

- 08s3001:** カーボンナノチューブのような網状の高分子は他にどのようなものがありますか。 M: 私
は知りません。調べて教えてくださいネ。 『単位系は？』
- 08s3002:** 問題 8.9 でスレーターオービタルの $1s$ に $\zeta = f \text{ rac}Zn$ を代入すると、 $\frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z}{a_0}}$ とな
ります。これは、p.224 の水素型原子とは異なります。 $\zeta = \frac{Z}{a_0}$ だと同じ値になるのですが、p.304
には $\zeta = f \text{ rac}Zn$ を代入するとあります。これはどういうことでしょうか？ M: それぞれの
- 08s3004:** 化学という分野を物理化学や分析化学などに分ける意味はあるのですか？ M:
- 08s3005:** 教科書 p.379 に、HF の分子オービタルのエネルギー準位図 (図 9.19) があるが、 $2p_F$ のエネ
ルギーが $1s_H$ のエネルギーより小さくなるのはなぜですか？ $2p_F$ と $1s_H$ のエネルギー準位はど
のようにして決めたのですか？ M: 例えばハートリー・フォック計算。 『教育の効率化』
- 08s3006:** 東大の教授のチームが、光をあてるだけで電子を通しやすい状態になったり、電気を通しに
くい状態になる物質 (五酸化三チタン) のナノ結晶を作ったそうですが、なぜ光を当てるだけでそ
のような効果があらわれるのでしょうか。またこの物質を光記録材料として使えば、ブルーレイ
ディスクの約 200 倍の情報を記録できるそうですが、それはなぜですか？ M: 当人に聞けば？
- 08s3007:** 水温が上昇すると、水は膨張し、水温が下降すると、水は縮小する (温暖化の海面上昇と同じ
効果)。水が膨張したときにおいて、水分子間の振る舞いはどうなっているのか。膨張するというこ
とは、水分子間の隙間がわずかに大きくなったということか。水分子そのものの体積が膨張する
とは考えられない。 M: 分子の体積とは？それはなぜ不変なのか？;-)
- 08s3008:** フントの規則により、 S の値が大きい方が安定であるといえるが、スピン角運動量の値が大
きくなると安定になるのはなぜですか？ M: スピンの交換積分の符号
- 08s3009:** $2p^2P_{1/2}$ と $2p^2P_{3/2}$ はエネルギー的に近いため遷移のとき二重線を与えるが、 $2s^2S_{1/2}$ もエ
ネルギー的に $2p^2P_{1/2}$ 、 $2p^2P_{3/2}$ と近いのになぜ三重線とならないのか？ M: 選択律
- 08s3010:** 電子が同じ領域に 2 コ以上存在できない理由を証明するにはどうすればよいか。 M: 証明
が必要な事項なのか？ 『それは人工的に阻止できるか？』
- 08s3011:** 遷移で原子番号が大きくなるにつれて、選択律が破られるが、この原子番号の大きい原子の
選択律を破らせないためには、この原子にどのような操作を加えれば破らせない事ができるの
ですか？そもそも、そのような操作は可能なのですか？ M: 選択律が破られる原因は何か？
- 08s3012:** スピン変数 σ は、古典的に対応する量がないとテキストに記述されていますが、現代では
すでに求められているのでしょうか？ M: 求めるって、何をですか？
- 08s3013:** 問題 8.5 で光速の原子単位を求める問題がありましたが、3.5 章のブタジエンの問題では光
速を $2.998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ として用いていました。どのような場合に原子単位を用いれば良いの
でしょうか。 M: メリットがあるときでしょうね。
- 08s3014:** フントの第 3 の規則で副殻が半分より多く占有されているのとされていないのとで最安定
の条件が異なるのはどうしてか。 M: スピン軌道結合定数の符号
- 08s3015:** ハートリー・フォック方程式を解く方法として教科書 p.306 以降に「つじつまの合う場
の方法」が挙げられています。ここで「つじつまが合うようになるまで繰返す」とありますが、つじ
まが合うってどういうことですか？ M: 「すなわち～」の前に書いてある。『第四の色は何か？』
- 08s3016:** テレビは光の三原色をつかって色を表現してきましたが、光の三原色以外の色もつかって 4
色で色を表現するテレビができました。4 色をつかって何か違いがでるのでしょうか。 M:
- 08s3017:** 分子論的アプローチではない、量子化学に対するアプローチ方法はありますか？ M: ない

- と思う。むしろ後半の化学熱力学に対することかと。『スピン軌道相互作用として説明されている
- 08s3018:** シュレディンガー方程式で説明できない現象としてナトリウムの原子スペクトルの黄色い二
重線があるそうですが、説明できない現象として他にどのようなものがありますか。 M:
- 08s3019:** 重力や磁力には遮へいはあるのですか？ M: ケイパーライト :-p 『ものか？』
- 08s3020:** 周期表は同族や同周期で同じ特徴を持つが、人間の開発によって、周期表にあてはまらない
ような元素を作ることにはできるのか。 M: 元素の周期律の起源は何か？人為的に改変できる
- 08s3021:** 双極子モーメントから、分子の極性が判るが、さらに酸としての強弱を推定することはでき
ないだろうか。 M: 挑戦してみたらいかが？
- 08s3022:** 分子が赤外線を吸収するとき分子の双極子モーメントはどのように変化しているのですか？
M: 振動エネルギーが増すと、双極子モーメントはどうなるか、自分で考えてみたら？
- 08s3023:** 粒子の持つエネルギーを 0 にすることはできるのか？ M: どんなエネルギーのことか？
- 08s3024:** フェルミ粒子には、ミュー粒子やニュートリノなど、他にも色々あったのですが、つまり、ど
ういうことなのですか。 M: 果物には、林檎も蜜柑も苺もある。 『のだろうか？』
- 08s3026:** 8 章の原子スペクトル線で用いている選択律は原子番号が小さい原子だけに当てはまるとい
うことが書いてありますが、具体的にはどの原子まで、という境界はあるのでしょうか？あるなら
それはどこなのでしょう。 M: 境界があったとして、その前後の元素は、何が決定的に異なる
- 08s3027:** 酸素分子は基底状態において三重項状態をとっているが、このように基底状態で三重項状態
をとって存在する分子は他にどのようなものが存在するか。 M: いっぱいあるか探してみたら？
- 08s3028:** 教科書 p.305 の (8.16) 式は規格化されていない関数を使っているが、なぜ、規格化されてい
ないものを使おうと思ったのか。 M: 議論の流れで、どこが重要か？
- 08s3029:** 人の体は電子と陽子の数がつり合っている中で中性ですが、静電気などが流れる場合、人体
は正と負のどちらに帯電しているのでしょうか？ M: 自己矛盾。静電気は流れない :-p
- 08s3030:** 分子の形を計算を用いないで知る方法はあるか？ M: CO₂ は、IR とラマンの相互禁制則
から、対称心がある構造だとわかりますね。 『まんま、イオン化エネルギーを求めるため』
- 08s3031:** クープマンズの近似というのは何のために近似が必要なのでしょう。 M: その
- 08s3032:** 量子化学の分野において光のエネルギーは不連続的ですが、マクロ (日常の世界) の力学では
エネルギーが連続的に見えると思います。ここでもし光のエネルギーが連続的だったなら、日常で
の挙動が変わったりするのだろうか。 M: 紫外破綻、原子が潰れる、etc.
- 08s3033:** 原子単位を考える意味はなんですか。 M: § 8.1 にちゃんと書いてあるから、しっかり読め。
- 08s3034:** 光電効果では、光の量子仮説により、説明されるのはわかったのですが、なぜ光に「粒子性」
があるということがわかるのでしょうか。「量子」、「粒子」は、異なる意味だと、理解してしま
すが、ここでの「粒子性」とは一体光のどういった性質を表しているのですか？ M: 波動では説明
できないもの。光電効果の詳細を調べてみたらいかがか。
- 08s3035:** ラゲールの陪多項式は、水素原子型オービタルの動径部分を与える式の解を求めるときのみ
しか使わないのか。 M: 私は知りません。調べて教えてくださいネ。 『に説明できますよ。』
- 08s3036:** 電子の遷移には理論上許されないものが実際には起こるが、他に理論上許されていなくても
実際には起こるものにどのようなものがありますか？ M: 禁制遷移が観測される理由は、理論的
- 08s3037:** 映画館で用いられている 3D 眼鏡は黒いが、通常の眼鏡のように透明なレンズで 3D を見る
にはどうすればよいのか。 M: 偏光を利用する (?)
- 08s3038:** 研究の場で摂動論を用いるとき、どれくらいの項まで考慮するのか。 M: 必要なだけ。
- 08s3039:** 「厳密なエネルギーの値」は、何を根拠に「厳密な」と言っているのですか？ M: 07s3035

08s3040: 変分法は、時間に依存するシュレーディンガー方程式についても用いることができますか？もしそうなら、時間に依存するかしないかによって方法に違いは生じますか？ M: 変分原理は

08s3041: 教科書 p.390 の 9.16 節において『ほとんどの分子は励起状態をもつ』とありますが、逆に、励起状態を持ち得ないのはどのような分子なのでしょう。 M: 既出 『時間に依存するか？』

08s3042: s p d f ... と軌道数は増えていくが、これを何らかの方法で増える数を増減させることはできるのか？ M: 意味不明。そもそもの規則の起源は人為的に変更可能か？

08s3043: 摂動論には時間依存型のものがありますが、これは一定の摂動をかけて、結果の時間による変化を求めますか？それとも、時間によって摂動のかけ方を変えるのですか？ M: 教科

08s3044: 試行関数を選ぶ際に、考慮すべきことはありますか。 M: 既出、状況次第。 『書読めば』

08s3045: 直鎖アルカンでは trans 体になりやすく、環状アルカンでは cis 体になりやすいとされていますが、これは どうやって確認できるのでしょうか？ M: X 線結晶構造解析, NMR 等

08s3046: 物質は光を吸収することで、電子を励起して、吸収されなかった光を補色として見えますが、電子は常に励起状態になっているわけではないのに、常に色が見えるのはなぜなのでしょう？ M: まさしく、常に励起状態になっている訳じゃないから、常に色が見える ;-)

08s3048: 調和振動子のエネルギー準位は $E_v = h\nu \left(v + \frac{1}{2} \right)$ ($v = 0, 1, 2, \dots$) で与えられているが、なぜ、エネルギー状態はきっかり $h\nu$ ずつの変化しか許されていないのだろうか？ M: 参考書

08s3049: 仮に太陽から地球を見た場合、地球の表面温度が 280 K 程度なので直接目で見ることはできないと考えたのですが、どうでしょうか。 M: 神託が必要か 『で詳細な解法を確認せよ』

07s3001: p.306 “オービタルの概念も放棄している” とあるが、何故大きな原子や分子ではそうになってしまうのか？ M: 誤読

07s3002: p.299 「原子の電子的性質の解析に量子力学がいかに強力な道具であることを示そう。」とありますが、量子力学以外で解析できる道具はあるのですか。 M: 神託が必要か

07s3004: 授業の終わりに質問を書かせる意図はわかるんですが、その成果はあったのですか？ M: これは自分に聞くことでは？という訳で、与えられた機会を、あなたは活用できましたか？

07s3007: C_{60}^{2-} などのエキシトンを実際に確認する方法はありますか。 M: C_{60}^{2-} って、励起子 ??

07s3008: 原子単位はどのようなときに用いるとよいのですか。 M: 使うと便利とき

07s3009: あらゆる物質はクォークやレプトンと呼ばれる素粒子から構成されているらしいが、他の素粒子はあるのか。またそれらはどのような名称で、どのようなものなのか？ M: 素粒子物理学

07s3010: 原子単位ではエネルギーをハートリー (E_h) と表しますが、速度を表す記号はありますか。 M: 私は知りません。調べて教えてくださいネ。 『勉強すればいいのでは？』

07s3012: 変分計算で厳密値に近いエネルギーを得ることは、どんなことに役立つのですか？ M: 本気の質問ですか？あなたは学問に価値が無いと考えているのですか？

07s3013: $E = mc^2$ という式を光子で考えると、質量が 0 なのでエネルギーも 0 になります。光子のエネルギーが 0 というのはどういう状態なんですか？ M: きっと静止しているのでしょうか。 :-p

07s3014: 原子単位を使うことは、計算式が簡略化できる他に、何か利点はありますか。 M: p.301

07s3015: 実験値と計算値の誤差はどの程度までが許容か。 M: あなたの心の広さによる :-p

07s3016: ハートリー-フォック極限は、2 電子波動関数の試行関数を用いるとどうなるか。 M: p.305 記載の通り。ハートリー-フォックはあくまでも一電子近似。

07s3017: 7.25 で $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(x)$ から $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2$, $\hat{H}' = V(x)$ だと思って計算しましたが答えが合いません。何がおかしいのでしょうか。 M: 問題文をよく読め

07s3019: 1s 軌道と 2s 軌道は大きさに違いがあるのでしょうか？ M: 本気か？ p.227 参照。

07s3021: 2 つの核で電子 1 つを共有している場合の波動方程式はどうなるんですか。 M: § 9.2

07s3024: 一重項カルベンと三重項カルベンでは三重項カルベンの方が安定でシリレンやゲルミレンだと一重項の方が安定になるのはなぜですか。 M: スピン軌道相互作用かな 『以降を読め』

07s3027: Text p.280 の 2 行目の式について、摂動項がポテンシャルエネルギー $V(x)$ として Text p.176~177 にある。ここでは 6 調和振動子 [ママ] モデルの修正あるいは拡張が可能であるがあるが、その $V(x)$ の中でも第 1 項目ぐらいいは非摂動ハミルトニアンとして考えられないのか。 M: 摂動・非摂動の分割の基準については何度も言っている通り、(7.43) 式の前をよく読め。

07s3030: 原子単位はハートリーといいますが、由来はやはりハートリーさんが考えたからですか。 M: 私は知りません。調べて教えてくださいネ。

07s3031: 章末問題 6.17 について、水素原子の波動関数 $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$ および (6.2), (6.3) 式を用いて、 $\hat{H}\psi$ の値を求めたが、 $\hat{H}\psi = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \psi - \frac{e^2}{2\pi r \varepsilon_0} \psi$ となり、 $\hat{H}\psi = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \psi$ とならなかった。これは問題自体に誤りがあるのか、それとも解き方に誤りがあるのだろうか？ M: 情報不足で判断できない。勘違いとか計算間違いとかを想定した方が無難

07s3032: イオン化エネルギーの実験値はどのような手法で求められた値ですか？ M: 電場をかけたたり光を当てたりするのではないのでしょうか。

07s3033: 表 8.2 でハイレラスやビケリスはどのようにして基底状態エネルギーを求める方法なのか、またその方法から得た数値の妥当性はどうやって確かめるのか。 M: 詳細は参考文献にあたるべきだが、本質的には p.305 に記載の通りでしょう。計算値の妥当性の基準は実測値です (キッパリ)。

07s3035: 7 章では「厳密な結果」という言葉が多く出てきますが、その厳密な結果とはどのようにして求められるのでしょうか。 M: 既出だが、厳密な解とは解析解のこと。

07s3038: p.306 (8.18) で $V_1^{\text{eff}}(r_1) = \int \phi^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi(r_2) dr_2$ とあるのですが、この添え字の eff が $V_1^{\text{eff}}(r_1)$ が実効的で平均的ポテンシャルであるとあるのですが、どういった意味を表しているのでしょうか。 M: あなたの書いた説明の通りなのですが、何がわからないのでしょうか??

07s3039: 8 章末に、9 章では最も単純な分子 H_2 について少し定量的な検討を行い、より複雑な分子についての結果は定性的に検討する、とあるが、定量的に検討できるのはどの程度の分子までか？ M: 11 章参照。今ではかなりの分子について、定量的な検討ができるようになってきている。

07s3041: 先生が物理化学を勉強したいと思ったきっかけは何ですか？ M: それがどうかしたの？

07s3042: 問 6.56 で演算子 $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ は負でない物理量に対応するので $\beta^2 - (\alpha \pm m\hbar)^2 \geq 0$ が成立する、とあるが他の演算子でも負でない物理量に対応していれば正であるのか？ M: 神託が必要なのか？ 『同じ物理量に異なる原子単位があれば、混乱しないか？』

07s3044: p.300 表 8.1 で示されている原子単位以外には、どんな原子単位がありますか？ M:

07s3047: 8 章初めに原子スケールでの長さの自然な単位はボーア半径である、と書いている 自然な単位とはどういうことですか？ M: 原文は “a natural unit”. その意味で 1 m は人工的な単位だ。

06s3003: 試行関数の選び方はあるのか？ M: 当然。解の持つ性質を反映させるのが普通では？

06s3004: [白紙] M: 提出物が要件を満足していません。

06s3008: 7-29, 全てやればとても紙にはかききれないのでは？ M: 制限された範囲で書く訓練

05s2059: O_2 分子はどのようにして 2 つのラジカルを持つ状態で安定に存在するのか。 M: フントの規則、交換相互作用の符合