

§ 水分子的光譜

1. Eugene P. Wigner
2. Walter Gordon
3. David M. Dennison 不對稱陀螺分子理論
4. Carl Eckart
5. Sergei A. Tashkun
6. [Jonathan Tennyson](#) Twinkle space mission(太空任務 系外行星) ExoMol(分子光譜數據資料庫) <https://www.youtube.com/watch?v=L0QzqV1X3qY>
2025 年 獲頒 [RAS\(皇家天文學會\)金獎](#)(另一位得獎者為 James Binney)

我們可以把一個分子的轉動，想像成一個陀螺在空間中的旋轉。根據分子形狀的不同，它們的轉動方式（和對應的數學描述）也不同，因此被分成了三類：

1. 球型陀螺
甲烷 CH_4 四氯化碳 CCl_4
2. 對稱陀螺
氨氣 NH_3
3. 不對稱陀螺 水分子 H_2O 由於水分子是 V 形結構，它的三個主軸（我們可以把它想像成分子內部的 x, y, z 軸）的轉動慣量全都互不相等。

(1) 繞一個軸旋轉最容易（轉動慣量最小）。

(2) 繞另一個軸旋轉最困難（轉動慣量最大）。

(3) 繞第三個軸的難度介於兩者之間。

這是最複雜的情況。它的轉動能級沒有通用的解析解公式，必須通過求解一個矩陣的本徵值問題來得到。這在數學上是一個巨大的挑戰。

陀螺是比喻分子的整體轉動。

不對稱：形容水分子三個方向的轉動慣量均不相同，導致其轉動能級和光譜極其複雜。

研究途徑：分子光譜學 物理化學

Physical Chemistry Peter Atkins & Julio de Paula

Molecular Quantum Mechanics Peter Atkins & Ronald Friedman

Astronomical spectroscopy 天文光譜學