

図 4.1 H<sub>2</sub>O の振動 (振動自由度 = 3)

振動子数

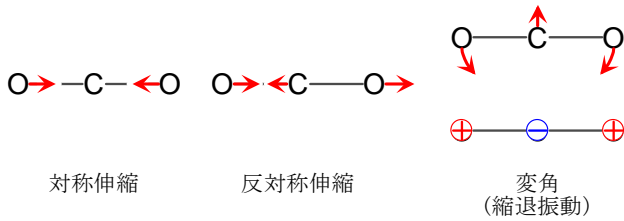


図 4.2 CO<sub>2</sub> の振動 (振動自由度 = 4)

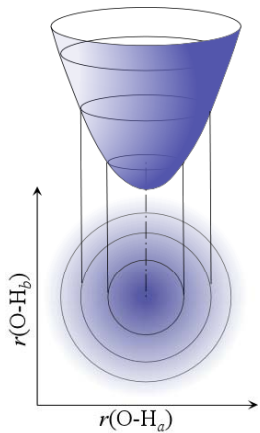


図 4.3 H<sub>2</sub>O の O-H 伸縮振動のポテンシャルエネルギー等高線図

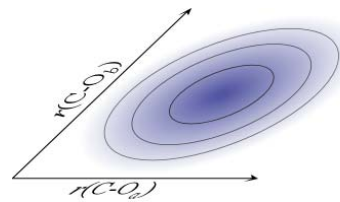


図 4.4 CO<sub>2</sub> の質量規格化座標でのポテンシャルエネルギー等高線図

× 基準振動ではない

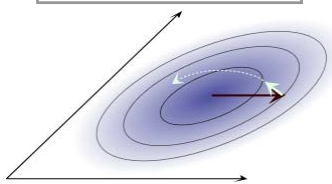
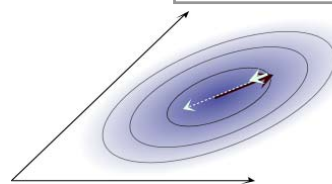


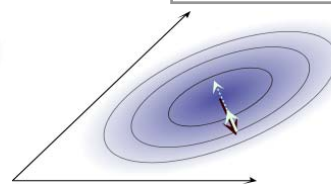
図 4.5 一方の  $r(\text{C-O})$  は、他方と直交していない

○ 基準振動



(対称伸縮 1337 cm<sup>-1</sup>)

○ 基準振動



(反対称伸縮 2349 cm<sup>-1</sup>)

図 4.6 直交する振動座標 = 基準振動座標

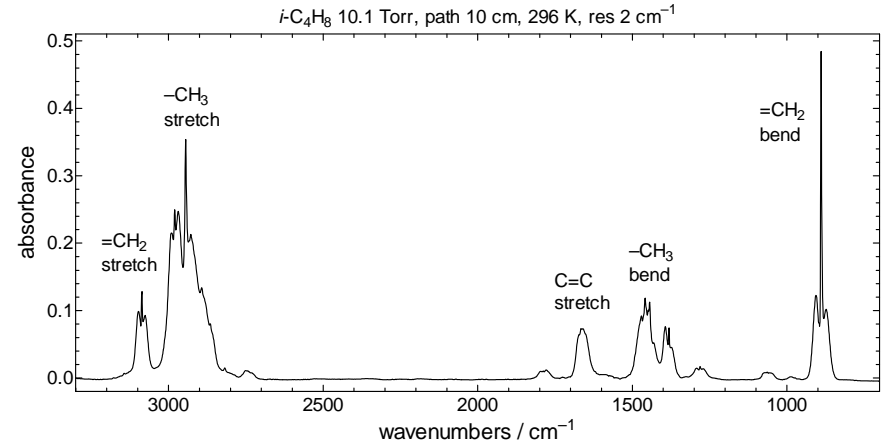


表 4.2 赤外活性とラマン活性

	赤外	ラマン
CO <sub>2</sub> $\nu_1$ (対称伸縮)	×	○
CO <sub>2</sub> $\nu_2$ (変角)	○	×
CO <sub>2</sub> $\nu_3$ (反対称伸縮)	○	×
CH <sub>4</sub> $\nu_1$ (全対称 C-H 伸縮)	×	○
N <sub>2</sub>	×	○
HCl	○	○
H <sub>2</sub> O $\nu_1$ (対称伸縮)	○	○
H <sub>2</sub> O $\nu_3$ (反対称 O-H 伸縮)	○	○
CH <sub>3</sub> $\nu_2$ (変角-傘反転振動)	○	×

表 4.1 代表的な結合の振動数

	[cm <sup>-1</sup> ]
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

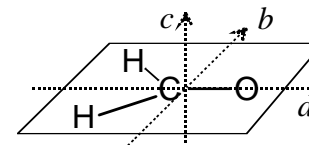


図 4.7 H<sub>2</sub>CO の回転軸

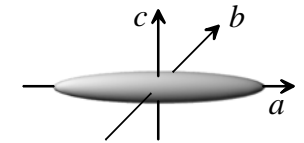


図 4.8a 偏長対称コマ ( $I_A < I_B = I_C$ )

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 <sub>2</sub>	×	○
HCl	○	○
CH <sub>4</sub>	×	×
CH <sub>3</sub>	×	○

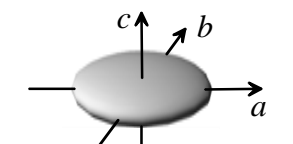


図 4.8b 偏平対称コマ ( $I_A = I_B < I_C$ )