



[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、

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

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  $\mu_d$  が振動座標  $x$  により変化するか否かで決まる。

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

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  $\alpha$  が振動座標  $x$  により変化するか否かで決まる (図 1-2)。

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

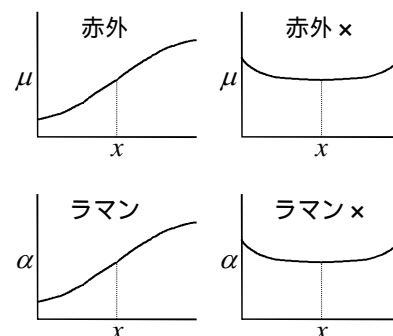
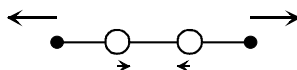


図 2-1. 赤外活性とラマン活性

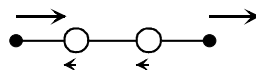
## [問題 o2]

- 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。

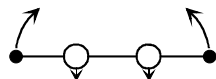
$\nu_1$ : 対称 C-H 伸縮振動



$\nu_3$ : 反対称 C-H 伸縮振動



$\nu_5$ : 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。