

[オプション課題 2] 分子の振動 - 赤外活性・ラマン活性 (C_2H_2)

n 個の原子から成る分子は $3n$ 個の運動自由度を持つ。このうち 3 は分子の並進自由度、3 (非直線分子の場合) または 2 (直線分子) は分子の回転自由度であり、残りが振動の自由度である。すなわち、

$$\begin{aligned} \text{振動自由度} &= 3n - 6 && \text{(非直線分子)} \\ \text{振動自由度} &= 3n - 5 && \text{(直線分子)} \end{aligned} \quad (2-3)$$

ある振動運動が赤外吸収に観測されるか否か (赤外活性/不活性) は分子の双極子モーメント m_d が振動座標 x により変化するか否かで決まる。

$$\frac{\partial m_d}{\partial x} \neq 0 \quad \text{なら赤外活性} \quad (2-4)$$

同様にラマン散乱に観測されるか否か (ラマン活性/不活性) は分極率 a が振動座標 x により変化するか否かで決まる (図 1-2)。

$$\frac{\partial a}{\partial x} \neq 0 \quad \text{ならラマン活性} \quad (2-5)$$

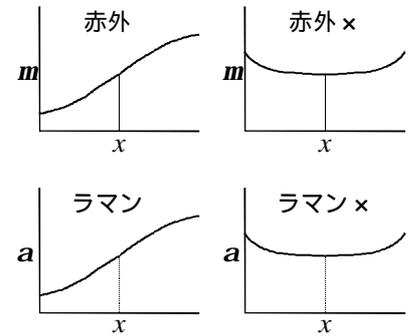
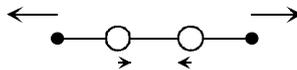


図 2-1. 赤外活性とラマン活性

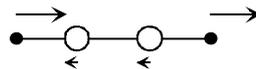
[問題 o2]

- a) アセチレン ($H-C\equiv C-H$), メチルアセチレン ($CH_3-C\equiv C-H$) の振動自由度はいくつか?
b) アセチレンの以下の振動モードの、赤外活性/不活性・ラマン活性/不活性を判別せよ。

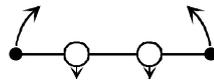
n_1 : 対称 C-H 伸縮振動



n_3 : 反対称 C-H 伸縮振動



n_5 : 反対称 C-C-H 変角振動



- c) 上記以外のアセチレンの振動モードには、どのようなものがあるか考えよ。