

表 5.1 スピン多重度

	一重項	二重項	三重項
不対電子数	0	1	2
S スピン量子数	0	$1/2$	1
M_S S の z 軸射影 (磁場中の量子化)	0	$-1/2$ $+1/2$	-1 0 $+1$
$2S + 1$ スpin多重度	1	2	3
例	He, H ₂ , CH ₄ , CH ₂ O(S ₀ , 基底状態)	NO, CH ₃ (ラジカル)	O ₂ , CH ₂ O(T ₁ , 励起状態)

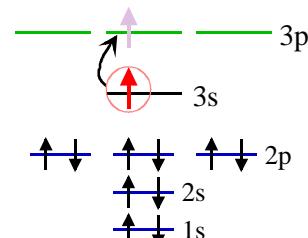


図 5.1 Na-D 線の電子遷移

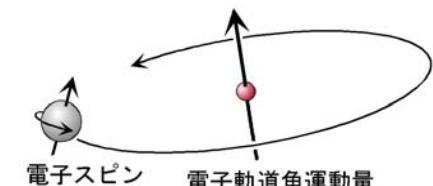


図 5.2 スpinと軌道角運動量

表 5.2 原子の電子状態 (スペクトル項)

	Na	F
電子配置	[Ne]3s ¹ 3s ↑	[He]2s ² 2p ⁵ 2p ↑↓↑↑↑
$2S + 1$	2	2
L	0 (s 軌道に 1)	1 (p 軌道に 1)
電子状態 (スペクトル項)	² S (doublet - S) 二重項の S 状態	² P (doublet - P) 二重項の P 状態

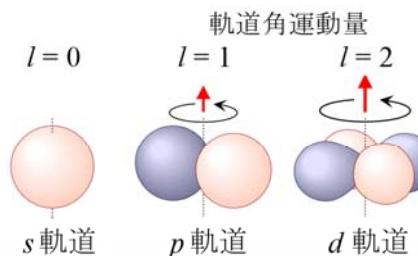


図 5.3 原子軌道

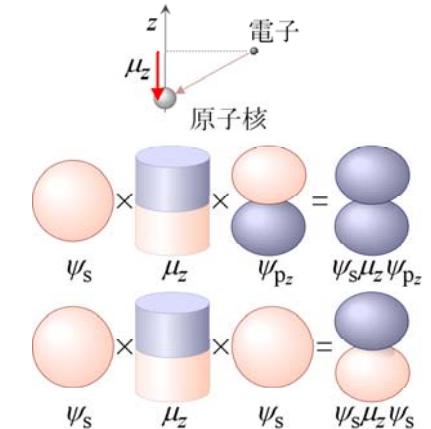


図 5.4 Δl 選択則

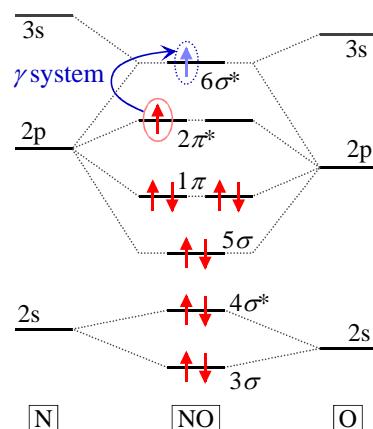
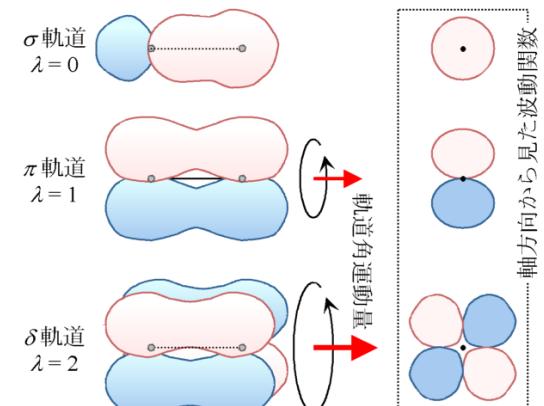


図 5.6 NO γ system

"Photochemistry of Small Molecules," Hideo Okabe,
Wiley-Interscience, New York (1978).

図 5.5 分子軌道の対称性
(電子の軌道角運動量量子数の分子軸への射影)