

(a) エネルギー準位図 (b) 分子軌道の輪郭図

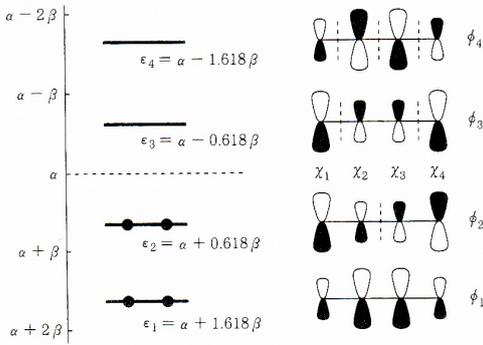


図 2.1 β-カロテンの分子軌道のエネルギー準位図と分子軌道関数の形 (節を破線で示す)

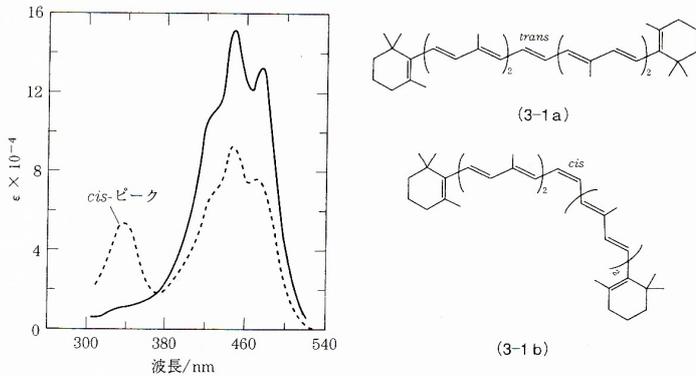


図 3.4 全 *trans*-β-カロテンとその 15,15'-*cis* 異性体の吸収スペクトル

廣田穰 分子軌道法

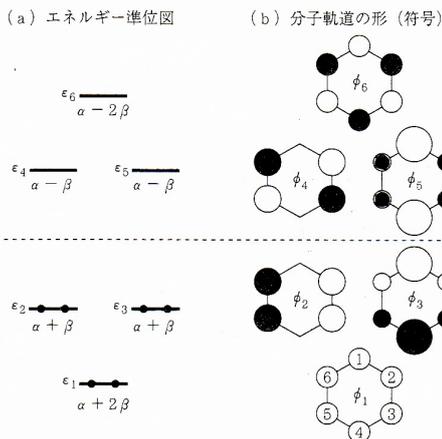


図 2.2 ベンゼンのエネルギー準位図と分子軌道の形

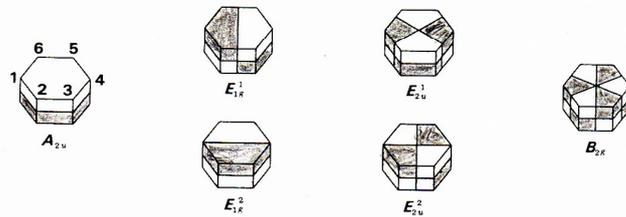


図 8.5 ベンゼン (D_{6h} 点群) の分子軌道の図式化

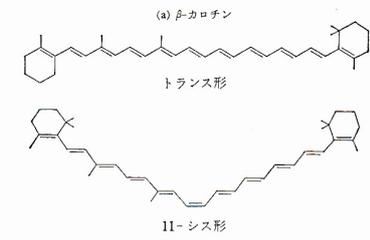


表 8-3 ポリエチレンほかの吸収スペクトルの波長と振動子強度(最低遷移の吸収)

	実測値 λ_{max} ($m\mu$)	実験値と一致する L の値 ^{a,b)} (Å)	振動子強度 (f)	
			計算値	実測値
エチレン	162.5	3.8(1.33)	0.40	0.34
ブタジエン	210.0	5.6(3.7)	0.67	0.53
ヘキサトリエン	250.0	7.3(6.1)	0.94	0.62
オクタテトラエン	290.0	8.9(8.6)	1.21	1.55
ビタミン A	325.0	10.4(11.1)	1.47	1.05

a) かつこの中の値は末端 C-C 間の距離を結合距離の測定値から求めたもの。
b) 実験値と一致する L の値を式(8.69)から逆算したものの。

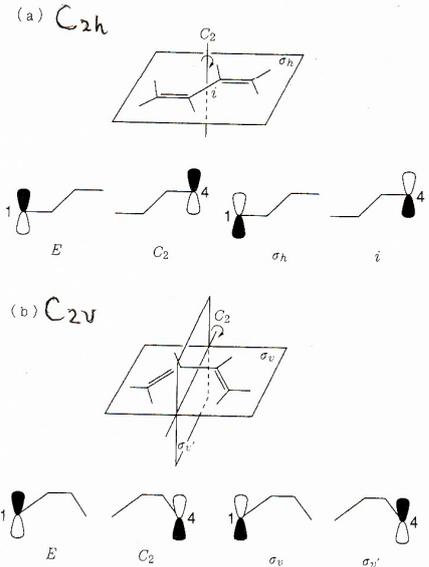


図 3.6 β-カロテンの (a) *s-trans* 配座および (b) *s-cis* 配座を持つ対称要素。下図は対称操作の後、C(1) にあった上向き p 軌道がどこに移るかを示す (他の軌道のローブは省略してある)

表 3.5 C_{2h} 指標表

	E	$C_2(z)$	σ_h	i
A_g	1	1	1	1
$z A_u$	1	1	-1	-1
B_g	1	-1	-1	1
$x, y B_u$	1	-1	1	-1

例えば *s-trans*-β-カロテンの励起状態 $\Psi_{2,3}$ は、電子配置が $\phi_1^2 \phi_2 \phi_3$ であるので以下の表のようになる。

分子軌道	対称性	E	$C_2(z)$	σ_h	i
ϕ_1	A_u	1	1	-1	-1
ϕ_1	A_u	1	1	-1	-1
ϕ_2	B_g	1	-1	-1	1
ϕ_3	A_u	1	1	-1	-1
$\Psi_{2,3}$		1	-1	1	-1

この指標に対応する B_u 対称性を持つ

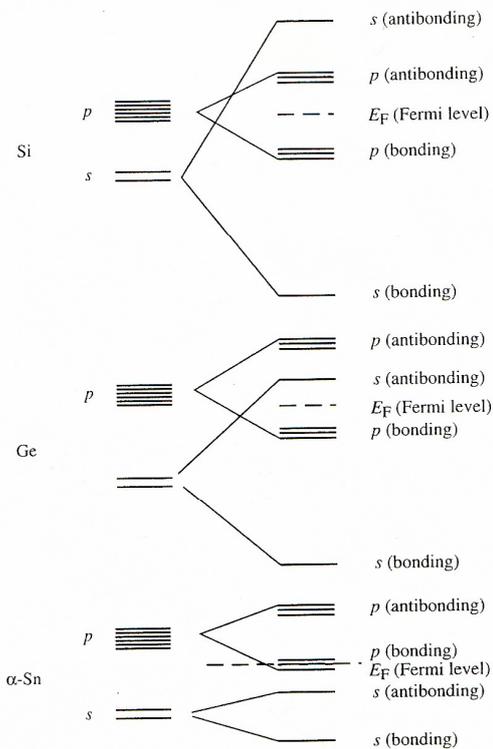


Fig. 2.26. Evolution of *s* and *p* atomic orbitals into the conduction and valence bands at zone center within the tight-binding approximation for Si, Ge, and α -Sn

Yu & Cardona, Fundamentals of Semiconductors

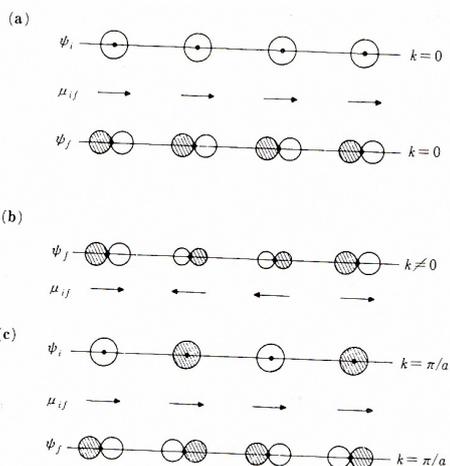


図 4.15 バンド間の分光的遷移。(a) *s* バンドと *p* バンドの $k=0$ 状態間の遷移。遷移双極子 μ が同一位相にあることを示している。(b) *s* バンドの $k=0$ 状態から *p* バンドの $k \neq 0$ 状態への遷移：遷移双極子はこの場合位相がずれている。(c) ゼロ以外の同じ k の値の 2 つの状態間の遷移。遷移双極子は再び同一位相となる。

P.A.Cox 固体の電子構造と化学

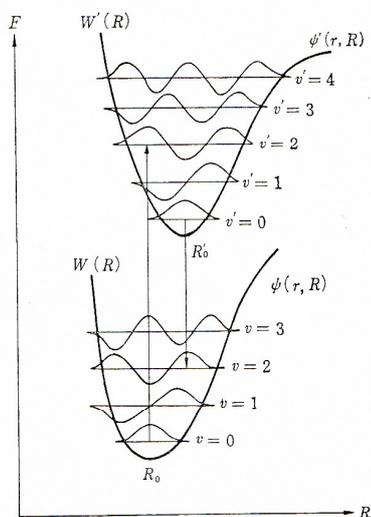


図 5.1 フランク-コンドンの原理
矢印は最も確率の高い振動遷移。

右衛門佐重雄 光生物学のための量子物理学序説

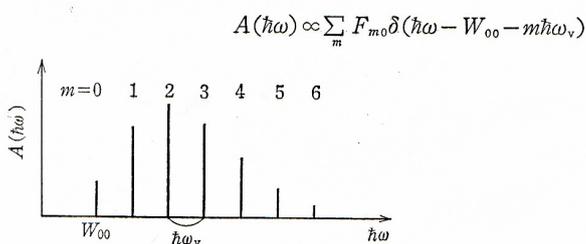


図 4.8 0 K における吸収スペクトルの形状 ($S=2.5$)

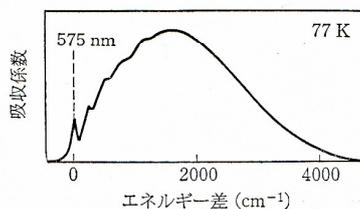


図 4.9 ルビーの ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_2$ 遷移による吸収スペクトル⁴⁾

U バンド

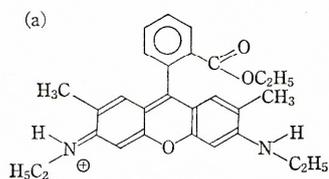
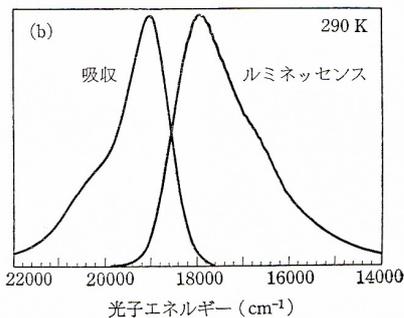


図 5.23 ローダミン 6 G の分子構造 (a) とその水溶液の吸収およびルミネッセンススペクトル (b)⁵⁾



楢田孝司 光物性物理学