

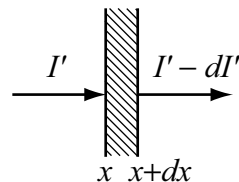
## 10 二原子分子の回転振動スペクトル

### 10.1 分光学

#### 10.1.1 Lambert-Beer の法則

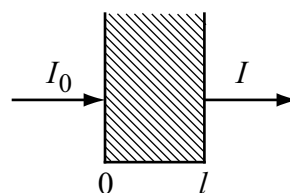
まず, Lambert の法則について述べる。光を吸収する媒体がある。 $dx$  の厚さの媒体を透過すると, 光の強度  $I'$  が  $dI'$  だけ減少する。微分形の式で表すと次のようになる。

$$(10.1) \quad -dI' = \kappa I' dx$$



厚さ  $l$  の媒体について積分形で書く。ただし, 入射光の強度を  $I_0$ , 透過光の強度を  $I$  とする。

$$(10.2) \quad \int_{I_0}^I \frac{dI'}{I'} = - \int_0^l \kappa dx$$



積分を実行する。

$$(10.3) \quad I = I_0 e^{-\kappa l}$$

普通は吸光度  $A$  を次のように定義する。

$$(10.4) \quad A = -\log_{10} \frac{I}{I_0} = \frac{\kappa}{2.303} l \equiv al$$

次に Beer の法則について述べる。濃度  $c$  と光吸収の関係は, 次のように表される。

$$(10.5) \quad a = \epsilon c$$

Lambert の法則と Beer の法則を組み合わせたものを Lambert-Beer の法則という。

$$(10.6) \quad A = \epsilon cl$$

$\epsilon$  はモル吸光係数という。  $c$  は  $\text{mol dm}^{-3}$  の単位で,  $l$  は  $\text{cm}$  の単位で表すことが多い。

#### 10.1.2 吸収強度を決めるもの

波動関数が  $\Psi_n$  でエネルギー準位が  $E_n$  であるような量子力学的な状態から, 波動関数が  $\Psi_m$  でエネルギー準位が  $E_m$  であるような別の量子力学的への光吸収による遷移について考える。

Bohr の共鳴条件によれば, 光量子のエネルギー  $h\nu$  が 2 準位間のエネルギー差に等しい場合にのみ光吸収が生じる。

$$(10.7) \quad h\nu = E_m - E_n = \Delta E$$

また, 光吸収が生じるためには, 次の式で定義される遷移モーメント  $\mathbf{R}_{mn}$  がゼロではない値をとる必要がある。

$$(10.8) \quad \mathbf{R}_{mn} = \langle \Psi_m | \mu | \Psi_n \rangle$$

ここで,  $\mu$  は双極子モーメント (ベクトル) で, 分子中の電氣的な偏りを表す。

$$(10.9) \quad \mu = \sum e_i \mathbf{r}_i$$

### 10.1.3 吸収スペクトル

上に述べたように、物質に光をあてたときに、すべての光が吸収されるのではなく、ある特定の振動数  $\nu$  を持つ光だけが吸収される。光吸収の強度を振動数ごとに分離したものを吸収スペクトルという。ただし、通常の分光学的測定では、振動数  $\nu$  でスペクトルを表すのではなく、光の波長  $\lambda$ 、あるいはその逆数である波数  $\bar{\nu}$  で表すことが多い。

$$(10.10) \quad \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

ここで、 $c$  は光の速度である。 $\bar{\nu}$  を、 $k = 2\pi/\lambda$  で表される波数と混同しないこと。

なお、分光学では  $\lambda$  は nm 単位で、 $\bar{\nu}$  は  $\text{cm}^{-1}$  単位で表されることが多い。

光は、波長によって紫外線、可視光線、赤外線、マイクロ波等に分類できる。

下の表は目安であり、厳密な境界線はない。

名称	波長範囲 $\lambda$	波数範囲 $\bar{\nu}$	振動数範囲 $\nu$
マイクロ波	1 mm ~ 100 cm	$10 \sim 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$	300 GHz ~ 300 MHz
赤外線	800 nm ~ 1 mm	$1.3 \times 10^4 \sim 10 \text{ cm}^{-1}$	400 THz ~ 300 GHz
可視光線	400 ~ 800 nm	$2.5 \times 10^4 \sim 1.3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	800 THz ~ 400 THz
紫外線	10 ~ 400 nm	$10^6 \sim 2.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	10 PHz ~ 800 THz

## 10.2 二原子分子の回転スペクトル

### 10.2.1 選択律

永久双極子モーメントを持つ二原子分子については、回転運動のエネルギー準位の遷移による吸収スペクトルを、マイクロ波（赤外）領域で観測することができる。したがって、異核二原子分子の回転は光吸収で観測できるが、等核二原子分子は永久双極子モーメントがゼロになるので光吸収による回転の観測はできない。

回転運動のエネルギー  $E_J$  を次のようにかく。

$$(10.11) \quad E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1)$$

ただし、 $J$  は回転の量子数（第 8 章で  $l$  と書いたものと同じ）であり、各準位は、可能な磁気量子数  $m$  の数だけ、 $2J+1$  重に縮退している。また、 $B$  は回転定数と呼ばれる。

$$(10.12) \quad B = \frac{\hbar^2}{2I}$$

光の吸収や放出によるエネルギー準位  $E_J$  から  $E_{J'}$  への遷移は、 $\Delta J = J' - J$  として、 $\Delta J = \pm 1$  の場合にのみ許される。特に光吸収によるものは、 $\Delta J = +1$  の場合のみである。

### 10.2.2 スペクトル線

選択律を Bohr の条件にあてはめる。

$$(10.13) \quad \begin{aligned} h\nu &= \Delta E \\ &= B[J'(J'+1) - J(J+1)] \\ &= B[(J+1)(J+2) - J(J+1)] \\ &= 2B(J+1) = \frac{\hbar^2}{I}(J+1) \end{aligned}$$

振動数を求める。

$$(10.14) \quad \nu = \frac{\hbar(J+1)}{2\pi I}$$

波数を求める。

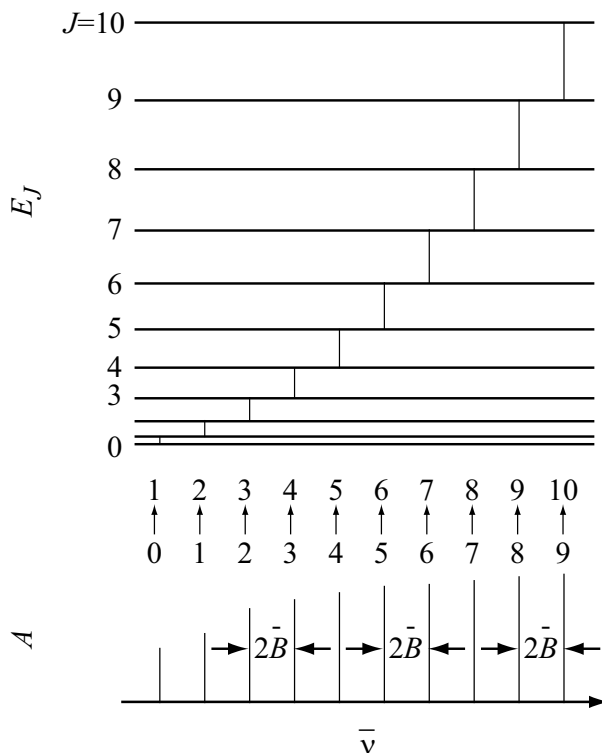
$$(10.15) \quad \bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{\hbar(J+1)}{2\pi cI} = 2\bar{B}(J+1)$$

ただし,  $\bar{B}$  は波数の単位で表した回転定数である。

$$(10.16) \quad \bar{B} = \frac{\hbar}{4\pi cI} = \frac{B}{ch}$$

慣性モーメント  $I$  が変化しなければ (つまり, 原子間距離が変化しなければ), 回転による吸収スペクトル線は  $\nu$  または  $\bar{\nu}$  に対して等間隔に並ぶ。その間隔は次のように与えられる。

$$(10.17) \quad \Delta\bar{\nu} = 2\bar{B} = \frac{\hbar}{2\pi cI}$$



### 10.3 振動-回転スペクトル

#### 10.3.1 選択律

永久双極子モーメントを持つ二原子分子については, 振動エネルギー準位の遷移による吸収スペクトルを, 赤外領域で観測することができる。したがって, 異核二原子分子は赤外活性で, 等核二原子分子は赤外不活性である。

振動と回転をあわせたエネルギー  $E_{v,J}$  を次のようにかく。

$$(10.18) \quad E_{v,J} = \hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}\left(\frac{1}{2} + v\right) + \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) = h\nu^\circ\left(\frac{1}{2} + v\right) + BJ(J+1)$$

ただし,  $v$  は振動の量子数 (第 9 章で  $n$  と書いたものと同じ) である。また,  $\nu^\circ$  は分子の基準振動数と呼ばれる。

$$(10.19) \quad \nu^\circ = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

光の吸収や放出によるエネルギー準位  $E_{v,J}$  から  $E_{v',J'}$  への遷移は,  $\Delta v = v' - v$ ,  $\Delta J = J' - J$  として,

$\Delta v = \pm 1$  でありかつ  $\Delta J = \pm 1$  である場合にのみ許される。つまり、回転準位が遷移することなしに振動準位のみが遷移することはない。特に光吸収による遷移は、 $\Delta v = +1$  の場合のみ生じるが、 $\Delta J$  は  $+1$  にも  $-1$  にもなりうる。

### 10.3.2 スペクトル線

$\Delta J = 0$  のスペクトル線は Q 枝と呼ばれるが、観測されない。

$\Delta J = -1$  のスペクトル線は P 枝と呼ばれる。P 枝について選択律を Bohr の条件にあてはめる。

$$\begin{aligned}
 (10.20) \quad h\nu &= \Delta E \\
 &= h\nu^\circ(v' - v) + B[J'(J' + 1) - J(J + 1)] \\
 &= h\nu^\circ(v + 1 - v) + B[(J - 1)J - J(J + 1)] \\
 &= h\nu^\circ - 2BJ = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} - \frac{\hbar^2}{I} J
 \end{aligned}$$

ただし  $J \geq 1$  である。

振動数を求める。

$$(10.21) \quad \nu = \nu^\circ - \frac{\hbar J}{2\pi I}$$

波数を求める。

$$(10.22) \quad \bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} - \frac{\hbar J}{2\pi c I} = \bar{\nu}^\circ - 2\bar{B}J$$

ただし、 $\bar{\nu}^\circ$  は分子の基準振動波数である。

$$(10.23) \quad \bar{\nu}^\circ = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$\Delta J = +1$  のスペクトル線は R 枝と呼ばれる。R 枝について選択律を Bohr の条件にあてはめる。

$$\begin{aligned}
 (10.24) \quad h\nu &= \Delta E \\
 &= h\nu^\circ(v + 1 - v) + B[(J + 1)(J + 2) - J(J + 1)] \\
 &= h\nu^\circ + 2B(J + 1) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar^2}{I} (J + 1)
 \end{aligned}$$

ただし  $J \geq 0$  である。

振動数を求める。

$$(10.25) \quad \nu = \nu^\circ + \frac{\hbar(J + 1)}{2\pi I}$$

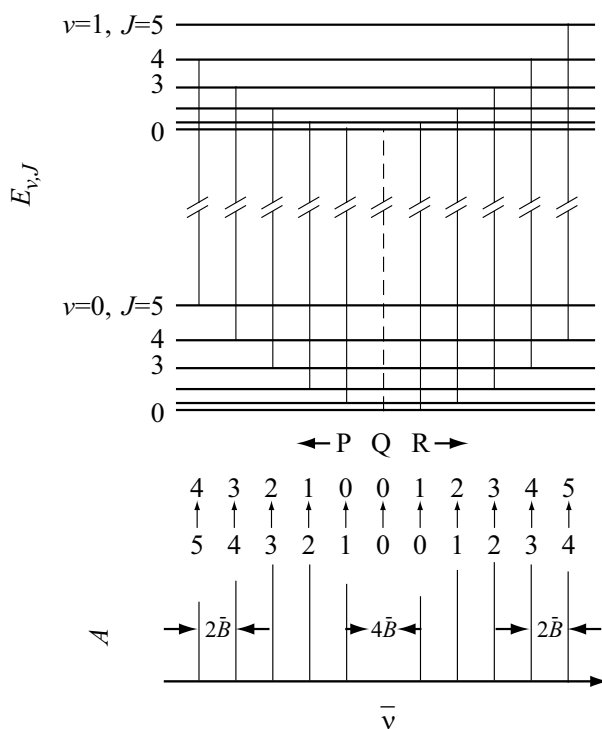
波数を求める。

$$(10.26) \quad \bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar(J + 1)}{2\pi c I} = \bar{\nu}^\circ + 2\bar{B}(J + 1)$$

慣性モーメント  $I$  と力の定数  $k$  が変化しなければ、振動-回転スペクトル線は、 $\bar{\nu} = \bar{\nu}^\circ$  付近以外で、 $\nu$  または  $\bar{\nu}$  に対して等間隔に並ぶ。その間隔は、純回転スペクトルの場合と等しく、次のように与えられる。

$$(10.27) \quad \Delta\bar{\nu} = 2\bar{B} = \frac{\hbar}{2\pi c I}$$

一方、 $\bar{\nu} = \bar{\nu}^\circ$  の位置にはスペクトル線はなく、その付近ではスペクトル線間隔は他の場合の 2 倍の値をとる。



## 10.4 Raman スペクトル

### 10.4.1 Raman 散乱

試料に振動数  $\nu_1$  の可視光線を照射し、試料から散乱されてきた光を観測すると、振動数に変化のない光 (Rayleigh 散乱) の他に、振動数が  $\nu_1 + \nu_R$  および  $\nu_1 - \nu_R$  に変化した光 (Raman 散乱) が観測される。 $\nu_1$  よりも振動数が小さい ( $\nu_R < 0$ ) スペクトル線を Stokes 線, 大きい方 ( $\nu_R > 0$ ) を anti-Stokes 線という。 $\nu_R$  の振動数は、赤外領域に対応しており、回転および振動-回転のエネルギー遷移に対応するスペクトル線が観察される。

エネルギー  $h\nu_1$  の光子が入射して、分子の振動-回転エネルギー準位が  $E_{v,J}$  から  $E_{v',J'}$  へ遷移したとき、エネルギー差  $\Delta E = E_{v',J'} - E_{v,J}$  分だけ光子のエネルギーが小さくなり、 $\nu_1 + \nu_R$  となって散乱されるとする。このとき、Bohr の共鳴条件は次のようにかかる。

$$(10.28) \quad h\nu_R = -\Delta E$$

### 10.4.2 選択律

二原子分子の場合、選択律は  $\Delta v = 0, \pm 1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 2$  であり、等核二原子分子でも異核二原子分子でも Raman 散乱が観測される。

### 10.4.3 純回転 Raman スペクトル

Raman 散乱の場合でも 純回転スペクトルと振動-回転スペクトルがある。純回転スペクトルでは  $\Delta v = 0$  であり、 $\Delta J = -2$  のものが anti-Stokes 線となる。

$$(10.29) \quad \begin{aligned} h\nu_R &= -\Delta E \\ &= -B[J'(J'+1) - J(J+1)] \\ &= -B[(J-2)(J-1) - J(J+1)] \\ &= 2B(2J-1) = \frac{\hbar^2}{I}(2J-1) \end{aligned}$$

この場合  $J \geq 2$  である。

波数を求める。

$$(10.30) \quad \bar{\nu}_R = \frac{\hbar(2J-1)}{2\pi cI} = 2\bar{B}(2J-1)$$

一方,  $\Delta J = +2$  のものが Stokes 線となる。

$$(10.31) \quad \begin{aligned} h\nu_R &= -\Delta E \\ &= -B[J'(J'+1) - J(J+1)] \\ &= -B[(J+2)(J+3) - J(J+1)] \\ &= -2B(2J+3) = -\frac{\hbar^2}{I}(2J+3) \end{aligned}$$

この場合  $J \geq 0$  である。

波数を求める。

$$(10.32) \quad \bar{\nu}_R = -\frac{\hbar(2J+3)}{2\pi cI} = -2\bar{B}(2J+3)$$

いずれの場合も, スペクトル線の間隔は  $4\bar{B}$  になる。ただし, Rayleigh 線と最初の回転 Raman 線との間隔は, 左右とも  $6\bar{B}$  である。

#### 10.4.4 振動-回転 Raman スペクトル

振動-回転スペクトルでは,  $\Delta v = +1$  のものが Stokes 線,  $\Delta v = -1$  のものが anti-Stokes 線になる。室温付近では  $v \geq 1$  の状態にある分子は  $v = 0$  に比べて非常に少ないので, 通常, anti-Stokes 線は Stokes 線に比べて弱い。いずれの場合も  $\Delta J = 0$  のスペクトル線を Q 枝といい,  $\Delta J = -2$  は O 枝,  $\Delta J = +2$  は S 枝という。

Stokes 線の Q 枝は,  $\nu_R = -\nu^\circ$  であり,  $\bar{\nu}_R = -\bar{\nu}^\circ$  である。

Stokes 線の O 枝について, Bohr の条件をあてはめる。

$$(10.33) \quad \begin{aligned} h\nu_R &= -\Delta E \\ &= -h\nu^\circ(v' - v) - B[J'(J'+1) - J(J+1)] \\ &= -h\nu^\circ - B[(J-2)(J-1) - J(J+1)] \\ &= -h\nu^\circ + 2B(2J-1) = -h\nu^\circ + \frac{\hbar^2}{I}(2J-1) \end{aligned}$$

この場合  $J \geq 2$  である。

波数を求める。

$$(10.34) \quad \bar{\nu}_R = -\bar{\nu}^\circ + \frac{\hbar(2J-1)}{2\pi cI} = -\bar{\nu}^\circ + 2\bar{B}(2J-1)$$

次に, Stokes 線の R 枝について,

$$(10.35) \quad \begin{aligned} h\nu_R &= -\Delta E \\ &= -h\nu^\circ(v' - v) - B[J'(J'+1) - J(J+1)] \\ &= -h\nu^\circ - B[(J+2)(J+3) - J(J+1)] \\ &= -h\nu^\circ - 2B(2J+3) = -h\nu^\circ - \frac{\hbar^2}{I}(2J+3) \end{aligned}$$

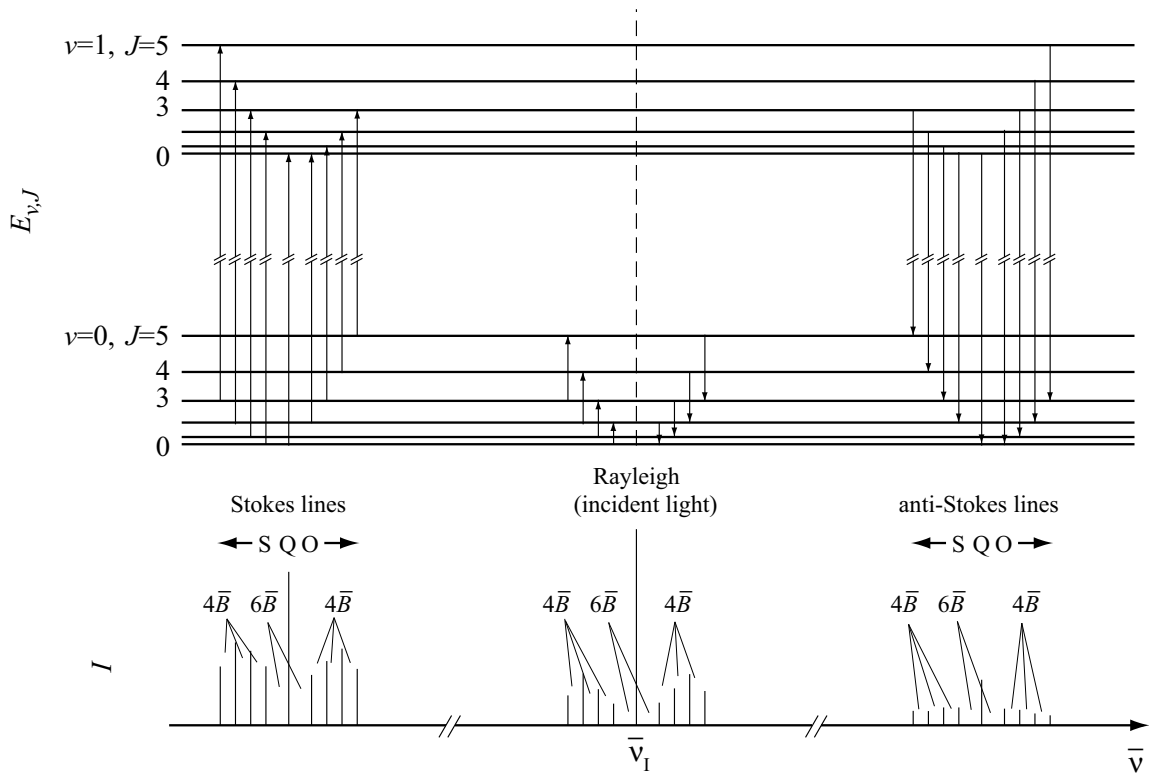
この場合  $J \geq 0$  である。

波数を求める。

$$(10.36) \quad \bar{\nu}_R = -\bar{\nu}^\circ - \frac{\hbar(2J+3)}{2\pi cI} = -\bar{\nu}^\circ - 2\bar{B}(2J+3)$$

いずれの場合も, スペクトル線の間隔は  $4\bar{B}$  になる。ただし, Q 枝と O 枝の最初の線および R 枝の最初の線

との間隔は、いずれも  $6\bar{B}$  である。



### 演習問題

- 10-1. 波長 440 nm で、厚さ 2 mm のガラスフィルターの透過率は 81.0 % である。
- (1) 吸光度はいくらか。
  - (2) 厚さ 8 mm のフィルターでは透過率はいくらか。
- 10-2. 波長 540 nm で、 $\text{MnO}_4^-$  イオンのモル吸光係数は  $202.5 \text{ m}^2 \text{ mol}^{-1}$  である。20.000 g の合金を溶解し、溶液中のマンガンを酸化して  $\text{MnO}_4^-$  とする。その溶液をメスフラスコで 500.0 ml に希釈した後、540 nm における透過率を 1.00 cm セルで測定したところ、32.5 % であった。合金中のマンガンの含量を重量 % で計算せよ。
- 10-3. モル質量  $425 \text{ g mol}^{-1}$  の染料 0.100 g を 100 ml のアルコールに溶解させた。この溶液 1.00 ml を 250.0 ml に希釈し 1.00 cm セルで透過率を測定したところ、55.0 % であった。
- (1) 染料のモル吸光係数はいくらか。
  - (2) 透過率の測定を原液で行わなかったのは何故か。
- 10-4. 熱運動のエネルギーは  $k_B T$  程度であると考えられる。次の波長  $\lambda$  の光の光子のエネルギーはどの程度の温度に相当するか。
- (1)  $\lambda = 250 \text{ nm}$  の紫外線
  - (2)  $\lambda = 500 \text{ nm}$  の可視光線
  - (3)  $\lambda = 1 \text{ mm}$  の近赤外線
  - (4)  $\lambda = 100 \text{ mm}$  の遠赤外線
  - (5)  $\lambda = 10 \text{ mm}$  のマイクロ波
- 10-5. ハロゲン化水素の基本振動  $\bar{\nu}$  は次の通りである。
- |                            |                           |                            |                            |                            |
|----------------------------|---------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
|                            | $^1\text{H}^{17}\text{F}$ | $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ | $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ | $^1\text{H}^{127}\text{I}$ |
| $\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$ | 4141.3                    | 2988.9                     | 2649.7                     | 2309.5                     |
- (1) 換算質量を求めよ。

- (2) 力の定数を求めよ。  
 (3) 振動が古典的であったときの周期を求めよ。  
 (4) これら分子の振動は、赤外活性か。また、Raman 活性か。  
 (5) 同位体置換で力の定数が変化しないとしたとき、 $^1\text{H}$  を  $^2\text{D}$  で置換したときの基本振動を求めよ。

10-6. ハロゲン分子の力の定数  $k$  は次のとおりである。

	$^{17}\text{F}_2$	$^{35}\text{Cl}_2$	$^{79}\text{Br}_2$
$k/\text{N m}^{-1}$	445	322	240

- (1) 基本振動の波数を求めよ。  
 (2) ゼロ点エネルギーを求めよ。  
 (3) これら分子の振動は、赤外活性か。また、Raman 活性か。
- 10-7. 次の 2 原子分子の基本振動  $\bar{\nu}$  から原子間距離の標準偏差を求め、平衡核間距離  $R$  と比較せよ。

	$^1\text{H}_2$	$^{14}\text{N}_2$	$^{16}\text{O}_2$	$^{32}\text{S}_2$
$\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$	4330	2350	1580	726
$R/\text{nm}$	0.074	0.110	0.121	0.189

10-8. 化学結合した 2 つの原子の間のポテンシャルを近似的に表す関数として Morse 関数がある。

$$(10.37) \quad V(x) = D \left( 1 - e^{-\beta(x-R)} \right)^2$$

ここで  $D, \beta, R$  は定数である。

- (1) 極小の座標、深さを求めよ。  
 (2) 極小付近を調和振動子近似した場合の基本振動の波数  $\bar{\nu}^\circ$  を求めよ。  
 (3) Morse ポテンシャルに対するエネルギー準位を波数単位で表すと次のようになることが知られている。

$$(10.38) \quad G(v) = \left( v + \frac{1}{2} \right) \bar{\nu}^\circ + \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 x_e \bar{\nu}^\circ, \quad x_e = \frac{\bar{\nu}}{4chD}$$

$x_e$  は非調和定数と呼ばれている。 $v$  は振動の量子数である。次の  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  分子の振動バンド中心波数のデータからゼロ点エネルギーと解離エネルギーを見積もれ。

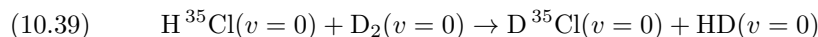
振動量子数	$0 \rightarrow 1$	$0 \rightarrow 2$	$0 \rightarrow 3$	$0 \rightarrow 4$	$0 \rightarrow 5$
バンド中心/ $\text{cm}^{-1}$	2885.98	5667.98	8346.78	10992.81	13396.19

10-9. ベンゼンの基本振動のうち Raman 活性なものが、 $3062 \text{ cm}^{-1}$  と  $992 \text{ cm}^{-1}$  にある。波長  $488.0 \text{ nm}$  の Ar-Kr レーザーを用いた場合、ベンゼンの振動 Raman バンドの中心はどの波長に観測されるか。

10-10. 次の基本振動数のデータが与えられている。

分子	$^1\text{H}^{35}\text{Cl}$	$^2\text{D}^{35}\text{Cl}$	$^1\text{H}^2\text{D}$	$^2\text{D}_2$
基本振動数/ $\text{cm}^{-1}$	2989	2144	3817	2990

次の反応の  $\Delta H^\circ$  を計算せよ。



10-11. Born-Oppenheimer 近似では、2 原子分子の電子エネルギーは核間距離のみに依存する。次の基本振動数のデータが与えられている。このことを用いて  $\text{H}_2$  と  $\text{D}_2$  の振動準位の違いについて説明せよ。

	$^1\text{H}_2$	$^2\text{D}_2$
$\bar{\nu}^\circ/\text{cm}^{-1}$	4330	2990

10-12. 剛体 2 原子分子の純回転スペクトルは等間隔に並んだピークの列になることを示せ。

10-13. 剛体回転のエネルギー準位は回転定数  $\bar{B}$  を用いて表されることが多い。

$$(10.40) \quad \frac{E_J}{ch} = \bar{B}J(J+1)$$

$\bar{B}$  は通常  $\text{cm}^{-1}$  単位で表す。

- (1) 回転定数を物理定数と慣性モーメントで表せ。



(2) 2 原子分子の赤外吸収スペクトルのピーク間隔を  $\bar{B}$  を用いて表せ。

10-14. 次の各分子の回転定数から平衡核間距離を見積もれ。

分子	H <sub>2</sub>	<sup>14</sup> C <sub>2</sub>	<sup>16</sup> O <sub>2</sub>	<sup>35</sup> Cl <sub>2</sub>
$\bar{B}/\text{cm}^{-1}$	60.80	2.010	1.446	0.244
分子	H <sup>35</sup> Cl	H <sup>79</sup> Br	<sup>12</sup> C <sup>16</sup> O	<sup>14</sup> N <sup>16</sup> O
$\bar{B}/\text{cm}^{-1}$	10.591	8.473	1.931	1.705

10-15.  $J$  が大きいときには、回転遷移を起こす電磁波の周波数が、始状態ないしは終状態における分子の古典的周波数に近似的に等しいことを示せ。

10-16. 実際の 2 原子分子の回転エネルギー準位は次のような形の式で近似できる。

$$(10.41) \quad \frac{E_J}{ch} = \bar{B}J(J+1) - \bar{D}J^2(J+1)^2$$

(1) 右辺第 2 項は何に起因する項と考えられるか。

(2) H <sup>35</sup>Cl の純回転スペクトルのピーク位置は次の式で表されることが実験的に知られている。

$$(10.42) \quad \frac{\bar{\nu}}{\text{cm}^{-1}} = 20.794(J+1) - 0.000164(J+1)^3$$

$\bar{D}$  を見積もれ。

10-17. 線形 3 原子分子について。

(1) 重心は、3 つの原子の質量と 2 つの平衡核間距離とを用いてどのように表されるか。

(2) 分子軸に垂直で重心を通る軸の周りの慣性モーメントはどうなるか。

(3) CO<sub>2</sub> の C=O 結合距離 (0.116 nm) から回転スペクトル間隔を見積もれ。

10-18. 2 原子分子気体の近赤外吸収スペクトルに於ける P 枝, Q 枝, R 枝について解説せよ。

10-19. 2 原子分子気体の Raman 散乱スペクトルに於ける O 枝, Q 枝, S 枝について解説せよ。

10-20. <sup>12</sup>C <sup>14</sup>N の平衡核間距離は 0.117 nm, 力の定数は 1630 N m<sup>-1</sup> である。どのような振動回転スペクトルを与えるか。赤外吸収, Raman 散乱の両方についてのべよ。

10-21. <sup>1</sup>H <sup>35</sup>Cl の平衡核間距離は 0.1287 nm, 基本振動数は 2990.95 cm<sup>-1</sup> である。

(1) 回転振動スペクトルの形状を予測せよ。

(2) 力の定数が変化しないとして, <sup>1</sup>H <sup>37</sup>Cl, <sup>2</sup>D <sup>35</sup>Cl, <sup>2</sup>D <sup>37</sup>Cl の回転振動スペクトルの形状を予測せよ。