

図 4.1 H₂O の振動 (振動自由度 = 3)

振動子数

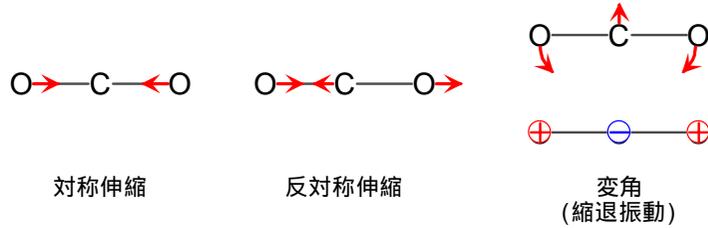


図 4.2 CO₂ の振動 (振動自由度 = 4)

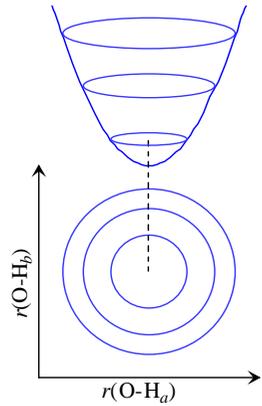


図 4.3 H₂O の O-H 伸縮振動のポテンシャルエネルギー等高線図

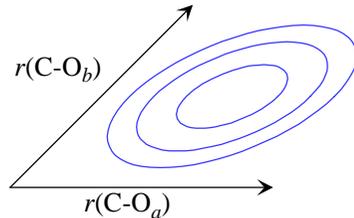


図 4.4 CO₂ の質量規格化座標でのポテンシャルエネルギー等高線図

表 4.1 代表的な結合の振動数

	[cm ⁻¹]
C-H 伸縮	~3000
C-C 伸縮	~900
C=C 伸縮	~1650
C-C-H 変角	~1000
H-C-H 変角	~1450

表 4.2 赤外活性とラマン活性

	赤外	ラマン
CO ₂ ν ₁ (対称伸縮)	×	
CO ₂ ν ₂ (変角)		×
CO ₂ ν ₃ (反対称伸縮)		×
CH ₄ ν ₁ (全対称 C-H 伸縮)	×	
N ₂	×	
HCl		
H ₂ O ν ₁ (対称伸縮)		
H ₂ O ν ₃ (反対称 O-H 伸縮)		
CH ₃ ν ₂ (変角-傘反転振動)		×

× 基準振動ではない

基準振動

基準振動

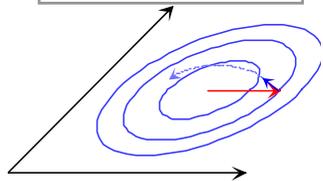
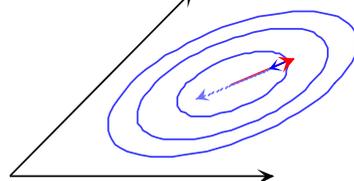
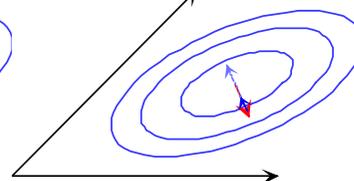


図 4.5 一方の r(C-O) は、他方と直交していない



(対称伸縮 1337 cm⁻¹)



(反対称伸縮 2349 cm⁻¹)

図 4.6 直交する振動座標 = 基準振動座標

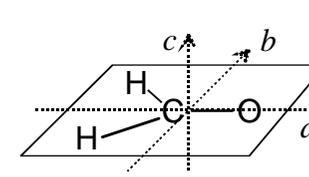


図 4.7 H₂CO の回転軸

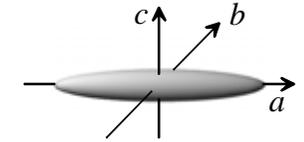


図 4.8a 偏長対称コマ (I_A < I_B = I_C)

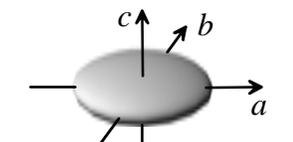


図 4.8b 偏平対称コマ (I_A = I_B < I_C)

表 4.3 純回転遷移と回転ラマンの活性

	純回転遷移	回転ラマン
N ₂	×	
HCl		
CH ₄	×	×
CH ₃	×	