



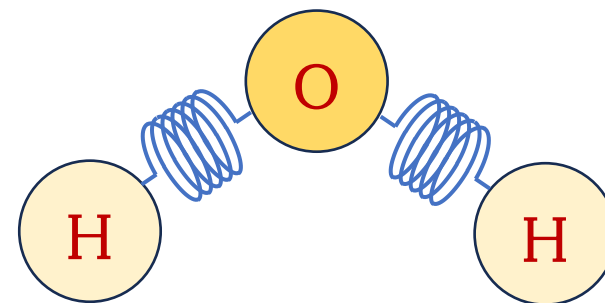
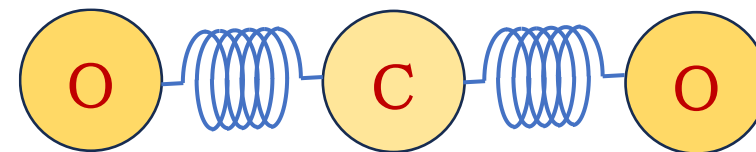
2.4. 分子の振動運動

二酸化炭素分子は、酸素原子Oと炭素原子Cとから構成される。

水分子は、酸素原子Oと水素原子Hとから構成される。

ここでは、原子間の化学結合をバネ、原子を剛体球であると仮定する。

分子には結合距離の伸縮、結合角の変角などの振動運動モードがある。





元素の周期表と電気陰性度

IA	IIA	IIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII				IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII
1 H 2.2																		2 He
3 Li 0.98	4 Be 1.57											5 B 2.04	6 C 2.55	7 N 3.04	8 O 3.44	9 F 3.98	10 Ne	
11 Na 0.93	12 Mg 1.31											13 Al 1.61	14 Si 1.9	15 P 2.19	16 S 2.58	17 Cl 3.16	18 Ar	
19 K 0.82	20 Ca 1	21 Sc 1.36	22 Ti 1.54	23 V 1.63	24 Cr 1.66	25 Mn 1.55	26 Fe 1.83	27 Co 1.88	28 Ni 1.91	29 Cu 1.9	30 Zn 1.65	31 Ga 1.81	32 Ge 2.01	33 As 2.18	34 Se 2.55	35 Br 2.96	36 Kr 3	

Periodic table of electronegativity by Pauling scale,
<https://en.wikipedia.org/wiki/Electronegativity>

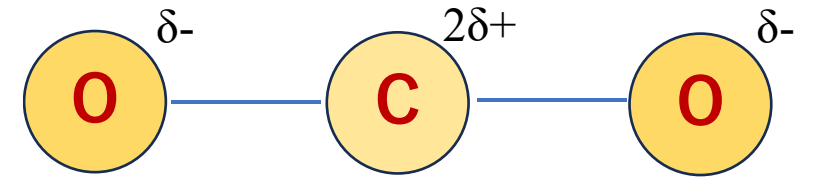
酸素原子Oは炭素原子Cよりも電気陰性度が高い。

酸素原子Oは水素原子Hよりも電気陰性度が高い。

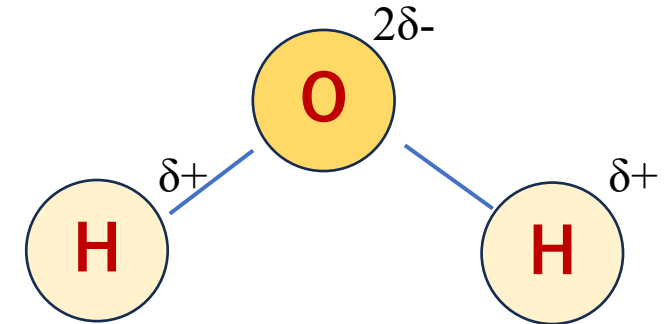


電気陰性度の差によって分子内の電子密度が偏り、
電子密度の高い部分 δ^- と低い部分 δ^+ とが生じる。

二酸化炭素分子では、酸素原子Oでは δ^- 、
炭素原子Cでは $2\delta^+$ に分子内の電子密度が偏る。



水分子では、酸素原子Oでは $2\delta^-$ 、
水素原子Hでは δ^+ に分子内の電子密度が偏る。



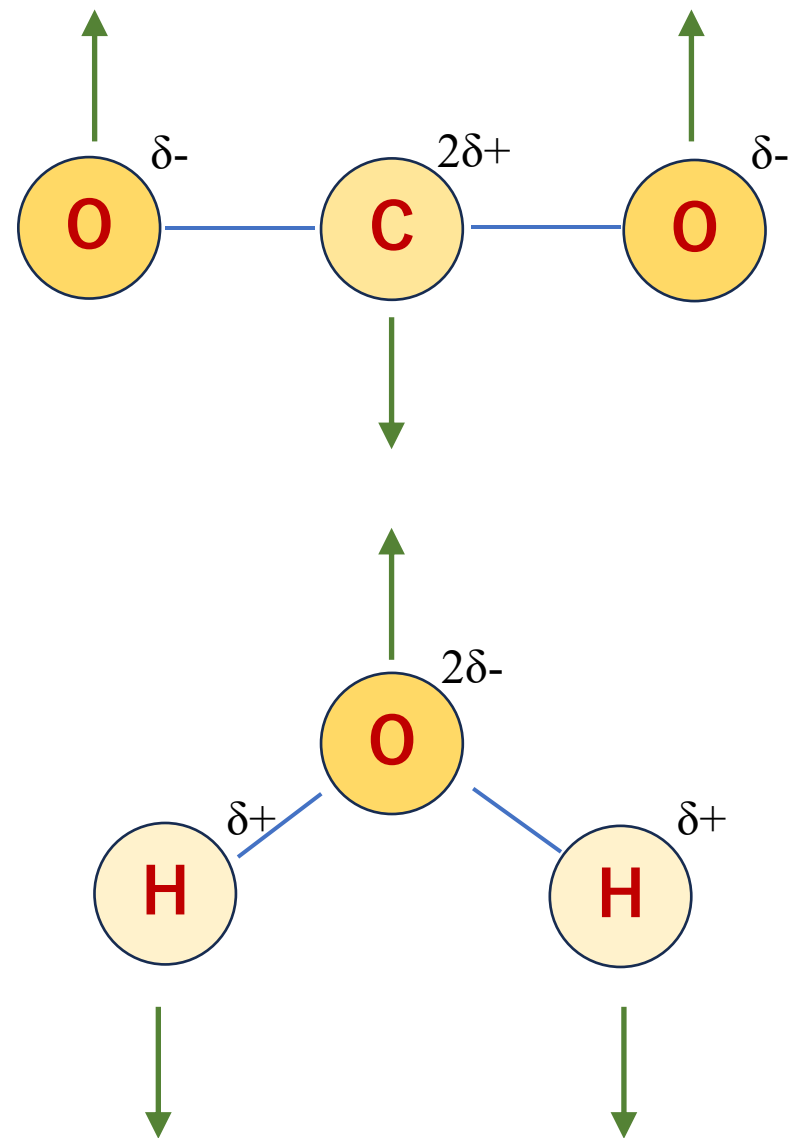
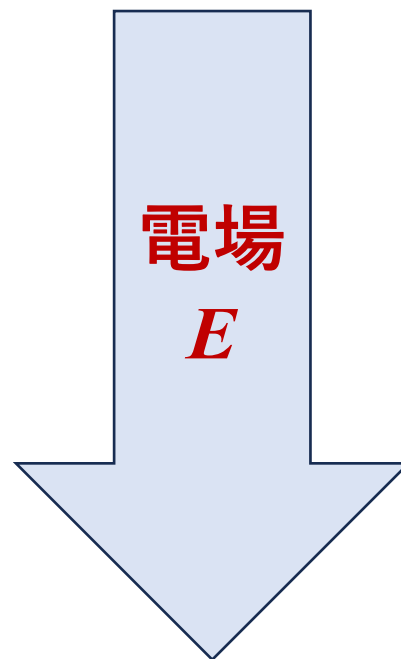
窒素分子や酸素分子などの等核2原子分子では、
分子内に電子密度が偏りが生じない。





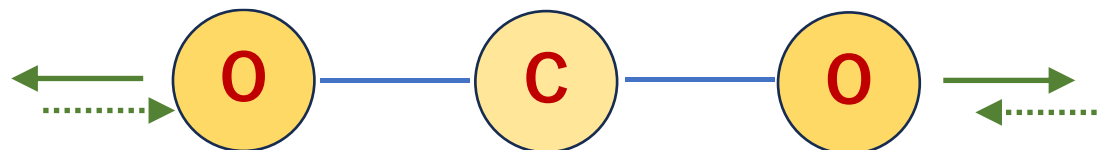
電場 E によって、
分子内で電子密度の
高い部分 δ^+ と低い部分 δ^-
に対して外力が生じる。

窒素分子や酸素分子などの
等核2原子分子に対しては、
外力が生じない。

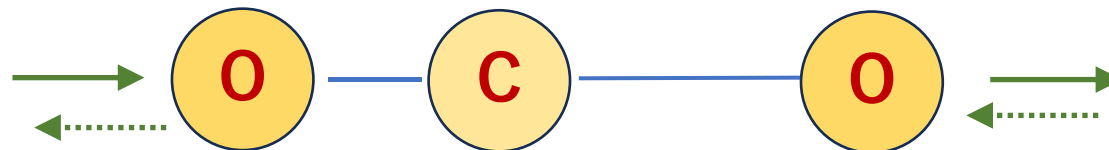


YU • 二酸化炭素, CO_2 , には、以下に示すような3つの振動モードがある。

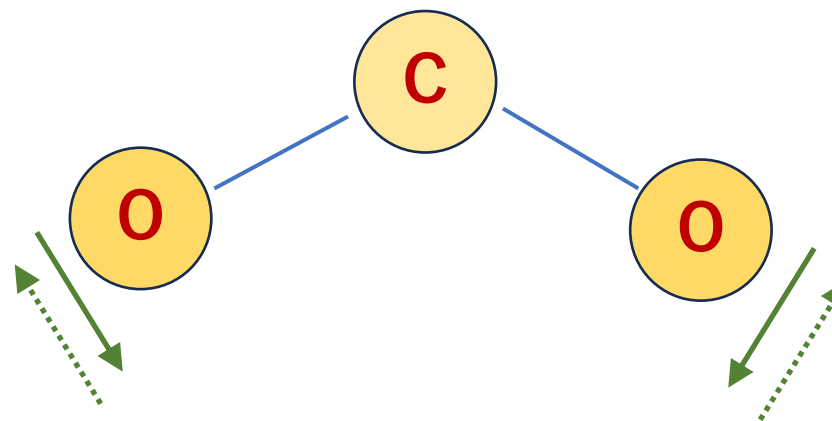
全対称伸縮振動, ν_1



逆対称伸縮振動, ν_2

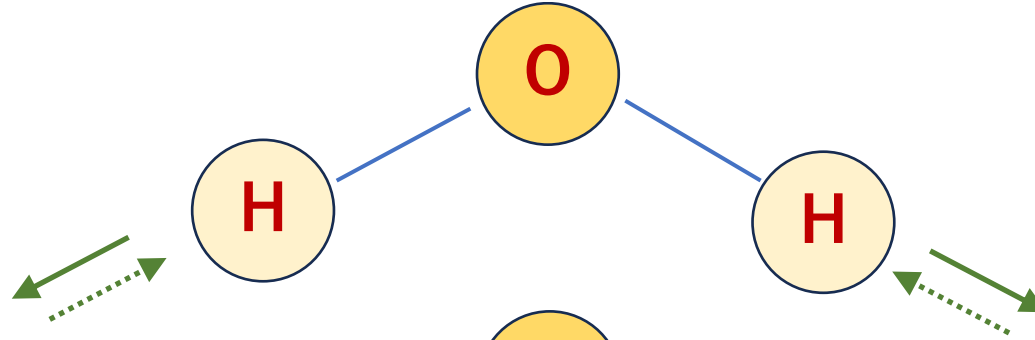


変角振動, ν_3

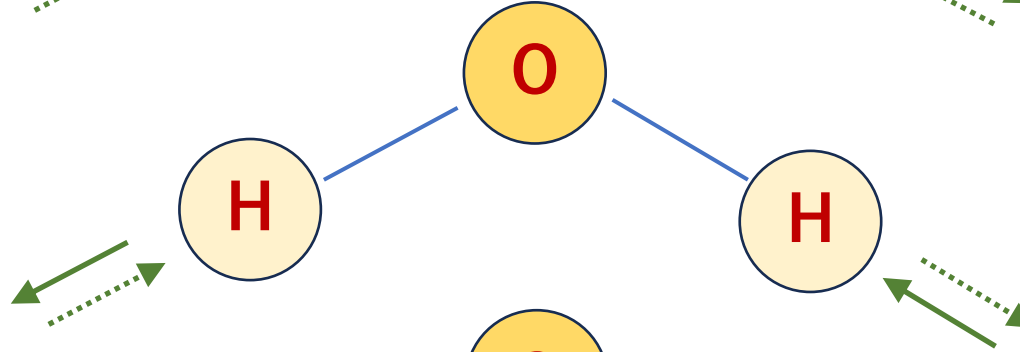


 水分子, H_2O , には、以下に示すような3つの振動モードがある。

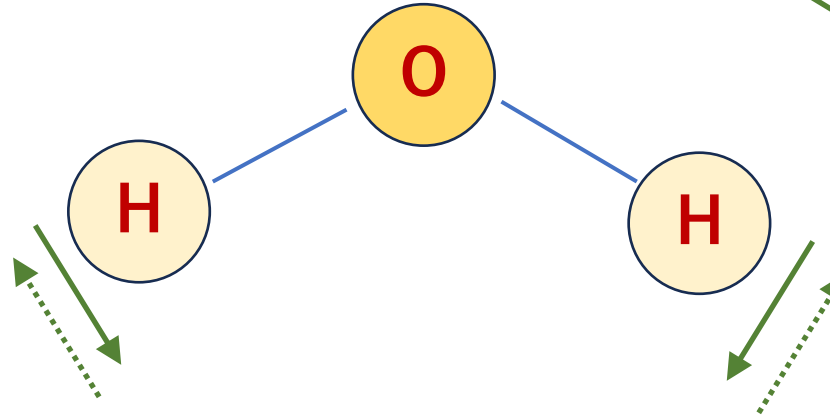
全対称伸縮振動, ν_1



逆対称伸縮振動, ν_2



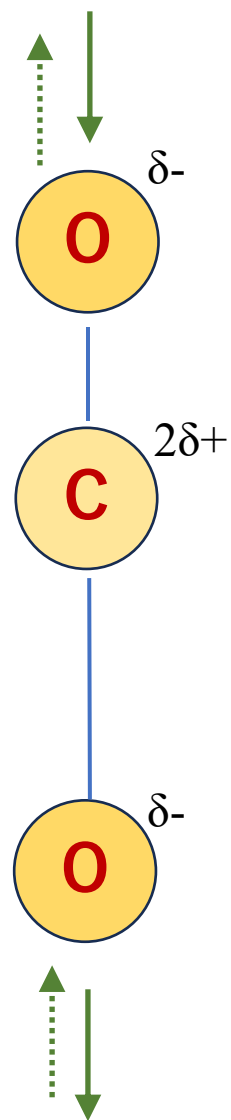
変角振動, ν_3



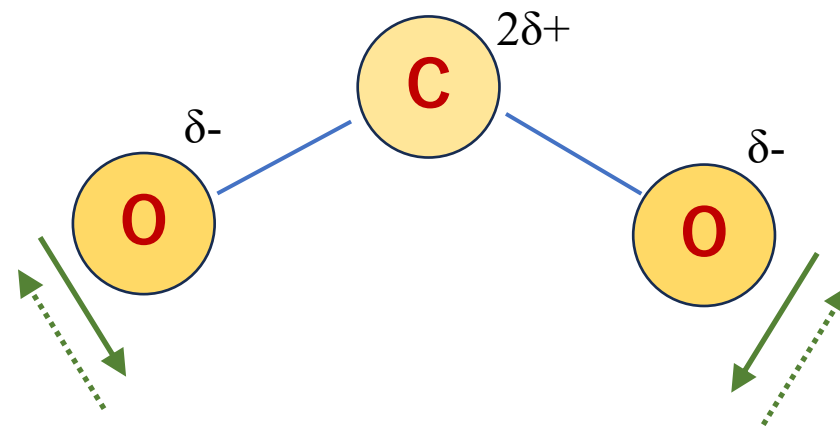


2.3. 赤外線による分子の振動運動の励起

赤外線電磁波



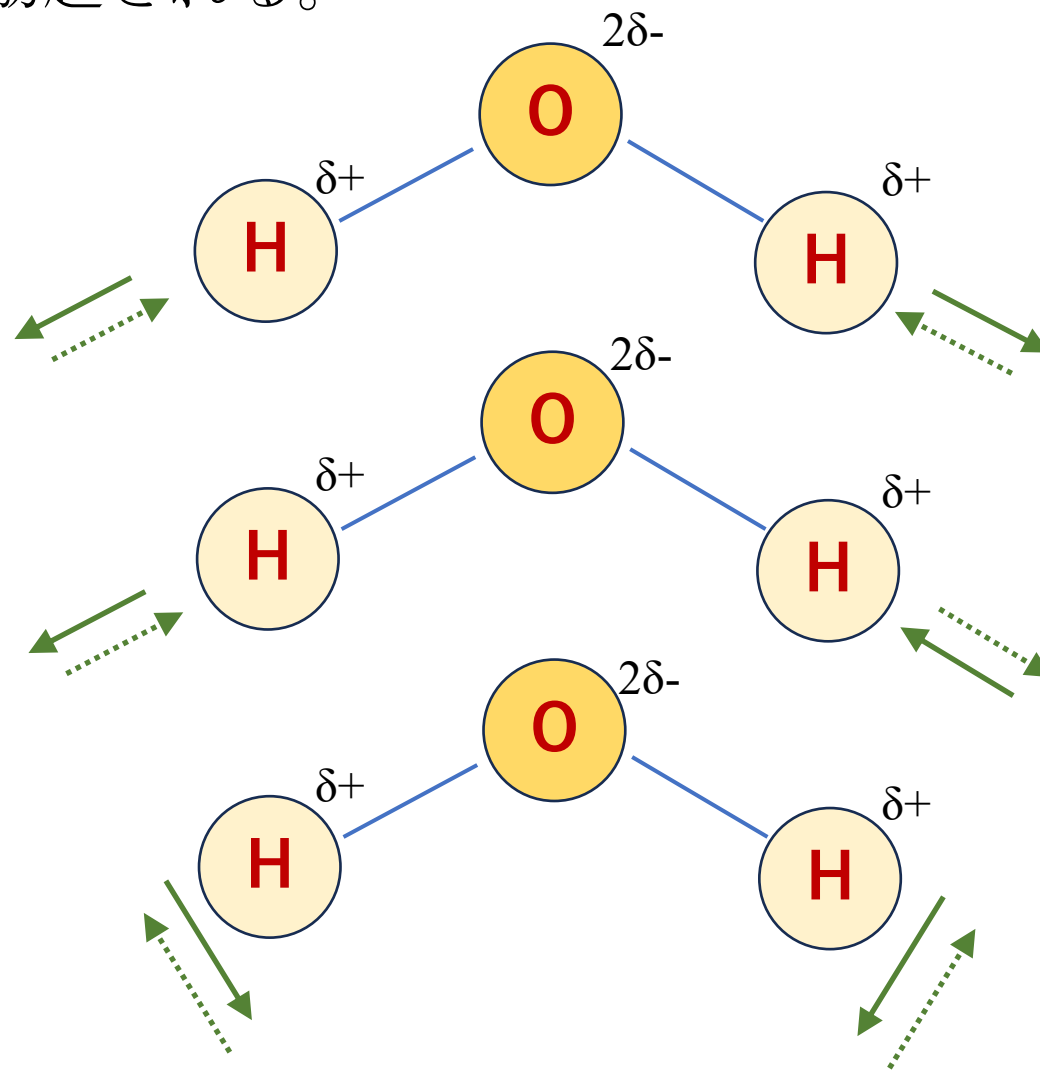
二酸化炭素では、分子内の電子密度が偏っているために、赤外線の電磁波を吸収し、振動運動が励起される。





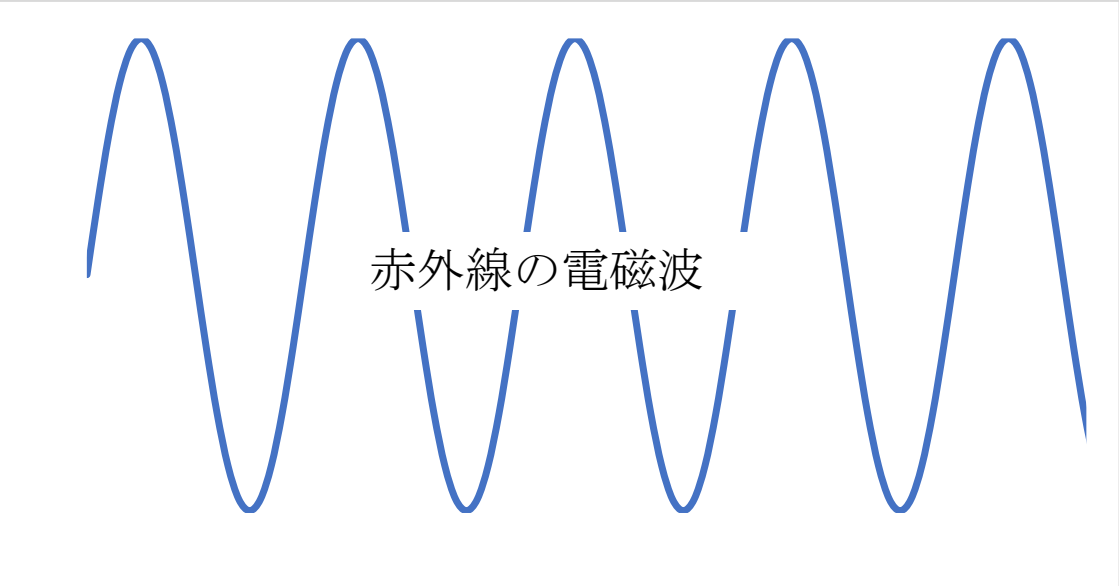
水分子では、分子内の電子密度が偏っているために、赤外線電磁波を吸収し、振動運動が励起される。

赤外線電磁波

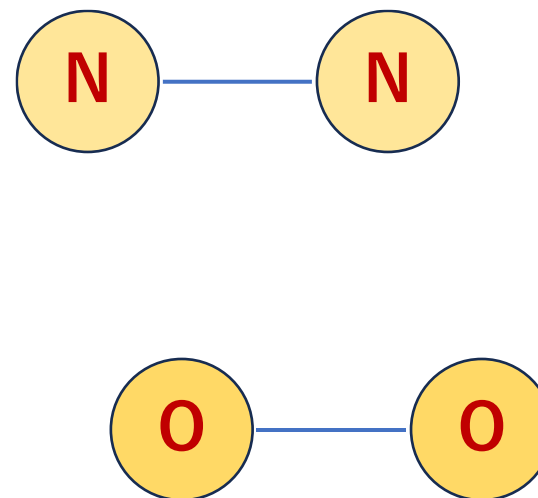




窒素分子や酸素分子などの等核2原子分子では、
分子内の電子密度の偏りが無いために、
赤外線電磁波を吸収しない。



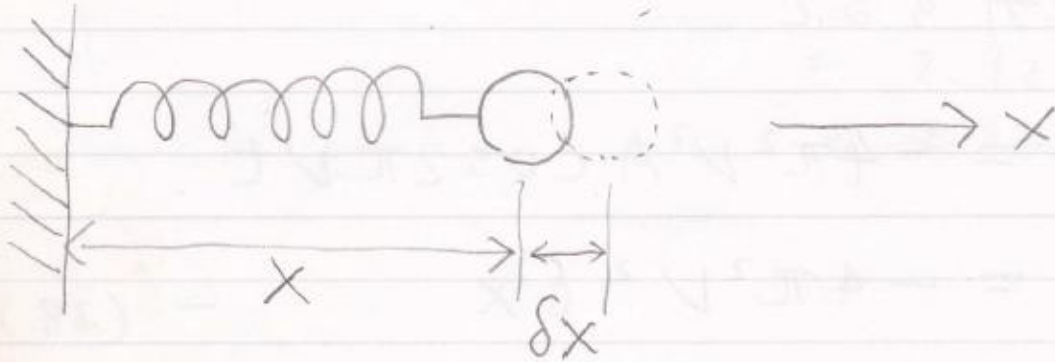
赤外線電磁波

A diagram showing a blue sinusoidal wave representing an infrared electromagnetic wave. The wave oscillates horizontally across the frame. The text '赤外線電磁波' is centered over the middle of the wave.

2.4 分子振動力 — 古典力学

2.4.1 単一粒子の振動

X-H 結合 ($X = C, N, O$ など)



このモデルでは 粒子 (H原子) が はね (結合) によって かべ (分子の残りの部分) に結び付けられている。

はねの後限力 F は 平衡点からのずれ δx に比例する。 (フックの法則!)

$$F = -k \delta x$$

(k ははね定数)

— (34)

力が質量 m の物体に作用すると
加速度 $\left(\frac{d^2(\delta x)}{dt^2}\right)$ がその物体に生じる。
(ニュートンの第2法則)

$$F = m \left(\frac{d^2(\delta x)}{dt^2} \right) \quad - (35)$$

³⁴
(1)、³⁵
(2) 式より

$$-k \delta x = m \left(\frac{d^2(\delta x)}{dt^2} \right) \quad - (36)$$

平衡点からのずれの時間変化は

$$\delta x = A \cos 2\pi \nu t \quad - (37)$$

で表わされるとする。(ν は振動数)
これを2回微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d^2(\delta x)}{dt^2} &= -4\pi^2 \nu^2 A \cos 2\pi \nu t \\ &= -4\pi^2 \nu^2 \delta x \end{aligned} \quad - (38)$$

となる。

(36)、(38) 式より

$$\frac{k}{m} \delta x = 4\pi^2 \nu^2 \delta x$$

これより、

$$\nu = \left(\frac{1}{2\pi} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{--- (39)}$$

となる。

問題 分子中の C-H 系結合では

$$k = 5.00 \times 10^2 \text{ (kg s}^{-2}\text{)}$$

$$m_H = 1.66 \times 10^{-27} \text{ (kg)}$$

このとき $\nu \text{ (s}^{-1}\text{)}$ はいくらになるか

$$V = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{5.00 \times 10^{-2} \text{ (kg s}^{-2}\text{)}}{1.66 \times 10^{-27} \text{ (kg)}}}$$

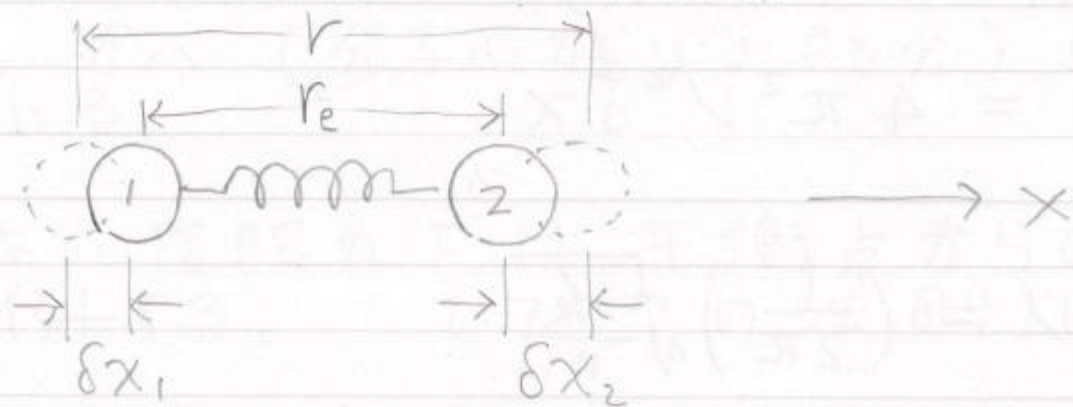
$$= \frac{1}{2\pi} \sqrt{3.01 \times 10^{29} \text{ (s}^{-1}\text{)}}$$

$$= 0.159 \times 5.49 \times 10^{14} \text{ (s}^{-1}\text{)}$$

$$= 8.77 \times 10^{13} \text{ (s}^{-1}\text{)}$$

$$\left(\begin{aligned} \lambda = \frac{c}{\nu} \text{ or } \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} &= \frac{8.77 \times 10^{13} \text{ (s}^{-1}\text{)}}{3 \times 10^8 \text{ (m s}^{-1}\text{)}} \\ &= 2.92 \times 10^5 \text{ (m}^{-1}\text{)} \\ &= 2.92 \times 10^3 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \end{aligned} \right)$$

2.4.2 二原子分子の振動



2個の原子 1, 2 と それをつなぐ
バネ という モデル を考える。

$$\text{結合の伸び} = r - r_e = \delta x_2 - \delta x_1 = q \quad (40)$$

フックの法則

$$F = -k(\delta x_2 - \delta x_1) = -k(r - r_e) = -kq \quad (41)$$

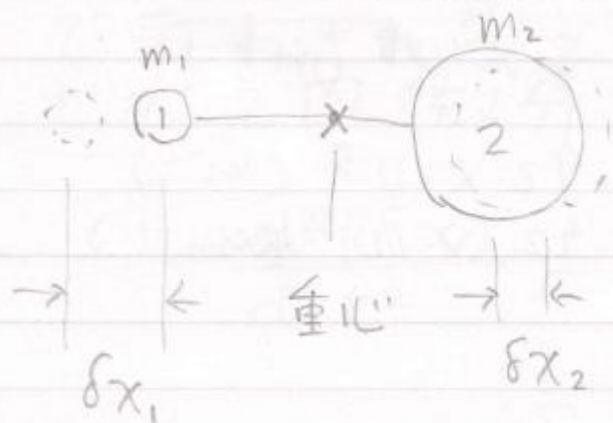
q を 振動座標 という。

ニュートンの第2法則

$$F = m_1 \left(\frac{d^2(\delta x_1)}{dt^2} \right) \quad (\text{原子1について}) \quad - (42)$$

$$F = m_2 \left(\frac{d^2(\delta x_2)}{dt^2} \right) \quad (\text{原子2について}) \quad - (43)$$

この原理



$$-\delta x_1 = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) (r - r_e) \quad - (44)$$

$$\delta x_2 = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right) (r - r_e) \quad - (45)$$

(18), (19), (21) より

$$F = -k(r - r_e) = m_1 \left(\frac{d^2(x_1)}{dt^2} \right) \\ = -m_1 \cdot \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) \left(\frac{d^2(r - r_e)}{dt^2} \right) \quad - (46)$$

$\Rightarrow r$

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \mu \quad \text{を換算質量}$$

(双原子分子でないとはいえない)

(46) は $\frac{d^2 q}{dt^2} = -\frac{k}{\mu} q \quad - (47)$

q は時間 t とともに周期的に変化するので

$$q = A \cos 2\pi \nu t \quad \text{---(48)}$$

(48) を (47) に代入すると

$$-(2\pi\nu)^2 q = -\frac{h}{\mu} q$$

$$\therefore \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{\mu}} \quad \text{--- (49)}$$

(49) は m を μ に置きかえた以外は (39) と同じ

2.4.3 3原子分子の振動

2原子分子では 振動モード は ただ1個。

多原子分子では 振動モード は $3N-6$ 個 になる。
(N は 構成原子数)

(※ 直線分子では $3N-5$ 個)

なぜなら、

全自由度は $3N$ 個

(N 個の 構成原子が x, y, z の
3方向に うごく)

そのうち、

分子全体の 並進の 自由度が 3個。

“ 回転 3個。

CO₂ 型分子の基準振動

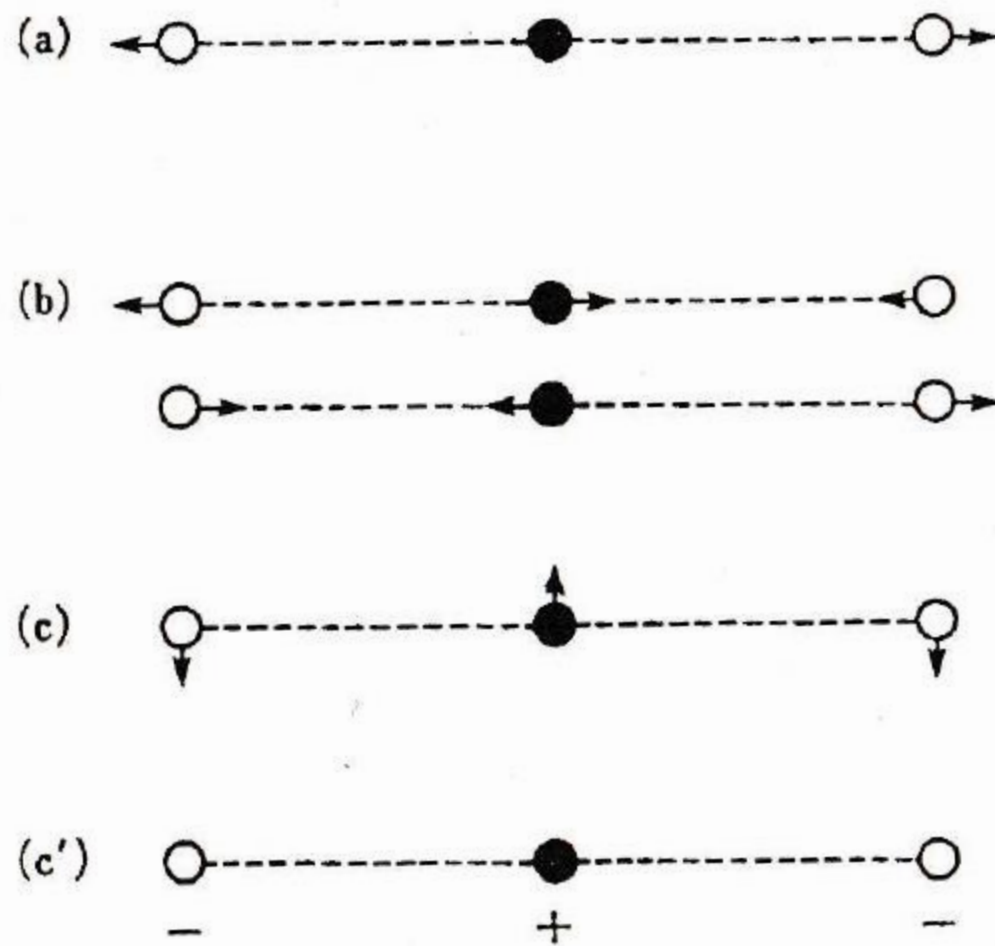


図 3.1 CO₂ 型分子模型の 4 個の基準振動.

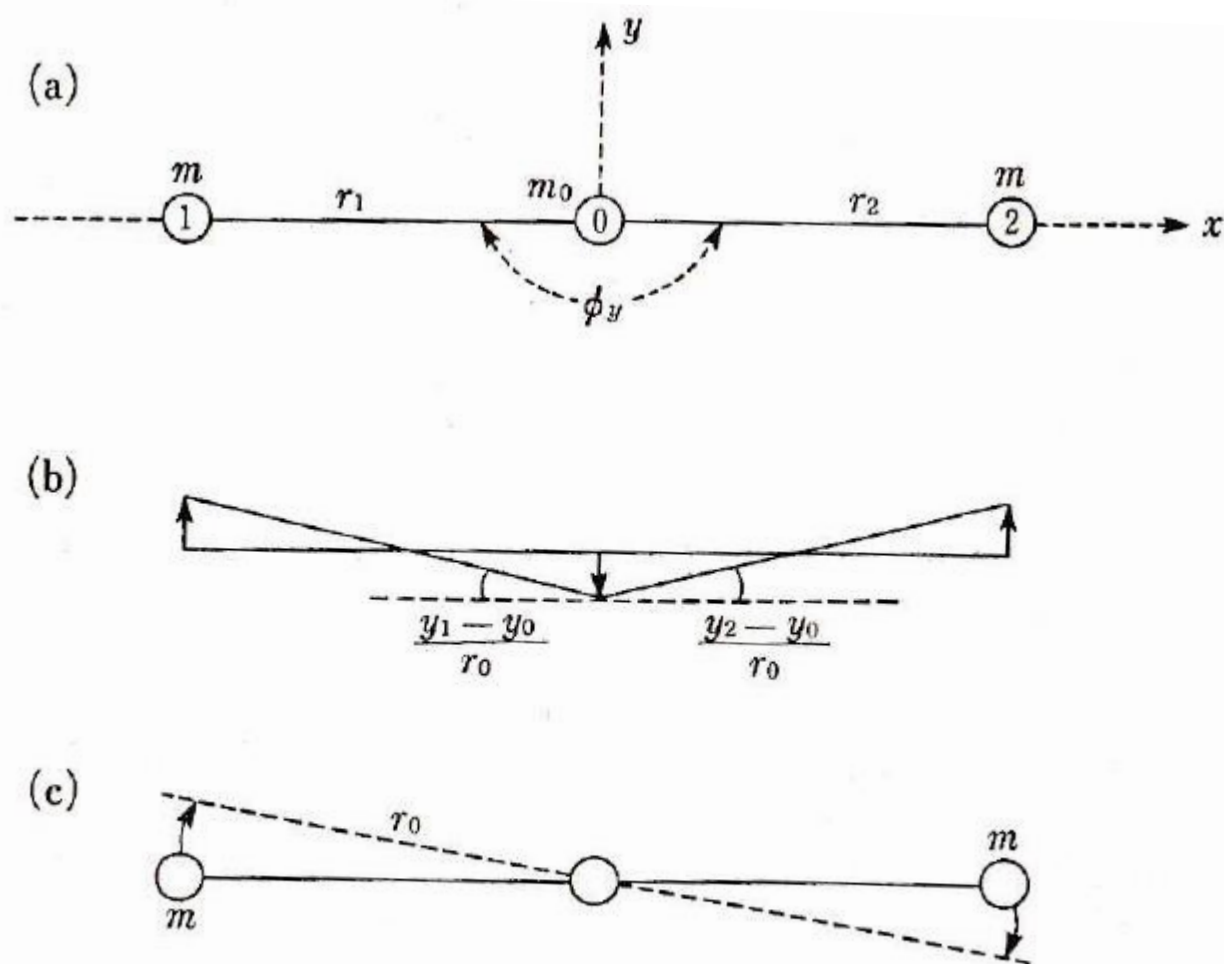


図 3.3 CO₂ 型 3 原子分子の分子内座標，直交座標，変角の動き，回転の動き.

CO₂ 型直線 3 原子分子(図3.3)について, 基準座標と振動数の計算法を簡単に述べよう. 運動エネルギー T と位置エネルギー V は次式のように表わされる.

$$T = \frac{1}{2} m_0 \dot{x}_0^2 + \frac{1}{2} m_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 + \frac{1}{2} m_0 \dot{y}_0^2 + \cdots + \frac{1}{2} m_2 \dot{z}_2^2 \quad (3.1)$$

$$V = \frac{1}{2} K (\Delta r_1)^2 + \frac{1}{2} K (\Delta r_2)^2 + k (\Delta r_1) (\Delta r_2) + \frac{1}{2} H (r_0 \Delta \phi_y)^2 + \frac{1}{2} H (r_0 \Delta \phi_z)^2 \quad (3.2)$$

$\Delta r, \Delta \phi (r_0 \Delta \phi)$ のように, 結合の伸縮や原子価角の変化などを分子内座標とい

う. 位置エネルギーは, 分子内座標の 2 次形式で表わすと物理的意味がわかりやすい. 式(3.2)において K は結合伸縮に対する力の定数, H は原子価角 ϕ の変化に対して元に戻そうとする力の定数, k は 2 つの結合の間の相互作用を表わす力の定数である. 分子内座標と直交座標の間に, この場合, 次のような関

わす力の定数である．分子内座標と直交座標の間に，この場合，次のような関係が成り立つ（図 3.3 参照）．

$$\Delta r_1 = x_0 - x_1 \quad (3.3)$$

$$\Delta r_2 = x_2 - x_0 \quad (3.4)$$

$$r_0 \Delta \phi_y = y_1 + y_2 - 2 y_0 \quad (3.5)$$

$$r_0 \Delta \phi_z = z_1 + z_2 - 2 z_0 \quad (3.6)$$

次に行なうべきことは，この関係を用いて，式(3.1)の運動エネルギー T の中から分子全体の並進運動と回転運動の部分を除いて振動のエネルギーだけを取り出すことである．これは次のように計算される． $m_1 = m_2 = m$ とする．

$$T = \left. \begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{(m_0 \dot{x}_0 + m \dot{x}_1 + m \dot{x}_2)^2}{m_0 + 2 m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\dot{x}_2 - \dot{x}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{2 \dot{x}_0 - \dot{x}_1 - \dot{x}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ & + \frac{1}{2} \frac{(m_0 \dot{y}_0 + m \dot{y}_1 + m \dot{y}_2)^2}{m_0 + 2 m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\dot{y}_2 - \dot{y}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{2 \dot{y}_0 - \dot{y}_1 - \dot{y}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ & + \frac{1}{2} \frac{(m_0 \dot{z}_0 + m \dot{z}_1 + m \dot{z}_2)^2}{m_0 + 2 m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\dot{z}_2 - \dot{z}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{2 \dot{z}_0 - \dot{z}_1 - \dot{z}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

(3.1) ボー-項

$$T(x) = \frac{1}{2} m_0 \dot{x}_0^2 + \frac{1}{2} m \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m \dot{x}_2^2 \quad \text{とす}$$

並進、回転の部分を取り除いて

振動のエネルギーだけをとり出す

(3.7) ボー-項の導出

$$\begin{aligned} \bullet T_x(x) &= \frac{1}{2} \frac{1}{m_0 + 2m} (m_0 \dot{x}_0 + m \dot{x}_1 + m \dot{x}_2)^2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{m_0 + 2m} (m_0^2 \dot{x}_0^2 + m^2 \dot{x}_1^2 + m^2 \dot{x}_2^2 \\ &\quad + 2m_0 m \dot{x}_0 \dot{x}_1 + 2m_0 m \dot{x}_0 \dot{x}_2 + 2m^2 \dot{x}_1 \dot{x}_2) \end{aligned}$$

$$\bullet \frac{m}{2} \left(\frac{\dot{x}_2 - \dot{x}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{m}{4} (\dot{x}_2^2 + \dot{x}_1^2 - 2\dot{x}_1 \dot{x}_2)$$

$$\bullet \frac{m}{2} \left(\frac{2\dot{x}_0 - \dot{x}_1 - \dot{x}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{m_0 m}{2m + m_0} \left(\frac{4\dot{x}_0^2 + \dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 - 4\dot{x}_0 \dot{x}_1 - 4\dot{x}_0 \dot{x}_2 + 2\dot{x}_1 \dot{x}_2}{2} \right) \cdot \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{m} = \frac{2}{m_0} + \frac{1}{m} = \frac{2m + m_0}{m_0 m}$$

$$T(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{m_0 + 2m} \left\{ \left[m_0^2 \dot{x}_0^2 + m^2 (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) + 2m_0 m (\dot{x}_0 \dot{x}_1 + \dot{x}_0 \dot{x}_2) + 2m^2 \dot{x}_1 \dot{x}_2 \right] \right.$$

$$\left. + \left[(m m_0 + 2m^2) \left(\frac{\dot{x}_2^2}{2} + \frac{\dot{x}_1^2}{2} - \dot{x}_1 x_2 \right) \right] \right.$$

$$\left. + m_0 m \cdot \left[2\dot{x}_0^2 + \frac{\dot{x}_1^2}{2} + \frac{\dot{x}_2^2}{2} - 2\dot{x}_0 \dot{x}_1 - 2\dot{x}_0 \dot{x}_2 + x_1 x_2 \right] \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{m_0 + 2m} \left\{ \dot{x}_0^2 (m_0^2 + 2m_0 m) + (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) \left(m^2 + \frac{m m_0 + 2m^2}{2} + \frac{m_0 m}{2} \right) + \dot{x}_0 (\dot{x}_1 + \dot{x}_2) (2m_0 m - 2m_0 m) \right.$$

$$\left. + \dot{x}_1 \dot{x}_2 (2m^2 - (m m_0 + 2m^2) + m_0 m) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{m_0 + 2m} \left\{ \dot{x}_0^2 (m_0 + 2m) m_0 + (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) (2m^2 + m_0 m) \right\}$$

$$= T_x(x) \quad - (3.7) \text{ の } - \text{項}$$

ここで、式(3.3)～(3.6)の関係式を用いて書き換える.

$$\left. \begin{aligned} T = & T_x + \frac{m}{2} \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 + \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 - \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ & + T_y + R_z + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{r_0 \Delta \dot{\phi}_y}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ & + T_z + R_y + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{r_0 \Delta \dot{\phi}_z}{\sqrt{2}} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{2}{m_0} + \frac{1}{m} \quad (3.9)$$

ここで、 T_x , T_y , T_z が x , y , z 方向の並進運動, R_y , R_z が y 軸, z 軸のまわりの回転運動の運動エネルギーである. したがって, これらを除いて振動のエネルギーのみを考えると,

$$\begin{aligned} T_v = & \frac{1}{2} m \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 + \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 - \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ & + \frac{1}{2} \frac{\mu}{m} [(r_0 \Delta \dot{\phi}_y)^2 + (r_0 \Delta \dot{\phi}_z)^2] \end{aligned} \quad (3.10)$$

(3.8) 求一项 导出

$$\begin{aligned} T(x) &= \frac{1}{2} \frac{(m_0 \dot{x}_0 + m \dot{x}_1 + m \dot{x}_2)^2}{m_0 + 2m} + \frac{m}{2} \left(\frac{\dot{x}_2 - \dot{x}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{m}{2} \left(\frac{2\dot{x}_0 - \dot{x}_1 - \dot{x}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ &\quad \downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ &= T_x + \frac{m}{2} \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 + \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{m}{2} \left(\frac{\Delta \dot{r}_1 - \Delta \dot{r}_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ &\quad \text{並進} \qquad \qquad \qquad \text{對稱} \qquad \qquad \qquad \text{逆對稱} \end{aligned}$$

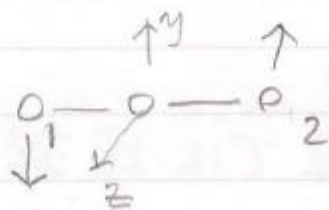
(3.8) 求2項導出

$$T(y) = \frac{1}{2} \frac{(m_0 \dot{y}_0 + m \dot{y}_1 + m \dot{y}_2)^2}{m_0 + 2m} + \frac{m}{2} \left(\frac{\dot{y}_2 - \dot{y}_1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{m}{2} \left(\frac{2\dot{y}_0 - \dot{y}_1 - \dot{y}_2}{\sqrt{2}} \right)^2$$

$$= \underset{\downarrow}{T_y} + \underset{\downarrow}{R_z} + \frac{m}{2} \left(\frac{V_0 \Delta \phi_0}{\sqrt{2}} \right)^2$$

並進

z軸まわりの回転



となり，式(3.2)の位置エネルギーを書き換えると，

$$V = \frac{1}{2} (K+k) \left(\frac{\Delta r_1 + \Delta r_2}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2} (K-k) \left(\frac{\Delta r_1 - \Delta r_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ + \frac{1}{2} H [(r_0 \Delta \phi_y)^2 + (r_0 \Delta \phi_z)^2] \quad (3.11)$$

となる．上の両式は

$$T_v = \frac{1}{2} (b_{11} \dot{S}_1^2 + b_{22} \dot{S}_2^2 + b_{33} \dot{S}_{3y}^2 + b_{33} \dot{S}_{3z}^2) \quad (3.10')$$

$$V = \frac{1}{2} (a_{11} S_1^2 + a_{22} S_2^2 + a_{33} S_{3y}^2 + a_{33} S_{3z}^2) \quad (3.11')$$

のように $S_i S_j (i \neq j)$ のような交叉項のない独立な項の和で表わされているので，各項別々に Lagrange の運動方程式を解いて，

(3.11) 式 1, 2 项 导出

$$\begin{aligned} V_{st} &= \frac{1}{2}(K+k) \left(\frac{\Delta r_1 + \Delta r_2}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{2}(K-k) \left(\frac{\Delta r_1 - \Delta r_2}{\sqrt{2}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{4} \left\{ (K+k)(\Delta r_1^2 + \Delta r_2^2 + 2\Delta r_1 \Delta r_2) \right. \\ &\quad \left. + (K-k)(\Delta r_1^2 + \Delta r_2^2 - 2\Delta r_1 \Delta r_2) \right\} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4} \left\{ 2K(\Delta r_1^2 + \Delta r_2^2) + 4k\Delta r_1 \Delta r_2 \right\}$$

$$= \frac{1}{2} K(\Delta r_1^2 + \Delta r_2^2) + k\Delta r_1 \Delta r_2$$

—— (3.2) 式 1~3 项

Lagrange の 方程式

$$L = T - V$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\Delta r}} \right] - \frac{\partial L}{\partial \Delta r} = 0$$

(3.11) は 交差項 $\Delta r_i \Delta r_j$ がない

$$\left\{ \begin{array}{l} S_1 = \frac{\Delta r_1 + \Delta r_2}{\sqrt{2}}, \quad S_2 = \frac{\Delta r_1 - \Delta r_2}{\sqrt{2}} \quad \text{とする} \\ S_{3y} = r_0 \Delta \phi_y, \quad S_{3z} = r_0 \Delta \phi_z \end{array} \right.$$

$\Delta r = s_1, s_2, s_3, s_2$ とした方程式を解く

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{s}_1} \right] &= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial T}{\partial \dot{s}_1} \right] = \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{s}_1} \left(\frac{1}{2} m \dot{s}_1^2 \right) \right] \\ &= \frac{d}{dt} [m \dot{s}_1] = m \ddot{s}_1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial s_1} &= -\frac{\partial V}{\partial s_1} = \frac{\partial}{\partial s_1} \left(-\frac{1}{2} (k+k) s_1^2 \right) \\ &= -(k+k) s_1\end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{s}_1} \right] - \frac{\partial L}{\partial s_1} = m \ddot{s}_1 + (k+k) s_1 = 0$$

この微分方程式の解は

$$s_1 = s_{1, \max} \cos(2\pi \nu_1 t + \phi)$$

$$\nu_1 = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k+k}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad - (3.12)$$

同様にして

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{S}_2} \right] - \frac{\partial L}{\partial S_2} = \mu \ddot{S}_2 + (K - h) S_2 = 0$$

この微分方程式の解は

$$S_2 = S_{2\max} \cos(2\pi V_2 t + \phi)$$

$$V_2 = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K - h}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \quad - (3.13)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{S}_{3y}} \right] - \frac{\partial L}{\partial S_{3y}} = \frac{\mu}{2} \ddot{S}_{3y} + H S_{3y} = 0$$

$$S_{3y} = S_{3y\max} \cos(2\pi V_3 t + \phi)$$

$$V_3 = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2H}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \quad - (3.14)$$

$$V_1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k+k}{m}} \quad \dots \quad \text{全对称伸缩振动}$$



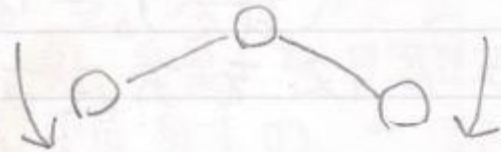
$$V_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k-k}{\mu}} \quad \dots \quad \text{逆对称伸缩振动}$$

$$\mu = \frac{m m_0}{2m + m_0}$$

... 换算质量



$$V_3 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2H}{\mu}} \quad \dots \quad \text{变角振动}$$



	$\tilde{\nu}_1$	$\tilde{\nu}_2$	$\tilde{\nu}_3$	(cm^{-1})
CO_2	1337	2349	667	
CS_2	656	1523	397	

この値から バネ定数 k を計算してみなさい
(k , μ , H)

ただし、

C 原子の質量	$1.99 \times 10^{-26} (\text{kg})$
O "	$2.66 \times 10^{-26} (\text{kg})$
S "	$5.31 \times 10^{-26} (\text{kg})$

解

$$V_1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K+h}{m}} \quad V_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K-h}{\mu}} \quad \text{より} \quad \begin{cases} K+h = 4\pi^2 m V_1^2 \\ K-h = 4\pi^2 \mu V_2^2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} K = 2\pi^2 (m V_1^2 + \mu V_2^2) & \text{--- ①} \end{cases}$$

$$\begin{cases} h = 2\pi^2 (m V_1^2 - \mu V_2^2) & \text{--- ②} \end{cases}$$

$$V_3 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2H}{\mu}} \quad \text{より}$$

$$H = 2\pi^2 \mu V_3^2 \quad \text{--- ③}$$

振動数 ν (s^{-1}) は

$$\nu (s^{-1}) = \frac{c (m s^{-1})}{\lambda (m)} = 3.00 \times 10^8 (m s^{-1}) \cdot \tilde{\nu} (cm^{-1}) \times 10^2 \left(\frac{cm}{m} \right) \quad \left(\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} \right) \text{波数}$$

$$\begin{cases} \nu_1 = 3.00 \times 10^8 \cdot 1337 \times 10^2 = 4.01 \times 10^{13} (s^{-1}) \\ \nu_2 = 7.05 \times 10^{13} (s^{-1}) \\ \nu_3 = 2.00 \times 10^{13} (s^{-1}) \end{cases}$$

$$m v_1^2 = 2.66 \times 10^{-26} (\text{kg}) \cdot (4.01 \times 10^{13})^2 (\text{s}^{-2})$$

$$= 42.6 (\text{kg s}^{-2})$$

$$\mu = \frac{m m_0}{2m + m_0} = \frac{1.99 \cdot 2.66}{2 \cdot 2.66 + 1.99} \times 10^{-26} = 0.724 \times 10^{-26} (\text{kg})$$

$$\mu v_2^2 = 35.9 (\text{kg s}^{-2})$$

$$\textcircled{1} \wedge \text{代} \lambda L z \quad 2\pi^2 = 19.7$$

$$\left\{ \begin{array}{l} K = 19.7 \cdot (42.6 + 35.9) = 1.55 \times 10^3 (\text{kg s}^{-2}) \end{array} \right.$$

$$\textcircled{2} \wedge \text{代} \lambda L z$$

$$K = 19.7 (42.6 - 35.9) = 1.32 \times 10^2 (\text{kg s}^{-2})$$

$$\textcircled{3} \wedge \text{代} \lambda L z$$

$$H = 19.7 \cdot 0.724 \times 10^{-26} \cdot (2.00 \times 10^{13})^2 = 5.71 \times 10^1 (\text{kg s}^{-2}) //$$