

- 16s2052:** 底が傾いた 1 次元の箱の中の粒子で波動関数に対する一次の補正を行っていないのはなぜですか。エネルギーと波動関数どちらも補正すると、設問にある一次の摂動論ではなくなるからですか？ M: 著者に聞けばいいのでは? :-p // エネルギーの一次の補正, 二次の補正, …… , 波動関数の一次の補正, 二次の補正, …… と必要なだけ順次求めればいい。
- 17s2007:** 摂動論において、厳密解が分かる部分までを非摂動部分にするべきなのでしょうか、それとも近似法を用いてもよいのでしょうか。 M: 別に、好きにすればいいのでは? // “べき” とか “よい” とか、誰が決めるのか?
- 17s2051:** 特にないです。 M: そうですか。しかし、質問が記載されていません。
- 18s2014:** 底が傾いた一次元の箱についての振動はどうなっているのですか。 M: 意味不明。何の振動の話か?
- 18s2018:** 摂動法と変分法の使い分け方のコツはなんですか。 M: コツがあるなら教えてほしいです。//好きな方(または両方)を使ってみればいいのでは?
- 18s2029:** 教科書 p.302 にある通り 13 次の振動の補正を用いて近似解を出すのはすごく時間がかかるとありますが、それなら計算よりも実験値の平均を値出す方が早くて正確なのではないか? M: それは私は知りません。// 何のために、計算や実験をしたのでしょうか?
- 18s2038:** 2 次の補正エネルギーについては 1 次の補正エネルギー同様に求めることはできないのか。 M: “同様” とは、何と同様な話か? // 教科書や参考書で摂動法を勉強すれば分かるのでは?
- 18s2045:** 1) 摂動論において幾つかの参考書では任意定数の λ を用いてハミルトニアンを $H=H_0+\lambda H'$ と表記しているが、この λ はどんな意味合いになるのでしょうか。(読んでもよく分からなかった) // 2) 摂動論に対して、なんらかの形で近似展開された波動関数(例えばテイラー展開など)を基に厳密に計算するのとどちらが優れているのでしょうか。 M: どの参考書を読んだのでしょうか? 例えばアトキンス基礎物理化学では“補正の次数を示すためのダミー変数であって、計算の最後ではこれを消してしまう”, 原田義也の量子化学では“以下の計算では便宜上、(小さい項)を $\lambda \hat{H}'$ で表し、(中略)、 λ は $\lambda \ll 1$ の定数とする”などがある。
- 18s2046:** 本講義では近似法として変分法と摂動論を習ったが、近似解を求めるにあたって有効な手段は他に存在しないのか M: 同じ主旨の質問には過去に何度も答えているつもりなのだが、見ていないのだろうか??
- 19s2003:** 表 8.2 から、補正は必ずしも加算していく/減算していくのみではないということは分かったのですが、加算のみ/減算のみの場合と加減両方用いる場合とどちらが多いのでしょうか。設定した摂動ハミルトニアンによるのでしょうか。 M: 統計をとったことがないので、私は知りません。// もしも仮に、加算のみの方が多かったら、どうだということののだろうか?
- 19s2005:** 類似性のある系とは、どの観点から見て類似していると言えるのですか。 M: 別に、好きにすればいいのでは? // 講義でも、教科書 p.280 の非調和振動子の非摂動項を、調和振動子と考えても自由粒子と考えても良い(あまつさえ、クーロンポテンシャル場の中の粒子と考えても良い)と説明したのだが、理解されていないようで残念。
- 19s2007:** 変分法と摂動法はどのように使い分けるのですか。 M: 18s2018 参照
- 19s2011:** 摂動論の類似の別の系と解きたい系との差は、どのように求めるのでしょうか? M: 本気か? // 差を求めるには、引き算をすればいいのでは? 算数の復習が必要なのでしょうか??
- 19s2017:** 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、とありますがこれはどのように判断すれば良いのですか? M: 19s2005 参照
- 19s2029:** 近似をするときに変分法と摂動論ではどちらの方がより簡単によりたくさんの原子に適用できるのか? また、不向きな関数というのは存在するのか? M: 原子の数を数えたことがないので、私は知りません。調べて分かったら、教えてくださいネ // そもそも、変分法と摂動論のそれぞれを、しっかり理解すれば分かるのでは?
- 19s2031:** 実験値とありますが、実験する人によって値が変わることがよくあると思いますが、どう実験値として定義しているのですか? M: 本気か? // 実験値は実験値でしょ? 人によって値が変わるとイケナイのか?
- 19s2046:** 摂動論は縮退の有無に関わらず精度の高い近似値を得られるのでしょうか。 M: 教科書 p.263 の“近似的方法を〜ほとんど望みの精度で解くことができる”を、未だに理解できないのでしょうか? これは縮退のある摂動論を特別視しているのか?
- 19s2047:** 無限に補正項あると言う話がありましたが無限にある補正項を足した場合、厳密解に限りなく近づいていくと言うことですか? M: 本気か? 自分で考えて分からないのはなぜか? // テイラー展開で無限個の項を加えたらどうなるか?
- 19s2049:** 適切に変分法や摂動法を用いれば適切な精度で近似値を出せるが、コンピュータを使えば 20 次でも 30 次でもさっと解けてしまえるのか? それともそれすら難しいのか? // [以下省略] M: 本気か? コンピュータは望みのことができる(高次の摂動を解くことができる)魔法の箱なのか? // だれがどうやってコンピュータを動かしているのか? 計算プログラムやアルゴリズムは、誰が考えるのか? // [ご心配いただきありがとうございます.]
- 19s2051:** 摂動論の取り扱いには縮退があるかないかで何か変わることはありますか? M: 勉強すれば分かるのでは? // 縮退のある系に摂動が加わると、たいていは縮退が解けることになる。縮退した系の波動関数において線形結合をとって波動関数を構成し直すことになる。
- 19s2053:** 他の参考書で縮重を考えるとより複雑になるので取り扱わないとあったのですが、縮重を考えるとどのようなことを考慮しなければいけませんか? M: 別の参考書も見ればいいのでは? 19s2051 参照
- 20s2001:** ハミルトニアンの分け方によっては、摂動ハミルトニアンが非摂動ハミルトニアンよりも値が大きくなることもあるのでしょうか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // 適当な系で値を求めてみれば分かるのでは?
- 20s2002:** 講義ではどこを摂動項としても良いと言っていたが、教科書には摂動項が小さいほど解が近いと書かれている。ならば基本的には摂動項が小さくなるように摂動項を定めた方がいいのか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 必要な精度で求めるために高次の項まで求めればいいだけでは?
- 20s2003:** 表 8 磁 2 で、10 パラメーターで変分計算したときの基底状態のエネルギーと、1078 パラメーターで変分計算したときの基

基底状態のエネルギーが実験値の基底状態のエネルギーより小さくなっていて、変分原理に従っていないと思うのですがこれはなぜですか？ **M:** 変分原理を、正確には理解していないのでは？

20s2004: 摂動論において任意で誤差を小さくできるのであれば、試行関数によって誤差の大きさが左右される変分法は扱いづらくないのですか。 **M:** 教科書 p.263 の“近似的方法を～ほとんど望みの精度で解くことができる”を、未だに理解できないのでしょうか？ // 扱いやすいか扱いづらいかは主観では？ 目的に応じて使いやすい、分かりやすい方法を使えばいいのでは？

20s2005: 系に縮退がある場合、摂動論は使えますか？ **M:** 19s2051 参照

20s2006: 280 ページの $\alpha =$ の式はどこからきたのですか？ **M:** 本気か？ 単なるまとめて置き換えでは？ // 調和振動子について復習する必要があるのでは？

20s2007: 実際に近似をするとき変分法と摂動法ではどちらが好まれますか？計算する人それぞれなのですか？ **M:** 18s2018 参照

20s2008: 基底状態のエネルギーの実験値はどのような条件下でどのように求められたものなのですか。 // 縮退がある系について質問です。縮退は摂動によって解けると見たのですが、これは例えば 1 次の摂動までを考えたときは縮退しているように見えるが、2 次の摂動まで考えたら実は縮退していなかったということでしょうか。また高次の摂動まで考えても縮退が解けない場合がありますか。 **M:** 実験値を報告している原著論文を見ればいいのでは？ // 系によるのでは？ 19s2051 も参照

20s2009: 底が傾いた一次元の箱の $E(1)$ の値が $V(x)$ の値の平均のようになったのは偶然ですか？例えば底が v 字に折れ曲がっていても $E(1)$ の値はこの時の $V(x)$ の値の平均のようになりますか？ **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは？

20s2011: 前章ではヘリウム原子のシュレーディンガー方程式を厳密に解けないとありました。今回の授業でヘリウム原子の実測値が -2.9033 とわかりましたが、この実測値はどのようにして求めることができるのですか。 **M:** 20s2008 の前半参照

20s2013: ある系について摂動論を用いて求めた近似解があるとして、それは別の未知の系の近似解を同じように摂動論で求める際に、既知の系の値として用いることはできますか？ **M:** MP2 や MP4 など、HF 法で得られた結果をゼロ次として摂動論的に電子相関エネルギーを計算している。教科書 p.317 や参考書参照。// 出来るかどうか、判断するのは誰か？

20s2015: ヘリウム原子について 1 次の摂動論では電子反発の項を摂動と考えたわけだが、2 次や 3 次などの摂動論では電子反発の項の他にどういった項を摂動と考えるのか？ 非摂動部分と摂動部分を区切る位置を変えれば良いのか？ しかしそれでは表 8.2 のような 13 次の摂動論はできない気がするが... **M:** 摂動の次数について誤解している予感。

20s2016: 章末問題 7・31 で $1/r_{12}$ を球面調和関数を用いて展開していますが、どうしてこの展開ができるのですか？ **M:** 完全系・直交多項式による展開ということでしょうか。

20s2017: 電子が増えるほど、電子間の相関エネルギーが大きくなり、誤差が増えるのですか？ **M:** 何の誤差の話か？ 誤差とは何か？ // 真の値 (厳密解) がわからないのに、どうやって誤差を見積もるのか？

20s2018: ヘリウム原子の際は水素原子、底が傾いた一次元の箱では平らな箱を類似の問題とすることができそうですが、類似の問題が分からない場合はどのようにすればいいのでしょうか。 **M:** 19s2005 参照

20s2019: ハミルトニアンを決めることが出来ているのにシュレーディンガー方程式を求められないのはなぜですか **M:** 例えば多体問題

20s2021: 縮退がある場合と無い場合の摂動論はどのように変わるのか？ **M:** 19s2051 参照

20s2022: 摂動法で系を求める時に、摂動法により近似解を求めた他の系を類似性のある系として採用することはできるのでしょうか。 **M:** 20s2013 参照

20s2023: 変分法も摂動論のどちらも良い結果を与えますがこの二つの方法はどのように使い分ければ良いですか？ **M:** 18s2018 参照

20s2024: 教科書 281 ページにおいて全基底状態エネルギーと書かれていますが、基底状態エネルギーは一つの系で決まっているものはずなのに「全」という接頭語を付けるのは適切なのでしょう。 **M:** 著者が、必要だと思ったから、付けたのでは？ // 部分に対する全体。エネルギーを部分に分けて求めたり、表したりすることがあるのでは？ // 国語力不足か、またはここでやっている事を理解していないのでは？

20s2026: 式 7-50 でなぜ二重積分になったのかわかりません。なぜですか **M:** 本気か？ そこで積分する計算の、変数の数はいくつ？

20s2027: 摂動論の基本的な仮定に、逐次補正が急速に小さくなっていくとありますが、なぜそうなるのですか？ **M:** 本気か？ 論理学の復習が必要か？ // “仮定” とは何か？ “そうなる” のか “そうする” のか？ だれが定めるのか？

20s2028: 表 8.2 から次数が上がる度、エネルギーの上がり幅は小さくなっていることが分かるので、高次数になるとある値に収束するという事は考えられませんか？ **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 考えるのは誰か？ 人が考えるのを規制したり制限したりするのは誰か？

20s2030: 箱の中の粒子について考えてきましたが、壁が有限の高さを持つ場合、エネルギーの計算の仕方に違いは出るのでしょうか？ **M:** 本気か？ // 自分で計算してみればいいのでは？

20s2031: 錯体などのより複雑なものに対して摂動論を用いた場合、大きな次数でないと厳密解に近似しないのか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // “近似” の意味を未だに理解していないようで、残念。// 誰が近似するのか？

20s2032: 一様な電場の中に置かれた水素原子の問題に摂動論を適用して考えると、水素原子の分極率を求めることができる。では、分極率からどのような化学的現象が説明できるか。 **M:** 分極率は物理的な性質だが、その物理的な性質が化学的性質に反映されることは、あり得ることではある。しかし具体的に今回の場合を考えようとすると、単独の原子の性質でもあるし、すぐに思いつくことはない。あ、原子オービタルの変形のしやすさと考えれば、何かあるかも.....

20s2034: 摂動論では励起状態の粒子のエネルギーの近似解を求めることはできるのか **M:** 本気か？ // 摂動論についてきちんと勉強すれば分かるのでは？ // 例えば波動関数やエネルギーが教科書 (7.45), (7.46) 式のように展開されるとしているが、この時の波動関数やエネルギーは、基底状態のものに限られるのだろうか？ 限定される理由があるのだろうか？ 近似法は、基底状態しか対象

にしないのだろうか？

20s2035: 変分法と摂動法はそれぞれどのような問題に適していますか？ **M:** 18s2018 参照

20s2036: 摂動論の基本的な仮定は、逐次補正が急速に小さくなって先に進むにつれて重要でなくなる、とあるが、大きくなってしまった場合はあるのか。 **M:** 20s2027 参照

20s2037: 摂動論についてですが、無限の項を足しあげると測定結果は有限の値に収まるが計算結果が無限になってしまうことを繰り返し込み理論で解決しましたが、元々の演算子の固有値に縮退がなくても計算結果が無限になってしまうことはあるのでしょうか？

M: “逐次補正が急速に小さくなって先に進むにつれて重要でなくなる”という摂動論の基本的な仮定は、何のためにあるのだろうか？ // 摂動論などを用いて求めようとしている現実の物理量の中には、無限になってしまうものがあるのだろうか？

20s2038: 摂動論で補正の値がマイナスになる場合もあるのですか。 **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 勉強すれば分かるのでは？

20s2039: 変分法と摂動法で、近似解を求める前からどちらの方が正確な解が得られるか予想することはできますか？ **M:** 出来るものも有るかもしれないし無いかもしれない。20s2004 のコメント参照

20s2040: 先生が近似をとるとき問題によって変分法と摂動法どちらを用いるか基準はありますか。またなぜその基準となるのですか。 **M:** 基準について、特に考えたことはありません。// 実際の問題にあたるときは、摂動法を使おうとか変分法を使おうとかのレベルではなく、分子軌道法を使おうとかそういうレベルで考える。そこでももちろん、分子軌道法はしかるべき近似法を背景としているわけなのだが.....

20s2041: 近似解を求めたい n 番目の基底状態に縮退がある場合一次の摂動エネルギーを今回の調和振動子のようなケースと同様に求めることができないらしいが、一次の波動関数の項がエネルギーを求める際に消えるから求められる気がするのだがどこが誤りなのだろうか。 **M:** 雰囲気ではやっと思えるのではなく、キチンと自分で計算してみればいいのでは？ // 19s2051 参照

20s2042: 摂動論において無限次の摂動ハミルトニアンを入れることで求めた値が発散せずに厳密解と同じ値を得る方法はあるのでしょうか。 **M:** 20s2015 のコメント参照

20s2043: 非摂動法ハミルトニアンで、縮退の有無を考えた時に摂動論どのように適応されるのですか？ **M:** 19s2051 参照

20s2045: 変分法はグラフの形が分かっているとき、摂動論は厳密に解けるものと近い式であるときに使いやすいということですか。 **M:** 本気か？ 自分で判断できないのはなぜか？ // 両方使って比べてみればいいのでは？

20s2046: 摂動論の方が計算がややこしいように思えるのですが、摂動論を使った場合の方が都合のいい例はありますか。 **M:** 20s2004 のコメント参照, 18s2018 も参照

20s2047: 8 章であったヘリウム原子の基底状態エネルギーを求める 13 次の摂動論にて、13 次まで求めるのは非常に大変であり、またそこまで求めても実験値の正確さが追いつかないとありましたが、何時までの摂動計算なら実用的だったのでしょうか？ **M:** 対象によって異なるのでは？

20s2048: なぜ摂動など天文学の言葉をもとにしているのですか。 **M:** 本気か？ 科学史を勉強すれば分かるのでは？

20s2049: (表 8・2) より、エネルギー (Eh) = -2.00 - イオン化エネルギー (Eh) の関係が成り立つと言えるか。それとも偶然か。 **M:** 本気か？ 自分で考えて分からないのはなぜか？ // イオン化エネルギーの定義は？

20s2050: ヘリウム原子の例では、摂動論も変分法も非常に良い近似が得られたが、どちらも良い近似が得られない場合はどのように計算すれば良いのですか？ **M:** 教科書 p.263 の“近似的方法を～ほとんど望みの精度で解くことができる”を、未だに理解できないのでしょうか？

20s2051: この章でシュレディンガー方程式の近似解を得るために摂動論を用いていたが、それ以外にも摂動論を用いているものはあるのか？ **M:** 本気か？ 教科書や参考書をよく読めば分かるのでは？ // 物理学を勉強すれば分かるのでは？

20s2052: $E_n(0) - E_f(0) = 0$ になってしまうような波動関数の場合には摂動法は使えないのですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // その式はどこから出てきたのか？ 分母がゼロになる場合に、その計算式は意味があるのか？