

10s3003: x 線構造解析で電子密度が高いものを同定することに便利であることはわかりましたが、逆に電子密度が低いものを同定することが簡単にできるものはありますか。M: たいていの測定方法は、何かがあることを検出するものなので、何かが無いことを検出するというのは、珍しいのではないかな。

10s3008: MO 法の種類が多くて違いが理解できなかったのですが、何故こんなにも種類があるのですか？そして、半経験的とはどういうことですか？(授業中に既出かもしれませんが。) M: 前回から今回の前半までで紹介したように、分子軌道法と一口に言っても、考慮すべき要素がたくさんあるわけです。で、それぞれに応じて、計算結果の信頼性や正確さ(現実世界・実験結果にどの程度忠実か)あるいは計算のコスト(時間や労力)が違います。多種の MO 法といっても、全部が同時にできた訳ではなく、それぞれの時代に使える計算機資源の能力に応じて、徐々に近似を高め、精度を向上させ、普及し、発展してきたわけです。選択肢が豊富な現代では、結果の信頼性と計算コストなどから、必要に応じて手法が選択されているようです。実験研究者が、目の前のパソコンで、すぐに答えを知りたい、等々ときには、半経験的手法(MNDO レベル)が現在でも使われることがあります。// 半経験的手法とは、分子積分をパラメータとしておき、計算結果(主に生成熱)が実測値を再現するように、それらの値を決めている方法です。経験的方法はもっと直接的で、クーロン積分の値をイオン化ポテンシャルの実測値とする、等のようにパラメータの値に経験値(実測値)を当てます。非経験的方法は、これらのような経験的に決められるパラメータを使わずに、全部の積分の値を理論的に計算します。しかし、基底関数(波動関数)をどうするかについては先験的に決定する方法はなく、必要な計算精度と計算コストから妥当なところが選ばれます。ここで適切な基底関数の選択をするためには「経験」が必要だというのが、有名なジョークです :-)

10s3010: 経験則というものがありますが“法則”と呼ぶにはどのような基準があるのでしょうか。M: 言葉の意味が分からなければ、辞書を見ればいいのでは？導かれたのが経験的であろうが理論的であろうが、法則は法則でしょう。量子論の創世期で言えば、ウィーンの法則というものがあり、それは輻射の強度が最大の波長と温度との関係を記述しています。これは当初は全くの経験則でしたが、今ではプランクの黒体輻射の式から理由付けされます(導出できます)。

10s3018: どの MO 法を用いるかを、どうやって決めているのですか？ M: 10s3008 参照

10s3020: 宇宙でたんぱく質の実験をしていますか？ M: NASA の Web 学・生物学に関する実験や材料・物数おこなわれているようですが。

10s3023: 光学異性体(アラニンなど)が出来るのですか？ M: 光学異性光源であれば、赤外線について解読できます。偏光していない光源学系の都合で、偏光特性が表れてるので、光学異性体とは関係ない。異性体とは、分子のパッキングがことない。

10s3026: いろいろな MO 法がある。MO 法はどれなのか？ M: 10s3008

10s3028: 現在最も分子軌道法で正確なものは、どういうことですか？ M: 書籍や論文“”という点では研究の最前線は、どういうことですか？!

10s3029: 分子はそれぞれ固有の振動が変化する場合に生じるとある。置かれた双極子モーメントは、そのエネルギーを持ちます。その周期的に変化します。一方で電磁振動が共振すると...

10s3036: 最近の化学分野の論文を。書館または教員に相談すればいい。

09s3040: “汎関数”とはどういうものか？意味が分からなければ、辞書を見れば。代入すると、関数の値が得られます。汎関数”は、関数の関数とも言われます。ち、エネルギーは電子密度の関数というわけ。