

回転エネルギーおよび並進運動エネルギー

キーポイント：回転運動の量子化；回転運動では重心の位置は一定；換算質量；並進運動とは分子を剛体とみなした運動

[回転エネルギー]

自由な（束縛されていない）分子は回転しています¹⁾。分子の回転運動では、分子の重心が移動しません。回転の状態も量子化されています。

2 原子分子ならその重心の廻りに回転します。この運動を量子力学的に扱う場合、**換算質量 (reduced mass)** という量を定義して、回転運動に関する Schrödinger 方程式を解きます。2 原子分子 P-Q の原子核の質量を m_p , m_q とします。換算質量 (μ) は 1 式で定義されます。

$$\mu = \frac{1}{\frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_q}} = \frac{m_p m_q}{m_p + m_q} \quad 1$$

P-Q 間の平均距離を r_0 としますと、回転のエネルギーは 2 式のように量子化された結果が得られます。

$$E^{rot} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad 2$$

\hbar は、プランクの定数 (h) を 2π で割った定数です。

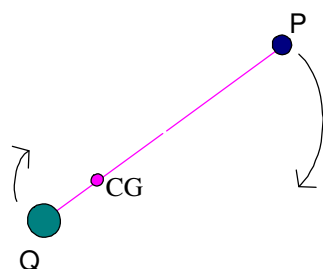


図 1. 回転運動では分子の重心 (CG) は動かない。

3 原子以上の分子ではもっと複雑な回転運動があらわれますが、あまり深入りはやめましょう。回転エネルギーの準位間のエネルギー差はマイクロウェーブのエネルギーに相当し、吸収・放射されるスペクトルから、正確な結合距離の決定や星間物質の探索に利用されています。

[並進運動エネルギー]

並進運動 (translational motion) とは分子の構成するすべての原子が一緒に同じ方向に移動する運動のことです。おおざっぱに言えば、分子の剛体としての運動で、運動の中心は分子の重心です。

並進運動エネルギーも、原理的には量子化されていて、狭い空間に閉じ込められた場合は量子化現象が顕著になります。量子化のエネルギー準位の差は、粒子（この場合、分子）を閉じ込める空間が大きくなると小さくなります (1230 を参照)。通常の容器には入った分子は、分子の大きさに比べて空間の広さは無限大とみなせますので、エネルギー準位差は無限小、すなわちエネルギー変化は連続的となります。

分子の並進運動エネルギーは、通常は古典力学的に扱われています。

1) たとえば、気体状態の分子は、個々の分子は孤立していると考えられる。