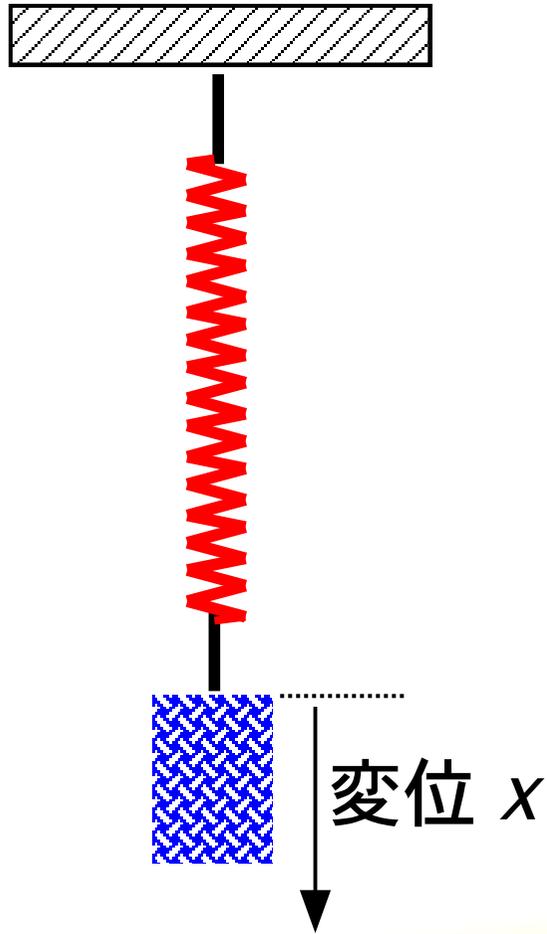


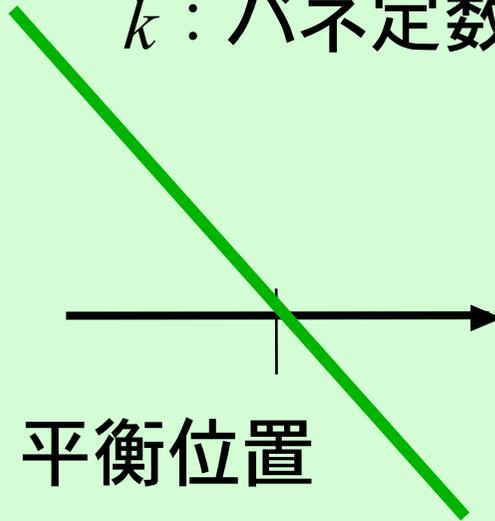
# バネの Hooke の法則



バネによる力

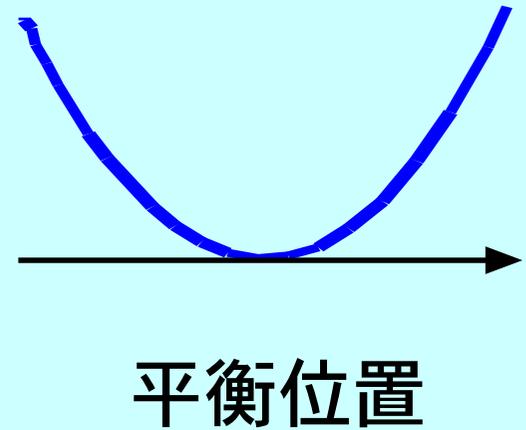
$$F = -kx$$

$k$  : バネ定数

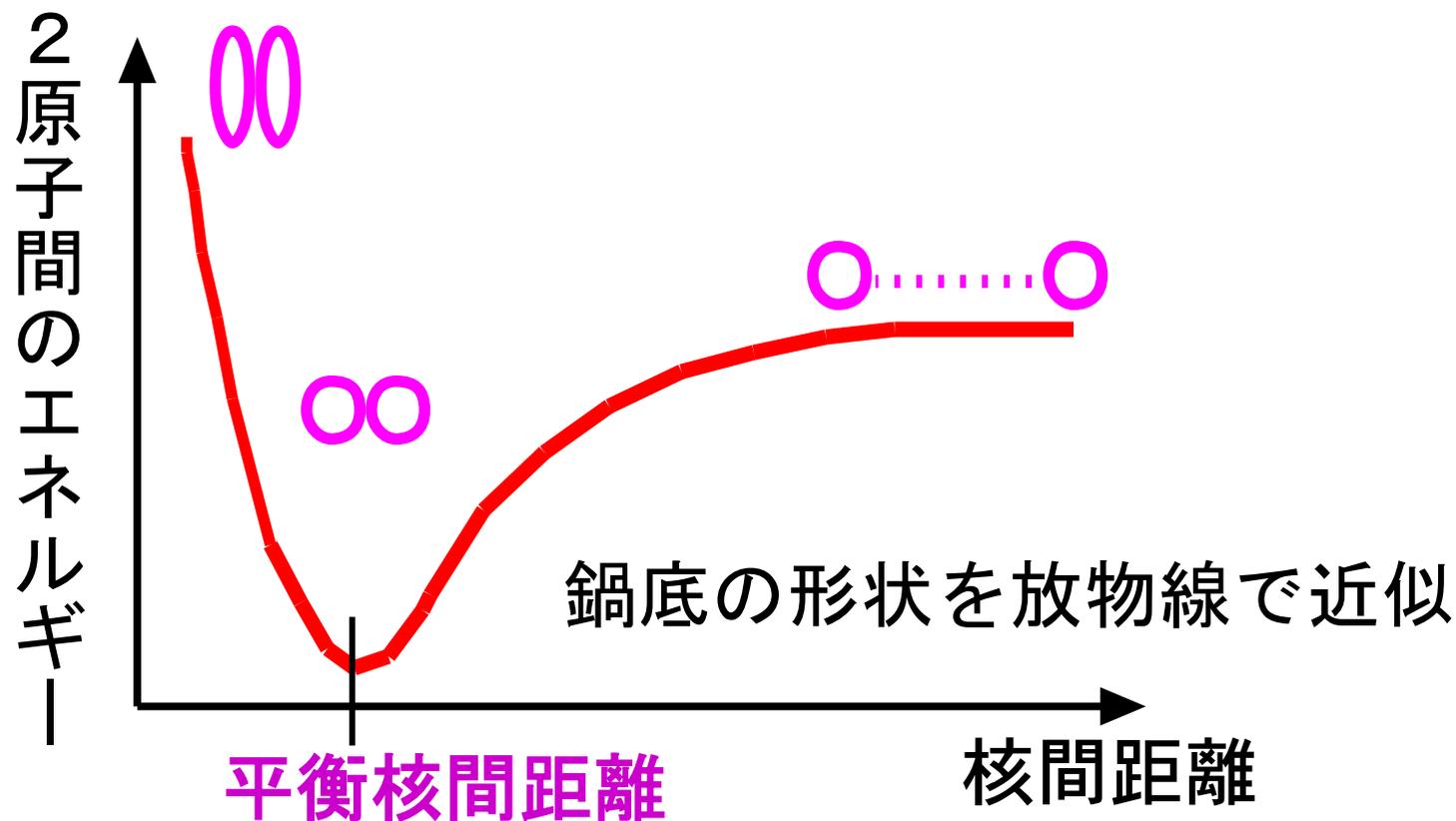


バネによる  
位置エネルギー

$$U = (1/2) kx^2$$



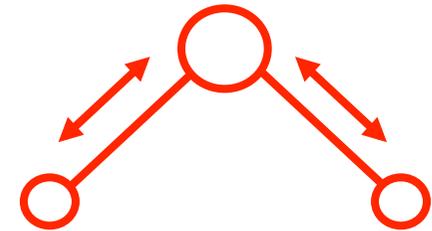
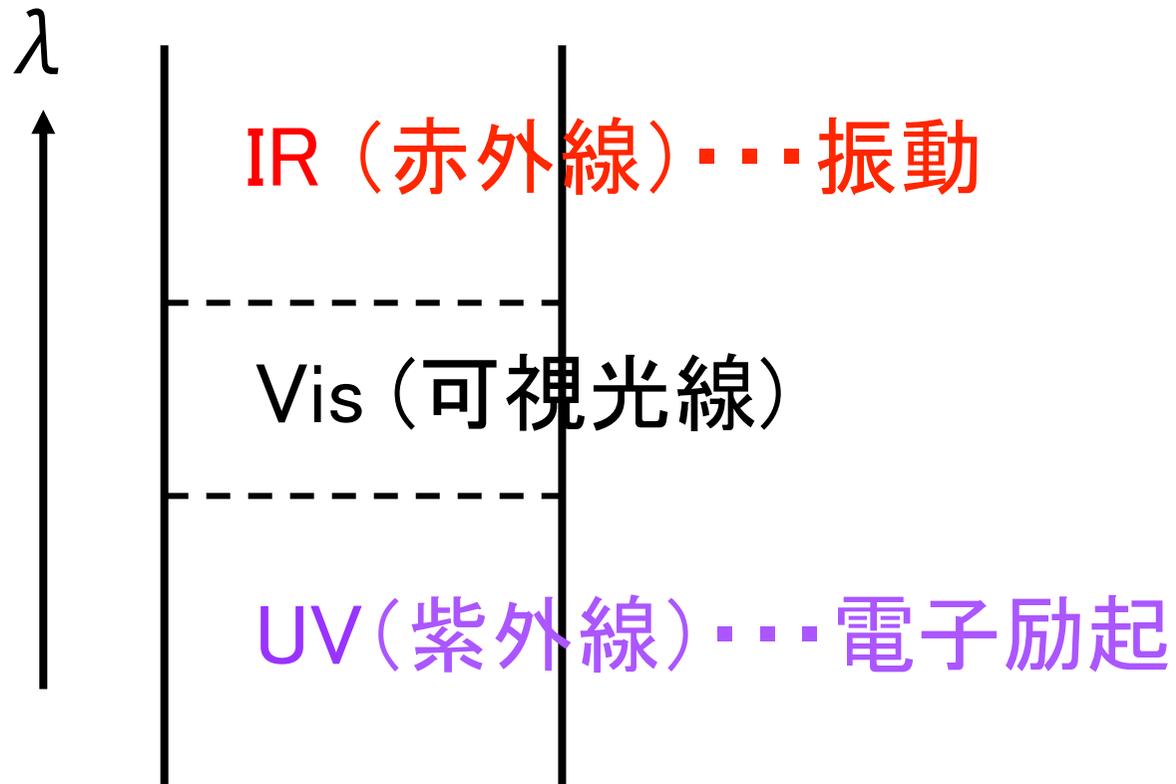
化学結合にも、バネの性質がある



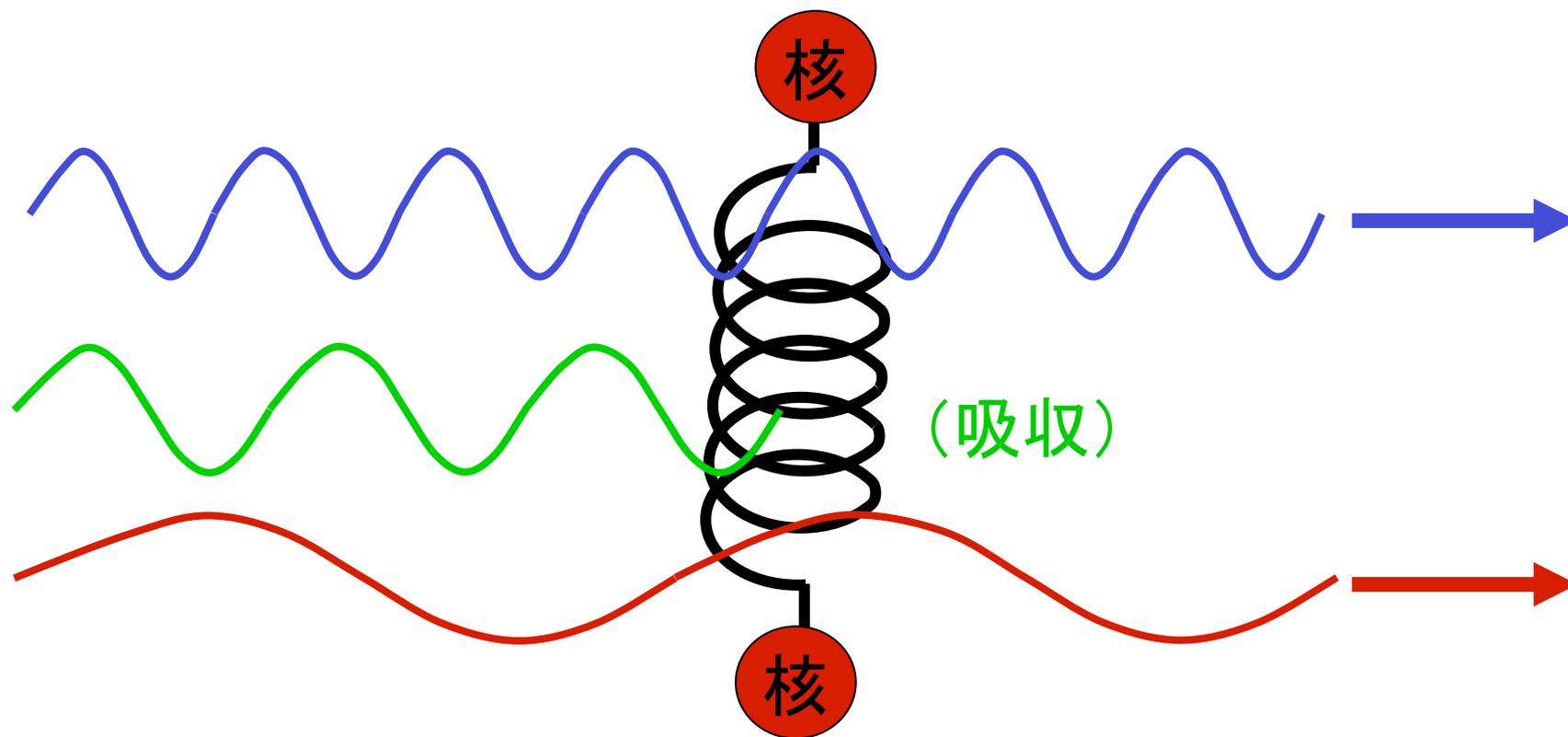
平衡位置近くの振動  
→ 赤外吸収スペクトル  
(力の定数、原子団の推定)

平衡位置を計算で予測  
→ 分子構造予測  
(分子力場計算)

# 電磁波

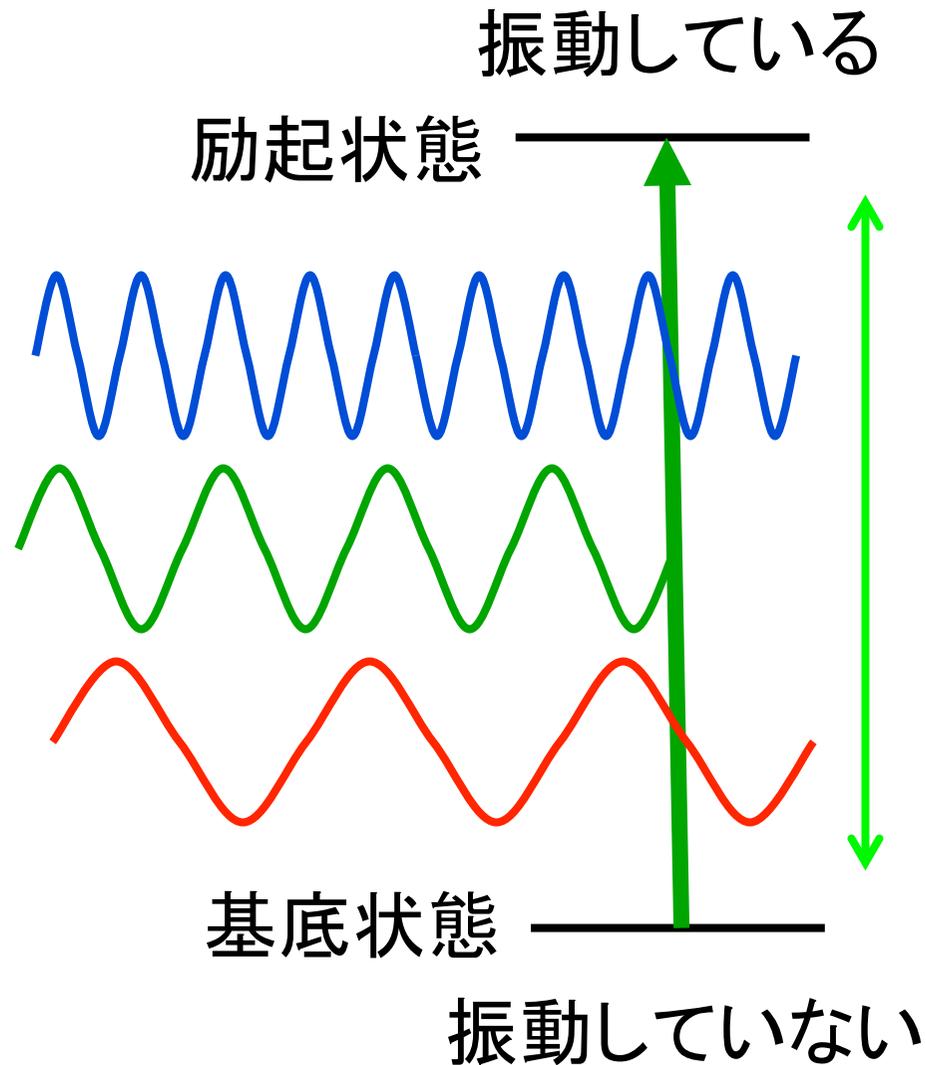


# 共鳴吸收



分子内の振動は量子化されている

→ 特定の波長の光によってのみ、(振動)励起を受ける



$$\begin{aligned}\Delta E &= h\nu \\ &= hc \frac{1}{\lambda}\end{aligned}$$

$\nu$  : 振動数

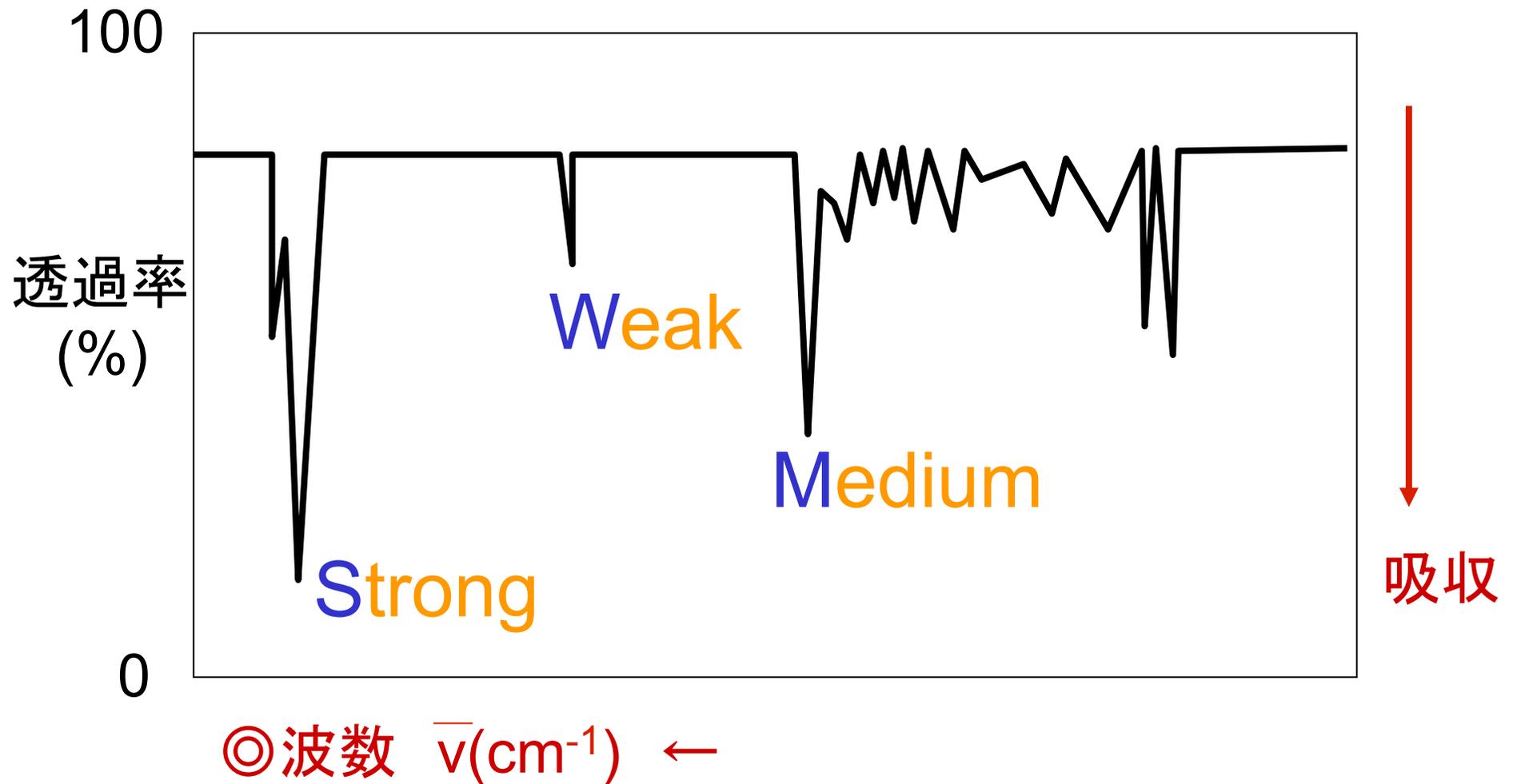
$\lambda$  : 波長

$h$  : プランク定数

$c$  : 真空中の光速

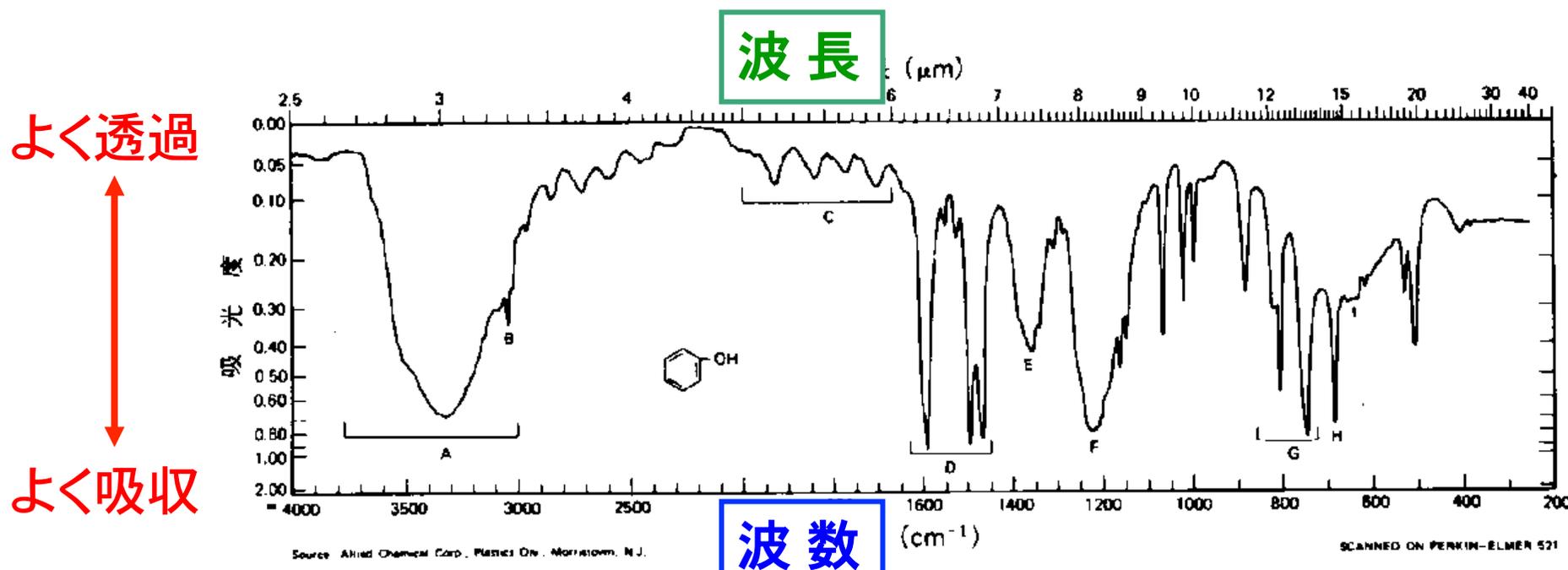
# チャートの見方

→ 波長  $\lambda(\mu\text{m})$



# 赤外線って？

ものを暖めるのにちょうど良い電磁波・・・振動と関連

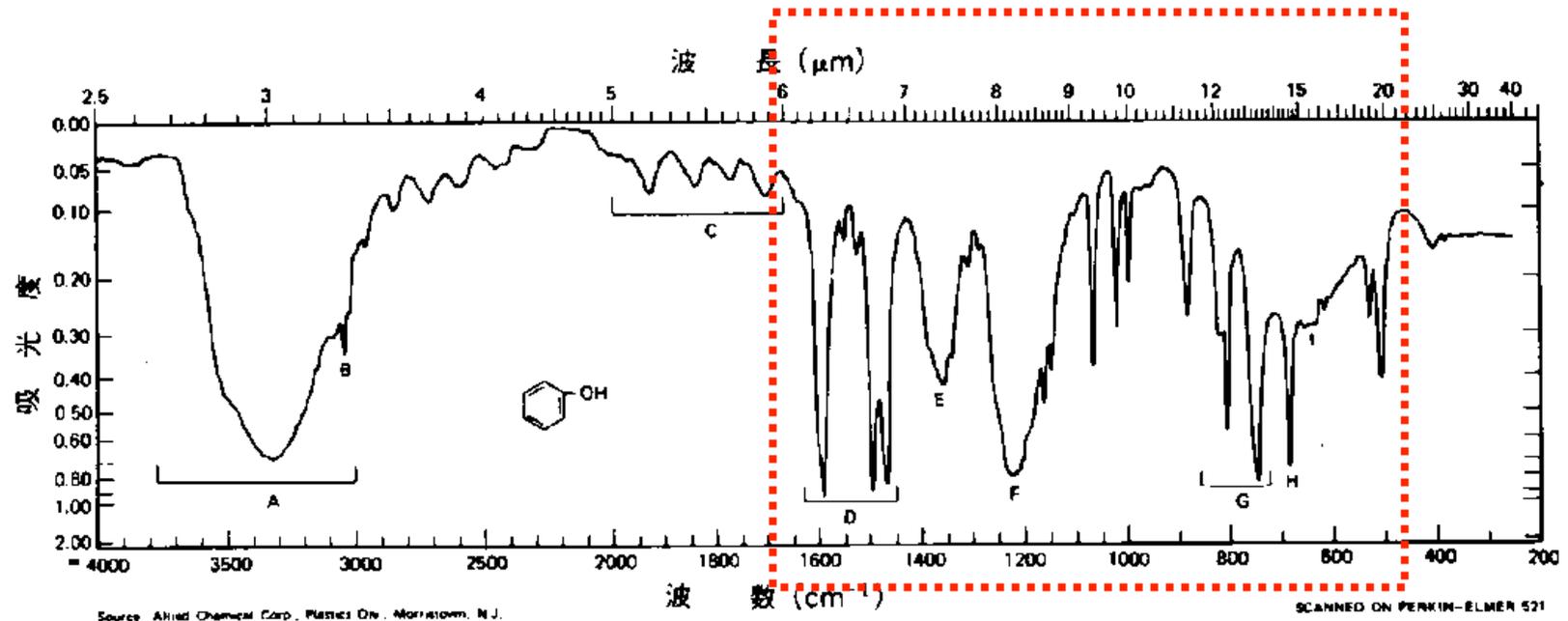


- A: 幅広いO-H伸縮, 3300 cm<sup>-1</sup> (3.00 μm), 分子間水素結合
- B: 芳香族C-H伸縮, 3045 cm<sup>-1</sup> (3.28 μm)
- C: 倍振動または結合振動吸収帯 (図3-14参照), 2000~1667 cm<sup>-1</sup> (5.0~6.0 μm)
- D: C=C環伸縮, 1580, 1495, 1468 cm<sup>-1</sup> (6.33, 6.69, 1.81 μm)

波数は波長の逆数。波数軸はエネルギー軸  
慣例として波長をcmで表して、逆数をとる。単位 cm<sup>-1</sup>

吸収帯から原子群（官能基）を言い当てることができる  
という点で利用価値が高い

指紋領域



- A: 幅広いO-H伸縮,  $3333\text{ cm}^{-1}$  ( $3.00\text{ }\mu\text{m}$ ), 分子間水素結合
- B: 芳香族C-H伸縮,  $3045\text{ cm}^{-1}$  ( $3.28\text{ }\mu\text{m}$ )
- C: 倍振動または結合振動吸収帯 (図3-14参照),  $2000\sim 1667\text{ cm}^{-1}$  ( $5.0\sim 6.0\text{ }\mu\text{m}$ )
- D: C=C環伸縮,  $1580, 1495, 1468\text{ cm}^{-1}$  ( $6.33, 6.69, 1.81\text{ }\mu\text{m}$ )

強い吸収は帰属できることが多い→特性吸収帯一覧表  
>C=O, C-O-C, O-H etc

→ 波長  $\lambda(\text{m}\mu)$

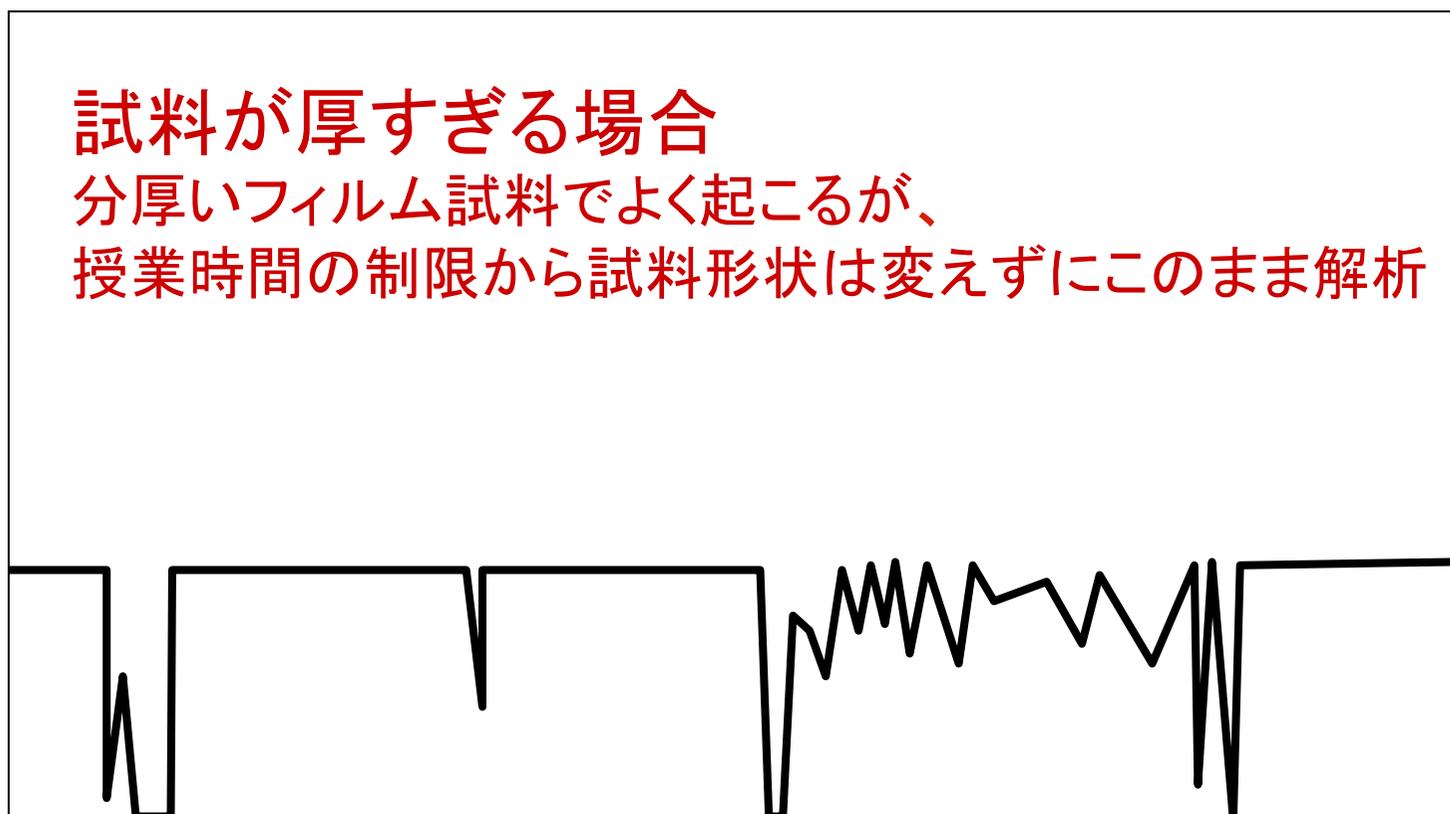
100

透過率  
(%)

試料が厚すぎる場合  
分厚いフィルム試料でよく起こるが、  
授業時間の制限から試料形状は変えずにこのまま解析

↓  
吸収

ここだけ拡大  
して印刷する  
と作業しやす  
い



M

S

プリントアウトされた表  
の透過率の値からも  
推測できる

## 融点測定

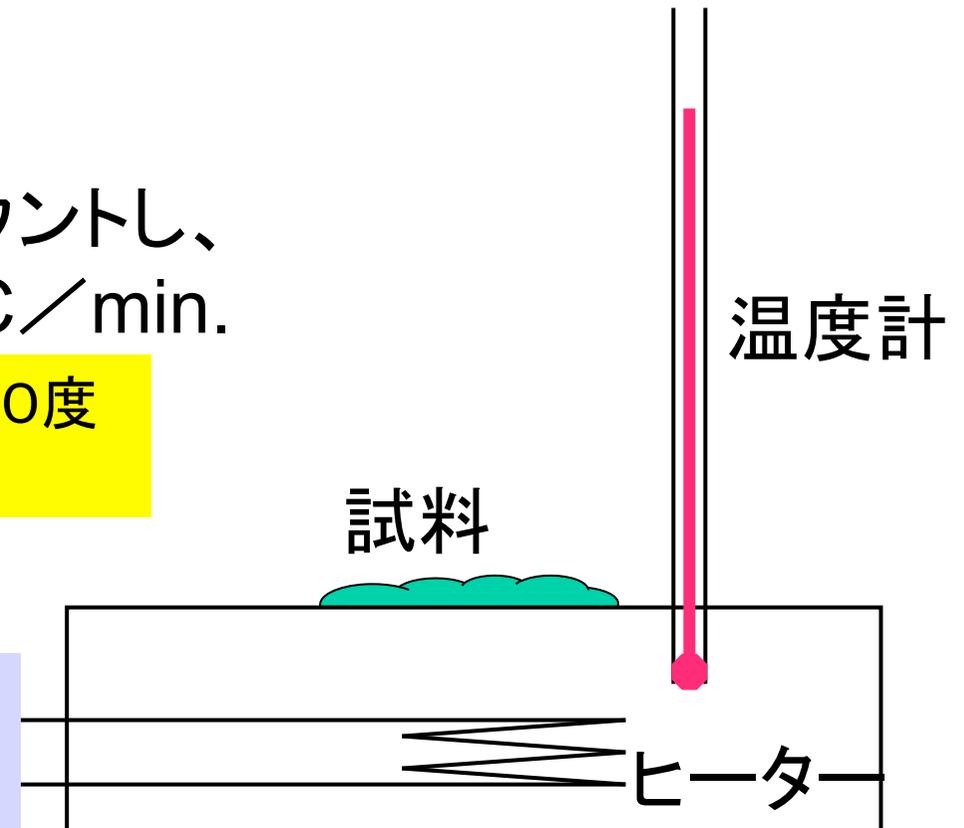
融け始めから融け終わりの幅を付けて報告する。  
これは純度にかかわる情報を含むので、必須

例) 123 ~ 135 °C

試料をなるべく少なく薄くマウントし、  
温度上昇はゆっくり: 1~2°C/min.

時間短縮のために標的溫度の-10度  
くらいまで速やかに昇温してよい

試料とヒーターと温度計の間の  
温度勾配をいかに小さくするか



プリント(演習)は検印時に提出することを基本

フィルム状試料について、ポリエチレンPEで練習。  
時間に余裕があるので、A、B、C全部測定せよ。

同定はクイズになっています。演習プリントで訓練。

試料の別(PE,A,B,C)をスペクトルに明記、レポートに明記。  
フィルム形状になるのはポリマーですから、  
(ナニナニ)<sub>n</sub> という構造式で答えて下さい。

## レポート 自由記述 (p.67)

- ① 目的と測定原理： 自分の言葉で要約して書く
- ② 測定装置の概要
- ③ 実験操作： 行ったことを具体的に、**過去形で書く**
- ④ 測定結果：
  - (1) 合成と標準アスピリンの融点測定
  - (2) 合成アスピリンの赤外スペクトル (**装置名称など記録**)
  - (3) フィルム状試料の赤外スペクトル
- ⑤ 評価と考察：  
(**テキストの考察の質問4個すべてに答えること**)

H28年度以降、アスピリンの赤外スペクトルは ATR法で実施。  
透過法はフィルム試料に対してだけ使用する。