

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【ラマン・赤外分光法】

(7) 分子の基準振動の数と各振動の原子変位（振動の矢印）ってどうやって求めるの？

作成日： 2018 年 7 月 2 日

担当者： 久野 潤也

分子の運動には、その重心が移動する並進運動、重心のまわりの回転運動、そして、原子間距離が伸び縮みする振動運動の 3 種類がある。振動は原子がエネルギーの最も低い準位を往復する運動であり、原子が外部からエネルギーを受け取り高くなると、それを低い準位に戻そうとする力が働くために起こる。分子の振動による波数と吸収強度の関係を測定する方法が赤外分光法やラマン分光法である。

今回は水分子の基準振動を例にして説明をしていく。分子振動の数（自由度）というのは一つの原子につき 3 方向（x,y,z 方向）あると考えると、原子が 3 個ある水分子では自由度 9 と考えられる。水の基準振動を Fig.1 に示す。しかし、この中には同じ振動をしていると見なせるものがあるため、それを省く必要がある。その結果、水分子の基準振動は 3 つとなる。

この基準振動の種類や振動の矢印を求めるには当研究室では計算化学用ソフトウェアである Gaussian を使う。今回の計算結果を Fig.2 と Table 1 に示す。

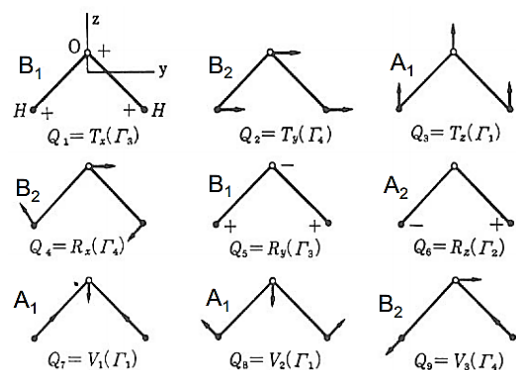


Fig.1 9 個の基準振動モード

Frequency / cm^{-1}	Infrared	Raman Activity
1799.20	79.9885	11.4963
3809.39	0.0475	95.8049
3943.28	9.2023	44.0802

Table 1 水分子の基準振動の波数と赤外、ラマン活性

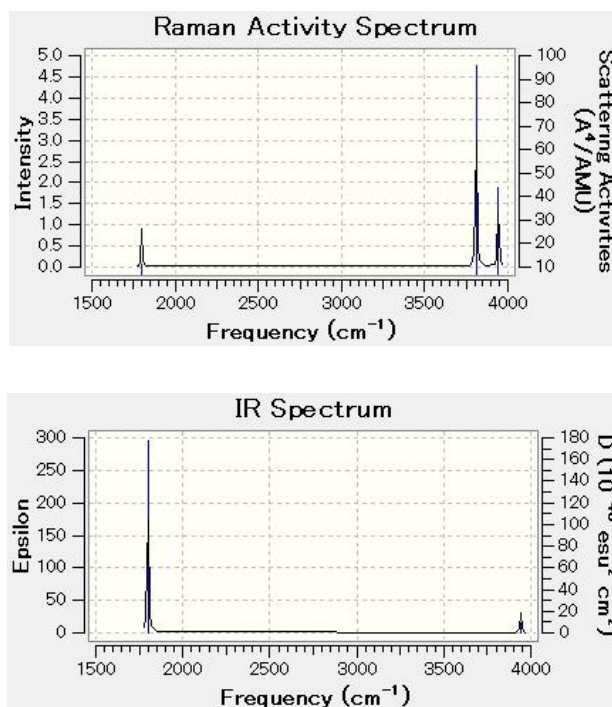


Fig.2 水分子の赤外、ラマンスペクトル

参考文献

- http://www.shinshu-u.ac.jp/faculty/engineering/chair/chem009/computer%20file/6_vibration.pdf

6. 振動解析

- http://home.sato-gallery.com/education/el/hosoku_hikari06.pdf

基礎から学ぶ光物性・補足資料 ラマン分光と赤外分光