

疑問1) ハミルトニアン? 演算子? 訳わからないんだけど。

答1) 演算子とは、簡単なものであれば+ (プラス) とか- (マイナス) とか× (カケル) とかです。つまり、数学的に何か計算するためのものです。今の場合、「電子がどの辺に存在するか」が波動関数  $\phi$  で表されるのですが、その波動関数を状況に応じて積分したりするものをひっくるめています。

その中でもハミルトニアン演算子は、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの計算のための演算が入ったもので、別名「エネルギー演算子」と呼ばれています。教科書 p.270 参照。

疑問2) VB法で、なぜ  $H_2^+$  電子の空間波動関数  $\phi$  が、それぞれの原子軌道の足し算 ( $\phi_a + \phi_b$ ) ではなく掛け算 ( $\phi_a \phi_b$ ) になるのか?

答2) 「確率密度」をあらわす関数が、波動関数だからです。二つのさいころをふり、1と6の目が同時に出る確率はいくつか、という問いには確率の掛け算を行うでしょう? あのイメージで良いと思います。

疑問3) 1s って何か?

答3) 核にいちばん近い電子軌道で、球の形をしています。教科書 p.349 参照。

疑問4) 波動関数でよく言う「規格化」って何?

答4) 波動関数の 2 乗を全空間で積分したものが 1 になるように、波動関数を設定することです。教科書 p.266 参照。

疑問5)  $d\tau$  ってなに?

答5) 微小体積です。  $dx dy dz$  だと思ってください。教科書 p.265 参照。