

プロGRESS物理化学 II (20121005) M: 以下は宮本のコメント

10s3002: 近似法には, B-O 近似以外には どのようなものがあるのか. M: 各種の分野の専門書を見れば, それぞれにいろんな近似があるでしょう. 分子構造論に関係する物として思い付くのは, LCAO 近似とか, 一電子近似とか, 平均場近似とか, クープマンズの定理もある意味では近似でしょう. あと, そもそも, Schrödinger 方程式も, 非相対論の枠組の中での話なので, 近似といえば近似.

10s3003: \hat{H} の各項の符号はどのように決めるんですか. だいたい \hat{H} などについて忘れてました. どのあたりから復習すればいいのでしょうか?? M: え? ふつーですけど. (+) \times (-) = (-), (-) \times (-) = (+)

10s3008: B.O. 近似を用いらずに分子オービタルを求めると, B.O. 近似を用いた場合の図 9.6, 図 9.7 と違うグラフになるのですか? M: そりゃ, 違うでしょうね. B.O. 近似を用いずにどうやって求めるか, 結果がどうなるかは知りませんが.

10s3010: ベクトルを含む規格化も通常通り 1 になるのはなぜですか? M: “ベクトルを含む規格化” って, 何ですか?

10s3017: よりきれいな結晶を作るには, 固体を溶かして, より遅い速度で冷やせばいいと予想したのですが, どうですか. M: どうって, 何が? 私に感想を聞いて, どうするの?

10s3018: 許容遷移であることを群論的に説明するとは具体的にどういうことですか? M: 許容遷移は, 遷移モーメント $\mu = \int \psi_f^* e r \psi_i d\tau$ がゼロでない. この積分を評価するのに群論を用い, 被積分関数が全対称 (広い意味での偶関数) であればよい.

10s3020: X 線や γ 線を放出する化学反応はありますか? M: 普通の意味での化学反応にともなってやりとりされるエネルギーの大きさは, kJ/mol で測るオーダーなので, 電磁波のエネルギーで言えばせいぜい可視光から紫外線程度ではないかと.

10s3021: 他の年もこのような人数だったのですか? // H_2^+ の分子オービタルを見ると原子の真上が一番電子が多いように見えるけど, 実際そうなのだろうか? M: 人数が, どうかしましたか? // 単に 1s 軌道はそうだというだけ. この先出てくる pdf... の

オービタルではまた異なる. さらに
ますね. で, “実際” とは??

10s3023: ゴリラガラスは, どうして,
ゴリラガラス” って, 何ですか?

10s3025: H_2^+ について考えたときに
ですか? 賀来について考えている
をどう見ますか?

10s3026: $K = - \int dr \frac{1s_B^* 1s_A}{r_B} + \frac{S}{R}$
でしょうか? 答えを得るのに一週
問する意味は何でしょうか? // 教

10s3028: 計算で導き出した分子の形
などで直接視認する以外に方法は
の所で, 分光学的スペクトルとの
とあわせて, 教科書を見てはいか

10s3029: 指標表の数値はどのような
得られる指標を直行変換によりブ
表現の間の直交性を使うとか, 対称
の数と規約表現の数との関係を使

10s3036: 変分法と摂動論は, どちらか
とがないので分かりません. 多数
すか?

08s3003: H_2^+ イオンは実際にどんな
ということでしょうか? 分子に

09s3040: 反結合性オービタルのプロ
り上るときと違いはありますか.