあるのですか。あるとしたらそれはどのような場合でしょうか？ **M:** 20s2022 参照

20s2038: 箱の中央に節があるというのはどのような状況でしょうか。 **M:** 別に。箱の中央に節がある状態は、それ以上でもそれ以下でもない。何を聞きたいのか？

20s2039: 試行関数は境界条件と $x = a/2$ を中心に対象であるという条件を満たせば、どんな関数でも一次元の箱の中の粒子の基底エネルギーの厳密解に近い値を得ることができるのでしょうか **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは？

20s2040: 箱の外でも空間を永遠に大きい箱と捉えれば今回の授業で求めた解は成り立ちますか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 波動関数は、一価・有限・連続 か？

20s2041: 摂動論に関して、 ∞ 次の摂動論まで求められればそれがエネルギーの厳密解になるのでしょうか。 **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // テイラー展開やフーリエ展開で無限個の項を考えた場合はどうなるか？

20s2042: 教科書には、 E_2 は値としては粗いが第一励起状態エネルギーに相当していると書かれていたのですが、なぜ第一に相当する E_2 について第二励起状態エネルギーに近い値が得られるのでしょうか。 **M:** 講義でも説明したのだが、伝わっていない残念。20s2011 参照

20s2043: 近似的方法を用いることで、厳密に解けない系についての方程式を解くことが可能であるのだから、この際、電子のスピンについて考慮する必要はないのか？ **M:** 本気か？ 解くべき方程式に電子のスピンについての効果は入っているか？ // ハートリー・フォック法について勉強してみればいいのでは？

20s2044: 先験的知識がより多い方が、正確な近似になるのでしょうか。 **M:** 自分で考えて分からないのはなぜか？ // 教科書 p.264 の“その関数 (ϕ) が何らかの意味で ψ_0 に近ければ近いほど E_ϕ は E_0 に近くなる” という記述の意味を理解されていないようで残念。 ψ_0 に近そうな関数をあらかじめ選ぶことができれば有利だと考えるのは自然では？

20s2045: 炎色反応では原子に熱エネルギーを加えて電子を励起させます。これは電子がより外側の電子核に入って核から遠ざかっている状態だと思います。このとき、加えるエネルギーが非常に大きい場合、核と電子を完全に分離することもできるのですか。 **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ 熱により核と電子が完全に分離した状態を、毎日見ているのに?? // 完全に分離するためのエネルギーは、いったいどの位か？ それは熱エネルギーで与えることができない大きさか？

20s2046: 宿題の $g_1(x), g_2(x)$ にある指数は何を示していますか。 **M:** 別に。指数は指数でしょ？ // 何を意図した質問なのか分からない。

20s2048: 教科書 p.277 図 7.3 について破線と実線が大きめにズレているのは視覚的にちょっとしたズレをわかりやすくするために

すか？ それとも c_1, c_2 の比の数値の有効数字の桁数が小さいからですか？ **M:** 自分でプロットしてみれば分かるのでは？ //

著者に聞けばいいのでは？ :-p

20s2049: 同次連立方程式の E_ϕ に E_1 を代入するところで、代わりに E_2 を代入して計算をすすめいくと出てくる解は、何か意味を持っているか。また、持っていたとしたらどんな意味か。 **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // (7.35), (7.36) 式から順に (7.3) 式までさかのぼって考えてみれば分かるのでは？

20s2050: 基底状態のエネルギーは厳密解と非常に近い近似解が得られるが、第 2 励起状態のエネルギーは厳密解と近似解のずれが大きくなるのはなぜですか？ **M:** 18s2003 参照

20s2051: 複雑な計算をどうしてコンピュータは瞬時に計算できるのか？ **M:** 本気か？ コンピュータは何のために発明・作成されたのか？

20s2052: 第一励起状態エネルギーの下限を知る方法はどういうものがありますか **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // (定義により) 第一励起状態のエネルギーは基底状態のエネルギーよりも低くなることはないのは自明では？