

ここに書いた説明では不十分だと思われる場合、遠慮せず直接質問しにきてください。おそらく、面と向かって話をしたほうが、互いに理解しやすいかもしれません。

- この説明 (図：詳細省略、光子の電場の振動、原子の s 軌道、p 軌道) がわからないです。
- 教科書 § 4.4、電子遷移の選択則、a 電子軌道部分の積分による遷移確率の大小についての説明です。電場の振動で電子が揺さぶられる方向と、遷移前後の軌道 (電子の存在する位置) の変化が合致していないと吸収できませんよ、というのが結論です。授業中の解説を聞き逃したのではないなら、これ以上を書いても伝わらないかもしれませんね。直接質問にきてください。
- 図 (省略) のように光が当たると、(遷移可能な軌道の絵が) が (図省略) となる理由がよくわかりませんでした。
- s 軌道の電子に光を当てると p 軌道になり、光が吸収される…?
- 電場による分極が意外と複雑でどのような電場どう分極するかイマイチわかってない。
- 上と関係しますが。省略した図のによろよろとなっている部分は、光のもっている電場の振動方向です。電子は、電場が振動することで、その振動方向に、力をうけますね。力の向きと大きさは光の振動数と同じ振動数で入れ替わるわけですね。○や8のように書いているのは、原子軌道のイメージですが電子が存在できる場所 (存在確率の高い空間の形) なわけです。もちろん、分子軌道で説明する場合も同じです。
- 教科書 p52 の「両者の掛け算が奇なら、全体は偶関数」で何がわかるのか? 遷移前と遷移後の掛け算?
- 遷移の起こりやすさ、です。光子の電場の振動の方向を基準として見たとき、遷移前の分子軌道や原子軌道と、遷移した電子が新たに入る分子軌道や原子軌道の対称性を比較するのです。遷移前の軌道が偶の場合、遷移後の軌道が奇であるなら、偶関数×奇関数で、「両者の掛け算が奇」です。つまり遷移は許容です。
- 基底状態と励起状態の核配置が図 (省略) のような場合、基底状態の $v=0$ からは、励起状態の $v=3$ までしか励起できないのですか。
- 図では、基底状態のポテンシャルの最も低い距離 ($v=0$ における分布の中心) から垂直に上向きの矢印を書いたとき、励起状態のポテンシャルカーブと $v=3$ あたりで交差しているので、そのような質問になったと思われます。ところで、基底状態の $v=0$ において最も多く観測されるのはその位置ですが、それよりやや長いものや、やや短いものもあります。だから、矢印を1本だけ書くのではなく、基底状態の $v=0$ における波動関数 Ψ_i ($v=0$ のレベルの上に山のように書き込んだやつ、 Ψ^2 がその距離で見つかる確率) と、対象として考える励起状態の任意の振動レベルにおける Ψ_f を見るわけです。2つの軌道にちょっとでも重なりがあれば、遷移は起きる可能性がゼロではないです。
- (基底状態と励起状態で核間距離が同じときの図) 基底状態の $v=0$ からは励起状態 $v=1$ への遷移では、 $\phi^2=0$ (節) の部分に遷移する。このとき「吸収がない」と聞こえたが「吸収がない」と「遷移しない」とは同じだろうか。
- ここでは、「遷移が起きること=吸収を生じること」です。なお、一つ上の質問に対する説明も見ておいてください。基底状態では中央付近の存在確率が高いとはいえ、その両側にも分布していますから、励起後の $v=2$ を考えたとき、節の左右 (ゼロではないところ) への遷移 (吸収) なら可能なわけです。
- 波動関数 (付帯事項の説明…)
- まあ、直接説明しましょう。質問においでください。
- 強い mixing がある場合、なんで (図) が交差しなくなるのか。
- p65 の図ですね。次回の授業で扱います。基本的な考え方は、水素原子の 1s 軌道ともうひとつの 1s 軌道から、分子軌道 σ と σ^* を生じますよね。これと同じです。
- 図 4.14 の鏡像関係がよくわからない。
- 今日の授業で説明したような理由により、吸収が生じるとき、基底状態の $v=0$ からの各遷移 (励起状態の $v=0$ 、 $v=1$ 、 $v=2$ … のそれぞれへの遷移) の確率と、発光が生じるとき、励起状態の $v=0$ からの各遷移 (基底状態の $v=0$ 、 $v=1$ 、 $v=2$ … のそれぞれへの遷移) の確率がほぼ同じになるため、吸収スペクトルと発光スペクトルは、その振動順位に由来する微細構造が、鏡像関係になります。

- 励起状態の電子状態で、なぜ左側にむかって電子が在るのか。曲線付近に電子の存在確率が多い理由など。垂直に励起するのは判ります。
- 「励起状態の電子状態で、なぜ左側にむかって電子が在るのか。」は質問者の意図を図りかねます。「曲線付近に電子の存在確率が多い理由」は、今日の授業では説明しませんでした。結果として、そうなっていると述べただけです。具体的な計算結果の例は、「調和振動子 振動 波動関数 形」などをキーワードとしてウェブ上で検索してもらえると、グラフで表されているようなものを含め閲覧することができるでしょう。
- 何故、中が小さい？
- ひとつ上の答えでよろしいですか？
- $v'=2$ より上の軌道で、振動平均付近ではなぜ分布が小さくなるのですか。
- 同じ意図の質問ですね。ただし、「 $v'=2$ より上の軌道」という表現はちょっと困ります。振動レベルは、電子配置による準位ではありません。「励起状態」と表しているところに複数かかかれている振動準位は、すべて同じ軌道に電子はいっているものです。
- 波動関数 Ψ と Ψ^* の違い。
- 波動関数が虚数を含むことがあるので、 Ψ のエルミート共役を Ψ^* で表します。とはいえ、虚数のことを考えないなら、 Ψ と Ψ^* の積と表現されているものは、単に Ψ^2 と捉えてしまって OK です。
- 基底状態と励起状態では励起状態の方が核間距離が長くなるために下図（省略）のようになるとき、ずれる距離は決まっているのですか。
- 分子ごとに違うでしょう。分子の構造が決まれば、予測は可能なはずですが。またはスペクトルの測定により、これに対応するような量を実測することもできます。
- 「軌道」「遷移」「 $\sim$ 状態」などの言葉がでてくると、もうダメだとあきらめてしまいます。
- ひとりでなんとかならないなら、質問にきましょう。せめて言葉の意味がわかるだけで、教科書を読む気がでてくるでしょうから、あきらめないで。
- アインシュタインの光等量則について。
- p41 の囲みの太字部分です。
- 核配置座標の幅は何を表しますか？
- 調和振動子（ポテンシャルエネルギーが放物線の形になっている）において、高い振動励起状態では核配置座標が幅をもつということがなにを意味するか、ということで OK でしょうか。もし、そうならば、ポテンシャルエネルギーとはなにを表しているのか、という問いと同じです、と返しましょう。ある高い振動励起状態に相当する力学的エネルギー（位置エネルギーと運動エネルギーの和）をもつケースを考えましょう。この幅とは、実際にそのバネがとり得る長さの幅であることになりますね。
- 電子の波動関数はポテンシャルエネルギー曲線から「滲み出す」と言っていたが、ポテンシャル曲線に存在する電子は真空準位にいるということなのか？
- 質問者本人には、授業後の休み時間に説明しましたが。古典力学との対応でみた場合に、全エネルギー（運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギー）が変わらず、あたかも負の運動エネルギーをもつような核間距離（すなわち、粒子のもつ全エネルギーよりも大きなポテンシャルエネルギーを要するような核間距離）をとることができるということです。
- 4.7 式がそれぞれ何を示しているのかよくわかっていない。
- 教科書の説明を読んで理解しにくいところは、直接ききにきてください。