

物理化学演習 A (20100628) M: 以下は宮本のコメント

- 08s3001: 真空中でも反応速度は変わらないのですか。 M: 原料の存在は真空に反しないのか; -p
- 08s3002: 電子と光子は粒子性と波動性を持っています。しかし、光子は光っていて、電子は光りません。なぜ光子は光って、電子は光らないのですか? M: 電子もエネルギーを失って光るが?
- 08s3004: 近似的方法とは、厳密に方程式を解けない場合使うものですがその方程式が解けないのに近似的方法で求めた解はなぜその方程式の解として扱えるのですか? M: 厳密解が得られない
- 08s3005: 教科書 p.390 に、「ほとんどの分子は励起電子状態をもつ。」とあるが、励起電子状態をもたない分子にはどのようなものがあるのですか? また、なぜその分子は励起電子状態をもたないのですか? M: 例えば励起状態が解離状態でポテンシャルの極小を持たない。『だけで解はある。
- 08s3006: 二原子分子の赤外線スペクトルは調和振動子によって説明できますが、それ以上の多原子分子の赤外線スペクトルはどのようにすれば説明できますか。 M: 教科書 pp.555-563 参照
- 08s3007: 天然の水素は、0.015 % の重水素原子 D を含む。H<sub>2</sub> と D<sub>2</sub> が混ざり合っている気体から効率よく D<sub>2</sub>O を生成するには、どうしたらよいのだろうか。 M: 六フッ化ウランはどうしてる?
- 08s3008: 分子の結合角はどのように測れるのですか? それはどれほどの信頼性がありますか? M: 教科書 図 1.8 (a) が得られる理由や、§13.8 あたり (?) も参照して考えてみればいいのに
- 08s3009: 式 (7.45), (7.46) は逐次補正のない式 (7.42) を用いて導いているのになぜ式 (7.45), (7.46) は逐次補正があるのか?  $\hat{H}$  に逐次補正はないのか? M: 摂動論と補正項の導出を復習せよ。
- 08s3010: 多くの文献を見ると、[図は省略] 赤外線付近が赤紫に見えるのですが、紫っぽかったら波長は短いのではないのでしょうか。 M: 意味不明。単に暗い赤に見えるだけでは?
- 08s3011: 変分法及び摂動法を用いて不都合が生じた分子は、どのような方法を使って対処するのですか? M: 変分や摂動が悪いわけじゃない。試行関数を改良したり、高次の摂動項まで考慮する。
- 08s3012: テキスト p.317 に、0 次の波動関数とあります。ハートリー-フォックオービタルをなぜ定数として扱っても良いのですか? M: 何のこたか? 定数として扱っていないが?? 誤解でしょう。
- 08s3013: 物理化学実験で粘性率の絶対値は求めることはできないのかという設問がありましたが、粘性率はもともと割合なのに、絶対値というがい念はあるのでしょうか。 M: 何の割合か?
- 08s3014: 分子イオン H<sub>2</sub><sup>+</sup> は安定な化学種とされているが、H<sub>2</sub><sup>+</sup> はどのようにして作られるのか。また、安定性はどのように確認できるのか。 M: 要は還元すればいい。なお、質問後半は、スバラシイ!!
- 08s3015: 教科書 p.271 より、(7.20) 式  $E(Z) = Z^2 - \frac{27}{8}Z$  について  $E$  を最小にする  $Z$  の大きさを有効核電荷と考えることができる、と述べられていますが、それはなぜですか。 M: 水素型原子と近似してる。続いて記載されてる理由は読んだ? 『を数として発見したことは偉大だった!
- 08s3016: 対称要素 E は対称操作は変化なしで、すべての分子にあてはまります。このあたりまえの対称要素 E は群論にどのように関連してくるのですか。 M: 群の定義 (p.494) 参照。ゼロやイチ
- 08s3017: EPR で分子を測定する時、測定を失敗する一番の原因とは何ですか? M: 実験に失敗は無く、あくまでも実験事実が正しい。(ただし、期待した結果じゃないことは、よくあるが...)
- 08s3018: 基底状態のエネルギーは、1 次の摂動論で誤差が約 5 %、より高次の計算をすれば、さらに誤差が小さくなっていますが、摂動論よりも誤差を少なくするには、どのような近似を用いれば良いのでしょうか。 M: 摂動論だから誤差が小さい訳じゃない。ゼロ次のとり方が適切だったから。
- 08s3019: 水素結合の強さに影響を与える因子として距離以外に何かあるのでしょうか。 M: 神託
- 08s3020: 野球ボールなど時速 150 km にもなると目で追うのが大変であるが、光は光速なのになぜ見えるのか。 M: ボールも当たれば痛さで存在がわかる。『を求めず自分で調べて考えれば...
- 08s3021: 双極子モーメントをもたない分子はマイクロ波も赤外線も吸収しないということだが、表 5.1

- にある等核二原子分子の力の定数や結合長は、どのように求められたのか。 M: 炭酸ガスが赤外線を吸収するのは有名だと思っていたが... 振動スペクトルについて再調査せよ。『エネルギー。
- 08s3022: 分子構造が分かっていたらその分子の色をある程度予想することはできるか? またどのような方法で求められるか。 M: 基底状態と励起状態のエネルギーを計算する。その差が励起
- 08s3023: 質量を持っていない粒子はあるのですか? M: 光子、重力子; -p
- 08s3024: (0 (ゼロ) を説明するのは難しいと思うのですが,) 英語やスペイン語では 0 hours, 0 horas と、0 については、複数形を用いるそうです。日本語だと、曖昧になりがちだと思うのですが、日本語では、複数、単数どちらで扱っているのでしょうか。 M: 0 が単数、00 が複数なのは; -p
- 08s3026: 変分法や摂動論などいくつかの近似方法を学習しましたが最も正確な近似方法は何かなのでしょう? M: 方法が問題なのではない、使い方の問題。良い試行関数が、良いゼロ次波動関数が。
- 08s3027: 光化学反応においてその反応や変化を促進させるために増感剤を添加する場面があるが、増感剤となりえる分子は一般的にどのような分子なのだろうか。 M: 例えばそれ自身で失活しにくいとか、色々あると思うので、調べて考えてみたらいいか。
- 08s3028: シュレーディンガー方程式を厳密に解けない複雑な系では変分法や摂動法を使うが、この問題にはどちらがよいなどというのはあるのでしょうか。 M: 道具を上手に使える条件が整って
- 08s3029: 中性子が陽子や電子に変化する場合、その電荷はどこから取り入れるのでしょうか? M: CP 保存 (?) または素粒子物理学を勉強したらいいか。『いる方。08s3011, 08s3026 など参照。
- 08s3030: 光子の動きを止める方法はありますか? M: 神託が必要なら、時計を止めたらいいか?
- 08s3031: 同じ電子配置のもので複数の項記号をもつことがあると思いますが、それらの違いはどのようなことに影響を及ぼすのでしょうか? M: 項記号の要素を考える。各種の角運動量が違う。
- 08s3032: 化学反応を考えるとき、反応に関与しやすい電子、しにくい電子は決まっているのでしょうか。 M: 本気? 価電子が何だか知ってる? 『すなわちエネルギーが異なる。Na の D 線の分裂。
- 08s3033: 試行関数に含まれる項のうち、大きなエネルギーに対応する項ほど基底状態エネルギーに対して小さな寄与しか与えないのはなぜですか。原因は何ですか。 M: 何の話か? 全く意味不明。
- 08s3034: 変数分離法の形  $(u(x,y), t) = X(x)T(t)$  にすることができない波動関数の中で物理的に重要な意味をもつものはありますか? あるとしたらどのようなものなのでしょうか? M: すぐには思
- 08s3035: 液晶を持つ物質に X 線ビームを向けると、図 1.8 のような X 線回折図形を示すのか。 M: 回折像が得られる理由は何か? 液晶はその要件を満たすか?? 『いつかない。調べて教えてネ。
- 08s3036: 7 章では近似を用いて、エネルギーなどを計算していますが、それによって得られた値は実測値と比べて、どれくらいの誤差から、よい近似あるいはあらい近似として扱われるのでしょうか? M: 「よい・あらい」は目的に応じた定性的な言葉。普遍的で明確な境界線が引けるか?
- 08s3037: シンチレーションとは、光点が短時間強く間欠的に輝くことを意味するが、特に蛍光体に放射線が照射されたときに発光するのはなぜか。 M: 教科書 図 15.1 あたりを参照。
- 08s3038: 気温や室温など温度が上昇すると息苦しさを感じるのはなぜか。 M: どこが授業内容と関連してるの? 『か? 教科書 § 7.4 や複数の参考書の該当箇所を繰り返し読んで考えたか。
- 08s3039: 「1 次の補正」がよくわかりません。何のために 1 次の補正を計算し、得られた答えは何を表わしているのですか? M: 08s3009 参照。理解するためにあなたはどんな努力をしている
- 08s3040: 教科書 p.264 では、試行関数  $\phi(r) = e^{-\alpha r^2}$  が使われており、問題 7.5 では、 $\phi(r) = re^{-\alpha r}$  が使われています。これらの試行関数  $\phi(r)$  は、どのような考察の上で決定されているのでしょうか? M: あなたなら、試行関数にどんな要件を課すか? 既知の性質は何か?
- 08s3041: 物質はその物質に対応する波長の光だけでなく、それに近い波長の光もエネルギー準位の振

動により吸収してしましますが、どんな構造・物質にも吸収されることのない波長の光は存在し得るのでしょうか。 M: この条件下で原理的に有り得るかを、自分で判断できないのか？

08s3042: ヘミアセタールは存在する時間とても短く、合成できないということを聞いたのですが、どのようにして、ヘミアセタールは発見されたのか？ M: 重大な誤解 // §15.8, Chap.28-30 参照

08s3043: 光によって電子が励起するときは、あるエネルギー準位間に対応した波長の光を吸収しますが、熱によって励起するときは、光の波長のようなエネルギー準位間に対応した基準はないのですか？ M: 熱エネルギーとはマイクロに見て何か？ 光と何が決定的に違うか？

08s3044: 2種類の液体を混合すると、混合液の体積が、それぞれの液体の体積を足したものよりも少なくなることはなぜですか。 M: コップ一杯の小石と水を混ぜたら、どうなる？

08s3045: 分子1個は光子1個を吸収するという「光化学当量則」がありますが、分子1個が光子を2個以上吸収することもあります。光化学当量則はどのような条件で成り立つのですか？ M:

08s3046: 分子の振動数と、分子が吸収する赤外線量は関係性があるのでしょうか？ M: ランベルト-ベールの法則に従わない道理があるのか？ 『多光子吸収が起きる条件は？』

08s3048: エネルギーは消滅させられないのですか？ M: 本気か？ エネルギー保存則とは何か？

08s3049: p.271 で有効核電荷が2より小さいとなっているのに p.282 の最後の部分で  $Z=2$  とおくのはどうしてですか？ M: 別の話。 『性質にどんなものがあるか考えてみてはいかがか。』

07s3001: p.277 に“励起状態のエネルギーの上限のもっとよい値を得る方法がある”とあるが、どんな方法ですか？ M: 例えば既知の制約を明示的に考慮してはどうか。励起状態の備えるべき

07s3002: 複雑な場合にシュレーディンガー方程式を解くことができないのに、近似的方法を使うとシュレーディンガー方程式をほとんど望みの精度で解けるということは、近似を用いない場合のある程度のシュレーディンガー方程式の解がわかっているということなのですか。 M: 近似のレベルを上げて、解の収束具合を見れるとか、手はいろいろあるだろう。考えてみてはいかがか。

07s3004: 光触媒作用として、酸化チタンや酸化亜鉛に紫外線をあてると、酸素が吸着する、光吸着ということが起こるらしいのですが、酸化チタンや亜鉛に酸素が吸着しているということは、どのように測定・観測されるのですか？ M: 分光学的手段、または脱着して化学分析、など。

07s3005: 電子間反発の項を無視することによって、どれくらい誤差がでますか？ M: 表 8.2 参照。

07s3008: 摂動項が小さいときのみ摂動法が使えるが、どの程度大きいと使えないのですか。 M: 表 8.2 参照。非摂動のエネルギー  $-4$  に対して摂動項は約  $1$  にも達する！

07s3009: 普段何気なく感じている重力の正体とは何か？ どこから来る、何が原因の力なのか？ M: 一般相対性理論を勉強する。そして GUT (大統一理論) または TOE (万物理論) を学ぶ :-p

07s3010: 摂動法は摂動項がどの程度大きくなると使えなくなりますか。 M: 07s3008 参照。

07s3012: どうして必ず  $E_\phi \geq E_0$  になるのですか？ M: 問題 7.1 参照。『と光速が予言されている。

07s3013: 教科書の表紙の裏に、光速を表わす  $c$  は『真空中の光の速度』と書いていますが、真空以外の光の速度はどれくらいなんですか？ M: マクスウェルの電磁波の方程式で  $c_0^2 = 1/(\epsilon_0\mu_0)$

07s3014:  $\hat{H}$  について、非摂動項、摂動項はどうやって判断すればよいのですか。 M: p.279 の

07s3015: 変分計算で厳密な結果に近づけるための方法は、試行関数のパラメータを増やす以外に何かあるのでしょうか。 M: もちろん試行関数を作り直す。 『(7.43) 式の前をよーく読め。』

07s3017:  $4\pi \int_0^\infty \phi^* \hat{H} \phi r^2 dr$  や  $4\pi \int_0^\infty \phi^* \phi r^2 dr$  といった式で  $4\pi$  や  $r^2$  はなぜ出てくるのでしょうか。  $E = \frac{\int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau}{\int \psi_0^* \psi_0 d\tau}$  で  $4\pi$ , および  $r^2$  はでてきませんが... M: 三次元のデカルト座標系と極座標系の変換を復習せよ (教科書 D 章あたり)。また積分における微小体積の表記にも注意。

07s3019:  $\int$  は  $\int_{-\infty}^\infty$  や  $\int_0^1$  を省略したものだんですよね？  $\int_{-\infty}^\infty$  や  $\int_0^1$  を一々書く必要はないってことでしょうか？ M: 文脈によるでしょ。

07s3021: 7.5 の積分の計算過程がよく分かりません。 M: 授業中に質問すればいいのに。なお、提出物が要件を満足していません (質問になってない)。丹念に自分で計算してください。

07s3024: 1 回の雷でどの位のエネルギーを蓄積することができますか。 [=は貝へんにつくりが守] M:

07s3027: Text p.280 の 2 行目のハミルトン演算子は、第 1, 2 項を非摂動ハミルトニアン演算子、第 3, 4 項を摂動としているが、どうしてか。(第 3 項は非摂動ハミルトニアンとならないのか。) M: 07s3014 参照。 『私は知りません、試して測って見たら？』

07s3030: 今現在、W 杯がテレビで放送されていますが、南アフリカでは玉が浮きやすいそうです。高地で行われているなどいろんな理由が考えられているのですが、先生はそれに関してどう思いますか。 M: どこが授業内容に関連した質問なのだろうか、と思う。

07s3031: 用いる試行関数は多くの問題において与えられているが、その試行関数は何を基にして決められているのか？ M: 08s3040 参照 『近似解は近似解でしょ。』

07s3032: 近似解として扱うことができるのはどのような条件がありますか？ M: 別に。

07s3033: p.265 図 7.1 の水素原子の基底状態に対する試行関数でガウス試行関数と厳密な試行関数の  $r/a_0$  が 0 に近づくにつれてずれが生じるのはなぜですか？ M: 関数形が違うから当たり前。

07s3035: p.300 表 8.1 の角運動量の原子単位で「プランク定数を  $2\pi$  で割ったもの」とありますが、なぜ、 $2\pi$  で割ったものが用いられるのでしょうか。 M: 角運動量演算子の固有値は？

07s3038: 非調和項を調和振動子に対する摂動と考えるとはどういうことですか。 M: 07s3014 参照。

07s3039: 永年方程式の二つの解で基底状態のエネルギーを求めるのに使わなかった方の解は粒子の第一励起状態エネルギーに相当するとありますが、もっと適当な求める方法があるというのは、何の方法ですか？ M: 07s3001 参照

07s3041: 近似的方法を使えばどんなに複雑な原子・分子もシュレーディンガー方程式を厳密にとけるのですか？ M: 日本語分かりますか？ 厳密に解けないから近似解を求めるのにね。

07s3042:  $\hat{H}$  が一次演算子である時  $\hat{H}\Psi = C_1\hat{H}\Psi_1 + C_2\hat{H}\Psi_2$  となるのに何故  $\hat{F}\Psi_1 = f_1C_1$ ,  $\hat{F}\Psi_2 = f_2C_2$  のとき、 $\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$  に  $\hat{F}$  を作用させると一般的に  $\hat{F}\Psi = \text{const}\Psi$  にならないのですか？ M: 意味不明。式が間違ってる？

07s3044: 理論計算と実験値での誤差はどの程度であれば小さいと言えるのですか。 M: 状況による。

06s3003: スレーターオービタル、ガウス=オービタルなどの使い分けがよくわからなのですが [ママ]？ [=は判読不能] M: そうですか。末尾に疑問符が付いていますが、それだけでは質問になりません。

06s3004: 物理法則と信仰による宗教に矛盾があるとき科学者はどのようにそれを受けとめているのでしょうか。 M: 人それぞれでしょう。授業内容とどう関連しているのか？

06s3008: 7.1 はどこが間違っているのかよくわからなかったです。 M: そうですか。でも、提出物が要件を満足していません。 『式を発明して使用してきた人類の叡智に対する挑戦ですか？』

05s2059: 行列式の有用性がよくわかりません。行列式を使わなくても困らないのでは。 M: 行列

記名なし: 変分パラメータの使い分けはどのようにすればよいのか。 M: 何の話でしょうか？

記名なし: わからない人は質問してくださいと言っていたが、何がわからないのかすらわからない場合もあると思います。 M: 全くその通りだと思います。したがって「何がわからないかが分かれば、ほとんど解けたと同じ」と、常々主張しています。正しく質問するためには、相応の知識や努力が必要なのです。みなさんはどんな努力をしているのでしょうかネ ;-)