詳説 物理化学 Monograph シリーズ

https://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/

1. 電磁気学における単位系
   0. はじめに
   1. 単位系の種類
   2. 電場と磁場の対応(***E***–***H*** 対応と ***E***–***B*** 対応)
   3. 単位の換算
   4. 異なる単位系での式表現
   付録1. 国際単位系(SI)の再定義の影響
   付録2. MKSA 単位系 ↔ Gauss 単位系変換法(安直(アンチョコ)法)
   文献
   あとがき

2. 「成分」と「基底」の変換の相違点 ー群論と行列力学の基礎を理解するためにー
   0. はじめに
   1. 成分の変換行列と基底の変換行列の表記法
   2. 成分の変換の一般的表現と行列要素
   3. 基底の変換の一般的表現とユニタリー変換
   4. 連続操作に対する変換行列
      4.1 成分と基底への連続操作
      4.2 連続操作による変換の具体例(その1)
      4.3 連続操作による変換の具体例(その2)
   5. 変換行列表記の実情
      5.1 成書における表記
      5.2 成書における混乱
   6. 行列力学の表現
   付録1. 1次独立と1次従属
   付録2. 1次写像(線形写像)のまとめ
   付録3. 関数と座標に対する対称操作
   あとがき

3. 物体の速度と物質波の速度 ー*E* = *hν* の本質の理解ー
   0. はじめに
   1. 疑問の発生(物体の速度と物質波の速度の混乱)
   2. 物体の運動速度と物質波の速度の相違点
   3. 群速度の直観的理解
   4. 光速を超える位相速度と光速を超えない群速度

文献

4. 磁気モーメントと g 値

0. はじめに
1. 電磁気学の単位系と $\boldsymbol{E}$–$\boldsymbol{H}$ 対応と $\boldsymbol{E}$–$\boldsymbol{B}$ 対応
2. 磁気双極子が作る磁場
3. 円電流が作る磁場(磁気モーメント)の導出(その1)
4. 円電流が作る磁気モーメント式の導出(その2)
5. 磁気モーメントと磁場の相互作用
付録1. 2つの磁荷が作る磁位(式(18))の別導出および別表記法
付録2. 円電流が作る磁気モーメント(式(38))(その3)
付録3. 円電流が作る磁気モーメント(式(38))(その4)
付録4. 磁気モーメントの大きさ表記
文献
あとがき

5. 歳差運動の物理学

0. 疑問の発生
1. 歳差運動とは
2. 磁場と磁気モーメントの相互作用
3. 角運動量のカップリング(相互作用)の意味と歳差運動の周波数
3.1 原子
Hund の規則の解釈
3.2 分子(2原子分子)
4. 全角速度ベクトルの分子軸まわりの歳差運動
平行移動座標系
等速度移動座標系
加速度移動座標系
x 軸(最小慣性モーメント(a 軸))まわりの回転
z 軸(最大慣性モーメント(c 軸))まわりの回転
y 軸(中間慣性モーメント(b 軸))まわりの回転
5. 分子軸の全角運動量まわりの歳差運動
ω_x (x 軸方向の角速度)
ω_y (y 軸方向の角速度)
ω_z (z 軸方向の角速度)
6. 具体例(2原子分子)
付録1. 角運動量演算子と Hamiltonian の交換関係
(a) $\boldsymbol{l}_i$, $\boldsymbol{s}_i$ が H_i および H_0 と可換

(b) $\boldsymbol{l}_i$ が H_i と非可換
(c) $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}, \boldsymbol{s}_i$ が H_1と可換
(d) $\boldsymbol{l}_i, \boldsymbol{s}_i, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}$ が H_2と非可換
(e) $\boldsymbol{l}_i^2, \boldsymbol{s}_i^2, \boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2$ が H_2と可換
(f) $\boldsymbol{j}_i, \boldsymbol{J}$ が H_2と可換
付録2.「Euler の運動方程式」別導出法
付録3. 対称こま($I_x = I_y \equiv I \neq I_z$)の回転エネルギー
付録4. 歳差運動の速度の相違(図2)
付録5. ビリアル定理の適用例(化学結合形成)
付録6. Hund の規則の拡張
分類(a) l_1, l_2のいずれかまたは両方が0
分類(b) $(nl)^2$
分類(c) $(nl)^2$ 以外
文献
あとがき

6. Clebsch–Gordan 係数と射影演算子

0. はじめに
1. Step-up operator(上昇演算子)と Step-down operator(下降演算子)
2. Coupled representation と uncoupled representation
3. Clebsch–Gordan 係数
3.1 Clebsch–Gordan 係数の式表現
3.2 Clebsch–Gordan 係数の具体例
4. Step-down operator(下降演算子)による固有関数の決定
4.1 2電子系のスピン関数
4.2 2電子系の軌道関数とスピン関数
5. 射影演算子(projection operator)による固有関数の決定
5.1 射影演算子
5.2 2電子系のスピン関数
5.3 3電子系のスピン関数
5.4 2電子系の軌道関数とスピン関数
5.5 スピン–軌道相互作用
6. 射影演算子の原理
あとがき

7. 化学反応速度理論の徹底的理解 －微視的可逆性から遷移状態理論まで－

0. はじめに
1. 微視的可逆性
2. 微視的可逆性から詳細釣り合いへ
3. ミクロカノニカル速度定数とカノニカル速度定数
4. 統計論的ルートと RRKM 速度定数および遷移状態理論式
5. RRK 速度定数
6. 実験的活性化エネルギーと反応のしきいエネルギー
付録1. 時間反転 Hamiltonian の固有関数
付録2. 並進運動の縮重度(式(18))と Maxwell–Boltzmann 分布の関係
付録3. 微分散乱(衝突)断面積と微分反応断面積
付録4. 3次元並進運動の縮重度(式(18))の別導出法
付録5. 式(145) ~ (148)の第9版以前の記述について
はしがき
文献
あとがき

8. 遷移状態理論の基本仮定 －遷移状態理論導出過程の理解－

0. はじめに
1. 基本仮定の物理的意味
2. 遷移状態理論式の導出
3. 不回帰仮定と遷移状態理論反応速度
4. 成書における解説例
文献
あとがき

9. 熱力学第2法則と状態関数 －自発過程と最大仕事－

0. はじめに
1. 自発過程の方向と平衡条件
2. 最大仕事と Helmholtz エネルギーおよび Gibbs エネルギー
3. 熱力学的状態方程式(thermodynamic equations of state)と Joule の法則
4. 理想気体の状態方程式と Joule の法則
5. 理想気体の熱容量
6. C_p と C_V の差および Mayer の関係式
付録1. 循環恒等式(131)の証明
付録2. 熱力学的状態方程式(91)の別導出法
付録3. 熱力学関数の独立変数(Legendre 変換)
付録4. 断熱自由膨張，Joule–Thomson 膨張

付録4-1. 断熱自由膨張(対真空膨張)
付録4-2. Joule–Thomson 膨張
付録5. オマケ
付録5-1. 熱力学第2法則の理解における注意点
付録5-2. 演習問題を解くためのカギ
付録6. Bridgman Tables
付録7. Helmholtz エネルギーと Gibbs エネルギーの本質
付録8. 可逆過程での系と外界と全体のエントロピー変化
定温可逆膨張(または圧縮)
定圧可逆膨張(または圧縮)
定容可逆昇温(または降温)
断熱可逆膨張(または圧縮)
付録9. 有効仕事の熱力学(典型例：燃料電池)
文献
あとがき

10. 発光分光スペクトルによる振動緩和速度定数決定法
1. 単一振動準位 v = 1励起実験
2. 単一振動準位 v = 2励起実験
あとがき

11. 発光スペクトル強度と励起分子数の関係
1. 回転発光スペクトル強度と励起回転準位分子数
2. 振動発光スペクトル強度と励起振動準位分子数
3. 波数スペクトルから波長スペクトルへの変換
付録1. 波数スペクトル → 波長スペクトル
付録2. v''-progression(v''-プログレッション)強度と $N_{v'}$ の関係
付録3. 回転，振動，電子遷移の遷移双極子モーメント
回転遷移($\psi'_e = \psi''_e$, $\psi'_v = \psi''_v$)
振動遷移($\psi'_e = \psi''_e$, $\psi'_v \neq \psi''_v$)
電子遷移($\psi'_e \neq \psi''_e$, $\psi'_v \neq \psi''_v$)
付録4. 対称こま分子の振動回転遷移および振電回転遷移
付録5. 2原子分子の Hönl–London 因子および sum rule
付録5-1. Hönl–London 因子の計算
付録5-2. Hönl–London 因子の sum rule
付録5-3. 遷移双極子モーメントの誤った定式化の例
文献

12. Coulomb 相互作用による2電荷の運動

付録. 式(6)から式(13), (24)を導く別法

13. Pauli 原理と Slater 行列式

1. はじめに
2. σ^2 電子配置の Slater 行列式
3. σσ電子配置の Slater 行列式
4. 射影演算子の利用
5. 縮重軌道(π, δ, ϕ, ⋯)への電子配置と Slater 行列式
   5.1 π^2 電子配置
   5.2 π^3 電子配置
   5.3 $\pi^2\sigma$ 電子配置(スピン関数結合法)
      $^2\Delta$
      $^4\Sigma$
      $^2\Sigma_1$
      $^2\Sigma_2$
   5.4 Hamiltonian の固有関数
   5.5 軌道関数の表記順の問題(疑問 Q2への回答)
   5.6 $\pi^2\pi$ 電子配置

付録1. 対角和則の証明

付録2. 相似変換後も行列の固有値が変わらないことの証明

文献

あとがき

14. 衝突頻度と平均自由行程

0. はじめに
1. 平均自由行程の定義
2. 注目した分子1個だけが速さ v で運動するモデル
3. すべての分子が同じ速さ v で運動するモデル
4. すべての分子が Maxwell–Boltzmann 分布している場合(1)
5. すべての分子が Maxwell–Boltzmann 分布している場合(2)

付録. 式(103)の導出(別法)

文献

15. 有効 Lennard–Jones ポテンシャルの極値問題

付録. $r_m = 5^{1/6}$ の別決定法

16. Jahn–Teller 効果と Renner–Teller 効果の統一理解

1. はじめに
2. ハミルトニアンの基準座標展開
3. Jahn–Teller 効果
4. Renner–Teller 効果
5. 擬 Jahn–Teller 効果
付録1. Herzberg–Teller 展開
付録2. 分子が属する点群の対称操作と Hamiltonian の交換関係
文献
あとがき

17. 化学ポテンシャルと平衡定数

0. はじめに
1. 反応系の物理量の変化
2. 部分モル体積
3. 反応進行にともなう体積変化
4. 反応進行にともなう Gibbs エネルギー変化
5. 化学ポテンシャルと混合エントロピー
6. 標準反応 Gibbs エネルギーと平衡定数(理想気体)
7. 異なる標準状態での化学ポテンシャルと平衡定数(理想気体)
8. 化学ポテンシャルと熱力学関数の関係(理想気体)
部分モル体積 $\bar{V}_i(T,p)$
部分モルエントロピー $\bar{S}_i(T,p)$
部分モルエンタルピー $\bar{H}_i(T,p)$
部分モル内部エネルギー $\bar{U}_i(T,p)$
9. $\Delta_r G(T,p)$ および平衡定数の全圧依存性(理想気体)
10. $\Delta_r G(T,p)$ および平衡定数の温度依存性(理想気体)
11. 実在気体(非理想気体)の化学ポテンシャルと平衡定数
12. 凝縮相の化学ポテンシャルと相平衡
13. 溶液中の物質の化学ポテンシャル
14. 溶媒と溶質の化学ポテンシャル
15. 溶液での化学平衡と平衡定数
16. 溶液での平衡定数の圧力および温度依存性
付録1. $\Delta_r G^\circ$ と ξ_e の関係
付録2. 非対称規準系と対称規準系
付録3. 誤った式変形の例
付録4. 化学ポテンシャル式 (chemical potential equation)
付録5. Helmholtz エネルギーと平衡定数

付録6. エントロピーの体積依存性と圧力依存性および標準物理量間の関係
付録7. 反応エントロピーと反応商
付録8. 溶媒の化学ポテンシャルを表す濃度変数がモル分率のみである理由
付録8-1. 反応性溶媒
■ モル分率表記
■ モル濃度表記
● 溶媒：モル濃度 (×)
● 溶質：モル濃度 (○)
■ 質量モル濃度表記
● 溶媒(反応性)：質量モル濃度 (×)
● 溶質(反応性)：質量モル濃度 (○)
▶ 溶媒(反応性)：モル濃度 (×), 溶質：モル濃度 (○)
▶ 溶媒(反応性)：モル分率 (○), 溶質：モル濃度 (○)
▶ 溶媒(反応性)：モル分率 (○), 溶質：モル分率 (○)
▷ 具体例1：水の電離 (溶媒：モル分率，溶質：モル濃度)
▶ 気相反応
付録8-2. 非反応性溶媒
▶ 溶媒(非反応性)：無視 (×), 溶質：モル濃度 (○)
▶ 溶媒(非反応性)：モル分率 (○), 溶質：モル濃度 (○)
▶ 溶媒(非反応性)：モル分率 (○), 溶質：モル分率 (○)
▷ 具体例2：電池反応 (溶媒：モル分率，溶質：モル濃度)
付録9. 水素イオン規約と標準モルエントロピー
文献
あとがき

18. 統計熱力学における古典統計と量子統計の関係
0. はじめに
1. 巨視状態と微視状態
2. 小正準集団と正準集団
3. N 分子系エネルギーと正準集団分配関数
4. 分子分配関数 $q(V,T)$ と正準集団分配関数 $Q(N,V,T)$
5. 量子統計と古典統計
5.1 正準集団による取扱い
補正 MB 統計
BE 統計
FD 統計
5.2 大正準集団による取扱い
古典理想気体

補正 MB 統計
理想量子気体
BE 統計
FD 統計
付録1. 微視状態数 W を最大にする準位占有数 n_i の組 $\{n_i\}$ の計算(Boltzmann 分布式(22)の導出)
付録2. 熱力学関数の正準集団分配関数と分子分配関数による表現
付録2-1. 熱力学関数の正準集団分配関数による表現
付録2-2. 熱力学関数の分子分配関数による表現
付録3. 熱的 de Broglie 波長(式(68))の導出
付録4. 平衡定数と分子分配関数の関係(気体)
付録5. $\mu_i = -kT\ln(q_i/N_i)$ (式(372))の導出について
付録6. 平衡定数と Helmholtz エネルギーの関係
付録7. 微視的状態総数 Ω と最確配置の熱力学縮重度 W_{m} の関係
付録8. 小正準集団，正準集団，大正準集団の束縛条件と分配関数
付録8-1. 正準集団
付録8-2. 大正準集団
付録8-3. 小正準集団
付録9. Stirling の公式
雑感 (1分子系 N 個と N 分子系1つの相違)
文献
あとがき

19. 対称性低下法による電子状態の term 決定法
0. 疑問の発生
1. 対称性低下法
1.1 例1：電子配置 $(t_{2g})^2$
1.2 例2：電子配置 $(t_{2g})^5(e_g)^2$
2. 電子配置 π^2 および δ^2
3. Q & A
付録1. 既約表現相関表
付録2. 対称性“上昇法”による電子状態の term 決定法(番外編)

20. Wigner–Witmer 相関則の導出
0. 疑問の発生
1. 疑問の歴史
2. 同じ電子状態の等核2原子からなる2原子分子
2.1 準電子による記述

2.2 全波動関数 $\Psi(1,2)$ の準電子交換対称性
2.3 スピン関数 χ_{spin} の準電子交換対称性
2.4 軌道関数 φ_{orb} の準電子交換対称性と原子軌道交換対称性
2.5 分子の軌道関数 φ_{orb} の g, u 対称性
3. 同じ電子状態の等核2原子からなる分子の term 決定の具体例
3.1 ^{3}S + ^{3}S 系
3.2 ^{4}S + ^{4}S 系
3.3 ^{1}P + ^{1}P 系
付録1. 2原子分子 term 一覧表
付録2. 全スピン関数の準電子交換に対する対称性
付録3. 球面調和関数の反転操作による変化(式(56))
付録4. Pechukas と Zare による Wigner–Witmer 相関則の導出(文献5)
付録4-1. 同じ電子状態の等核2原子から生成する分子の term 決定法
付録4-2. 具体例(^{2}P + ^{2}P 系)
付録4-3. 具体例(^{3}D + ^{3}D 系)
付録4-4. 式(143)の証明
付録5. 2原子分子の電子状態(term)決定法 (主に分類(i), (ii)について)
I. 原子結合
II. 融合原子
III. 分子軌道
文献
あとがき

21. 球対称点群(K_h)の直積と対称積・反対称積

0. はじめに
1. 対称積と反対称積
1.1 2次元既約表現の直積および対称積と反対称積
1.2 3次元既約表現の直積および対称積と反対称積
1.3 対称積と反対称積の既約表現の数
2. K_h 点群の直積および対称積，反対称積
2.1 K_h 点群の2次元既約表現の直積
2.2 K_h 点群の3次元既約表現の直積
2.3 K_h 点群の4次元既約表現の直積
2.4 K_h 点群の直積の一般式
3. K_h 点群の対称積，反対称積の具体系への応用
3.1 p^2 電子配置の term 決定
3.2 p^2 電子配置の *L*–*S* coupling と *jj*-coupling
3.3 d^2 電子配置の term 決定

3.4 f^2 電子配置の term 決定

22. 核交換操作と核スピン統計
0. はじめに
1. 同種粒子の交換
2. Atkins および Herzberg の解説(等核2原子分子)
2.1 Atkins の解説(文献1)
2.2 Herzberg の解説(文献2)
3. 対称心をもたない線形分子
4. 同種核が2対以上ある線形分子
5. 置換の利用
6. 非線形分子(対称こま分子)
7. 非線形分子(非対称こま分子)
8. 線形分子の復習
9. 置換反転群による取扱い
10. 非平面分子 XA_3 型(C_{3v} 点群)分子：反転なし
11. 非平面分子 XA_3 型(C_{3v} 点群)分子：反転あり
11.1 D_{3h} (MS)の指標表と全核スピン関数 ψ_s^N の可約表現
11.2 既約表現の相関表と逆相関表
11.3 Nonrigid 非平面 XA_3 型分子の回転準位の統計的重率
12. 線形分子の置換反転群による取扱い
13. 双極子遷移での選択則
付録1. 2原子分子の回転波動関数の180°回転操作による変化
付録2. 対称スピン関数と反対称スピン関数の個数の決定法
付録3. 2つの群の既約表現の相関
付録4. 選択則 $\Delta J = 0, \pm 1$ の導出
付録5. 等核2原子分子の座標と $D_{\infty h}$ (MS)の操作による座標の変化
付録6. 置換反転群(MS)の操作と点群(MP)の操作の関係
付録7. 非対称こま分子の置換反転群(MS)による取扱い
文献
あとがき
雑感 –1963年のパラダイムシフト–

23. Born–Oppenheimer 近似と断熱近似
0. はじめに
1. 分子の Hamiltonian
2. 原子核の運動の凍結
3. 系の波動関数の電子波動関数による展開

4. 断熱近似(adiabatic approximation)
4.1 Born−Huang 断熱近似(断熱近似)
4.2 Born−Oppenheimer 断熱近似
4.3 粗い断熱近似(Crude adiabatic approximation)
5. 用語の変遷と推奨される名称
付録1. 空間固定座標運動エネルギー演算子の重心運動エネルギー演算子と相対運動エネルギー演算子への分離(Jacobi 座標)
付録2. 式(35)の対角行列要素($n = m$)が0になることの証明
付録3. 式(35)の非対角行列要素($n \neq m$)の別表記
付録4. 式(36)の対角行列要素($n = m$)の別表記
付録5. 式(36)の非対角行列要素($n \neq m$)の別表記
付録6. 質量加重座標(質量加重 Jacobi 座標)
付録7. 正準交換関係と Poisson 括弧
文献

24. 量子論におけるブラ・ケット表記
0. 疑問の発生
1. ブラとケットの意味
2. 基底ベクトルのブラ・ケット表記
3. 単位演算子と射影演算子
4. 状態ベクトルと波動関数の関係
4.1 波動関数の本質
4.2 波動関数および演算子の x-表示と p-表示
5. 演算子とブラ・ケット表記の関係
5.1 演算子の行列表示と行列要素
5.2 演算子の本質
文献

25. 相律における成分の数
0. 疑問の発生
1. 相律の導出
2. “制約”の考慮
3. 構成成分の数と成分の数
4. 相律と平衡定数の関係
5. 構成成分の定義
6. 具体例
例1 ~ 6
文献

あとがき

26. Einstein の A 係数と B 係数
0. 疑問の発生
1. 光のエネルギー密度(分光放射エネルギー密度)
2. Einstein の A 係数
3. Einstein の B 係数
4. Einstein の A 係数と B 係数の関係
5. Einstein 係数と光吸収断面積の関係
6. データベースで用いられているスペクトル線強度と光吸収断面積の関係
付録1. CGS esu 単位系の式から MKSA 単位系の式への変換
付録2. スペクトル波形の矩形への書き換え
付録3. 振動子強度
文献

27. 連続固有値関数の規格化と Fourier 変換
0. 疑問の発生
1. 離散固有値関数の規格化
2. 連続固有値関数の規格化
3. 運動量固有関数の規格化
4. 運動量固有関数(基底関数)による展開
5. 運動量固有関数の広がり

28. 振動準位の既約表現決定法
0. 疑問の発生
1. 振動の固有関数およびエネルギー固有値
2. 無縮重基準振動の基音の既約表現(対称性)
3. 無縮重基準振動の倍音の既約表現
4. 縮重基準振動の基音の既約表現
5. 縮重基準振動の倍音の既約表現
6. 振動角運動量の導入
7. 振動角運動量ごとの既約表現
付録1. n 重縮重振動の準位 v の縮重度
付録2. 縮重振動の倍音の既約表現
付録3. 振動角運動量の導入(極座標表示した Schrödinger 方程式の解)
付録4. 基底関数と固有関数の変換行列(表現行列)の指標が等しいことの証明
文献
あとがき

29. 占有数表示(Fock 表示)の演習問題 ー第2量子化の基礎を理解するためにー

0. はじめに
1. テキストの式(6.43)について
2. Fock 行列要素(テキストの式(6.109b))および式(6.110))の導出
3. 水素分子(H_2)の Fock 行列要素(テキストの式(6.117))および1電子軌道エネルギー(式(6.118))の導出
4. 基底状態の全電子エネルギー(テキストの式(6.119))の導出
   4.1 MO 基底系での計算
   4.2 AO 基底系での計算
5. 1電子励起状態(1重項と3重項)および2電子励起状態のエネルギー
6. まとめ
7. 振動角運動量ごとの既約表現
付録1. 生成演算子，消滅演算子の一般的性質
付録2. 電子演算子の計算における注意点(テキスト章末問題6・1(a), (b))
付録3. テキストの式(6.75)の物理的意味
付録4. 2電子積分(行列要素)の表記法について
付録5. Wick の定理の利用
   ▶ Normal-ordered form
   ▶ Contraction の導入と演算
   ▶ Wick の定理
   ▶ Wick の定理を利用する真空期待値の計算
   ▶ Wick の定理の(厳密ではない)証明 –3つの演算子の積–
   ▶ Wick の定理の(厳密な)証明
      ○ 補助定理1(式(449))の証明
      ○ 補助定理2(式(450))の証明
      ○ Wick の定理の証明
   ▶ 一般化 Wick の定理
付録6. Particle-hole formalism の導入と Fermi 真空
   ▶ Particle-hole formalism での normal-ordered form
   ▶ Particle-hole formalism での contraction
   ▶ Particle-hole formalism による Hamiltonian の表記
   ▶ Brillouin の定理
   ▶ 基底状態と2粒子励起状態の相互作用
   ▶ 基底状態相関の摂動論
   ▶ Normal-ordered form と非 normal-ordered form による摂動論の相違点
付録7. Slater–Condon 則(Slater–Condon rules)
付録8. 占有数表示による電子 Hamiltonian の導出

文献
あとがき

30. 統計理論による prior 分布の導出
0. はじめに
1. Prior 分布式導出の原理
2. 分子 X の内部エネルギーの状態密度 $\rho(E_{\mathrm{V}}, E_{\mathrm{R}})$
3. 生成分子 AB の振動回転エネルギーprior 分布 $\rho°(f_v, g_{\mathrm{R}})$
4. 生成分子 AB の振動エネルギーの prior 分布 $\rho°(f_v)$
5. 生成分子の相対並進エネルギーprior 分布 $\rho°(f_{\mathrm{T}})$
6. X = 原子の場合の生成分子 AB の各種 prior 分布
7. 生成物が3分子以上の場合の prior 分布
▶ AB + X + Y の AB の振動回転エネルギーprior 分布($\rho°(f_v, g_{\mathrm{R}})$)
▶ AB + X + Y の AB の振動エネルギーprior 分布($\rho°(f_v)$)
▶ AB + *n*X の AB の振動エネルギーprior 分布($\rho°(f_v)$)
8. Prior 分布導出式の構造
付録1. 並進，回転，振動エネルギーの状態密度
付録2. Prior 分布と Boltzmann 分布の関係
付録3. 運動量と角運動量の保存を考慮する統計理論による生成分子のエネルギー分布
付録3-1. 運動量と角運動量の保存による運動自由度の減少
付録3-2. Phase space theory (PST)
文献
あとがき

31. 原子軌道・分子軌道・混成軌道の関係 －軌道とは何か－
0. はじめに
1. 軌道の実数化による可視化
2. 縮重軌道群の unitary 変換
3. 非縮重軌道群の unitary 変換と混成軌道に関する混乱点
4. CH_4の分子軌道(MO)の構築
▶ H 原子(1s 軌道)の対称軌道の既約表現
▶ 4つの H 原子(1s 軌道)の対称軌道
▶ H 原子の対称軌道と C 原子の軌道の既約表現ごとの組み合わせ(分子軌道形成)
5. CH_4の混成軌道(HB)の構築
6. 原子軌道・分子軌道・混成軌道が表す系の状態
▶ 分子軌道と原子軌道が表す系の波動関数と物理量
▶ 混成軌道と原子軌道が表す系の波動関数と物理量
▶ 原子軌道・分子軌道・混成軌道の関係

7. まとめ
付録1. 軌道の形は観測できる？できない？
付録2. sp^2混成軌道(中心原子)の構築
付録3. 混成軌道理論による2つのイオン化エネルギーの説明
付録4. 図2(式(107))とは異なる分子軌道の構築
付録5. 正規直交基底(関数)間の変換が unitary 変換であることの証明
文献
あとがき

32. **線形分子と非線形分子の回転準位の統一的理解**

0. 疑問の発生
1. 線形分子と非線形分子の figure axis 方向の角運動量
2. 線形分子の回転準位への量子数 K_a, K_c の割り当て
3. 線形分子と非線形分子の回転準位の parity
4. 線形分子と非線形分子の回転準位構造の対応
5. Bent–linear 遷移の振電回転スペクトル構造
6. Linear–bent 遷移の振電回転遷移と branch
付録1. 分子が属する点群(full symmetry)の既約表現による回転準位の分類(文献8)
付録2. 線形分子と非線形分子の振動モード
文献
あとがき

2025年10月4日