

分子分光学 (20200706) **M:** 以下は宮本のコメント

- 16s2008:** 振電相互作用というのは、すべての分子に存在するが適当な対称性が存在しないため現れていないという事か **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか? // “適当な対称性が存在しないため現れていない” とは、どういう意味か. // 群論は 許容・禁制 を教えてくれるが、許容の時にどの程度の許容なのか (遷移確率の絶対値) は教えてくれない. 遷移モーメント積分の値 (振動子強度の値, etc.) をきちんと計算するしかない.
- 18s2045:** 反転要素を持つ場合、交互禁制になるとあったが逆に交互禁制であることをスペクトルから観測すればそれは反転要素を持つのか **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか? // 逆は必ずしも真ならず、というのが論理学の一般論. // 反転が無くても、たまたま交互禁制の場合があるかも.
- 18s2051:** 教科書の p.548 から、フランク-コンドンの原理についての説明があるが、基底状態と励起状態で $v=0$ の遷移や $v=3$ への遷移がみられます。特に $v=3$ の時は基底状態と励起状態で振動状態が変化しているが、この時の分子の構造はどう変化してますか。この励起した瞬間では変化がないのでしょうか。 **M:** せっかく フランク-コンドン の原理について学習しているのに、それを全く理解していないかのような質問で、残念. // フランク-コンドン 原理によれば垂直遷移になるので、電子遷移において分子の構造は変化しない (電子の運動に比べて核の運動は遅いので、電子遷移の間には止まっているように見える). また振動状態も励起されるのであれば、その振動モードの振幅が増大すると考えられるので、その方向への分子構造の変形が拡大されると考えるのが普通では?