

- 08s3001:** 走査型顕微鏡は、何かを当てて形を知るとありましたが、中の方がわかるのはなぜですか。  
M: その何かが中まで入っていくということでしょうね。 『プリズムや回折格子のこと？』
- 08s3002:** ナトリウムのようにスペクトル線が近接しているために二重線があらわれるもので、この近接しているスペクトル線 1 つ 1 つを分離して取り出すにはどうしたら良いですか？ M:
- 08s3004:** 凝固点降下の実験においてベックマン温度計の水銀が切れることがありましたが、原因としては何が考えられますか？ M: 自分で色々考えてみてはいかがでしょうか。
- 08s3005:**  $H_2$  や  $O_2$  分子などの原子間の化学結合の安定性は、どのようにして調べたのですか？  
M: 「安定性」をどう定義しますか？ 『高度な本を参照してください(サポート Web ページ参照)』
- 08s3006:** なぜ剛体回転子では隣接した準位間でしか遷移はおこらないのか。 M: 13 章や、より
- 08s3007:** 恒星内部で作られる最も重い元素は鉄であるが、鉄よりさらに重い元素が生まれるには、どのような条件が必要だろうか。 M: その本(どの本?)に書いてありませんでしたか？
- 08s3008:** 混成軌道とは 2 つ以上の軌道が重なって、全く新しい軌道が形成されるが、それは、なぜか？  
M: “安定化する”が初歩的な説明だろう。今は混成軌道は LCAO-MO の一部と理解されている。
- 08s3009:**  $B_2$  と  $F_2$  では結合エネルギーの小さい  $F_2$  のほうが結合長が短いのか。強く結合しているほうが結合長が短くなるように思える。 M: 現実には表 9.2 の通り。細かな点の理由は複雑!!
- 08s3010:** 同素体の性質の違いは量子化学的にどこからくるのか。 M: 黒鉛とダイヤモンドは明らか
- 08s3011:** ポラン B は人体に悪影響を及ぼすとある本で知ったのですが、まだ詳しい原因がわからないと書いてありました。電子やオービタルの概念など分子論的な考察を用いて、原因を考察するならば、どのような方法がありますか？ M: 悪影響とは具体的に何か？ 『かに違うと思うが？』
- 08s3012:** 0.001 K 付近で、単純な分子軌道法で存在しないはずの  $He_2$  分子の存在が確認できるそうです。 $He_2$  分子は、どのような相互作用で結合しているのですか？ M: 特別なことはないと思う。
- 08s3013:** 密度  $\rho$  は(質量)/(体積)です。また、単位体積重量は  $\rho g$  で表され、 $g$  は重力加速度です。どちらも体積あたりの重さを表していると思うのですが  $g$  を掛けることにはどのような意味があるのでしょうか。また、これらの物理量は具体的にどのような場合で使い分けられるのでしょうか。  
M: そもそも次元の違う物理量だ。質量と重量は、厳密に言えば違うものだ。 『末尾に記載』
- 08s3014:** 多電子原子の原子スペクトルの選択律においてある  $J=0$  の状態から別の  $J=0$  の状態への遷移が禁制であるというのは、どのようにして分かったのだろうか。 M: 一般の話は p.329
- 08s3015:** 教科書 p.328 に、「これらは数値としては小さく重要ではない」とあります。大きい、小さい、又は重要かどうかの判断をする基準は何ですか？また、その基準の適用が妥当性はどのようにして確かめるのですか？ M: 観測結果をうまく説明できるか。今回は原子スペクトル。
- 08s3016:** CT 錯体は、その構成している分子や原子と異なった光吸収が起こることがあります。物理化学実験では、長波長側に異なった光吸収が見られましたが、短波長側に見られることあるのですか。ある場合は CT 錯体はどのような状態なのですか。 M: エネルギーが高くなるのは不利
- 08s3017:** 経験的則は、どのようにして世の中に認められるのですか？ M: 再現性があり経験が共有されるとか、条件等について検証可能であったりとか、なのでは？ 『なのでは？』
- 08s3018:** オービタルの記号, s, p, d, f はナトリウム原子のスペクトルの分析に起源があり, s (鋭い), p (主要な), d (ぼやけた), f (基本的な) となっているが、何をもとにこのように考えたのでしょうか。  
M: 昔の検出装置は、写真乾板やフィルムだったことに注意。すなわち輝線(または暗線)の写真を撮影していた。その線が sharp だったり diffuse だったりのでしょうね。図 1.5, 1.7 参照。
- 08s3019:** 光当量側で、1 個の分子が 1 個の光子を吸収し 1 個の分子が反応するとされますが、励起し

- た電子が基底状態に戻るときに発する光子は、電子 1 個につき 1 個なのですか？ M: 普通は
- 08s3020:** 水とアルコールはどんな割合でも溶けるが、水:アルコールが 2:8 などの場合、水にアルコールが溶けるのか、アルコールが水に溶けるのか。 M: 同じことでは？ 『そう考えるのでしょうか。』
- 08s3021:** 1 章で見た水素原子のエネルギー準位図に比べて、図 8.4 のナトリウム原子の準位図は、非常に複雑になっています。分光学的な測定技術に、どのような進歩があったのでしょうか。 M:
- 08s3022:** 問 8.40 で  $nf^2F$   $3d^2D$  遷移によるスペクトル線が基本的な意味(fundamental)系列と呼ばれるのはなぜか？ M: 08s3018 参照 『技術の進歩というよりは、理論の進歩では？』
- 08s3023:** 陽子や電子等の粒子の大きさを大きくしたり小さくしたりすることはできるのか？ M:
- 08s3024:** ミクロ状態というのが、8 章では出てきますが、ちゃんと理解できていません。どういう状態のことなんですか。 M: pp.320-321 の記述のどこが分からないのでしょうか？ 『神託が必要？』
- 08s3026:** 私達が光を手当てたとき光子の進行方向を変えていると言えるのでしょうか？ M:
- 08s3027:** 分子軌道計算を行なう際に分子の対称性を用いると主にどのような長所・短所があるのだろうか。 M: 教科書 § 12.1, § 12.8-9 を読め 『光源・手・目の配置を考えたら？』
- 08s3028:** なぜ、ライマン系列のスペクトルの二重線が  $n$  が大きくなるにつれてその分裂幅が小さくなるのか。 M: 問 8.46 参照。スピン軌道相互作用の一次の摂動エネルギーは  $n^{-3}$  に比例している。
- 08s3029:** 三重項励起状態が一重項励起状態より寿命が長いのはなぜですか？ M: 寿命の逆数は失活速度(緩和速度)なわけだが、励起状態の寿命を支配する要因は何だろうか？
- 08s3030:** 光子にエネルギーをもたせるとどうなるのだろうか？ M: 既に  $h\nu$  を持っているが...？
- 08s3031:** 光子を 1 つだけ識別することは、可能でしょうか？ M: photon counting という手法
- 08s3032:** 項記号は安定化している原子を特定する理論としてのみ用いられているように見えるが、他にはどのように用いられているだろうか。 M: 例えば表 8.5 に示されている項は、一つを除いて全てが励起状態を指しているが...？
- 08s3033:** 原子スペクトルではなぜ選択律が  $\Delta L = 0, \pm 1$ ,  $\Delta S = 0$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$  となるんですか。  
M: 時間に依存する摂動、電磁波と原子との相互作用について勉強してください。
- 08s3034:** 原子同士が衝突する時、原子の何がぶつかりあうのでしょうか？ M: 殻 ; -p
- 08s3035:** 二原子分子、多原子分子において、(8.53) 式のようなものはあるのか。 M: 何を求めるの？
- 08s3036:** スピン-軌道結合というのは他のスピン-スピン相互作用などより、どうしてスペクトルなどに強く影響するのか？ M: “強く影響する”とはどういうことか？ 08s3015 も参照
- 08s3037:** 粒子よりも小さい単位は何か。 M: 素粒子 ; -p
- 08s3038:** 8.17 の問題で教科書に記載されている解答が実効 1 電子ハミルトニアンを用いて説明しているのはなぜなのか。 M: 1 電子オービタルの話だからでしょう
- 08s3039:** 教科書 p.329 に「ここでは選択律を一応認める」とありますが、なぜ「一応」なのですか？  
M: 論理的に導出されたことのみを認めるのが科学的な態度では ; -)
- 08s3040:** 項の記号がわかることによって、原子スペクトルの記述などができるようになりますが、項の記号は他にどのようなことに用いられるのですか？ M: § 8.8 の題名やその本文には何と？
- 08s3041:** 教科書 p.335 の図 8.5 のヘリウム原子のエネルギー準位図において、 $4^1P$  がありませんが、これはどのような理由によるものですか。私は  $4^1P$  が無いというのは有り得ないと思うので、単なる載せ忘れでしょうか。 M: 忘れた、間違えた、誤植、省略した... 神ならぬ身の知る由もなし
- 08s3042:** p.332 の表 8.6 を見ると遷移が 2 種類あるものではエネルギーが若干ズレているものと全く同じものがありますが この違いは何が起因しているのでしょうか？ M: “遷移が 2 種類ある”とか “エネルギーが若干ズレているものと全く同じもの”とか、意味がわかりません。

08s3043: パウリの排他原理はどのようにして発見されたのですか？ M: 読書感想文のネタ？(笑)

08s3044: p.305に「最良の変分計算では」とかいてありますが、何故最良といえるのか。他に良い計算がないとわかるのですか。 M: 当該のパラグラフはわかりにくい文章ですね、表 8.2 の中での話でしょう。ピケリスの結果にもかかわらず、さらなる変分計算を行なう意味は無いと思われま

08s3045: 電子遷移に要する時間は  $10^{-15} \sim 10^{-16}$  秒とされていますが、これを速くしたり遅くしたりする因子は何でしょうか。 M: 遷移の途中のことは考えない :-p 『ですからね。

08s3046: 粒子の状態を記述するのにシュレディンガー方程式を用いるが、この方程式を用いても状態を記述できない粒子は存在するのでしょうか？ M: シュレディンガー方程式は非相対論的

08s3048: 質量のある原子は無からは作り出せないが、質量のない光子は作り出せますか？ M:  $E = mc^2$  により、高エネルギーから粒子・反粒子対が生成されることがあるのでは？

08s3049: p.329 で選択律を一応認めることにするとありますが、厳密には分光學で導いた選択律などを用いるのですか？ M: “分光學で導いた選択律”とは何ですか？ 08s3039 も参照。

07s3001: p.334 で“ $\Delta S = 0$  という選択律のために遷移が起こらない。”とあるが、 $S = 0$  と  $S = 1$  の遷移で  $\Delta S = 0$  となるのはどういう意味ですか？ M: 記述に矛盾はない。あなたの誤解・誤読。教科書の記述は、一重項と三重項との間では  $\Delta S = 0$  でないから遷移は禁制であるとの意。

07s3002: p.305~306 にかけての文に、「厳密なエネルギーの結果が得られることを示しているが～、オービタルの概念も放棄している。(中略)」とあるが、オービタルの概念を放棄した結果は正しい結果といえるのですか。 M: 正しいかどうかの判定基準は何か？ 08s3015 も参照

07s3004: フントの規則で L と S が同じ場合に副殻の占有によって J の値が最大・最小となるのはなぜですか？ M: スピン軌道結合定数の符号。電子が正孔かで、粒子の電荷が違う。

07s3005: 電子の波動関数はすべて任意の 2 電子の交換に対して反対称なのですか？ M: スレーター行列式は、どうなっているか？なぜ反対称が要請されているのか？

07s3007: 項の記号は電子配置の詳細を表す、と教科書に書いてあるのですが、多重度などがわかるとどのようなときに便利なのですか。 M: 例えば遷移の選択律、磁性。

07s3008: パウリの排他原理はどのように導かれたのですか。 M: 08s3043 参照

07s3009: 量子論と相対性理論はつじつまが合わず、相対性理論はもう古い、間違いだという方も増えているようですが、逆に相対性理論でしか説明できない事柄はどのようなものがあるのでしょうか。 M: “相対性理論はもう古い、間違いだという方も増えている”の証拠は何でしょうか？相対論の多大な成功にもかかわらず、そのように主張することの意味がわかりません。

07s3010: [白紙] M: 提出物が要件を満足していません。

07s3012: 項記号は何を表しているのですか？ M: p.317 の通りですが、何がわからないのですか？

07s3013: 圧力などの単位には何種類がありますが (Pa, bar など)、なぜ 1 つのことについて複数の単位があるのですか？ M: 歴史的経緯。科学や技術は、初めから現在あるように(天から?)与えられたわけではない。多くの先人達の叡智の結集により、少しずつ進歩してきたという過程があり、そして現在に至っており、今もなおそれが進行中であることに思いを馳せてみよう。

07s3014: スピン変数に古典的に対応する量がないというのはどういうことですか。 M: 言葉通りであり、第四の自由度ということ。なお位置変数三つ (x, y, z 等)には古典的に対応する量があるネ。

07s3015: 例題 8.6 で“ $^2S$  状態では J の可能な値は  $\frac{1}{2}$  で項記号は  $^2S_{\frac{1}{2}}$  となる”とあるが多重度と項記号の取りうる数は関係ないのか。 M: 項記号を作る規則を復習せよ。 『の話だから。

07s3016: 反対称波動関数、という概念がいきなり出てきたのはなぜか。 M: 一電子でなく多電子

07s3017: 食料などで「直射日光をさけて保存」とあったりしますが、保存とは言えないのでは？状態

は常に変化していると思うのですが... M: 日常語の“保存”と、科学用語のそれとでは、似ているけど厳密には意味が少し違うということか？ 『簡単な形の例示として考えると思うが...

07s3019: 量子力学において、箱や井戸を考えるのは何故でしょうか？ M: 量子力学でなくても、

07s3021: 8.45 の問題がよく分からなかったので解説して下さい。 M: どうして授業時間中に質問しなかったのか？そのための授業時間なのではないか??

07s3024: 「つじつま合わせ」をして解を出す方法がありますが、ただ単に都合よく解を出しているだけじゃないですか？ M: 一般論では全くその通り。それがここでどうしたという話なのか???

07s3027: Text p.307 に「つまり、電子間に相関がないということになる」とあるが、その前後の文はどう言う意見か。相関がないのに相関エネルギーを定義するとはどういうことか。 M: 誤読。HF 法によるエネルギーと厳密なエネルギーに差がある原因が、HF 法では電子間の相関を考慮していないからだ、と教科書に書いてあるだけ。『意味不明。L は軌道角運動量であって、軌道ではないし。

07s3030: 項記号で軌道 L を数字で表している (L = 0, 1, 2, etc.) のは何故でしょうか？ M:

07s3031: 数学章 F において、 $\det A$  や  $\det R^{-1}$  という表記があるが、これは何を意味するのか？ M: p.481 に書いてあるが？ $\det$  の綴りが気になるなら、“行列式”を英語で何と言うか調べて

07s3032: 教科書に「完全な波動関数」という記述がありますが、どのような条件を満たすと「完全」といえるのですか？ M: 既出の問題だと思う。 『みたらどうか。

07s3033: 物理化学の真髓ってなんですか。 M: そんなものがあるなら、こっちが教えてほしい :-p

07s3035: 8.40 でスペクトル線は“鋭い (sharp)”“主要な (principal)”“ぼやけた (diffuse)”“基本的な (fundamental)”の 4 つがあると書かれていますが、スペクトルが実際、ぼやけたりしているのでしょうか。スペクトルが鋭いとはどういうことでしょうか。 M: 08s3018 参照

07s3038: ハートリー-フォック オービタルを 0 次の波動関数として、摂動論によって相関エネルギーを計算する方法とはどういった方法ですか。 M: あなたが書いている、そのまんまだと思うのですけど...何が分からないのでしょうか？

07s3039: 近似を用いずにどの程度の分子まで分析可能だろうか？ M: 分子オービタルを用いる時点で LCAO-MO 近似な訳だし、それ以前にもボルン-オッペンハイマー近似な訳だし.....

07s3042: わざわざ「解析的な」と言わず「厳密な」と言うのは、化学的な要因はあるのか？ M: 無いでしょうね。むしろ、数理的な方面の話だと、授業中に言ったのですが。

07s3043: p.335 にここで用いている選択律は原子番号が小さい原子だけに適用し、原子番号が大きくなるにつれて破れるとありますが、何故ですか？ M: 授業中に説明しました。量子数 (n, l, m,  $m_S$ ) が良い量子数でなくなる。

07s3044: フントの規則はどのようにして導かれたのですか？ M: 08s3043 参照

07s3047: 非実効的なハミルトン演算子ってあるのでしょうか、あるとしたらどのような意味を持つのでしょうか？ M: “実効～”じゃないのが該当するでしょう。例えば平均的ポテンシャルじゃなくて、全ての粒子間のクーロン相互作用をあらわに記述したものとかがしょうか。

06s3003: 昇降演算子でなぜ  $\beta$  から  $\alpha$  に変わるのが“上昇”で  $\alpha$  から  $\beta$  に変わるのが“下降”なのか？ M: (8.24) 式のように固有値 (量子数) が与えられている

06s3004: [白紙] M: 提出物が要件を満足していません。

06s3008: 原子単位で計算する場合、計算結果は簡略化していないときと比べて差はでないのですか。 M: 単位系によって物理量が変わっても良いのか？

05s2059: ホスフィン配位子は逆供与を受けうるが、その場合、ホスフィンの空の d 軌道に電子を受け入れているのでしょうか。 M: 神託が必要ですか？