

- 08s3001:** 輻射が紫外線領域に入れば振動数が増加するのはなぜですか。 M: はあ? p.30 参照
- 08s3002:** 二原子分子では重なり積分 S は p.316 図 9.4 の 2 つの原子が重なっているところですが、 H_A-O-H_B などの三原子分子以上の場合、 H_A と O と H_B 3 つの原子で重なり積分を考えたりののでしょうか? M: 三原子のイメージは図 10.11 だが、実際の積分計算は二中心まででは?
- 08s3004:** 3D の映画はどのような仕組みで映像がとび出して見えるのですか? M: 既出
- 08s3005:** 等核二原子分子において、 σ_{1s} や σ^*_{1s} と書かないで、 σ_g_{1s} や σ_u_{1s} というふうに書くのはなぜですか? M: p.367 をよく読め。二つの方法が紹介されているだけ。
- 08s3006:** $AlCl_3$ の空軌道に Cl^- が入る反応がありますが、空の軌道は本当にあるのか。また実際にあるなら、それはどのようにになっているのか。 M: 空軌道にイオンが入るとは? 08s3044 の
- 08s3007:** 鉄は磁石に引きつけられるが、水中に磁石を入れると、水中の鉄イオンが引き寄せられるということはあるのだろうか。また、この操作を、無重力(量)で行った場合はどうなのだろうか。 M: 水は磁気を遮蔽するという意味か? ☞コメントも参照
- 08s3008:** 電子は波動関数で表わされるため、電子が観測される時は波が縮退していると考えますが、波は広がりを持つのに、観測される瞬間のみ縮退するというのは、ありえるのでしょうか? M: この“縮退”の意味は? degenerate じゃなさそうだし。コペンハーゲン解釈とか言ってみるテスト。
- 08s3009:** He_2 は結合次数が 0 なのにわずかでも結合エネルギーがあるのか? 同様に結合長があるのか? M: 同工異曲が多数。他を参照。
- 08s3010:** 結局のところ神はサイコロを振るのか振らないのか(*量子化学の質問です)先生はどう考えますか。 M: 神の御業を人がとやかく言うべきか? :-p
- 08s3011:** 図 9.22 で一番上の曲線で、核間のきよりが解離したとき、基底状態と励起状態の解離するとかいてありますが、励起状態同士解離する場合 どのような曲線を描くのですか? またその核間ポテンシャルエネルギーはどのような値をとり、どのような意味をなすのですか? M: 日本語が変。図の右端、解離状態のエネルギーが異なる理由をよく考えよ。
- 08s3012:** エネルギーの低い光子を連続して大量に分子にぶつけても、分子は基底状態から励起状態にはならないのですか? 例えば、1 J のエネルギーを持つ光子 1000 個を、100 J で励起する分子に一度にぶつけても分子は励起しないのですか? M: 多光子吸収については既出。なおミクロの世界で“一度にぶつけて”は可能か? 『対向する辺が伸びた D_{2h} 対称になるらしい
- 08s3013:** 励起状態のベンゼンの構造は基底状態のときのものとは比べてどのような変化をするのでしょうか。各原子間の反発が強くなり、環がひとまわり大きくなったりするのでしょうか。 M:
- 08s3014:** 分子軌道法によって炭素の二原子分子が存在するかどうか予測することができるが、この方法以外の方法で予測はできないのか。できるとしたらどんな方法があるか。 M: もち VB 法
- 08s3015:** 常磁性、反磁性分子は不対電子をもつかどうかでも分けられますが、この電子の何が要因で磁的性質に差が出るのですか? M: スピンスピン :-)
- 08s3016:** 0.001 K 付近のヘリウムの気体中に He_2 を分光的方法で検出したらしいのですが、どのような分光的方法で検出したのですか。また He_2 の結合エネルギーも求められていますが、どのような方法で求めたのですか。 M: 物化実験では CT 錯体の存在を分光学的手段で検出している。
- 08s3017:** 「結合の性質」とは特にどのような性質のことを差し[ママ]ますか? M: 強弱(定量的に?)以外にも $\sigma/\pi/\delta$ とか 供与/逆供与 とか
- 08s3018:** He_2 の結合エネルギーは $E_{結合} \ll 1 \text{ kJ mol}^{-1}$ であるが、より進んだ分子軌道によると $E_{結合} \approx 0.01 \text{ kJ mol}^{-1}$ となるとあります。この違いは、計算のどの部分によるものなのでしょう

か。 M: 正確には論文を当たれ、なのだが、まあ電子相関でしょうね。

- 08s3019:** 共役等によって電子の移動が長くなると吸収波長が長くなるのは、なぜですか? M: p.90 自由電子モデル、または p.429 付近の HMO で求めてみたら?
- 08s3020:** 電気が流れると磁場が発生するが、金属などの金属結合は自由電子が結合に関係しているの、そこに磁場は生まれるのか。 M: “そこ”とは何処のことか? 銅線で電磁石ができるが?
- 08s3021:** 8.5 節では、波動関数の空間部分とスピン部分が独立だと仮定していますが、この仮定が正しいことを確かめるためには、どのような検証をすれば良いですか。 M: 面白いですね。スピンの空間の三次元とは異なる第四の自由度じゃなかったら、自由度が減っちゃう?!
- 08s3022:** 6.23 のような変数が 2 つ以上あるような微分方程式はどのようにして解いていくのか? M: 何のこと? (3.44) 式のような 3 変数の方程式は、解けたよね。
- 08s3023:** 原子の中にはある一定量集めると爆発するようなものもあるようですが、どのような原理で爆発するのか。 M: 何点狙い? 核分裂の連鎖反応を調べたら? 『教えてください。』
- 08s3024:** エネルギー図などで、電子配置を [横棒に上下の矢印の図は略] のようにあらわしますが、どうしてこのように表示するようになったのですか。 M: 私は知りません。調べて分かったら
- 08s3026:** 分子構造などを知るためにスペクトル解析がありますが、スペクトルの高感度検出を目指す際、重要なことはなんでしょう? M: 観測する現象、測定の方法、使用機器などに依って色々。
- 08s3027:** X 線や γ 線などの放射線のスペクトルを測定する方法としてどのようなものがあるのだろうか。 M: 普通に吸収スペクトルを測るとか、あるでしょ。
- 08s3028:** 重なり積分は解析的に求められるとあるがどのようにして求めるのか。 M: p.356 の話?
- 08s3029:** 1 つ 1 つの電子は反応などで変化(形、重量、電荷など)することは無いのですか? M: 正気ですか? 質量や電荷の異なる多種の電子があるのですか?
- 08s3030:** 粒子の波動性をなくす方法はあるか? M: (1.12) 式参照
- 08s3031:** p.277 に「励起状態のエネルギーの上限のもっと良い値を得る方法がある」とありますが、それはどのような方法でしょうか? M: 既出だと思う
- 08s3032:** Be の等核二原子分子の結合次数が 0 と公式により確かめられ、確かに結合エネルギーは他の二原子分子と比べても小さいと言えるが、結合長は Li_2 よりも短いです。結合エネルギーと結合長は相関関係にあるのだろうか。 M: あなたの挙げた例がその答えでは?
- 08s3033:** なぜ一般の分子は直接光照射で励起三重項状態を作り出すことはできないのですか。またどのような分子で励起三重項状態を作り出すことができますか。 M: スピン禁制の遷移だから。普通は励起一重項状態からの項間交差を利用したり、他の励起三重項状態の分子を増感剤にしてエネルギー移動させて作ったり。
- 08s3034:** 「原子は陽子、中性子、電子からなる」とよく耳にしますが、この表現の中に、原子殻という存在はできません。原子殻とは一体何でできているのですか? M: 本気ですか?
- 08s3035:** 分子の熱運動により、系内の温度が上がるのか。系内の温度を上げると熱運動が活発になるのか。どちらなのでしょう。 M: ミクロの世界で熱とは何か?
- 08s3036:** 結合次数が 0 となることから He_2 は存在しないはずと予想されますが、実際には He_2 は検出されているようです。では結合次数の考えは正しいと言えるのですか? M: ニュートン力学は正しいと言えるか? 『通常の輻射って、どんな輻射? 蛍光との違いは?』
- 08s3037:** 通常の光の放射には発熱を伴うが、蛍光の放射には発熱を伴わないのはなぜか。 M:
- 08s3038:** 表 9.2 を見ると、 C_2 と O_2 は共に結合次数 2 で、結合長はそれぞれ 124 pm, 121 pm となっているが、3 pm の違いで 100 kJ mol^{-1} も結合エネルギーの違いができるのはなぜか。 M: 系

の違いは結合長だけじゃない。

08s3039: ψ_- や ψ_+ の「-」「+」は何ですか？ M: 何の話？(9.32)式なら下に図もある。

08s3040: 励起状態をもたない分子は存在するのですか？もしあるとしたら、その分子が励起状態をもたないということはどのようにしてわかったのですか？ M: 既出だと思ふ

08s3041: スピン-軌道相互作用についての説明の一部をそのまま使うと、スピン-スピン相互作用は、電子スピンの付随した磁気モーメント同士の相互作用。軌道-軌道相互作用は、電子自身の軌道運動によって発生する電流が作る磁場同士の相互作用として良いでしょうか。何か違うところがあったら、指摘をお願いします。また、スピン-スピン相互作用と軌道-軌道相互作用がスピン-軌道相互作用に比べて数値としては小さいのはどのような理由によるものでしょうか。 M: 前半、いつまで神託が必要なのか？//後半、場合によっては大きなスピン-スピン相互作用もある。

08s3042: ヒュッケルの分子軌道法ではヘテロ原子に対し、クーロン積分、および共鳴積分に対し、補正用の数値が与えられているが、これはどのように導き出したものなのか？ M: たぶん経験。

08s3043: 結合次数が3以上の分子は存在しないのですか？ M: 無い理由があるのか？世の中

08s3044: 分子軌道法によって得られることには何がありますか。 M: 物化実験など履修してるのにチャレンジャーですな

08s3045: 原子吸光測定において、ゼーマン効果を利用して、磁場に平行な偏光では測定元素の吸収とバックグラウンド吸収が測定され、磁場に垂直な偏光ではバックグラウンド吸収のみが測定されます。なぜ磁場に垂直な偏光では測定元素の吸収が測定できないのでしょうか？ M: 当然選択律のはずだが、詳細は知らない。調べて分かったら、教えてください。

08s3046: 以前、ノーベル賞でも話題になった素粒子ですが、今後、その素粒子よりも「素」なものを見つけれられるのでしょうか？ M: クラークの第何法則がふさわしいかな？

08s3048: 結合次数が大きいと結合エネルギーが大きくなると教科書には書いてあるが、例外はないのか？ M: p.375のデータはどうか？ 『の講義の単位が危ないな、こりゃ。』

08s3049: ヒュッケル分子軌道法以外に分子軌道法はどのようなものがありますか？ M: 別の方

07s3001: p.361で H_2^+ での“化学結合の存在は交換積分によってもたらされている”とあるが、具体的にどんな結合をしているのですか？ M: 化学結合にはどんなものがあり、ここでは何の話をして

07s3002: 様々な近似を用いて解を求めますが、ボルン-オッペンハイマー近似で求めた解は厳密に解いたことになるのですか。 M: “厳密”の意味は以前に説明したが、それ以前の話か。『していた??』

07s3004: 分子の形で、たとえば AH_2 は直線で H_2O は折れ曲がっているのはどのような違いによって生じるのですか？ M: 教科書 § 10.3 を読め 『化学結合を理解できた説明するところ :-p』

07s3005: H_2^+ はどのようなところに使われているのですか。 M: 量子力学的記述によって初めて

07s3007: この講義では、毎回問題が4問ですが、ほとんどの講義内で全ての問題を解くことができなかったのですが、すべて時間内に終えるような問題を選んでいましたか。 M: その件に関連して初めのころに言った。ノートを写すだけなら十分に時間の余裕があるはず。

07s3009: 古典力学と量子力学において、電子の捉え方の違いはどのようなものなのでしょうか。 M: 今頃これか、本気ですか？

07s3010: He_2 の結合次数は0とされ、さらに非常に弱い結合が検出されたとあるが、そのような弱い結合になにか意味はあるのか。 M: He_2 を形成するという意味 :-p

07s3012: $(\sigma_u 1s)$, $(\sigma_g 1s)$ の u と g はどういう意味ですか。 M: p.367をよく読め。

07s3013: 結合性 σ オービタルがゲラード対称、反結合性 σ オービタルがウンゲラード対称なのに対し、結合性 π オービタルがウンゲラード対称、反結合性 π オービタルがゲラード対称になるのは

なぜですか？ M: 定義のせい、言葉の意味を良く考えよ。使用している AO の対称性が異なる。

07s3014: 同じ電子配置のもので複数の項記号をもつ場合、それらの違いはどのような時に影響がありますか。 M: だから Na の原子スペクトルで D 線の分裂とか(例題 8.10)、教科書をよく読め。

07s3015: 9.3 節の波動関数 ψ_+ が $\psi_+(r; R)$ と表記されていますが、何故 $\psi_+(r, R)$ ではなく『;』を用いたのでしょうか。 M: 英文の書法でも、コンマとセミコロンの意味は違うよね。

07s3016: 分子軌道法を異核の三分子以上には適用できないのか。 M: 08s3044 のコメント参照

07s3017: 電子配置を考える際、結合しているにもかかわらず K 殻と表記するのはなぜですか？ M: 教科書 p.373 上の方の記述をよく読め。

07s3019: ハイゼンベルクの不確定性原理が成立する条件とはなんですか？この不確定性原理は常に成立しているんですか？ M: 何か勘違いしているのでは？不確定性関係にある物理量は常に不確定性関係にあるし、そうじゃないものはそうじゃない。これらを全部含めて不確定性原理。よって、無条件に常に成立している。

07s3021: 結合の数が多くなる程結合長が短くなるのは何故ですか。 M: “結合の数”とは？

07s3024: He_2 の結合次数は0とされ、さらに非常に弱い結合が検出されたとありますが、どれくらい弱い結合ですか。 M: 教科書 p.371 に結合エネルギーが書いてあるのをよく読め。

07s3027: Text p.361, 3 行目に“交換積分の項に古典的に対応するものがないので”とあるが、どうしてか。 M: 実際に、無いでしょ。 『などを考えることは無意味か。』

07s3030: p.371 で He_2 の結合次数は0となるので、そのような分子は存在しないはずであるとあるが存在しないもの考える必要はあるか。 M: 零(無)という数、理の無い数、虚ろな数

07s3031: 表 9.5 をみると Li_2 の結合長の計算値と実験値の差が他の分子よりも明らかに大きい。これはなぜか？ M: 図 9.20 を見ると、軌道の広がりが他よりも大きいようだ 『話か？意味不明』

07s3032: $d\tau$ から dr へ置き換える際、積分範囲が0から ∞ になるのはなぜですか？ M: 何の

07s3033: MRI をでラジオを聞くことは可能だと思いますか？ M: 各装置の構成を考えよ

07s3035: p.369~370 で結合性 σ オービタルはゲラード対称で、結合性 π オービタルはウンゲラード対称と逆になるのでしょうか。 M: 日本語が変。07s3013 参照。

07s3038: ボルン-オッペンハイマー近似では核の運動を無視しますが、核の運動は無視してもさほど影響はないのでしょうか。 M: 何に対する影響でしょうか？

07s3039: 分子の分析は近似が無ければ不可能？ M: 分子の何の分析？

07s3041: NMR 分光計は1台いくらですか？ M: それを知ってどうするの？メーカーに聞けば??

07s3042: 問 6.43 磁気双極子 μ とあるが磁気双極子モーメント μ ではないのか？ M: 神託が必要か？または書籍に誤りは無い？ 『ント参照』

07s3043: 物質の純度が融点の温度幅の狭さから議論できるのはなぜですか。 M: 08s3044 のコメ

07s3044: B_2 や O_2 は常磁性をもつが常磁性をもつ分子は、磁石のようなものに引きつけられたり反発するのか。 M: 常磁性って何だと思ってるの？

07s3047: p.362 より電子密度には切れ目がある。とありますがイメージがわかりません。電子って原子核から無限の距離をとりうるのではないのですか？ M: 誤読。波動関数の節の話。

06s3003: なぜ対電子をもつと常磁性で、対電子がないと反磁性なのか？ M: 08s3015 参照

06s3004: [白紙] M: 提出物が要件を満足していません 『分野と同じだろう。』

06s3008: 物理化学を学ぶ上で、心がけることはありますか？ M: 特別なものはない。科学の他の

05s2059: 電子が非局在化することでエネルギーが安定化するのはなぜでしょうか。 M: 例えば 08s3019 のコメント参照