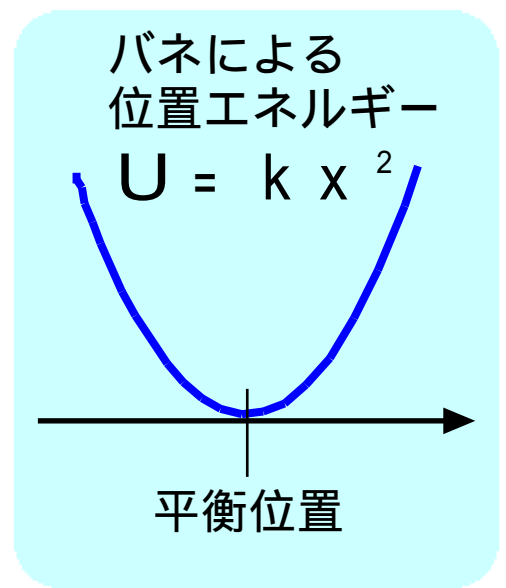
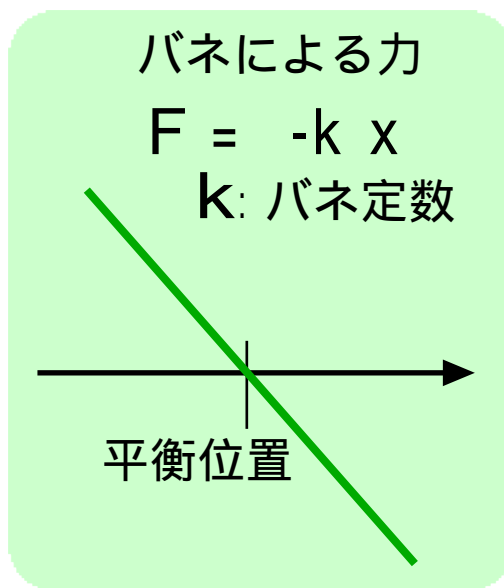
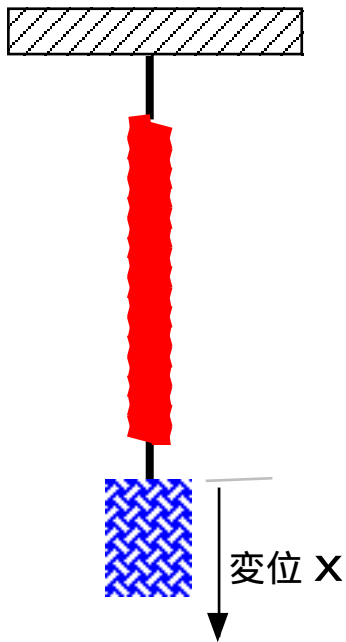
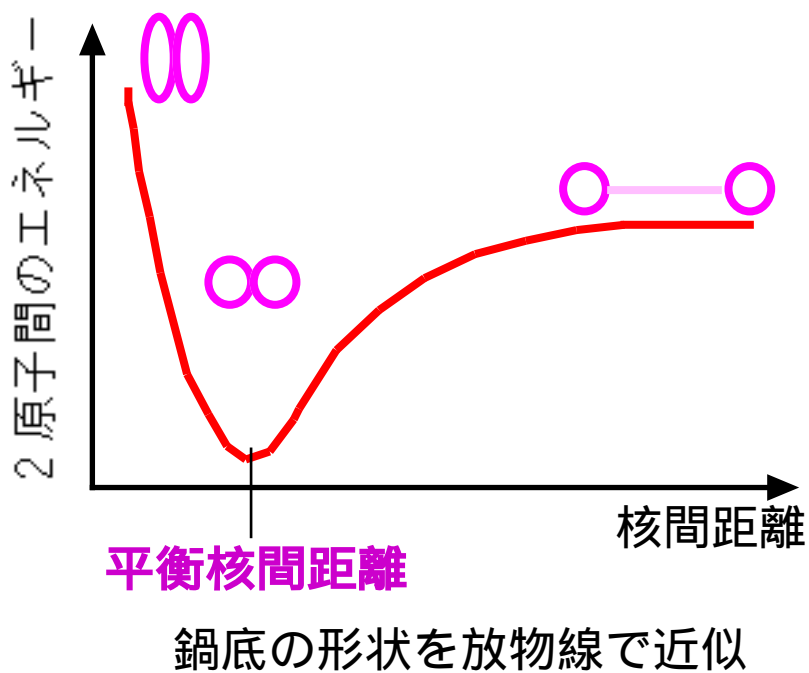


バネの Hooke の法則



化学結合にも、バネの性質がある



平衡位置を計算で予測
分子構造予測
(分子力場計算)

平衡位置近くの振動
赤外吸収
(力の定数、
原子団の推定)

赤外吸収スペクトル

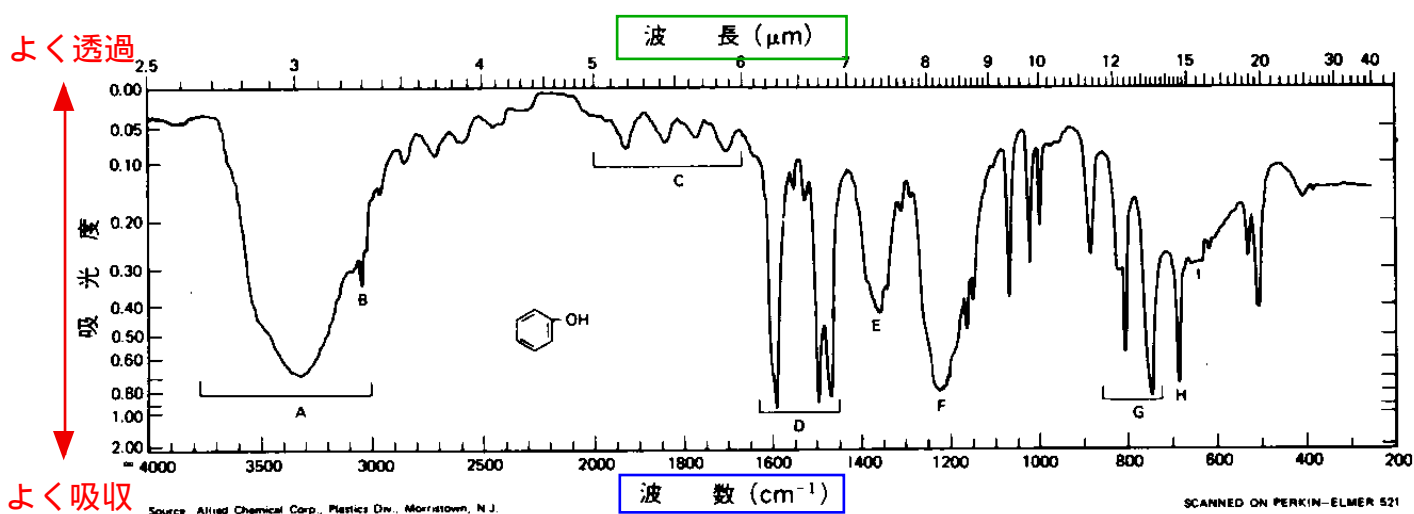
分子内の振動は量子化されている。

特定の波長の光によってのみ、振動励起を受ける。

赤外線って？

可視領域より長波長側（低振動数）、マイクロ波の手前。

ものを暖めるのにちょうど良い電磁波・・・分子の振動と関連



A: 幅広いO-H伸縮, 3333 cm^{-1} ($3.00\text{ }\mu\text{m}$), 分子間水素結合

B: 芳香族C-H伸縮, 3045 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, $1580, 1495, 1468\text{ cm}^{-1}$ ($6.33, 6.69, 1.81\text{ }\mu\text{m}$)

波数 は **波長** の逆数。

慣例として 波長を cm で表して、逆数をとる。単位 cm^{-1} 。

$$E = h\nu, c = \nu\lambda, \tilde{\nu} = 1/\lambda$$

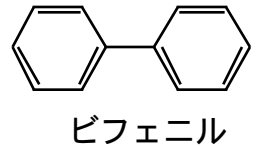
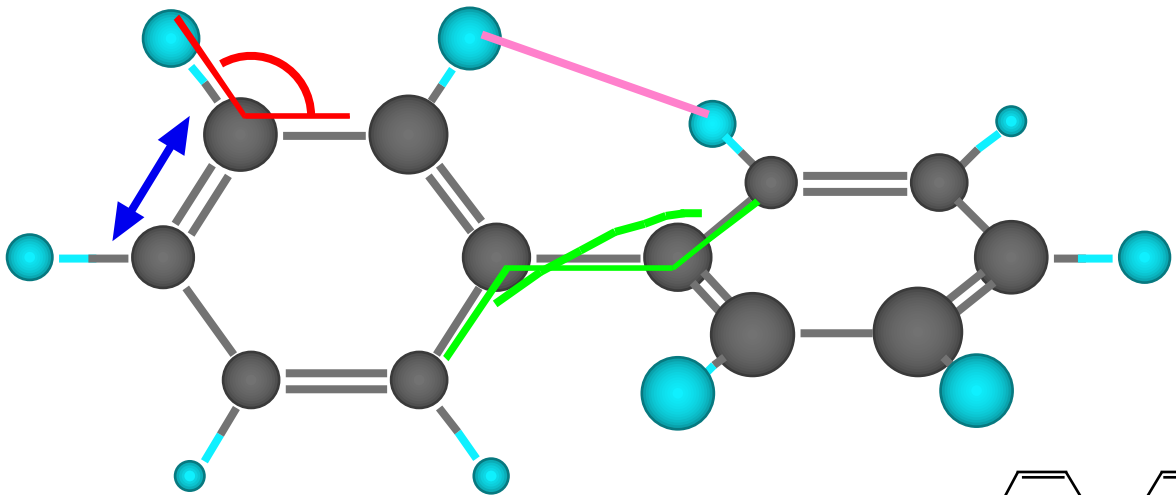
ゆえに、

$E = hc\tilde{\nu}$ 、重要なこと：**エネルギーと波数は比例する。**

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

分子力場計算

分子のなかの原子の間には、**結合長**、**結合角**、のほか、**二面角** (dihedral angle) や、結合していない原子との間の**距離**もすべて古典的なバネとする。



- 結合長** : 2原子で定義される
- 結合角** : 3原子で
- 二面角** : 4原子で
- 距離** : 2原子で

『民主主義的に』全体を満足させる
最安定構造を計算できる

『わざと歪ませた』構造
どのくらい**不安定**になるかを予測

電子状態や分光学的性質、化学的反応性には無力
分子軌道計算へ