

本日の講義の 26 ページ目の d 配置から生じる各項間のエネルギー差(基底項から)に関して質問があります。スライド右下に  $1 \text{ cm}^{-1} = 1.24 \times 10^{-4} \text{ eV}$  とあり、その下に  $1/8 \text{ cm}^{-1} \cong 1 \text{ meV}$  とありますが、 $1/8 \text{ cm}^{-1}$ ではなく  $8 \text{ cm}^{-1}$ ではないかと思います。そのとおりです。ミスです、指摘をありがとうございます。 $8 \text{ cm}^{-1} = 1 \text{ meV}$  が正しいです。修正いたします。

本日の授業スライド p41~p44 の 6 配位八面体型錯体の多電子系 d 電子配置の図が見やすかったです。d 電子が 1 から 10 まで全ての場合について載っていたので 1 つずつゆっくり確認することができました。また、p45 にまとめて載っており 1g と 2g を比較しやすかったです。

スペクトル項の規則について知っている、スペクトルのピークの帰属と理解が深まります。

前回の report 課題 q6,q7 でつまづいています。アドバイスあるいは参考図書等、教えていただければ幸いです。

「クーロン相互作用 フーリエ変換」で検索してみてください。固体物理の本にも載っています。

錯体の項の記号と点群の指標表の対応がよくわからなかったです (eg と t2g 軌道の電子配置と点群の指標表から錯体の項の記号を決定できるのか)。自由イオンでは指標表を考えずに全軌道量子数から項の記号を導いていましたが錯体における項の記号とのつながりがよくわからなかったです (より一般にはどのような導き方をすればいいのか)。

自由イオンと結晶場中の項の結びつきについて、まだモヤモヤしているところと思います。実際には、配位子場理論では、直積を使って電子数を増やしていった場合の最低エネルギー項を導出できます。自由イオンでは、指標表を使って既約分解します。次週、もう少し詳しく説明します。また、配位子場理論の本も参考に見てみてください。(難しいものが多いですが…)

授業の感想というより、量子化学に対する感想です。量子化学 (の教科書) には、どうしても数学的なテクニカルな事をしただけで、量子力学的に何をしているのかを解説してくれないというイメージがあります。もっと、量子力学的な目線がたくさん入った本を作ってもらえれば嬉しいです。

式変形やお話 (~で与えられる、など) にとどまらず、物理的な意味をしっかりと議論するのが重要だと思います。

今日の授業の感想は配位子の強さを連続的に変化させたときの許されるエネルギーとの関係を数理的に求める。実際に、分光でエネルギーを求めて、配位子の強さを知るとというのが私の中で噛み砕いた要約です。結晶のバンド図に似た哲学を感じました。

クーロン相互作用と配位子場の関係を議論しました。何をしているかを理解できると面白いものです。第4回でバンド理論を説明します。

物理化学基礎 1 の授業について、結晶場分裂などは学部の授業で習っていましたが、数式を用いて示すことができると知り、理解が深まりました。また、スペクトル項の記号について、何となくで乗り切っていたのでしっかりと理解できました、ありがとうございます。断片的な知識が自分の中で繋がって理解が深まった時が一番感動しますね。それが研究であり、やめられなくなるものです。(体験談)

本日の講義についてですが、今まで金属錯体のエネルギー準位を考える上で結晶場理論を用いた議論を目にすることが多かったものの、配位子場理論でより定量的な議論が可能になるのが印象的でした。

その通りです。続きを深掘りしていくと分光学に魅了されて、幸福になれます。

今まで配位子場理論について感覚的な理解しか行っていませんでしたが、本日の授業を通して、自由イオンの状態から、考慮するクーロン相互作用の強さによってどのように電子の軌道準位が分裂していくのかを考えることや、軌道の対称性について考えることができました。また、田辺-菅野ダイヤグラムの重要性や利便性についても、改めて強く認識することができました。

自身で納得いくまで深く考えてみてください。原著論文に立ち返るのもよいかもしれません。

7 ページの 1,2 行目についての質問です。

$\Delta E = E(\uparrow\uparrow) - E(\uparrow\downarrow)$  を計算すると、 $c^2Q$  の項が残ると思うのですが、 $\Delta E = -2J_e$  だけになるのはなぜでしょうか。c の値が無視できるくらい小さいということですか？

説明不足でした。その通りであり、 $c^2 \ll 1$  が前提にあります。

授業資料 45 ページにおきまして、「L」の記号が記された電子軌道においては、「磁性に軌道角運動量の寄与あり」とのことでしたが、この寄与は、磁性に関する電子スピンの x, y, z の三軸において、非対称であることに由来するという理解で間違いはないでしょうか。

その通りです。非対称な電子分布と磁性の関係は私の専門分野でいくらでも説明できます。磁気異方性の起源などにも関連します。スピンのみでなく軌道角運動量に着目した磁性研究が今後重要であると思っています。（個人的感想）

また、今回の授業に関しまして、結晶場理論や配位子場理論は量子化学や無機化学でも触れた分野であり、授業内容はやや多かったです。そのおよそを理解できたと感じております。物理化学の特に数式を用いた理解にやや苦手意識を持っておりましたが、本日の授業で各 d 電子数における基底状態の順位の記号に関して、おおよそのイメージを持つことができました。

式変形に溺れることなく、かつ表面的（お話的な）でない深い理解を目指してほしいです。常に、物理的な意味を考えるようにするとよいと思います。

前回の授業や今回の冒頭 P27 に登場した電子のやりとりの図が正直に申し上げると（自分だけかと思いますが）わかりにくかったです。

Goodenough-Kanamori rule の説明は、第 4 回で実際の物質系でどうかをもう一度説明します。検索して、理解を深めておいてくれるとよいです。Goodenough さんは 2019 年にノーベル賞を受賞されています。金森先生は阪大の学長でした。

課題の Q13 を解いている際に気になったのですが、E, E<sub>u</sub>, E<sub>g</sub> の違いについて教えていただきたいです。

Q13 は、Oh 対称性なので、E<sub>g</sub> としてください。 E<sub>u</sub> という表現は使わないです。

また、成績評価に関する質問なのですが、各回のレポート課題を解き、30 問中 10 問以上解答するよという指示でしたが、良い評価を得るには 30 問完答することが求められますか。良い評価のためには何問くらい答えたら良いなどの基準を教えていただけると幸いです

大学院の講義なので、研究に支障のない範囲で進めてほしいという意味合いを込めています。そのため、10 題は解いてほしいといいました。選択の自由を与えるために多くの問題（課題）を用意しています。人によって興味が違うと思います。20 題解けば十分でしょう。成績を気にせず、理解を深めてくれればそれでよいです。与えられたお勉強は M1 の講義で最後になると思います。今後は自身で課題を見つけて解くことになるので、最後のレポート課題ですね。

授業の難易度はとても高いと思っていますが、どのような利点があり、その事象についてどのような歴史的背景があるのか等の知識も増やすことができ、今一度物理化学の勉強がで

きることを前向きにとらえています。(英語の説明が時々わからないことも多々ありますが...)

前向きにとらえてください。物理的な意味、なぜそうするのか、などを考えながら議論を楽しんでください。判りやすい説明を心がけます。

少し質問なのですが、レポート提出の際は日本語でも構わないでしょうか？

また、手書きのレポート用紙をアップロードするという認識でよろしいでしょうか？

日本語、手書きで構いません。返却希望者には後で返却します。レポートの写真を送付するのは好きではないです。後日に説明します。

I hope my suggestion will not be late. I think your class is very useful for me.

I always think that your current PPT is already perfect. I just want to offer some suggestions to make it better.

As for me, because I am not familiar with some academic words in English. I haven't study Japanese before. So, some academic words are very strange for me. For my view, **if you can make a summarize at the end of PPT and mark important words for this class** I think it will help me to catch main details for this class more easily. I can search for the words when I preview your class based on your Power Point.

I can proudly say that I feel that you and your students interact very actively in your class. This atmosphere also attracts me to continue learning.

Anyhow, I will adapt to your teaching style in any case. I will be grateful if you are willing to listen to my advice as an ordinary international student.

Thank you for your kind comments! I'm sorry for presenting some pages in Japanese. As you commented, I will summarize the words to understand easily. Enjoy Spectroscopy!