



4.9. 分子振動

• Morseポテンシャル

図 5-5 調和振動子のポテンシャル $k(l-l_0)^2/2$ (破線) と二原子分子の完全な核間ポテンシャル(実線)との比較。調和振動子のポテンシャルは極小からの小さな変位に対しては満足できる近似になっている。

教科書様式!!

図の出典: マッカーリー・サイモン

4.9. 分子振動

• エネルギー準位と固有関数

エネルギー(高)
→ 節(高)

古典論的調和振動子ではないところ(トンネル効果による"しみだし")

図の出典: マッカーリー・サイモン, 77講, 大野公一

4.9. 分子振動

• 二原子分子の例

表 5-1 二原子分子の基本振動数、力の定数、結合長

分子	ν/cm^{-1}	$k/\text{N m}^{-1}$	結合長/pm
H ₂	4401	510	74.1
D ₂	2990	527	74.1
H ³⁵ Cl	2886	478	127.5
H ⁷⁹ Br	2630	408	141.4
H ¹²⁷ I	2230	291	160.9
³⁵ Cl ³⁵ Cl	554	319	198.8
⁷⁹ Br ⁷⁹ Br	323	240	228.4
¹²⁷ I ¹²⁷ I	213	170	266.7
¹⁶ O ¹⁶ O	1556	1142	120.7
¹⁴ N ¹⁴ N	2330	2243	109.4
¹² C ¹² O	2143	1857	112.8
¹⁴ N ¹⁴ O	1876	1550	115.1
²³ Na ²³ Na	158	17	307.8
³⁵ Na ³⁵ Cl	378	117	236.1
³⁹ K ³⁹ Cl	278	84	266.7

二重結合
三重結合
「ばねが」固い

図の出典: マッカーリー・サイモン

量子論的調和振動子 - 止まることを許さけない

4.9. 分子振動

• 実験結果 回転の量子化の影響

振動スペクトル
・赤外スペクトル
・ラマンスペクトル

図 2 DCl 分子の赤外スペクトル
この分子は波長 5 μm 程度の電磁波を吸収する。気体分子のスペクトルでは図のように分子の回転に伴う構造が見える。

図の出典: 77講

さいごに
※ 先生の研究(余談)

ラマン散乱し 入射光の波長より
低い波長の光が出てくる
現象。(ちがじ色の光が!!)

ラマンスペクトル 「分子の指紋」
→ スペクトルパターンが分子によって
全然ちがう

顕微鏡にも使われない。(コントラストの向上)

C. elegans 出たw
生細胞を染めずに見る