構造物理化学 I (20210126) M: 以下は宮本のコメント

- **17s2025:** 二原子分子以外でも赤外線を吸収し、励起することはあるのでしょうか。 **M:** 自分で判断 できないのはナゼか? 無いと考える根拠があるのか? // 教科書 13 章や参考書をよく読めばいい のでは?
- **18s2003**: 図 5.8 で、v=3,4 のときは確率密度の極大値が中心と端で微妙に違うのはなぜですか? **M**: 波動関数がそうなっているとしか言いようがないのでは? // むしろ, 位置によりポテンシャルエネルギーが異なるので、一様な強度をもつ波動関数には成り得ないと予想されるのだが.
- **18s2006**: 酸素分子や窒素分子の基本振動数が赤外吸収では求められないのならば、主にどのような方法で測定されているのですか。 **M**: 振動分光には, 赤外線吸収のほかにラマン散乱もあるし, 電子遷移スペクトルの振動構造を高分解能で詳細に観測するという手もあるのでは?
- **18s2010:** 波動関数のしみ出しは実験的に観測できるのか **M:** 出来ない理由があるのかを自分でよーく考えてみればいいのでは? // 波動関数は直接観測できる物理量か? // トンネル効果が実際に起こること. 20s2046 も参照
- **18s2014:** エルミート演算子に法則がありますか **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // 演算子の種々の性質は, 法則と呼べるか? 例えば "エルミート演算子の固有値は実数である" 等はどうか?
- **18s2045+:** 講義中に出てきた分子量の話に関連して、分子量は幾つかの同位体に対しての平均であるが、その同位体それぞれの分子量は分子量に対して単一の決まった飛び飛びの (量子的) 値を取るのか。それとも分布的になるのか。 **M:** 本気か? 自分で判断できないのはナゼか // "単一の決まった飛び飛びの (量子的) 値を取るのか。それとも分布的になるのか"って、何を聞きたいのかサッパリわからない。 // (+) たとえば一個の分子の質量は構成原子の質量の合計で、 6.02×10^{23} 個の分子の集団の質量も同様に構成原子の質量の合計になる。ではそれが例えば質量スペクトルではどうなるか? 試料を構成する分子の一個一個の分子がその質量に対応するところに信号を与える。当たり前では?
- **18s2046**: 調和振動子の確率密度が放物線の外にわずかながらはみ出しているということは元から与えられている粒子の存在確率の値域がわずかに拡張されているということなのか **M**: 自分で判断できないのはナゼか? // というよりも "元から与えられている粒子の存在確率の値域"って,何?
- **19s2003:** 教科書に、二原子分子では基本振動数は $10^3 \, \mathrm{cm}^{-1}$ 付近に現れる、とありますが、そのこと について特にその場では言及されていないように思われます。これはそのうち解説されるのでしょうか。 それとも度重なる実験結果からの内容ということでそのまま進むのでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 教科書の表 5.1 や表 13.2 を見たり,自分で調べたりして考えて みればいいのでは?
- **19s2004:** 振動により分子の双極子モーメントが変化することに電気陰性度も関係しますか? **M:** 本 気か? // 電気陰性度とはどんな物理量か? 原子の存在状態に依存する話か?
- **19s2005**: 量子力学的には振幅の外に粒子が存在している確率が 0 ではない、という古典力学的にはありえない考え方が否定されないのはなぜですか。 **M**: 本気か? // 量子力学と古典力学は異なるからでは?
- **19s2011:** エルミート多項式の母関数からロドリーグの公式が得られる思うのですが、条件を変えるとその公式は得られないのでしょうか **M:** 母関数から得られるものはその公式ではないと思われるが、それはさておき、"条件を変える"とは一体全体どういうことか?
- **19s2012:** 自分たちの住んでいるサイズでトンネル効果は起きることはありますか? **M:** 自分で計算

- してみればいいのでは? // 章末問題 4.36 付近参照
- **19s2013:** エルミート多項式 Hv の引数が ξ とありますが、 ξ はどのような物理的意味を持つのですか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはナゼか? // エルミート多項式はどのような物理的意味を持つか?
- **19s2017:** 教科書 p.183 の式の中で = の上に ? がついたものがあるのですがこれはどうしてこのようになっているのですか? **M:** 本気か? 国語力不足か? 論理的思考力不足か? // そのページに書かれているのは"証明"ではないことに注意. 方程式は, 恒等式ではないので, 未知数に解でない値を代入したら成り立たない (左辺と右辺が等しくならない).
- **19s2018**: 量子力学では確率がポテンシャルの壁を越えて存在することになっているが、古典的振動子 の確率ではどのような時に成り立たなくなったのでしょうか? **M**: 意味不明, 意図不明. 何を聞きたいのか? どのような答えを想定しているのか?
- **19s2022:** 二原子分子の赤外線スペクトルを調和振動子で説明できない場合もあるのでしょうか。 **M:** 本気か? 自分で考えて分からないのはナゼか? // 二原子分子のポテンシャルは調和振動子のポテンシャルと同じなのか?
- **19s2024:** p.183 式の = 上に ? が着いているのはこの時にまだ式 (5.36) 及び $\omega = (k/\mu) 1/2$ を用いてなかったからか。違うのであればそれはどのような要因があるのか。 **M:** 19s2017 参照
- **19s2026**: 波動関数の染み出しが実際に観測された例はあるのですか。 **M**: 18s2010 参照
- **19s2043:** トンネル効果と波動関数の染み出しはどう違うのか **M:** 自分で考えて分からないのはナゼ か? // 字が違う
- **19s2045:** 酸素や窒素は赤外線を吸収しないため地球温暖化には影響を与えていないのですか? **M:** 講義でも説明したのに、全く理解されていないようで残念 // 教科書 13 章や参考書もよく読めばいいのでは?
- **19s2049:** いわゆる粒子の「漏れ」は今回の講義で起こりうる事を理解したが、他の特異な性質も数式またはグラフによって考察可能なのか? **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // 科学は何をする学問なのか. 理解されていないようで残念
- **19s2050:** 分子光学的に結合を軸とした原子の回転に意味はないのでしょうか。それとも、影響があまりないため無視してもいいのでしょうか。 **M:** 教科書 5 章, 13 章や参考書をよく読めば分かるのでは? // 二原子分子の分子軸周りに回転しているかどうか, どうやって判断すればいいのだろうか?
- **19s2051:** どのようにして換算質量は定められたのでしょうか? **M:** 教科書 5.2 節の導出過程をよく 見て考えればいいのでは? 物理学の基礎を復習する必要があるのでは?
- **19s2052:** 天文単位の増加について弘前大学の三浦さんは惑星と太陽の潮汐摩擦によるものだと説明したが、どのような要素を用いるとこれを証明できるか? **M:** 前後の脈絡が無く, 意味不明
- **20s2001:** 表 5.1 について、H2 の振動数が D2 の振動数より多いのはどうしてなのでしょうか? **M:** 教科書の (5.33) 式の意味を理解されていないようで残念
- **20s2002:** 双極子モーメントの変化が大きい二原子分子ほど赤外線の吸収率は高いのですか **M:** 教科 書 13 章や参考書をよく読めば分かるのでは? // 遷移確率は何に依存するか?
- **20s2003:** 二原子分子の赤外線スペクトルは、それぞれの原子のスペクトルの重ね合わせで求めることはできますか? **M:** 正気か? 単原子で分子内振動をするというのか? // 異核二原子分子では 2 本の吸収線があることになるが?
- **20s2004:** 波動関数の染みだしは、粒子がポテンシャルエネルギーの壁を超える以上のエネルギーを獲

- 得する可能性を考慮しているという解釈は適切でしょうか。 **M:** そりゃ可能性はゼロではないが、トンネル効果はそういうことではない.
- **20s2005:** 調和振動子の持つエネルギーについて、振幅を無限大に大きくしていくとエネルギーは発散 するのでしょうか、それともある一定の値に収束するのですか? **M:** 自分で考えて分からないの はナゼか? // 調和振動子の定義に基づいて考えればいいのでは?
- **20s2006:** 教科書に、調和振動子のシュレディンガー方程式とかいてあるのですが、これは調和振動子の波動関数ということでしょうか? **M:** 本気か? // シュレーディンガー方程式と波動関数は同じものだという主張か?
- **20s2007:** 調和振動子モデルが隣接準位間にだけ遷移が許容されるのは何故か **M:** 教科書 p.569 をよく読めば分かるのでは?
- **20s2008:** 非調和的であれば、隣接準位間だけでなく例えば 0 → 2 のような遷移も可能ですか? **M:** 20s2007 参照
- **20s2009:** 分子の双極子モーメントが変化しないときなぜ赤外線は吸収されないのですか? **M:** 講義 でも説明したのに理解されていないようで残念. 振動する電場と分子との相互作用 // 双極子モーメントの変化はそれによって誘起される電場の変動をもたらす.
- **20s2011:** 選択律とは 2 つの量子状態間の遷移が許容であるか禁制であるかを簡潔に示した規則のことであるが、 Δ v=± 1 という条件は吸収と放出をそれぞれ示しているということですか? **M**: 自分で判断できないのはナゼか? // Δv = +1 と Δv = -1 とで、状態はどう変化するか? 状態のエネルギーは?
- **20s2012:** 等角ニ原子分子の基本振動数を求める方法はどんなものがあるのでしょうか。 **M:** 等角と は? // 18s2006 参照
- **20s2013**: 調和振動子から予想されるスペクトルが、吸収される光の振動数を持った、ただ一本の線で構成されるという予想が実験とよく一致しているとありますが、実際にどのような実験を行って求められているのですか? **M**: 本気か? // 赤外線吸収スペクトルの測定
- **20s2015:** 量子数 v=0 のときのエネルギーは絶対零度での二原子分子のエネルギーですか?前回、零点エネルギーは存在するのに取り出せないと言っていたのは、このような理由からですか? **M:** 全 然違う話を "零" という共通の一文字だけで同一視するとは? // なぜ二原子分子のエネルギーに 温度 (絶対零度) が関係するのだろうか?
- **20s2016**: ばねの振動周期の測定について,端では速度が 0 になるので端から測定を始めた方が中心から測定を始めるよりも正確に測定できるという考えであっているか. **M**: それではうまくないと 講義で言ったのを聞いていてくれなかったようで. 残念.
- **20s2017**+: エルミート多項式が偶関数、または奇関数であるならば、何か物理の分野において特徴があるのですか? **M**: (4.11) 式を見てよく考えればいいのでは?
- **20s2018**: 二原子分子の吸収スペクトルを求める式は、周期表の下の方の二原子分子に対しても当ては めることができるのでしょうか? **M**: 自分で判断できないのはナゼか? もしも元素の種類によっ て当てはめることができたりできなかったりするとしたら, その違いはいったいなぜなのだろうか? その式とやらに, 元素の種類に依存するような項や因子は含まれているのか? // ところで, 吸収スペクトルを求める式とは?
- **20s2019**: 水素と重水素は化学的な性質が似ているということは基本振動数は化学的性質に影響を与えないということですか? **M**: 自分で判断できないのはナゼか? // 化学的性質とは何か? 化学的でない性質とはどのような性質か?

- 20s2020: 分子が赤外線輻射を吸収するためには分子が振動するにつれて分子の双極子モーメントが変化しなければならない。二酸化炭素の持つ二つの双極子モーメントは、互いに逆向きで同じ大きさであるために相殺されて、分子全体としては無極性分子であるが、赤外線を吸収するのは何故ですか?分子全体としては無極性でも、極性結合を有する分子であれば、分子の振動によって双極子モーメントは変化するのですか? M:二酸化炭素は直線形の三原子分子なので、分子内振動の自由度は4である。教科書 p.557 参照
- **20s2021:** P184 の調和振動子の存在確率で、全エネルギーがポテンシャルエネルギーを超えても存在 確率が 0 にならないのは粒子が粒ではなく波として存在しているためある程度ぼやける、ということでしょうか? **M:** 何がぼやけるという話か? // 全エネルギーがポテンシャルエネルギーを超える領域とはどこのことか?
- **20s2022:** トンネル効果は古典力学的にありえないのに、量子力学の理論のなかだけでなく、核融合などのように現実の現象に現れているのはなぜでしょうか? **M:** 本気か? // 現実の現象は全て古典力学に支配されているのか?
- **20s2023:** なぜ分子が赤外線を吸収するために分子の双極子モーメントが変化しなければならないのですか? **M:** 20s2009 参照
- **20s2025:** 赤外線を吸収して励起するというのは分子の振動と赤外線の振動が共鳴するという解釈で合っていますか。 **M:** 20s2009 参照
- **20s2026:** ϕ 0(x) と ϕ 1(x) を規格化させることができたら何が得られるのか **M:** 別に, 規格化された波動関数が得られるのでは? // 未だに"規格化"の意味や意義が理解できないのだろうか? 教科書や参考書をよく読めばいいのに.
- **20s2027:** 調和振動子の確率密度は中心に近い部分は一定に近いのですか? **M:** 自分で判断できない のはナゼか? // 振動している波動関数が "一定" とは?
- **20s2028:** 極性をもつ HCl や、CO2 は赤外線を吸収し地球温暖化を引きおこすと言っていましたが、空気中には水蒸気となって H2O が飛んでいますが、H2O は極性を持つ分子ですが関係ないのでしょうか? **M:** 本気か? // 太陽系の中で地球が温暖な惑星として生物が発生し,生きていけるのはナゼか?
- **20s2029:** エルミート多項式が満たすべき微分方程式はありますか **M:** 自分でどれだけ調べたのでしょうか? // 講義でも板書したし, 教科書 p.198 の式なんかもどうでしょうか. 理工系の数学の教科書「化学数学」も観ればいいのでは?
- **20s2030:** 赤外線スペクトルを説明するときは二原子分子限定なのでしょうか? **M:** 17s2025 参照
- **20s2031:** タングステンは赤外線を吸収すると光ると聞いたことがあるのですが二原子分子も赤外線を吸収することによって変化はありますか。 **M:** "タングステンは赤外線を吸収すると光る" は, 本 当なのだろうか? // 教科書 13 章, 15 章や参考書をよく読んで考えてみればいいのでは?
- **20s2032:** 速度 v が虚数であれば量子力学の運動エネルギーの符号が負になるのは、つじつまが合うと思います。そこで私は次のような質問を考えました。速度 v は本当に実数ですか。 **M:** 正気か? 実世界の物理量が実数ではないと? 距離を時間で除したものが実数でないと?
- **20s2034:** 二原子分子の振動エネルギー準位に対応した波動関数はどうすれば導かれるのか **M:** 教科 書に記載されていないし講義でも示さなかったが,調和振動子のシュレーディンガー方程式を解く 過程については中上級の参考書を参照してください.
- **20s2035:** 分子が赤外線輻射を吸収するためには分子が振動するにつれて分子の双極子モーメントが変

- 化しなければならないとありますが、具体的にどのような変化が生じるのですか?振動するにつれて双極子モーメントは大きくなるのか?小さくなるのか? **M:** 20s2009 参照 // 双極子モーメントの定義を確認すればいいのでは?
- **20s2036:** なぜ急に波動関数にエルミート多項式が用いて表されたのか。 **M:** てにおはがオカシイの では? // 必要だからでは?
- **20s2037:** エルミート多項式は調和振動子の波動関数に現れるようですが、他にエルミート多項式が含まれるものはどのようなものがありますか治 M: 私は知りません. 調べて分かったら, 教えてくださいネ
- **20s2038:** 古典的な考え方において、なぜ x=0 でポテンシャルエネルギーが 0 の時に粒子がもっとも存在するのでしょうか。 **M:** 自分で考えて分からないのはナゼか? // どういう状態の粒子の話か? // 全エネルギーがゼロの古典的な粒子は、どのように振る舞うか?
- **20s2040:** 波動関数のしみだしは 0 に絶対ならないがその数値について具体的に求める方法は存在するのか。 **M:** 18s2010 参照
- **20s2041:** 図 5-8 で触れた波動関数の染み出しとは、調和振動子の振幅の最大値を超えた本来たどり着けないはずの場所にも存在確率があるということでしょうか。 そうならば振幅の最大値 A とは何なのでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはナゼか? // その図において, 振幅の最大値 A はどこに相当するか?
- **20s2042:** 赤外線輻射を吸収するために分子が振動するにつれて双極子モーメントはどのように変化するのでしょうか **M:** 20s2035 参照
- **20s2043:** 波動関数におけるしみだしの時の運動エネルギーはどのようになっているのか? **M:** 講義 でも説明したのに理解されていないようで残念 // 形式的には図 5.8 に類似した板書の図を見て考えればいいのでは?
- **20s2044:** 単原子分子の基本振動数、力の定数などはどのように求めるのですか。 **M:** 正気か? // 単原子分子が、どのように分子内振動するというのだろうか?
- **20s2045:** 音楽に於いて、不協和音と呼ばれる音同士の周波数比は比較的大きな整数の比で表されるということを最近知りました。ですが、周波数比と我々が和音に対して持つ印象との間にどのような

- 因果関係があるのか、その本では説明されていませんでしたので、ご存知ならば教えて頂きたいです。 **M:** 何かの勘違いでは?"不協和音"の意味を理解していない? // そもそもあなたが読んだ本は何?とか,それってここで聞くことが適切か?とか,なぜここで聞こうと思ったのだろうか?とか,まあいろいろ.
- **20s2046:** トンネル効果が起こった場合どういった影響が起こるのでしょうか。 **M:** トンネル効果と は、どういう現象か? トンネル効果の有無で何が違うか?
- 20s2047: 179 ページの図 5.7 についての話の中に、ある一定の値を超えると存在確率はほぼゼロになる、とありましたが、ほぼ 0 になるというのはあくまで理論値から導き出した結果だと思うのですが、無限回試行を繰り返した場合、そのかぎりなく 0 に近い存在確率を観測することは可能なのでしょうか? M: 自分で考えて分からないのはナゼか? // 現実の二原子分子とモデルとの関係を理解していない? // 無限回の試行の意味を理解していない?
- **20s2048**: 吸収した電磁輻射を放出せずに、保つにはどうするのですか? **M**: 無理な相談では? // アインシュタインの B 係数と言ってみるテスト
- **20s2049:** ナトリウムは常温で固体なので Na 二原子分子の k は気体二原子分子の k より大きくなる と思っていたのですが、(表5・1) より、Na 二原子分子の k が Cl 二原子分子の k より大きいです。それはなぜですか。 **M:** 事実誤認があるのでは? Na 二原子分子の方が Cl 二原子分子よりも力の定数 k が小さいようだが? // Na 二原子分子の原子間の結合はどういうものだろうか? ナトリウムが常温で固体であることと、どんなかんけいがあるか?
- **20s2050**: 教科書の表 $5 \cdot 2$ のエルミート多項式は、どのように導き出されたのですか? **M**: 19s2011 も参照
- **20s2051:** 二原子分子の力の定数には、金属結合やイオン結合といった結合の種類による違いはないのですか? **M:** 本気か? // 力の定数に,力の種類・起源に関する要素は入っているか? // 金属結合やイオン結合によって成り立っている二原子分子とは何か?
- **20s2052:** 赤外線の吸収を学びましたが、紫外線もまた双極子モーメントの影響を受けて吸収量が変わりますか? **M:** 吸収の原理, 光と分子との相互作用の様式を考えればいいのでは? 何に関するエネルギーか?