

- 10s3002:** 結合角から s 性がわかるということは、結合角を設定して、分子を想像することは可能なのでしょうか。 M: “結合角を設定して、分子を想像する”とは、どういうことでしょうか。まあ、想像だけなら、どんな分子でも想像できると思いますけど...
- 10s3008:** VSEPR 理論にもとづいて分子を配置すると、異性体ができると思うのですが、その場合、分子同士の反発の角度は変わるので、 ψ_n の値も変わるのでですか? M: 意味不明です。VSEPR は、ある原子の周りに結合する原子などを配置するものであって、分子間の相互作用をあつかっているものではないと思うのですけど。// さらに、反発の角度が変わると ψ_n の値が変わるって、いったいどういう話なのでしょう?? そもそも ψ_n とは?
- 10s3010:** 群論を学んでいて、たくさんの記号が出てきて、覚えづらいのですが、どうすればいいでしょうか。 M: 複雑な漢字を覚えるときに全体像を一気に覚えるのではなく、偏や旁に分解して、それぞれの部分の形とその配置として漢字を構成して覚えやすいよネ。そして部分の形の意味とか読みとかで、その漢字の意味や読みがなりたっていますよネ。
- 10s3018:** p 軌道のローブの長さは物質によって異なりますか? ローブの長さを求めることはできますか? M: ローブの長さを、どのように定義しますか? 例えば水素類似原子の動径分布関数は、図 6.3 のような形をして、無限遠まで延びています。もう少し角度方向の情報を加えて空間的な形をイメージするならば、図 6.5 や 6.6 の様に、濃淡や等高線表示ということになります。そうは言っても、CPK モデルのように、分子の外形があるものと考えたくなるのが人情でしょう。すると、簡単には、vdW 半径を考えれば、これは原子の種類 (元素) によって、異なった値が割り振られています。もう少し分子の個性を強調したければ、電子密度分布の一定の割合を囲む閉局面を考えたりすることもあるでしょう。あるいは電子密度分布がある一定の閾値をこえる領域を囲む閉局面という方法もあるでしょう。
- 10s3020:** 例えば CO_2 の立体構造は直線形ですがそれぞれの原子の同位体で同じように CO_2 を作る場合、立体構造は少し変化するのでしょうか? M: 20121019 の 10s3018 も参照。同位体置換によってポテンシャル曲線が変わるということは、エネルギーが極小になる位置、すなわち平衡核間距離などの構造要素もわずかながら変化することが予想できますよネ。
- 10s3023:** 分光光度計の検出器は、どんな仕組みで、光を検知しているのですか? M: 高級なものだと光電子増倍管 (ホトマル, photomultiplier) を用いているでしょう。他にも ccd やら 熱電対やら、いろいろあるでしょう。機器のメーカーに聞いたり、カタログを参照してみればよいのではないのでしょうか。

- 10s3026:** VSEPR では角度まで求めら
わかる式はないのか? M: 残念な
もいいですよ。チャレンジしてみ
ります。分子のシュレーディンガー
ることです。
- 10s3028:** 今のところ存在が確認されて
どの軌導 [ママ] の混成から出来て
味ですか? どう補って読めばいい
ことですか?
- 10s3029:** CH_3Cl の場合、3 つの C-H
と等価な軌道になるんですか? M
結合は等価であって、ただそのうち
 CH_3Cl は C_{3v} の点群に属するの
点群では、縮重表現は 2 次のもの
た三つの等価な (三重に縮退した)
参照。
- 10s3036:** なぜ、授業で 11 章の計算量
において、計算機による量子化学計
素のひとつではあります。計算によ
こまでで説明されていない) 様々な
学的手法を使う場合に、ブラックボ
味でも大切な事だとは思いますが、
11 章は「量子化学計算って、中で
上のものは得られないにもかかわ
あげる必要性は低いように思われ
ことですか?
- 09s3040:** H_2O のときも sp^3 混成のよ
M メタン (CH_4) の時も、実際に昇
のうちのひとつを 2p に移すとし
う意味でしかありません。混成軌
の位置に混成軌道のエネルギー準
ています。実際には、水素の軌道も
ていると考えられます。すると実
な四本の C-H 結合に相当する等価
半には 10s3029 も参照。