

10s3003: NTO の数値データはどのようにして求めたのですか。 M: それぞれの分子軌道法によって異なると思いますが, 例えば “与えられた化学的環境のもとでの動径部のシュレーディンガー方程式の解として, 数値関数 (数表) の形で求める” だそうです (DV- $X\alpha$ 法).

10s3008: χ_r を積分で表わすようなことはしないのですか。 // 全部まじめに計算するの「全部」とは具体的に何ですか。 M: χ_r は AO ですから, 積分を含むようなものではありませんが? 何を聞きたかったのでしょうか。 // その話の項目の題名は, “分子積分をどうあつかうか?” でした。物理化学実験でやった HMO では, $H_{ii} = \int \chi_i^* \hat{h} \chi_i d\tau = \alpha$, $H_{ij} = \int \chi_i^* \hat{h} \chi_j d\tau = \beta$ (ただし i と j は隣接) などとパラメータにしていました。後者 H_{ij} は, 二中心一電子積分ですが, ハートリー-フォック-ローターン (HFR) 法で分子の問題を扱うときには, 最大で四中心二電子積分の $\iint \chi_a(1)\chi_b(\frac{1}{r_{12}})\chi_c\chi_d d\tau_1 d\tau_2$ (a,b,c,d は原子の index) まで出てくる。

10s3010: テキスト p.446-447 にあるオービタル指数とは何ですか。またどのような計算で求められるのでしょうか。 M: 式 (11.2) やその近辺に書いてある文章の説明を, 読んでいないのでしょうか? p.304 も見てね。

10s3018: ファンデルワールスの状態方程式のファンデルワールス定数はどのようにして求められたのですか? これは実験的にではなく, 計算で求められますか? M: vdW の状態方程式は, “実在気体の状態方程式” のひとつとして提案されているものでしたね。具体的な実在気体を記述しているかどうかは, どうやって確かめればいいのでしょうか?

10s3020: 光電子分光法は分子オービタルの研究にも使われるとタイトルにありますが (p.420, (10.4)) 現在分子オービタルの研究をしている化学者は, どんなことに役立てようと研究を進めているのですか? M: 分子の性質 (物性・反応性 他) についての理解・予測。ひいては, 必要な性質を持つ分子の設計, 合成方法の立案, 他。すなわち, 分子 (物質) について, われわれが知りたいことややりたいことの, 全て。

10s3023: マッカーリ・サイモンの上巻の式 (11.8) の ϕ_{1s}^{GF} の前の係数はどうやって決めているのでしょうか? M: p.447 の記述では, STO と GF の指数を, 両者の重なり積分が最大になるように決めたと書いてある。GTO が STO の近

似ということを見ると, 最も係数はその次の段階で, ハートリー-フォック法ではないでしょうか。正確な詳細ページに記載の参考書)。

10s3026: 三次元のグラフをかけるように利用しているソフトは, ありますか? M: あります。と, 必ずしもそうではない。

10s3028: 4.33 で e^{ikx} は右に e^{-ikx} とわかるんですか。 M: “4.33” ではありませんでした。しかし, もしもこのように記述している問題文をじっくり読んでいないのであれば, 間違っているのかもしれませんが。

10s3029: 分子積分で重要なものとは何ですか? M: “重要” が否かは, 価値判断ができません。そのため, 何らかの方法が提唱されています。最も広範囲にわたる積分のうちで, 微分重なり $\chi_i \chi_j$ をゼロと置く zero differential overlap (ZDO) と異なる原子に属する場合に限らず, 微分重なり $\chi_i \chi_j$ differential overlap (NDDO) 法が提唱されています。

10s3036: 固有値方程式の, 「ある固有値に対する定数とある関数の積が得られる」という式ですが, どのように捉えたら良いのでしょうか? M: 行列で考えてはいかがでしょうか? 行列をイメージできるでしょう。

09s3040: 図 10.12 は $90^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で角度が変化する角になったり, 180° より広くなる角にならない本気ですか? 例えば水分子の結合角は 104.5° だったのです (!) // 閑話休題, 結合角 90° とはありえないでしょう。また 90° では, 結合角が 90° よりも小さ