光科学１
第9回

東京理科大学先進工学部 マテリアル創成工学科
曽我 公平

1

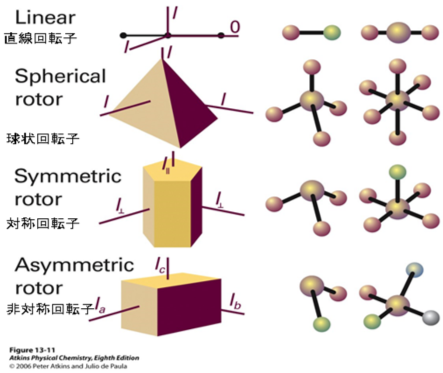
第8回のまとめ

- 分子の回転において、慣性モーメント$I = mr^2$は回転運動の重さを表す量である。
- 回転の運動エネルギーは慣性モーメントIと角運動量Jを用いて$\frac{J^2}{2I}$と表せる。
- 慣性モーメントの定義$I = \sum_{i=1}^{N} m_i {r_i}^2$
- 2原子分子の慣性モーメントは$m_{\mathrm{eff}} R^2$

2

分子の回転を記述する

- 剛体：分子の中はひずまないとする
- 回転の記述
  1. 重心運動と回転運動を分離
  2. 慣性モーメント
  3. 回転運動のエネルギー
  4. スペクトル



3

重心運動と回転運動の分離

- N原子分子
- 重心G

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{G}} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N} m_i \boldsymbol{r}_i\,, \qquad M = \sum_{i=1}^{N} m_i$$

- 運動エネルギー
  ＝重心G運動のエネルギー＋回転R運動エネルギー

$$K = K_{\mathrm{G}} + K_{\mathrm{R}}$$

$$K_{\mathrm{G}} = \frac{1}{2} M \left(\frac{d\boldsymbol{R}_{\mathrm{G}}}{dt}\right)^2$$

$$K_{\mathrm{R}} = ???$$

4

慣性系 Inertial System

ニュートンの運動方程式

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = \boldsymbol{F}$$

時間tで積分する

$$m\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = m\boldsymbol{v} = \int \boldsymbol{F}\ dt + \boldsymbol{C}$$

運動量保存則

位置$\boldsymbol{x}$で積分する

$$\int m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2}d\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}m\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right) = \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 = \int \boldsymbol{F}\,d\boldsymbol{x}$$

エネルギー保存則

5

円運動 circular motion

$r_\perp$方向の速さ

$$v_\perp = r\frac{d\theta}{dt} = r\omega$$

$r_\parallel$方向の速さ

$$v_\parallel = 0$$

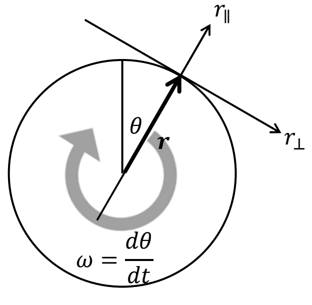
$$\boldsymbol{v}^2 = {v_\perp}^2 + {v_\parallel}^2 = (r\omega)^2$$

運動エネルギー

$$\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}m(r\omega)^2$$

角運動量

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$$



6

慣性モーメント Moment of Inertia

- 回転の運動エネルギー

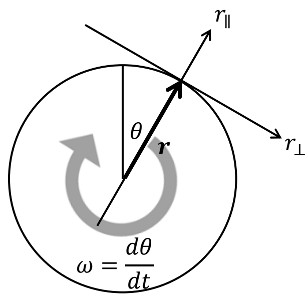
$$\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}m(r\omega)^2 = \frac{1}{2}mr^2\omega^2$$

時間を含まない　時間を含む

- 慣性モーメント

$$I = mr^2$$

- **回転軸ごとに決まる！**←重要



7

ニュートンの運動方程式

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}$$

角運動量$\boldsymbol{J}$

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$$

$$J = mrv = mrr\omega = mr^2\omega \equiv I\omega$$

慣性モーメント$I = mr^2$

両辺を時間で微分

$$\frac{d\boldsymbol{J}}{dt} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{dt}\times\boldsymbol{p} + \boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{p} + \boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}$$

$$= \underbrace{\boldsymbol{v}\times m\boldsymbol{v}}_{\text{ゼロ}} + \boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F} \equiv \boldsymbol{T}$$

回転の運動方程式

$$\frac{d\boldsymbol{J}}{dt} = \boldsymbol{T}$$

運動エネルギー

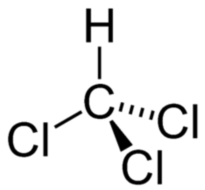
$$\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}m(r\omega)^2 = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 = \frac{1}{2}I\omega^2$$

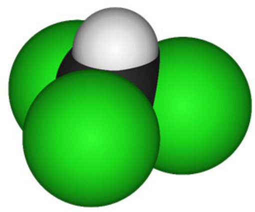
8

第8回の課題 【課題１】

【課題１】
$^{12}C^{1}H^{35}Cl_3$分子の慣性モーメントを求めなさい。ただし、$\angle \mathrm{HCCl} = 107^{\mathrm{o}}$、C − Cl結合距離は$R_{\mathrm{C-Cl}} = 177\ \mathrm{pm}$とする。また、回転軸はＨ − Ｃ結合方向とする。

【解】





chloroform

trichloromethane

9

第8回の課題 【課題１】

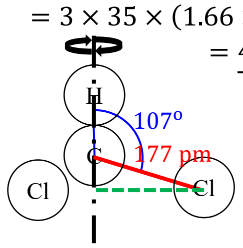
$\angle \mathrm{HCCl} = 107^{\mathrm{o}}$、$R_{\mathrm{C-Cl}} = 177\ \mathrm{pm}$

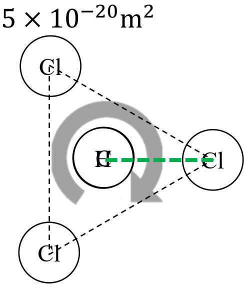
回転軸とC − Clのなす角は180° − 107°=73 °なので、回転軸とCl原子の距離

$$r_{\mathrm{Cl}} = R_{\mathrm{C-Cl}}\sin(73^{\mathrm{o}}) = 0.956_3 R_{\mathrm{C-Cl}}$$

したがって、慣性モーメントは

$$I = 3mr_{\mathrm{Cl}}^2 = 3 \times 35u \times (0.956_3 R_{\mathrm{C-Cl}})^2$$
$$= 3 \times 35 \times (1.66 \times 10^{-27}\mathrm{kg}) \times (0.956_3 \times 1.77 \times 10^{-10}\mathrm{m})^2$$
$$= 3 \times 35 \times (1.66 \times 10^{-27}\mathrm{kg}) \times 2.865 \times 10^{-20}\mathrm{m}^2$$
$$= \underline{4.99_4 10^{-45}\mathrm{kgm}^2}$$





10

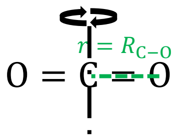
第8回の課題 【課題２ 】

【課題２】

CO_2のC=O結合距離を116.0pmとする。酸素の質量数を16としてCを中心とした回転の慣性モーメントを求めなさい。ただし、回転軸は$\mathrm{O=C=O}$の結合方向に垂直とする。また、原子質量単位は $u = 1.661 \times 10^{-27}\mathrm{kg}$とする。

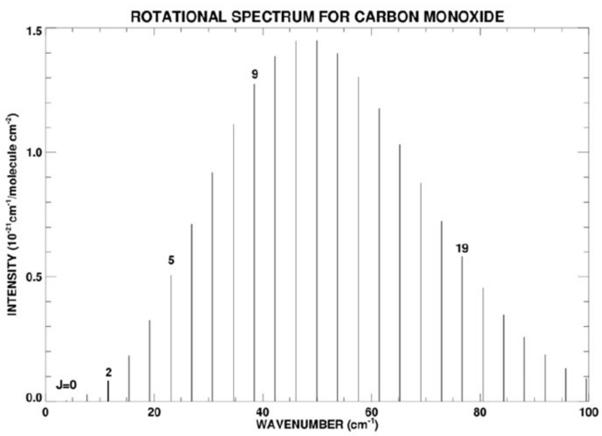
【解】

$$I = 2m_{\mathrm{O}}R^2 = 2 \times 16u \times (0.116 \times 10^{-9}\mathrm{m})^2$$
$$= 2 \times 16 \times 1.661 \times 10^{-27}\mathrm{kg} \times (0.116 \times 10^{-9}\mathrm{m})^2$$
$$= 7.152 \times 10^{-46}\ \mathrm{kgm^2} \approx 7.2 \times 10^{-46}\ \mathrm{kgm^2}$$



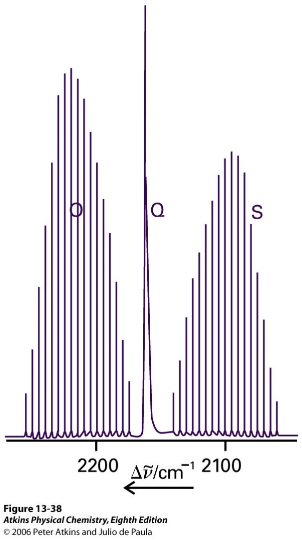
11

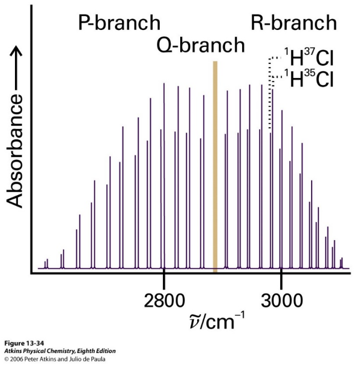
19. The microwave spectrum of $^{12}C^{16}O$ is shown below:



https://www.chegg.com/homework-help/questions-and-answers/19-microwave-spectrum-co-shown-rotational-spectrum-carbon-monoxide-intensity-102cm-molecul-q50255782

12





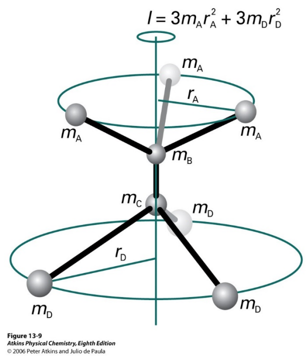
CO分子の回転ラマンスペクトル　　HCl分子の回転振動(赤外)スペクトル

13

慣性モーメント

慣性モーメント I ：N原子分子で

$$I = \sum_{i=1}^{N} m_i r_i{}^2$$



14

慣性モーメントI、角運動量Jと運動のエネルギーE

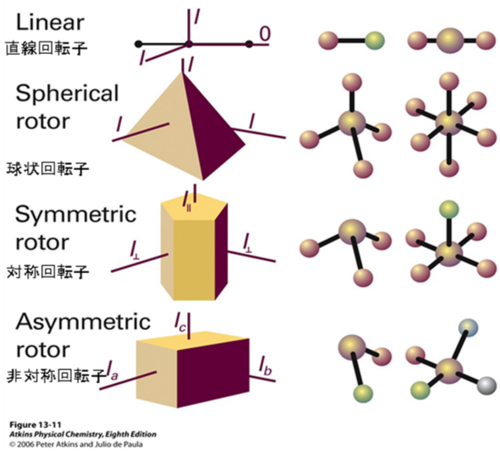
★慣性モーメントと角運動量が決まる：I, J

→運動エネルギーが決まる：$E = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{J^2}{2I}$

→共鳴吸収の振動数が決まる: $E = h\nu$

15

剛性回転子



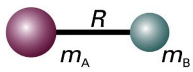
16

1．二原子分子

２原子分子の慣性モーメント

重心周りの回転

$$r_A = \frac{m_B}{m_A + m_B} R$$
$$r_B = \frac{m_A}{m_A + m_B} R$$

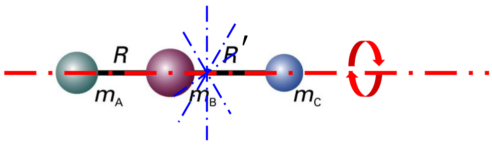


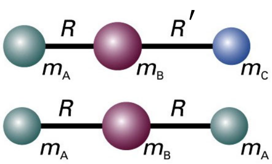
$$I = \sum_{i=1}^{N} m_i {r_i}^2 = m_A \left(\frac{m_B}{m_A + m_B}\right)^2 R^2 + m_B \left(\frac{m_A}{m_A + m_B}\right)^2 R^2$$
$$= \frac{m_A m_B (m_A + m_B)}{(m_A + m_B)^2} R^2 = \frac{m_A m_B}{(m_A + m_B)} R^2 = \underline{m_{\mathrm{eff}} R^2}$$

17

2．直線状分子（直線回転子）

- 分子軸まわりの慣性モーメントはゼロ
- 分子軸に垂直な軸はすべて等価
- 慣性モーメントは一種類





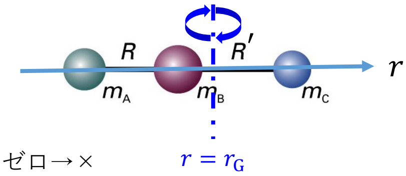
$$I = m_A R^2 + m_C R'^2 - \frac{(m_A R - m_C R')^2}{m}$$

$$I = 2 m_A R^2$$

$$m = m_A + m_B + m_C$$

18

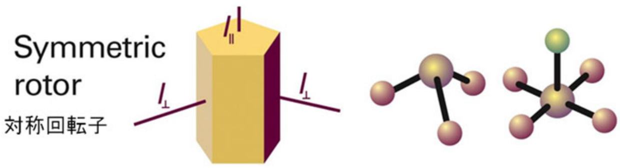
直線状分子の慣性モーメントを求める

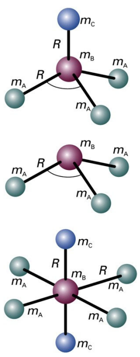


- 今日の課題１
- ヒント
  - 結合軸上の原子の慣性モーメントはゼロ→×
  - 結合軸上に座標をとる。
    その時どうすれば式が簡単になるか？
    $m_{\mathrm{B}}: r = 0$がおすすめ
  - 重心$r = r_{\mathrm{G}}$まわりの慣性モーメントを求める。

19

３．対称回転子





$$I_{\parallel} = 2m_{\mathrm{A}}(1-\cos\theta)R^2$$
$$I_{\perp} = m_{\mathrm{A}}(1-\cos\theta)R^2 + \frac{m_{\mathrm{A}}}{m}(m_{\mathrm{B}}+m_{\mathrm{C}})(1+2\cos\theta)R^2 + \frac{m_{\mathrm{C}}}{m}\{(3m_{\mathrm{A}}+m_{\mathrm{B}})R' + 6m_{\mathrm{A}}R[\tfrac{1}{3}(1+2\cos\theta)]^{1/2}\}R'$$

$$I_{\parallel} = 2m_{\mathrm{A}}(1-\cos\theta)R^2$$
$$I_{\perp} = m_{\mathrm{A}}(1-\cos\theta)R^2 + \frac{m_{\mathrm{A}}m_{\mathrm{B}}}{m}(1+2\cos\theta)R^2$$

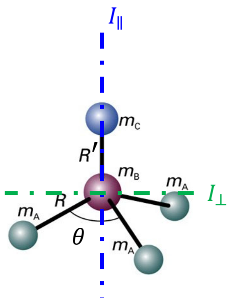
$$I_{\parallel} = 4m_{\mathrm{A}}R^2$$
$$I_{\perp} = 2m_{\mathrm{A}}R^2 + 2m_{\mathrm{C}}R'^2$$

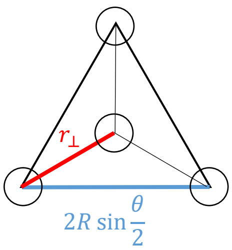
20

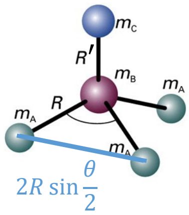
3．対称回転子

- 軸の選び方
- 独立な軸は2本。
- 最も回転対称性が高い軸を主軸$I_\parallel$とする。
- それに垂直な軸を副軸$I_\perp$とする。
- 今日の課題2: $I_\parallel$
- ヒント

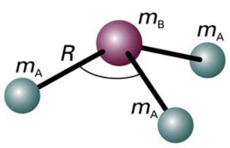
$$r_\perp = \sqrt{\frac{2}{3}(1-\cos\theta)}R$$



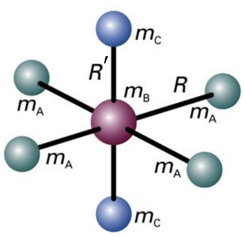




3．対称回転子



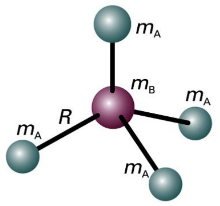
$$I_\parallel = 2m_A(1-\cos\theta)R^2$$
$$I_\perp = m_A(1-\cos\theta)R^2 + \frac{m_A m_B}{m}(1+2\cos\theta)R^2$$



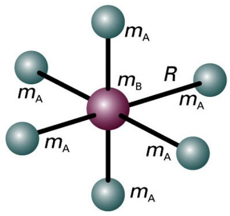
$$I_\parallel = 4m_A R^2$$
$$I_\perp = 2m_A R^2 + 2m_C R'^2$$

4．球対称回転子

- 3つの等しい慣性モーメントを持つ。
- 対称性が高いと回転中心と重心が一致するので楽に求まる。



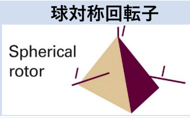
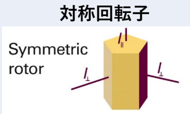
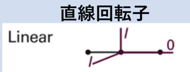
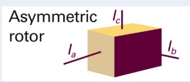
$I = \frac{8}{3} m_A R^2$



$I = 4 m_A R^2$

23

剛体回転子の4つの型と慣性モーメント

剛体回転子の型	慣性モーメント	例
球対称回転子 	3つの等しい慣性モーメント $I_a = I_b = I_c$	CH_4, SiH_4, SF_4
対称回転子 	2つの等しい慣性モーメント $I_a < I_b = I_c, I_a = I_b < I_c$	NH_3, CH_3Cl, CH_3CN
直線回転子 	慣性モーメントの一つはゼロ。ゼロではない1つの慣性モーメント $I_a = 0, I_b = I_c = I$	$CO_2, HCl, OCS, HC \equiv CH$
非対称回転子 	3つの異なる慣性モーメント $I_a < I_b < I_c$	H_2O, H_2CO, CH_3OH

24

主軸$I_{\parallel}$と副軸$I_{\perp}$はどうやって決まる？

- 角運動量ベクトルの定義

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$
$$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$$

- 角速度ベクトル $\boldsymbol{\omega}$：大きさがωで方向が回転軸方向のベクトル

$$\boldsymbol{v} =$$
$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v} = m\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r})$$
$$= mr^2\boldsymbol{\omega} + m(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\omega})\boldsymbol{r} \ \text{（公式）}$$
$$J_x = mr^2\omega_x - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)x$$
$$J_y = mr^2\omega_y - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)y$$
$$J_z = mr^2\omega_z - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)z$$

25

主軸$I_{\parallel}$と副軸$I_{\perp}$はどうやって決まる？

$$J_x = mr^2\omega_x - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)x$$
$$J_y = mr^2\omega_y - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)y$$
$$J_z = mr^2\omega_z - m(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)z$$

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} mr^2 & 0 & 0 \\ 0 & mr^2 & 0 \\ 0 & 0 & mr^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} mx^2 & myx & mzx \\ mxy & my^2 & mzy \\ mxz & myz & mz^2 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} m(y^2+z^2) & -myx & -mzx \\ -mxy & m(x^2+z^2) & -mzy \\ -mxz & -myz & m(x^2+y^2) \end{pmatrix} \boldsymbol{\omega}$$
$$= \boldsymbol{I\omega}$$
$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I\omega}$$

26

慣性モーメントテンソル$\boldsymbol{I}$

$$\boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} m(y^2+z^2) & -myx & -mzx \\ -mxy & m(x^2+z^2) & -mzy \\ -mxz & -myz & m(x^2+y^2) \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} \Sigma m(y^2+z^2) & -\Sigma myx & -\Sigma mzx \\ -\Sigma mxy & \Sigma m(x^2+z^2) & -\Sigma mzy \\ -\Sigma mxz & -\Sigma myz & \Sigma m(x^2+y^2) \end{pmatrix}$$

27

$\boldsymbol{R}$の回転を施す
（回転による座標の一次変換）

$$\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J}$$
$$\boldsymbol{\omega}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{\omega}$$

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I}\boldsymbol{\omega}$$
$$\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{J} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{I}\boldsymbol{\omega}$$
$$\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{I}\boldsymbol{R}^{-1}\boxed{\boldsymbol{R}\boldsymbol{\omega}}$$
$$\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J} = \boxed{\boldsymbol{R}\boldsymbol{I}\boldsymbol{R}^{-1}}\,\boldsymbol{\omega}'$$
$$\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{I}'\boldsymbol{\omega}$$
$$\boxed{\boldsymbol{I}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{I}\boldsymbol{R}^{-1}}$$

28

行列の対角化

$$\boldsymbol{I}' = \boldsymbol{RIR}^{-1} = \begin{pmatrix} I'_x & 0 & 0 \\ 0 & I'_y & 0 \\ 0 & 0 & I'_z \end{pmatrix}$$

となるまで線形変換する。これが本来の主軸。

（もともと重心を回転中心にしたり、
回りやすい軸を決めたりするのは直感的な判断。）

「行列の対角化」については、
Wikipediaの「対角化」に詳しい記述がある。

29

固有値問題

- 「オイラーはまた剛体の回転についても研究し、主軸の重要性に気づいた。」
- **レオンハルト・オイラー**（Leonhard Euler, 1707年4月15日 - 1783年9月18日）は、18世紀の数学者・天文学者（天体物理学者）
- オイラーは人類史上最も多くの論文を書いたと言われる数学者であり、並の数学者が一生かかって執筆する量の論文をオイラーは毎年のように発表し続けていたとも言われる。

by Wikipedia

30

固有値問題

- **天文学から量子力学まで**非常によく使われる数学。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$$

を満たすゼロベクトルではない**ベクトル$\boldsymbol{x}$**とスカラーλが存在するとき、$\boldsymbol{x}$を$\boldsymbol{A}$の固有ベクトル(固有関数)、λを$\boldsymbol{A}$の固有値と呼ぶ。

- 固有値と固有ベクトルの求め方
  - STEP 1. 固有方程式を解いて固有値を求める。
    固有方程式　$|\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{E}| = 0$
  - STEP 2. 各固有値に対する固有ベクトルを求める。
    $$(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{E})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

31

固有値問題

＜例＞

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 4 & 9 \end{bmatrix}$$

STEP 1. 固有方程式を解いて固有値を求める。

$$|\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{E}| = 0$$

$$\left| \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 4 & 9 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right| = \left| \begin{bmatrix} 5-\lambda & 3 \\ 4 & 9-\lambda \end{bmatrix} \right|$$

$$= (5-\lambda)(9-\lambda) - 3 \cdot 4 = (\lambda - 3)(\lambda - 11) = 0$$

$$\lambda = 3, 11$$

32

固有値問題

STEP 2. 各固有値に対する固有ベクトルを求める。

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$$

固有値3に対する固有ベクトルを求める。

$$(\boldsymbol{A}-3\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}=\left\{\begin{bmatrix}5 & 3\\4 & 9\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}3 & 0\\0 & 3\end{bmatrix}\right\}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}2 & 3\\4 & 6\end{bmatrix}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$$

したがって、固有ベクトルは

$$\boldsymbol{x}=k\begin{pmatrix}-3\\2\end{pmatrix}\text{ ただし}k\text{は0以外の実数}$$

固有値11に対する固有ベクトルを求める。

$$(\boldsymbol{A}-11\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}=\left\{\begin{bmatrix}5 & 3\\4 & 9\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}11 & 0\\0 & 11\end{bmatrix}\right\}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}-6 & 3\\4 & -2\end{bmatrix}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$$

したがって、固有ベクトルは

$$\boldsymbol{x}=k\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}\text{ ただし}k\text{は0以外の実数}$$

33

対角化と固有値

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}a_1 & 0 & \cdots & 0\\0 & a_2 & \cdots & 0\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\0 & 0 & \cdots & a_n\end{bmatrix}$$

が成り立つとき、$\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_n)$とすると、
対角行列の成分$a_1,a_2,\cdots,a_n$は$\boldsymbol{A}$の固有値であり、
それぞれに対応する固有ベクトルは$\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_n$である。

- https://oguemon.com/study/linear-algebra/diagonalization/

34

対角化と固有値

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}$$

左からPをかける。

$$AP = P\begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}$$
$$A(p_1\ p_2) = (p_1\ p_2)\begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}$$
$$(Ap_1 Ap_2) = (\alpha p_1\ \beta p_2)$$
$$Ap_1 = \alpha p_1$$
$$Ap_2 = \beta p_2$$

対角行列の成分$a_1, a_2, \cdots, a_n$はAの固有値であり、
それぞれに対応する固有ベクトルは$p_1, p_2, \cdots, p_n$である。
https://oguemon.com/study/linear-algebra/diagonalization/

35

次の行列は対角化可能かどうか判断し、可能な場合は対角化せよ：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix}$$

固有値と固有ベクトルを計算すると、

$$\lambda_1 = 3, \quad \lambda_2 = 2, \quad \lambda_3 = 1$$
$$v_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

固有ベクトルを並べた

$$P = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

の行列式は0でないため、これを使って対角化できる。

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

36

第9回のまとめ

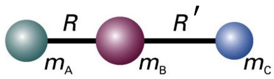
- 4つの剛性回転子：分子の対称性による分類
- 慣性モーメントを持つ軸の数
  - 直線回転子と球対称回転子では1本
  - 対称回転子では2本
  - 非対称回転子では3本
- 求め方
  - 回転の中心を定める(重心)
  - できるだけ計算が楽になる座標軸を定める(対称性に注目)
  - 軸上の原子の慣性モーメントの寄与はゼロ
- 実際の分子（特に対称性の低い分子）については
  慣性モーメントテンソルの**対角化**により$\boldsymbol{I}_{\mathrm{a}}$、$\boldsymbol{I}_{\mathrm{b}}$、$\boldsymbol{I}_{\mathrm{c}}$を 決定する。

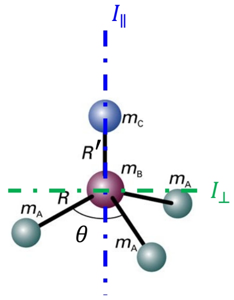
37

第9回の課題

【課題１】右の図に示した直線回転子の慣性モーメントを求めなさい。

【課題２】右の図に示した対称回転子の慣性モーメント$I_{\|}$を求めなさい。

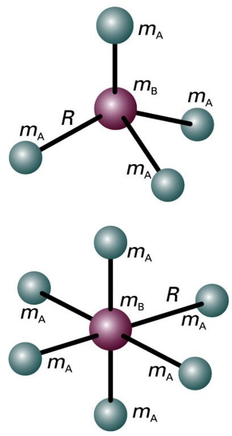




38

第9回の課題

【課題３】右の図に示した2つの球対称回転子の慣性モーメントを求めなさい。



39