

分子分光学 (20220606) **M:** 以下は宮本のコメント

- 19s2053:** ベンゼンの吸収スペクトルで、実測と理論が異なっていましたが、この時に 1 本しか出ないはずなのに 3 本出てしまった時、失敗したとはとらえないのですか？ 3 本出るように理論を考え直すのが一般的なのですか？ // また不十分と間違いでは大きな差があると思うのですが、異なった結果に対してどのような取り組みをすべきなのですか？ **M:** 色々な近似やモデル化・抽象化が、理論と実験とが食い違う理由として第一に考えられるので.....
- 20s2029:** 高分子のような大きな分子も振動計算できますか **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // もしもできないのならば、高分子と低分子との境界はどこか？ 振動計算できる最大の分子から、一原子増えた時に計算できなくなる理由は何か？
- 20s2030:** ベンゼンの基準振動解析において、簡約する手順でどうしても整数値にならないものがあるのですが、どのようにして計算しているのですか？ **M:** 原理的に整数にならなければおかしいので、計算間違いでは？
- 20s2034:** 今回の講義で $\pi\pi^*$ 遷移について扱ったが、錯体の d-d 遷移についても同様に考察できるのか **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 遷移の種類によって別々の手法を用いなければいけないと考えた理由は何か？ 科学ってそういうものなのか??