

3.A 補足 - 回転量子化と回転準位の多重度

- ・ 回転運動の量子化に関しては、Atkins 12 章 – 回転運動 (邦訳第 6 版では p. 353–, 第 4 版では p. 482–) を参照せよ。
- ・ 紛らわしいことであるが、講義中で「二次元回転子」と呼ぶ、直線分子の回転運動は、Atkins 12 章では「三次元の回転」に相当することに注意せよ。

[多重度]

- ・ 回転運動の量子力学解に不慣れな場合は、その波動関数が水素原子の「軌道」と類似であることに気づくと、理解しやすいかもしれない。
- ・ 水素原子の $1s$ 軌道 (方位量子数 $l=0$) は縮退していないが、 $2p$ 軌道 ($l=1$) は 3 重に縮退している。このことは「電子の入れ物」が $2p_x, 2p_y, 2p_z$ の 3 通りあると解釈される。一般に方位量子数 l の軌道は $2l+1$ 重に縮退している。[例えば d 軌道 ($l=2$) は 5 重縮退]
- ・ 直線分子の回転運動の量子力学解は、水素原子軌道と似ている。回転波動関数は球面調和関数である。水素原子の波動関数 (軌道) の角度方向の分布も球面調和関数であるが、動径方向にも分布を持つ点で、回転波動関数とは異なる。
- ・ 回転量子数 $J=0$ の波動関数は図 3.a2 の s 軌道と同じ「形」をしており、 $J=1, 2$ の波動関数は、それぞれ p, d 軌道と同じである。(異なる記号が使われるが回転運動の J も、水素原子軌道の l も角運動量の量子数である)
- ・ 回転量子数 J の状態が $2J+1$ 重に縮退していることは、水素原子の p, d 軌道が 3, 5 重に縮退していることと全く同様で、異なる波動関数の状態が同じエネルギーを持つことに相当する。

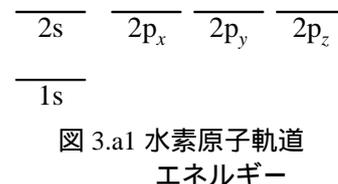
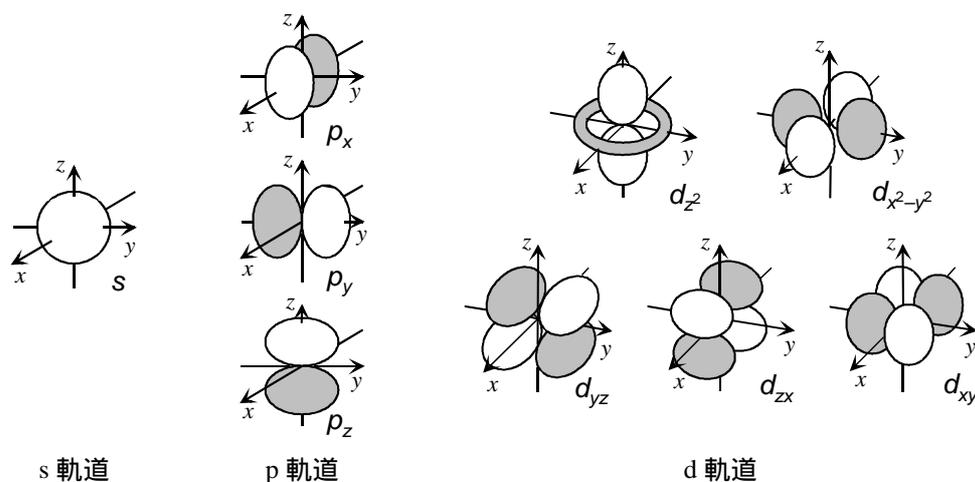
図 3.a1 水素原子軌道
エネルギー

図 3.a2 水素原子軌道の形