目　次

編集にあたって　v

まえがき　ix

1　分子のエネルギーと形 …… 1

1.1　色素分子の光吸収と発光 …… 2

1.2　地球からの赤外放射 …… 8

1.3　宇宙から届くマイクロ波 …… 13

1.4　分子のエネルギー準位の階層性 …… 15

1.5　電子線の回折と分子構造 …… 16

1.6　分子構造の決定法 …… 21

2　振動する分子 …… 23

2.1　振動する分子をどのように記述するか …… 24

2.2　量子論から見た分子振動 …… 29

(a) 調和振動子の量子化　29

(b) 調和振動子のエネルギー準位　30

(c) 赤外吸収によるポテンシャルの決定　35

(d) 調和振動子の固有関数　37

(e) Hermite の漸化式　40

(f) 調和振動子の固有関数系　42

2.3　調和振動子を基本として …… 44

(a) Hermite 演算子とブラケット表示　45

(b) 固有関数を用いた期待値の計算　49

(c) x の行列要素と赤外吸収の選択則　51

(d) 倍音吸収　53

(e) x^2 の行列要素とポテンシャルエネルギーの期待値 57
(f) 生成と消滅の演算子 62
(g) 摂動エネルギーの評価 65
(h) Morse ポテンシャル 68
2.4 アンモニア分子の反転運動 …… 73
(a) 赤外吸収スペクトル 73
(b) 波動関数の偶奇性 76
(c) エネルギー準位の分裂とポテンシャル障壁 77
(d) アンモニアの幾何学的構造と反転運動の周期 78
2.5 多原子分子の振動をどのように取り扱うか …… 83
(a) 分子の持つ自由度 83
(b) 基準振動とは 85
(c) 基準振動と行列の対角化問題 92
(d) 基準座標で表わした振動のハミルトニアン 95
(e) 基準振動の量子論 99
(f) n 原子分子の基準振動 102
(g) 分子内座標による基準振動の表現 107
(h) ***GF*** 行列法による基準振動解析 111
(i) 無次元座標を用いたポテンシャルの非調和展開 119

3 回転する分子 …… 125
3.1 分子回転と分子構造 …… 126
(a) マイクロ波分光学 126
(b) 分子回転の量子論(2 原子分子) 127
(c) 直線分子の回転エネルギー準位と同位体置換による構造決定 132
3.2 分子の角運動量 …… 135
(a) 角運動量演算子 135
(b) 角運動量演算子の交換関係 137
(c) 昇降演算子 138
(d) 角運動量演算子の固有値 140

(e) 角運動量演算子の固有関数 143
3.3 古典力学から見た分子回転 …… 148
(a) 分子回転と Euler 角 148
(b) 座標回転の行列表現 151
(c) 分子回転の運動エネルギーと角運動量 154
(d) 慣性モーメントの大きさによる分子の分類 157
3.4 量子論から見た分子回転 …… 160
(a) 分子回転の量子力学ハミルトニアン 160
(b) 分子固定座標系の全回転の角運動量 165
(c) 偏長コマ分子と偏平コマ分子の回転エネルギー準位 168
(d) 2 原子分子と直線分子のエネルギー準位 170
(e) 球コマ分子のエネルギー準位 171
(f) 非対称コマ分子のエネルギー準位 172
(g) 非対称コマ分子のエネルギー準位の計算 ($J=0$, $J=1$ の場合) 173
(h) Wang の変換 178
(i) 非対称コマ分子の回転準位の対称性 180
3.5 回転スペクトルによる分子構造の決定 …… 183
(a) 対称コマ分子の分子構造 183
(b) 非対称コマ分子の回転定数の決定 186
(c) 非対称コマ分子の分子構造 191
3.6 振動と回転は同時に起こる …… 196
(a) 振動遷移の回転構造 196
(b) 電子遷移の回転構造 200

4 散乱する電子 …… 205
4.1 散乱する電子の波 …… 206
4.2 原子による電子線の散乱 …… 212
(a) 散乱の Schrödinger の式 212
(b) Born 近似による散乱振幅 216
(c) 原子による電子の散乱 217

4.3 分子による電子線の散乱 …… 220
(a) 分子による電子散乱の散乱振幅 220
(b) 2原子分子による電子線の散乱と干渉 221
4.4 散乱電子波の位相シフト …… 225
(a) 散乱波の部分波展開 225
(b) 漸近領域での部分波のふるまい 229
(c) 平面波の部分波展開 232
(d) 散乱振幅の部分波展開 234
(e) 電子回折における位相シフト 237
4.5 分子振動の効果 …… 240
(a) 平均2乗振幅 240
(b) r_a 構造と r_g 構造 246
4.6 多原子分子による電子線の散乱 …… 249
(a) 分子散乱曲線と動径分布曲線 249
(b) 分子散乱曲線から分子構造へ 252
(c) 短縮効果 254
(d) r_α^0 構造 258
(e) 構造決定の実例 263
さらに学習するために …… 267
図の出典 …… 268
和文索引 …… 269
欧文索引 …… 272