

図 4.1 H₂O の振動 (振動自由度 = 3)

振動子数

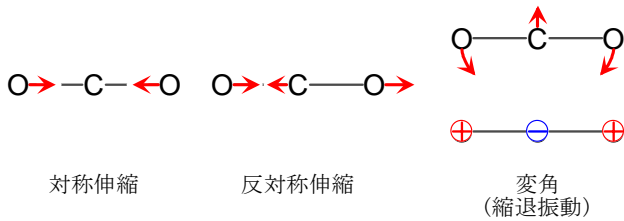


図 4.2 CO₂ の振動 (振動自由度 = 4)

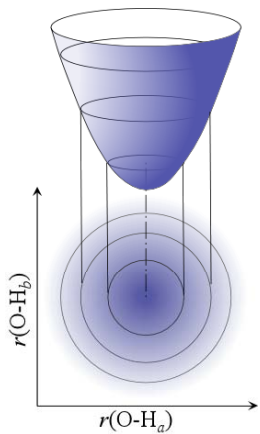


図 4.3 H₂O の O-H 伸縮振動のポテンシャルエネルギー等高線図

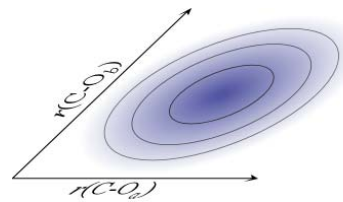


図 4.4 CO₂ の質量規格化座標でのポテンシャルエネルギー等高線図

× 基準振動ではない

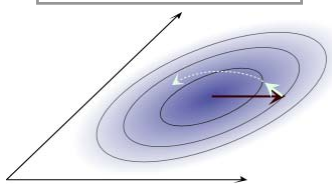
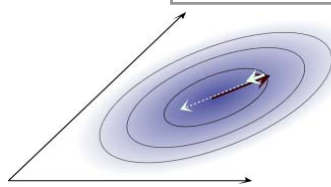


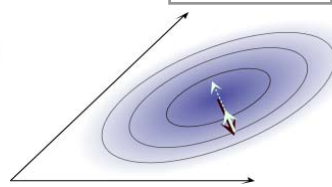
図 4.5 一方の $r(\text{C-O})$ は、他方と直交していない

○ 基準振動



(対称伸縮 1337 cm⁻¹)

○ 基準振動



(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

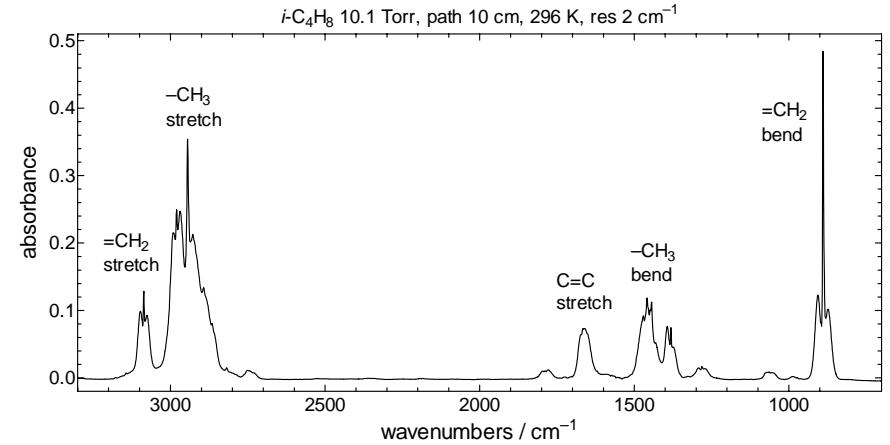


表 4.2 赤外活性とラマン活性

	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)	○	×

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

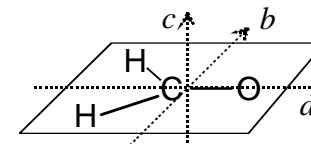


図 4.7 H₂CO の回転軸

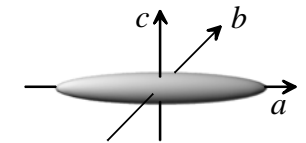


図 4.8a 偏長対称コマ ($I_A < I_B = I_C$)

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	×	○

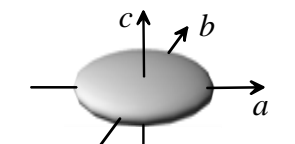


図 4.8b 偏平対称コマ ($I_A = I_B < I_C$)