

16s2008: 教科書 p.330 にある微細構造とは表 8・5 のどの部分の事を表してるのか // この微細構造は微細構造定数と関係があるのか M: 国語力不足か? 教科書本文では, 実例まであげてライマン系列の初めのスペクトル線が二重線であることの説明をしているのに, それの何がわからないのか? // ライマン系列とは, どんな遷移の系列だったか? // 読書感想文 (仮) のネタか? // 微細構造定数 α の歴史を調べてみれば分かるのでは?

16s2028: 項の記号のアルファベットのアルファベットはどういう規則で並ぶのか。 M: 本気か? // 教科書 p.317 の下の方の記述の意味が理解できないということか? 教科書 p.226 の記述の意味が分からないということか?

16s2040: 結合などによって禁制遷移がもとの軌道から安定化しても禁制のままなのでしょうか M: 意味不明. “禁制遷移がもとの軌道から安定化する” とは, どういう意味か? “遷移が軌道から...” って, 遷移は軌道なのか? “遷移が安定化する” とは, どういう意味か? 安定な遷移とは? 不安定な遷移とは??

17s2007: ハートリー・フォック計算で得られるエネルギーの順番は中性原子のものと一致しているところがあるが, カチオン・アニオンの場合でも一致しているのでしょうか。 M: 私は知りません. 調べて分かったら教えてくださいネ // 一致している・一致していない 等と考える根拠は何か?

17s2028: マッカーリ社 D 汽う皂麒図図臓 p.354 図 9 磁 3 では, なぜ $\phi^*\phi$ があのような形になるのでしょうか? p.232 図 6 磁 5 では $\phi^*\phi$ を確率密度としてプロットすると, 水素原子のオービタルの形状になりましたが, 分子軌道では $\phi^*\phi$ の値はオービタルの形状を表さないということでしょうか? M: 正気か? ある物理的意味を表すものと同じものが, 別の物理的状況では異なるものを表すと? // それぞれの図で, 縦軸横軸は何を表わしているか? という基本中の基本がわかっていない??

17s2029: 教科書に最も重要なのがスピン-軌道相互作用であり, スピン-スピン相互作用や軌道-軌道相互作用は数値が小さく重要ではないとあったのですが, 比較するとどのくらい大きさに差があるのか。 M: そこまで疑問が具体的になっているのなら, あと一息で, 自分で調べてみればいいのでは?

17s2037: なぜ水素分子イオンから結合を考えるのか。最初から水素原子について考えないのはなぜか。 M: 本気か? // なぜ最初から (一般の) 多電子原子を考えないで, 水素原子から原子の状態を考えるのか.

17s2045: 量子力学において, 原子価結合法よりも, 分子軌道法を用いて計算する方が優れているのはなぜですか? M: それぞれの方法について, よく学べば分かるのでは?

17s2047: 分光化学的によく研究された安定な化学種は他にどのようなものがありますか。 M: 意味不明. 他にって, 何の他にということか??

17s2051: 波長はどの程度の差まで二重線として観測できるのか M: 教科書や参考書では, どうすると二重線が観測されると記述されているか? この“どうすると”を突き詰めていくと どうなるか?

18s2004: 発光スペクトルの電子配置による波長の違いはどのような原理で起こりますか。 M: 正気か? // $\Delta E = hc/\lambda = h\nu$ が理解できていない??

18s2006: 電子配置が同じでも項が違ふとエネルギーが違ふ可能性があるとおっしゃっていましたが, そのエネルギーの差は大抵は電子配置が異なるもの同士よりも小さくなるのでしょうか。 M: 本気か? // 例えば 表 8.5 で, $(1s)^1$ と $(2s)^1$ や $(2p)^1$ 等の電子配置間のエネルギーの差は? 同じ電子配置で異なる項間のエネルギー差は??

18s2009: 原子核は空間に固定されていると近似するが, 分子間距離はどの範囲まで許容できるのでしょうか? M: 本気か? // 何を話題にしているところで, 分子間距離がそのどこに効いてくるといふ話でしょうか?

18s2018: 電子の数が多い時項記号を考える際気をつける事はなんですか。 M: 別に. 電子が多いからと言って, 特別なことをするわけではない.

18s2027: 電子スピンの異なっているエネルギーが同じになることはありますか。 M: そりゃ, 可能性はゼロではないでしょう. // で, 同じになることがあったとして, それがどうかしたのか?

18s2029: ある分子の基底状態を判断するとき, フントの規則以外に判断できる規則や法則はありますか? M: 同じ目的の別な方法・法則ということか? // 勉強すれば分かるのでは?

18s2030: なぜ古典力学では分子中の原子がどのように結合するかはわからずに, 分子だとして扱っていたのですか? M: 科学史を勉強すればいいのでは? // 分子の実在が多くの科学者に認められるようになったのは, いつ頃だと思っているのでしょうか?

18s2032: 水素分子イオンにおいて, 原子核が空間に止まって固定されていると近似していますが, 核間距離を R というパラメータで表しているのはなぜでしょうか。 M: 固定されているとはいっても, R がいくらかによって, 系のエネルギーが異なる (パラメータである) との教科書の記載のどの辺が理解できないのでしょうか?

18s2034: 分子オービタルでは 2 つの原子核がありそのまわりに電子がある。とあったが, 核間距離 R , 電子と核の距離 r_A, r_B を大きくしていったときどこまでが分子と言えるのか M: 自分で考えてわからないのはなぜか? // 距離 R は連続量であるが, 分子であるかないかは不連続だ. もしも境界線があったとして, その直前直後で系に本質的な違いがあるか?

18s2038: 水素分子イオンのハミルトニアンで核と電子間のポテンシャルエネルギーと核同士のポテンシャルエネルギーの符号がなぜ異なるのか。 M: 本気か? 物理学の基礎 (電磁気学) を復習すればいいのでは?

18s2040: 基底状態を判断するのにフント則が必要であるが, 他に判断することができる方法はあるか。 M: 18s2029 参照

18s2043: 半充填より多いか少ないかでエネルギーを低いと判断する J の値が変化するのは何故か? M: 20200721 の 19s2006 参照

18s2045: 水素分子イオンのハミルトニアンにおいての第四項 $+(1/R)$ は核-核におけるポテンシャルという解釈でよいか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // R はどこの距離か?

18s2046: フントの規則と実際の計算による値は完全に一致しているのか。または, なんからの寄与により多少の誤差は生じて一致することはないのか。 M: 20200721 の 17s2047 参照

19s2001: 教科書に, ある M_L と M_s の値を与える $m_{l_1}, m_{s_1}, m_{l_2}, m_{s_2}$ の組をミクロ状態というがありますが, なぜ名前にミクロという言葉が用いられているのですか。 M: 命名した人に聞けばいいのでは? :-p // 観測される状態がほぼ LS-結合状態なので, それを構成する状態ということで, 少し別名にしたのでは (別なものには別な名前をつける).

19s2002: 基底状態の判断に, フントの規則以外に判断する方法はあるのですか。 M: 18s2029 参照

19s2003: 分子オービタルの考えは今後量子力学以外の分野でも重要になってくるのか。 M: 教科書 p.444 と 11 章や参考書を読めばいいのでは?

19s2005: スピン-軌道分裂がエネルギーに対してどのくらいだと重要でないと判断してよいのか。(p.334) M: あなたは何のためにエネルギーを求めようとしているのか?

19s2006: 水素分子イオンについて, 分子軌道法を用いてエネルギーと波動関数を得ることが出来るが,

そこからどのようにして分子内の化学結合の本質がわかるのか。 **M:** 教科書をよく読めばいいのでは？

19s2007: Na において 3p 軌道から 3s 軌道に電子の遷移が起こるのはなぜですか **M:** 遷移許容だから。

19s2009: 分子オービタルの考え方で、2 つの核が分子を成す時に、2 つの核の間に定まった距離があるのでしょうか？それともある一定の範囲の距離であれば、2 核の周りに電子が存在し分子として成せるのでしょうか？その時、2 核間の距離によって結合の強さは変わるのでしょうか？ **M:** 本気か？教科書 5 章で学んだことを忘れたのか？ // 教科書 9 章や参考書をよく読めばいいのでは？

19s2010: 原子スペクトルの場合の選択律は、 $\Delta L=0, \pm 1$ 、 $\Delta S=0$ 、 $\Delta J=0, \pm 1$ のとき、 $J=0$ の状態から別の $J=0$ の状態への遷移が許されないのはなぜですか。 **M:** それが選択律。教科書 13.11 節や、少し上級の参考書で時間に依存する摂動を勉強すればいいのでは？

19s2011: 一次結合のときの核間距離の最小値は、水素分子イオンのときということでしょうか？また二次結合のときの最小値は水素分子の核間距離なののでしょうか？ **M:** 意味不明。// 一次結合と二次結合とあって、何ですか？

19s2012: 求められた電子の存在確率の A のグラフと B のグラフの交点は何か特別な意味を示す点になっていますか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 存在確率が等しい点

19s2013: 水素分子イオンと水素分子で分子のエネルギーや波動関数を求める方法は違うのですか。 **M:** 勉強すれば分かるのでは？ // 同じ方法でも違う方法でも求められるのでは？

19s2014: 反結合性軌道では結合している核同士の間ではなく外側に電子が存在する確立が高いということですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 電子密度分布はどうやって求めるのか？

19s2015: 電子配置が同じで項が違った時にエネルギーも異なる場合と異なる場合とでは何が違うのか。 **M:** 項が違った時にエネルギーが異なる場合があるのですか？それはどんな時でしょうか？

19s2016: 水素分子イオンが最も扱いやすいという風に書かれているが、水素分子とどれくらい差があるのか。 // [以下省略] **M:** それぞれどのような系なのか、自分で考えてみればいいのでは？ // 系の扱いやすさとは、何のことだろうか？

19s2018: 教科書 p.353 で結合がなぜ、どのように生じるかについて物理的な背景がわかるわけではないと書いてありますが、結合した時の電子の存在確率やエネルギーなどは求めることは出来ても、シュレディンガー方程式を用いて結合ができる物理的な背景は得れず、実験でしか得ることが出来ないのですか？ **M:** 国語力不足か？ // 「結合がなぜ、どのように生じるかについて物理的な背景がわかるわけではない」のは、どういう場合かについて、教科書では何と言っているか？

c: ミクロ状態やマクロ状態での電子の入り方はどのようにになりますか。 **M:** 正気か？ // 多電子原子における電子項について、全く何にも理解していないようで、残念。

19s2020: 分子軌道法を異核二原子分子に拡張した場合、異核二原子分子は対称性がないため、どのようなことを考慮すればよいのでしょうか。 **M:** 別に。普通にリッツの変分法で解を求めればいいだけでしょ。

19s2021: 教科書の p.329 に選択律一応認めることにするとあるが、“一応”認めてもいいものなのですか。 **M:** 認めたくないのであれば、まずは選択律の導出を学んで納得してから、これ以降の話を学べばいいのでは？

19s2022: 原子間の結合が 1 本の直線でつながっているわけではないとおっしゃっていましたが、実際に原子間が 1 本の直線でつながっているような状態になることは物理的に可能でしょうか。

M: 誤解している予感。// 直線という実態が存在するのか？

19s2023: 項記号のような考え方は原子の他に、分子にも用いられることができるのでしょうか。 **M:** 20200721 の 16s2040 参照

19s2024: 教科書 p.329 に H_{so} が十分小さくて摂動と考えることができれば (特に原子番号が 30 程度以下) という記述があるが、何故 Z_n 程度以下と断定できるのか。では、 Z_n 以上と以下で大きな差があるのか。 **M:** 日本語力不足か？ // 「程度」は、厳格な境界線なのか？

19s2025: 遮蔽効果や浸透効果によって 3d より 4s のほうがエネルギー準位が小さくなることを量子力学的に説明することはできますか。 **M:** 普通にそういう動径分布を持った関数を用いて HF 法でエネルギーを求めればそうなるのでは？

19s2027: 多電子原子のハミルトニアンにおいて、スピン軌道相互作用の項が重要になるのはどうしてですか。 **M:** それが関与する現象を問題にしているから。// ここで話題にしているのは、どんな現象だったか？

19s2028: なぜ選択律は原子番号が小さい原子にしか当てはまらないのですか？ **M:** 20200721 の 19s2046 参照

19s2029: 電子のスピンが異なる場合でも、エネルギーが等しくなることはありますか？ **M:** 18s2027 参照

19s2030: 異核二原子分子の場合、分子の対称性を利用することはできないのですか？また、NO は二つの原子の大きさが近いため、等核二原子分子として扱うのですか？ **M:** 本気か？ // 異核だと、何が違うのか？今問題にしているのは、何の波動関数か？何のエネルギーか？

19s2031: フントの規則を利用できない元素はニホンニウム以外にどういった元素がありますか？ **M:** 何か勘違いしているのでは？規則の利用に、一体どんな制限があるというのか？適用可能範囲は、どのように記述されているか？

19s2032: スペクトルについて実験する際、原子にはどのような種類の光を当てるのですか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // どんなスペクトルを観測しようというのか？

19s2033: 二原子分子のふたつの原子オービタルが持つ重なり積分が大きいと言うことはその分子がどのような状態であることを示しているのですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 重なりが大きいと、核 A の近傍における原子 B に属する電子の存在確率はどうなるか？

19s2034: 量子力学が発達する以前では化学結合をどのように捉えていたのか。 // 教科書 p.329 の選択律について許される遷移を規定する制限条件とあるがこれは具体的にどのような条件のことを示しているのか。 **M:** 18s2030 参照 // 本気か？国語力不足か？教科書本文には“選択律はある状態から他の状態への可能な、つまり許される遷移を規定する制限条件である。原子スペクトルの場合、選択律は [式 (8.57)] である。”と記載されている。初めの文で、何のことを制限条件だと述べているのか？そして二文目ではそれは何だと述べているのか？

19s2035: 項記号を用いて金属の基底状態を考えると、高スピン、低スピンの関わりとどのような影響がもたらされるのか。 **M:** 本気か？ // 高スピンとか低スピンとか、それって S と関係あるのか？

19s2036: 教科書 p.329 に許される遷移の制限条件が載っているが、具体的にエネルギー値での制限条件はあるのですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 教科書では、制限条件はどんなものだと書かれているか？

19s2037: H_2^+ の波動関数を考える際に、核間距離 R で二つの核とひとつの電子とで考えたが、上手いこと合成して今までやってきたように核と電子を 1 対 1 で置き換えて考えることは出来ないのだ

ろうか。 **M:** 自分で考えてみたり、様々な参考書を読んで勉強すればいいのでは？

19s2038: ボルン・オッペンハイマー近似によって角の運動を無視することで摂動論によって系統的な補正ができるとありますが、ボルン・オッペンハイマー近似と摂動論のつながりが理解できません。補足説明をお願いできますか？ **M:** 国語力不足か？ 質問文中での教科書本文の要約がオカシイ。 // ボルン・オッペンハイマー近似 (核の運動を無視) によるエネルギーと波動関数 → これを非摂動波動関数・非摂動エネルギー、無視した核の運動の効果 → 摂動

19s2039: スピン-軌道相互作用は磁気モーメントと電流による磁場との相互作用とあるのですが、これはどのような影響を与えるのでしょうか。 **M:** 本気か？ 物理学の基礎 (電磁気学) を復習する必要があるのでは？

19s2041: 熱力学でエネルギーの移動形態は仕事と熱であると学んだのですが、遷移について、光もエネルギーの移動形態なのですか。 **M:** 本気か？ // $E = h\nu$ は、量子力学の基本中の基本では？

19s2042: 教科書 353 ページに「この方法は望みの精度が得られるように系統的に改良することもできる」とあるが、どこをどのように改良することができるのですか。 **M:** 教科書の次のページをよく読めば、LCAO により分子オービタルを構成する。講義でも説明したのだが、これはレイリー・リッツの変分法。教科書 7 章や参考書をよく読めばいいのでは？

19s2043: 式 (9.3) をみると R が大きければ相互作用の項が無視できると思ったが、そのような場合はあるのか **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 核間距離が非常に離れれば、それって、水素原子と水素原子核 (プロトン) に解離したってことでしょ？

19s2044: フントの規則が適用されないものはあるのでしょうか、あるとすればどのようなものですか **M:** 教科書や参考書をよく読んで考えればいいのでは？ // そもそもフントの規則が適用されるものは何か？

19s2045: 量子力学的に考えると分子オービタルに原子核が 2 つ存在すると考えられるのはなぜか？ **M:** 量子力学も何も、水素分子・水素分子イオンなので、核が二つあるのは当たり前では？

19s2046: LS 結合は原子番号が小さい原子だけに当てはまり、原子番号が大きい原子は jj 結合という

結合が当てはまるようなんですが、どうして原子番号の大きさで合成の仕方が変わるのですか？ **M:** 状態を記述する量子数として L, S と j とでどちらが適切であるか、良い量子数になっているか、という問題。

19s2047: フントの第三規則のところで半充填より少ないと J は小さくて電子が詰まっている。半充填より多いと J は大きくてホールが詰まっている。と言っていたが ξ の符号の正負と電荷の正負はなにが関係してますか。 **M:** 章末問題 8.46 参照。 (ここに出てくる式は原子単位系だが)

19s2048: ボルン-オッペンハイマー近似の下では H_2^+ のシュレディンガー方程式を厳密に解くことができる教科書に記載されていますが、反対にシュレディンガー方程式を厳密に解くことができないのはどのような化学種がありますか？またそれはなぜ厳密に解くことができないのですか？ **M:** 本気か？ // 多電子原子が厳密に解けないのはなぜだったか？

19s2049: 分子オービタルで異種原子による二原子分子が成立する場合、電気陰性度などの特徴はどうやって波動関数に組み込むのか？ **M:** 異核二原子分子が現実存在するのだから、成立するでしよ。というか、人間の考え方の話なので、どんな分子であっても、分子オービタルで考えようと決めれば、成立するでしよ。

19s2050: 同じ原子でもミクロ状態が異なる原子では、化学的性質はどのように違うのですか。 **M:** 19s2001, 19s2019 参照

19s2051: 選択律において、原子番号が小さい番号の原子だけに当てはまる理由はなんですか？ **M:** 19s2028 参照

19s2052: 授業内でニホニウムは寿命が短いとおっしゃっていましたが、このような寿命の短い原子が日常生活で有用になるような研究を行っている場所はあるのでしょうか？ **M:** 私は知りません、調べて分かったら、教えてくださいネ :-)

18s6025: 原子によって初めの数種の電子状態のエネルギーの序列が異なることがあるのはなぜですか？ // 例えば教科書 p.328 の水素原子の 3d4s の違い、など。 **M:** ちょっと意味不明。序列が異なるって、何と何を比べての話か？