

授業コンテンツを担当教員に無断で他者に
配信することを固く禁じます。

光科学 1

第12回

東京理科大学先進工学部 マテリアル創成工学科
曾我 公平



1

第11回のまとめ

- 対称回転子

- 扁長こま分子 $I_{\parallel} = I_a < I_b = I_c = I_{\perp}, A > B = C$

$$F(J, K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2 \quad [\text{cm}^{-1}]$$

K は J の準位を高エネルギー側にシフトさせる

- 扁平こま分子 $I_{\perp} = I_a = I_b < I_c = I_{\parallel}, A = B > C$

$$F(J, K) = BJ(J+1) + (C-B)K^2 \quad [\text{cm}^{-1}]$$

K は J の準位を低エネルギー側にシフトさせる

- 非対称回転子 $I_a < I_b < I_c$

$$A = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I_a}, B = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I_b}, C = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I_c}$$



2

第11回の課題

【課題 1】

$^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の回転スペクトルに関する次の(1)～(3)の問いに答えなさい。
ただし $^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の結合長は101.2 pm、結合角は106.7°であるとする。

- (1) $^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の回転項 $F(J, K)$ を回転定数 B, C と J と K で表しなさい。
- (2) 回転定数 B, C を求めなさい。
- (3) $J=3$ のとき、 K の値の範囲を答えなさい。

【課題 2】

CO_2 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りなさい。ただし、 $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ 、原子質量単位は $u = 1.661 \times 10^{-27} \text{kg}$ 、円周率は3.142、光速は $2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$ とする。



3

第11回の課題

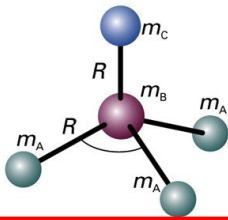
【課題 1】

$^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の回転スペクトルに関する次の(1)～(3)の問いに答えなさい。ただし $^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の結合長は101.2 pm、結合角は106.7°であるとする。

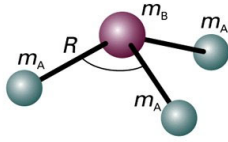
- (1) $^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子の回転項 $F(J, K)$ を回転定数 B, C と J と K で表しなさい。
- (2) 回転定数 B, C を求めなさい。
- (3) $J=3$ のとき、 K の値の範囲を答えなさい。



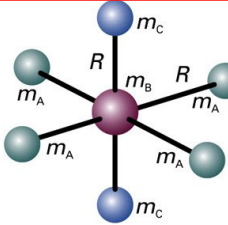
4



$$I_{\parallel} = 2m_A(1 - \cos \theta)R^2$$

$$I_{\perp} = m_A(1 - \cos \theta)R^2 + \frac{m_A}{m}(m_B + m_C)(1 + 2\cos \theta)R^2 + \frac{m_C}{m}\{(3m_A + m_B)R' + 6m_AR[\frac{1}{3}(1 + 2\cos \theta)]^{1/2}\}R'$$


$$I_{\parallel} = 2m_A(1 - \cos \theta)R^2$$

$$I_{\perp} = m_A(1 - \cos \theta)R^2 + \frac{m_A m_B}{m}(1 + 2\cos \theta)R^2$$


$$I_{\parallel} = 4m_AR^2$$

$$I_{\perp} = 2m_AR^2 + 2m_CR^2$$

5

第11回の課題の課題 1 の解

【課題 1 の解】

$$F(J, K) = BJ(J + 1) + (C - B)K^2$$

アンモニア分子の慣性モーメントは

$$I_{\parallel} = 2m_H R^2(1 - \cos \theta)$$

$$I_{\perp} = m_H R^2(1 - \cos \theta) + \frac{m_H m_N}{m_H + 3m_N} R^2(1 + 2\cos \theta)$$

$$m_H = u = 1.661 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\frac{m_H m_N}{3m_H + m_N} = \frac{14}{17} u = 1.3675 \times 10^{-28} \text{ kg}$$

$$\cos \theta = \cos(106.7^\circ) = -0.28736$$

6

第11回の課題の課題 1 の解

$$\begin{aligned}
 I_{\parallel} &= 2m_{\text{H}}R^2(1 - \cos\theta) \\
 &= 2 \times 1.661 \times 10^{-27} \text{kg} \times (1.012 \times 10^{-10} \text{m})^2 (1 + 0.28736) \\
 &= 2 \times 1.661 \times 10^{-27} \text{kg} \times 1.0241 \times 10^{-20} \text{m}^2 (1.287) \\
 &= 4.379_9 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 \\
 I_{\perp} &= m_{\text{H}}R^2(1 - \cos\theta) + \frac{m_{\text{H}}m_{\text{N}}}{3m_{\text{H}} + m_{\text{N}}} R^2(1 + 2\cos\theta) \\
 &= \frac{I_{\parallel}}{2} + 5.4064 \times 10^{-28} \times 10^{-27} \text{kg} \times (1.012 \times 10^{-10} \text{m})^2 (1 - 2 \times 0.28736) \\
 &= \frac{1}{2} \times 4.379_9 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 + 1.3679 \times 10^{-28} \text{kg} \times 1.0241 \times 10^{-20} \text{m}^2 \\
 &\quad \times (0.42528) \\
 &= 2.189_9 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 + 5.957_8 \times 10^{-48} \text{kgm}^2 \\
 &= 2.7857 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 = 2.786 \times 10^{-47} \text{kgm}^2
 \end{aligned}$$



7

第11回の課題の課題 1 の解

$$\begin{aligned}
 2.785_7 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 &= I_{\perp} = I_a = I_b < I_c = I_{\parallel} = 4.379_9 \times 10^{-47} \text{kgm}^2 \\
 \text{なのでアンモニア分子は扁平こま分子である。} \\
 F(J, K) &= BJ(J+1) + (C-B)K^2 \\
 C &= \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I_{\parallel}} = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\parallel}} = \frac{1}{I_{\parallel}} \frac{\hbar}{4\pi c} \\
 &= \frac{1}{I_{\parallel}} \frac{1.054_6 \times 10^{-34} \text{Js}}{4 \times 3.141_6 \times 2.997_9 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = \frac{1}{I_{\parallel}} 2.7976 \times 10^{-44} \text{Ns}^2 \\
 &= \frac{2.7976 \times 10^{-44} \text{Ns}^2}{4.379_9 \times 10^{-47} \text{kgm}^2} = 6.389_1 \times 10^{-2} \text{m}^{-1} = 6.389 \text{cm}^{-1}
 \end{aligned}$$



8

第11回の課題の課題 1 の解

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I_{\perp}} = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\perp}} = \frac{1}{I_{\perp}} \frac{\hbar}{4\pi c} \\
 &= \frac{1}{I_{\perp}} \frac{1.0546 \times 10^{-34} \text{Js}}{4 \times 3.1416 \times 2.9979 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = \frac{1}{I_{\perp}} 2.8003 \times 10^{-44} \text{Ns}^2 \\
 &= \frac{2.8003 \times 10^{-44} \text{Ns}^2}{2.4248 \times 10^{-47} \text{kgm}^2} = 10.052 \times 10^{-2} \text{m}^{-1} = 10.05 \text{cm}^{-1} \\
 F(J, K) &= BJ(J+1) + (C-B)K^2 \\
 &= (10.05 \text{cm}^{-1})J(J+1) - (3.663 \text{cm}^{-1})K^2 \\
 &\quad -J \leq K \leq J
 \end{aligned}$$

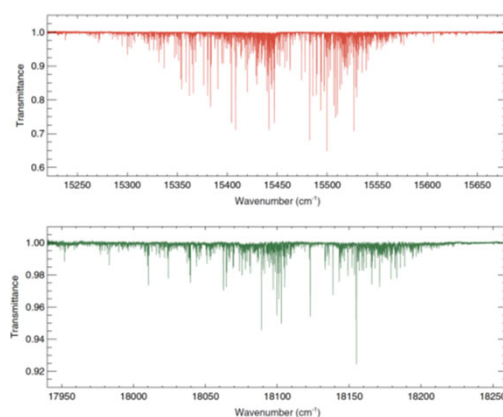
$J = 3$ においては

$$-3 \leq K \leq 3$$



9

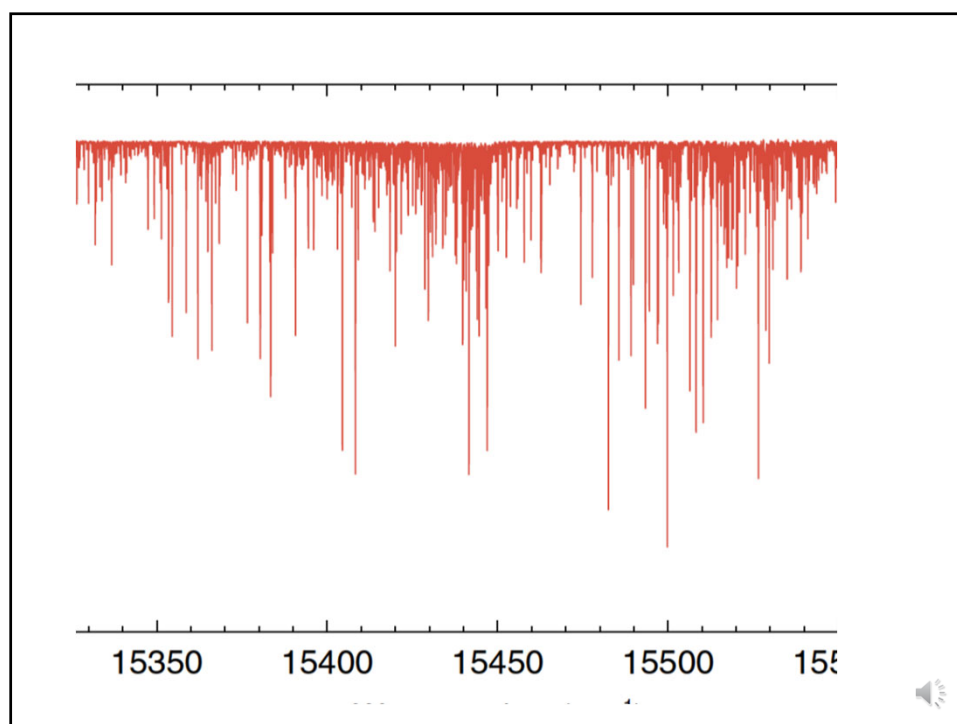
アンモニアガスのスペクトル



N. F. Zobov et al., Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 209 (2018) 224–231



10



11

Table 2

Observed ammonia energy levels, in cm^{-1} , in the $5\nu_{\text{NH}}$ region; also given are the calculated values with both the *ab initio* (ai) and refined (ref) PESs, the observed minus calculated (o-c) residues and error in the combination difference (CD).

J	K	calc. ai	obs.	o-c	CD	calc.ref	o-c
5 0 0 0 0 A_1' s							
1	1	15,478.3353	15,466.5198	-11.82	0.0015	15,461.5691	4.95
3	0	15,573.5648	15,561.9812	-11.58	-0.0012	15,556.3977	5.58
3	3	15,545.9218	15,533.4884	-12.43	-0.0008	15,528.5446	4.94
4	2	15,633.3132	15,621.4179	-11.90	-0.0003		
4	3	15,618.7333	15,605.8568	-12.88	0.0006	15,601.5825	4.27
5	3	15,710.0286	15,697.4938	-12.53	0.0030	15,692.9553	4.54
6	3	15,818.4972	15,806.3031	-12.19	0.0062	15,801.6672	4.63
7	6	15,865.8936	15,853.4710	-12.42	-0.0001	15,848.2242	5.25
4 0 1 1 0 0 E' s							
1	0	15,481.8660	15,469.9316	-11.93	-0.0012	15,463.9325	6.00
1	1	15,478.9618	15,466.4888	-12.47	-0.0012	15,461.0864	5.40
2	0	15,518.6451	15,506.0918	-12.55	0.0004		
2	1	15,514.5842	15,502.4293	-12.15	-0.0003	15,496.5855	5.84
2	1	15,516.3664	15,502.9113	-13.46	0.0047	15,496.6968	6.21
2	2	15,505.9747	15,494.0029	-11.97	0.0006	15,488.2554	5.75
2	2	15,506.1888	15,494.1377	-12.05			
3	0	15,574.1047	15,562.1522	-11.95	-0.0008	15,555.8965	6.26
3	1	15,572.2321	15,561.0706	-9.16	-0.0046	15,551.0073	12.06
3	1	15,572.4357	15,560.8323	-11.60		15,554.3331	6.50
3	2	15,560.6454	15,548.7502	-11.90	-0.0015	15,542.8740	5.88
3	2	15,561.1995	15,549.4616	-11.74	-0.0019	15,543.0635	6.40
3	3	15,544.8852	15,533.9636	-10.92	0.0000	15,527.7201	6.24
3	3	15,546.0406	15,533.9637	-12.08	0.0000	15,527.9310	6.03
4	1	15,640.8673	15,627.6109	-13.26	-0.0001	15,623.1372	4.47
4	2	15,634.6141	15,622.2864	-12.33	0.0003	15,615.6958	6.59
4	2	15,634.7014	15,623.1377	-11.56	-0.0007	15,616.7113	6.43

N. F. Zobov et al., Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 209 (2018) 224–231

12

Table 2
Observed anion energy levels, in cm^{-1} , in the $5\text{-}\nu_{\text{as}}$ region; also given are the calculated values with both the all-ionic (all) and refines (ref) PEDs; the observed minus calculated (a-c) residues and error in the combination difference (CD).

[illegible]

第11回の課題の課題 2 の解

酸素の質量数を16、直線状分子CO₂の結合距離を R として、慣性モーメントは

$$\begin{aligned} I &= 2m_{\text{O}}R^2 = 2 \times 16u \times (0.116 \times 10^{-9}\text{m})^2 \\ &= 2 \times 16 \times 1.661 \times 10^{-27}\text{kg} \times (0.116 \times 10^{-9}\text{m})^2 \\ &= 7.152 \times 10^{-46} \text{ kgm}^2 \end{aligned}$$

したがって回転定数は

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{\hbar}{4\pi cI} \\ &= \frac{1.055 \times 10^{-34}\text{J} \cdot \text{s}}{4 \times 3.142 \times 2.998 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} \times 7.152 \times 10^{-46} \text{ kgm}^2} = 39.15\text{m}^{-1} \\ &= 0.3915\text{cm}^{-1} \end{aligned}$$



15

第11回の課題の課題 2 の解

回転スペクトル項は、 J を正の整数として

$$F(J) = BJ(J+1) \quad [\text{cm}^{-1}]$$

J と $J-1$ の項間のエネルギー差 ΔF は

$$\Delta F = F(J) - F(J-1) = 2BJ$$

と表されるのでその間隔は

$$2BJ = 2 \times 0.3915\text{cm}^{-1}J = 0.7830 J \text{ cm}^{-1} (J = 1, 2, 3 \dots)$$

となる。



16

5 - 6. 回転選択則

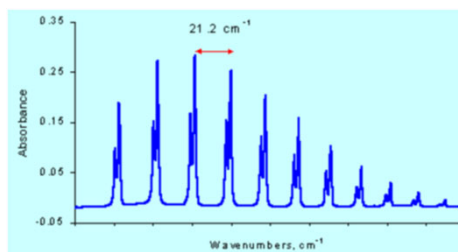
- マイクロ波吸収の選択則：分子が永久分極を持つこと
- 回転準位間における遷移選択則
 - 直線回転子 $\Delta J = \pm 1, \Delta m_J = 0, \pm 1$
 - 対称回転子 $\Delta J = \pm 1, \Delta m_J = 0, \pm 1, \Delta K = 0$



17

直線回転子のスペクトル

- $\Delta J = \pm 1$
- $\Delta F = F(J) - F(J-1) = 2BJ$
- $2BJ$ 刻みのスペクトルが現れる



HClの回転吸収スペクトル

<http://www.physics.dcu.ie/~be/Ps415/Rotational1.pdf>

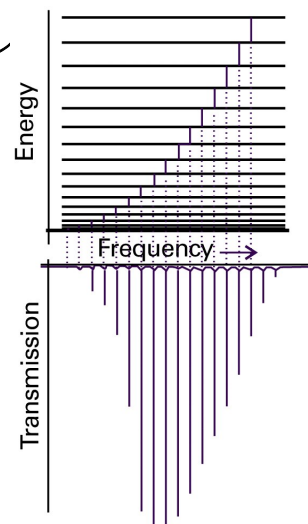


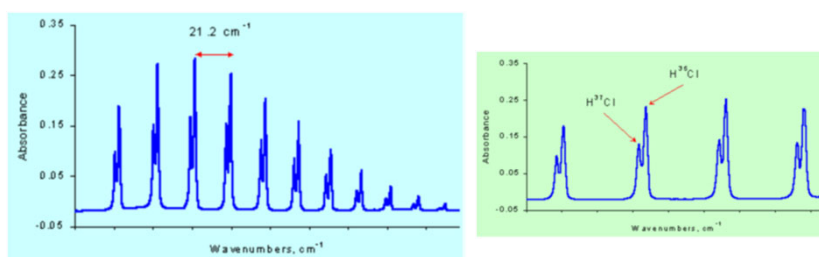
Figure 13-19
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula



18

同位体の影響

- 同位体の天然存在比
- Cl ^{35}Cl 75.76% ^{37}Cl 24.24%



<http://www.physics.dcu.ie/~be/Ps415/Rotational1.pdf>



19

5 - 7. 回転ラマンスペクトル

- ラマン散乱と回転準位が結合する
- 選択則
 - 直線回転子 $\Delta J = 0, \pm 2$
 - 対称回転子 $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, \Delta K = 0$
- ストークス線
 - 低い回転準位から高い回転準位の遷移が結合
- 反ストークス線
 - 高い回転準位から低い回転準位の遷移が結合
- 直線回転子では $\Delta J = 0, \pm 2$
 - $\Delta F = F(J+2) - F(J) = 2B(2J+3)$
 - $2(2J+3) = 6, 10, 14, \dots (J = 0, 1, 2 \dots)$
 - ストークス線 6B、10B、14B…に現れる

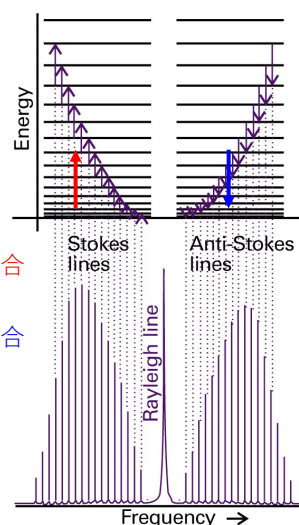


Figure 13-21
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula



20

5 - 8. 振動回転スペクトル

- 赤外吸収と回転準位が結合する
- 選択則
 - 赤外活性 $\Delta J = 0$
 - 一般に $\Delta J = \pm 1$



21

スペクトルの枝(branch)

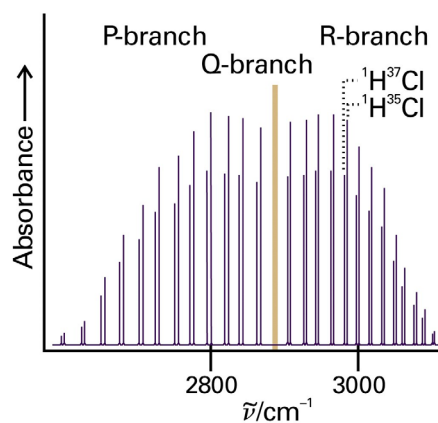


Figure 13-34
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula



22

スペクトルの枝と選択則

- 振動回転(赤外)スペクトルの枝
 - P枝 $\Delta J = -1$
 - Q枝 $\Delta J = 0$
 - R枝 $\Delta J = +1$
- 回転ラマンスペクトルの枝
 - O枝 $\Delta J = -2$
 - S枝 $\Delta J = +2$

O枝	$\Delta J = -2$	ラマン
P枝	$\Delta J = -1$	赤外
Q枝	$\Delta J = 0$	赤外
R枝	$\Delta J = +1$	赤外
S枝	$\Delta J = +2$	ラマン

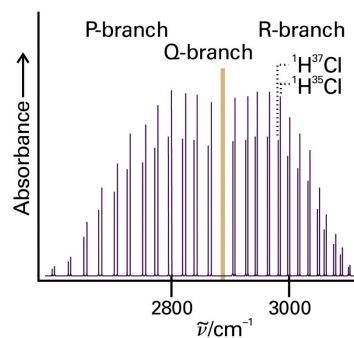


Figure 13-34
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula



23

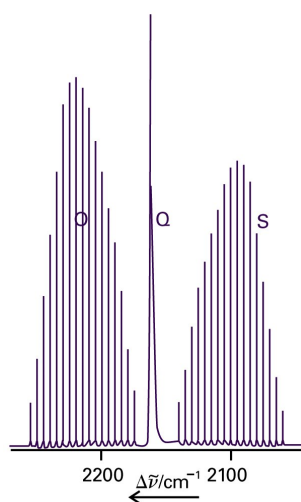


Figure 13-38
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula

CO分子の回転ラマンスペクトル

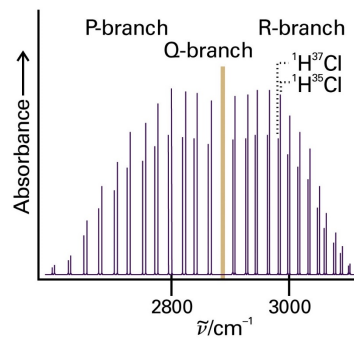


Figure 13-34
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula

HCl分子の回転振動(赤外)スペクトル



24

6. 振動分光法の使い方

- 振動分光法
 - 赤外分光法
 - ラマン分光法
 - 熱赤外分光法
 - 近赤外線分光法
 - テラヘルツ分光法 など



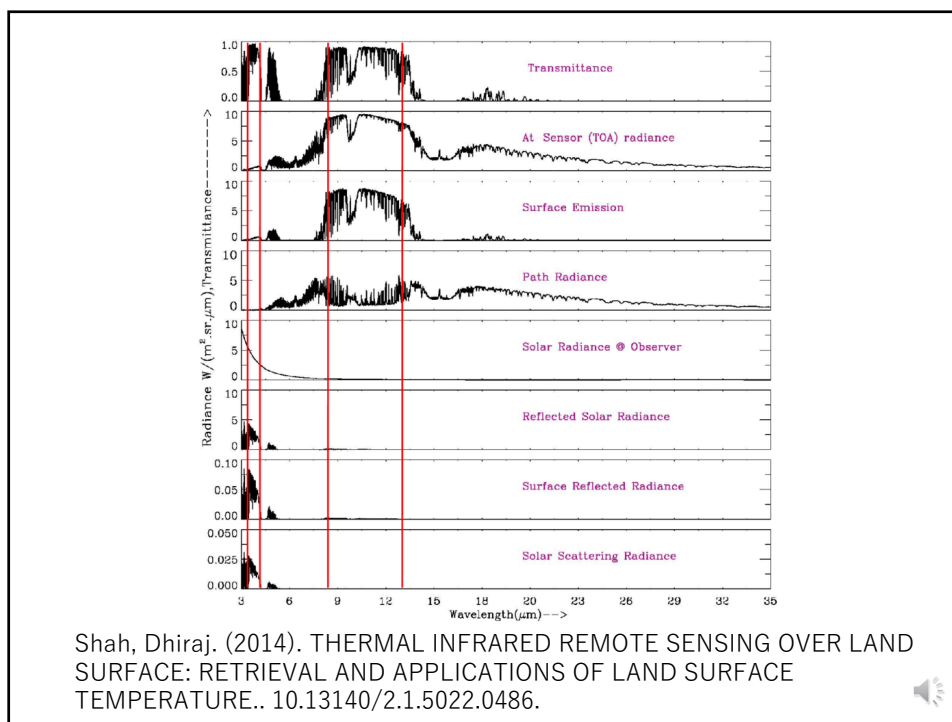
25

熱赤外分光法

- 熱赤外分光法（ねつせきがいぶんこうほう、英: Thermal infrared spectroscopy、英: TIR spectroscopy）とは赤外分光法の一つであり、**物体の構成物質を決定**する目的で広く使われている。**物体全体や表面から放出された熱赤外線を測定**し、その電磁スペクトルを解析して既知の物質のスペクトルと比較することで構成物質を決定できる。
- 主に航空・宇宙分野で用いられる



26

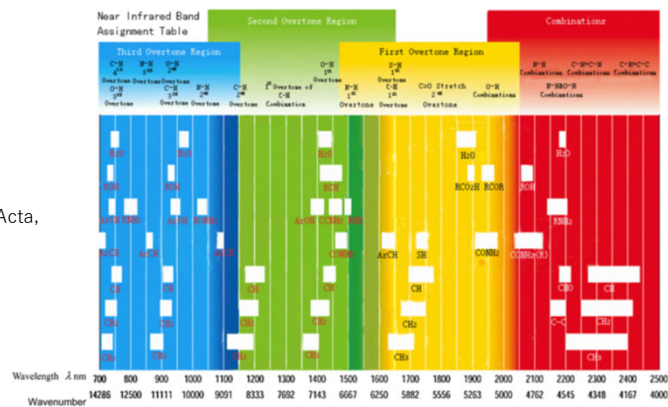


27

近赤外分光法 near - infrared spectroscopy NIRS

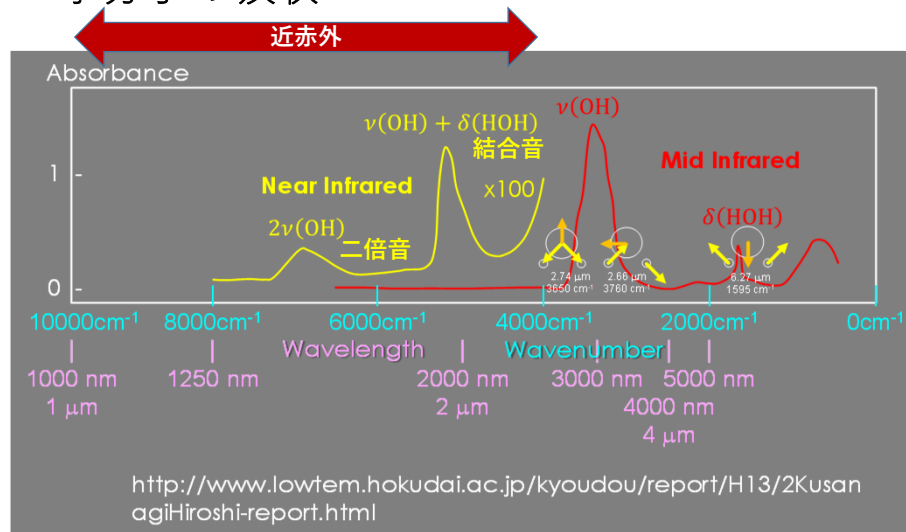
- 近赤外波長域：800～2500 nm(0.8～2.5 μm)
- 赤外吸収の倍音・結合音による吸収が現れる。

Z. Xiaobo et al.,
Anal. Chemica Acta,
667 (2010) 14.

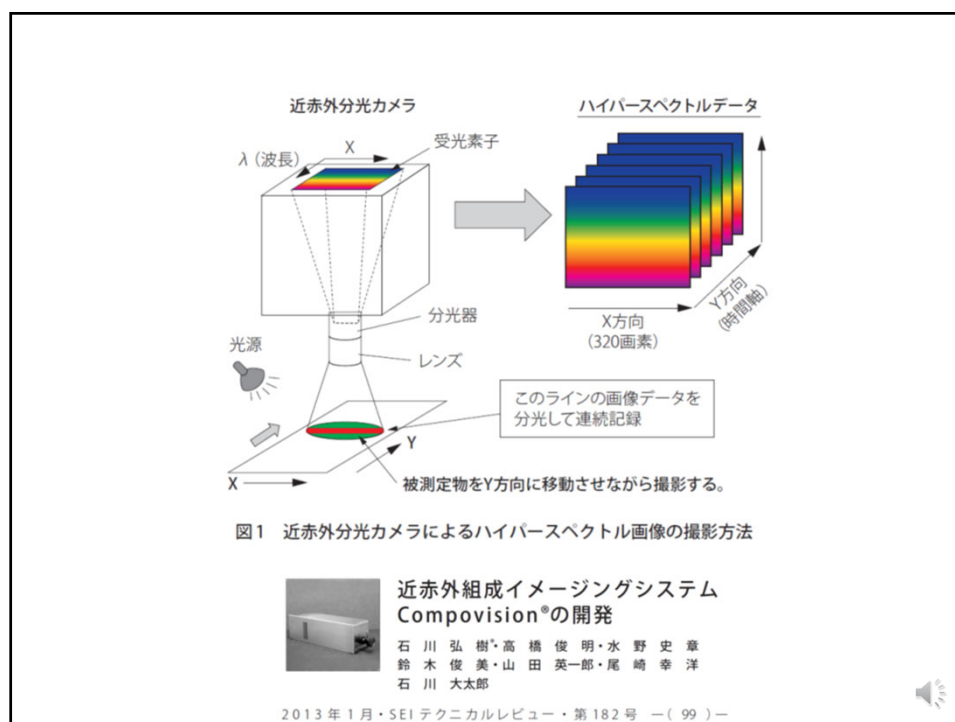


28

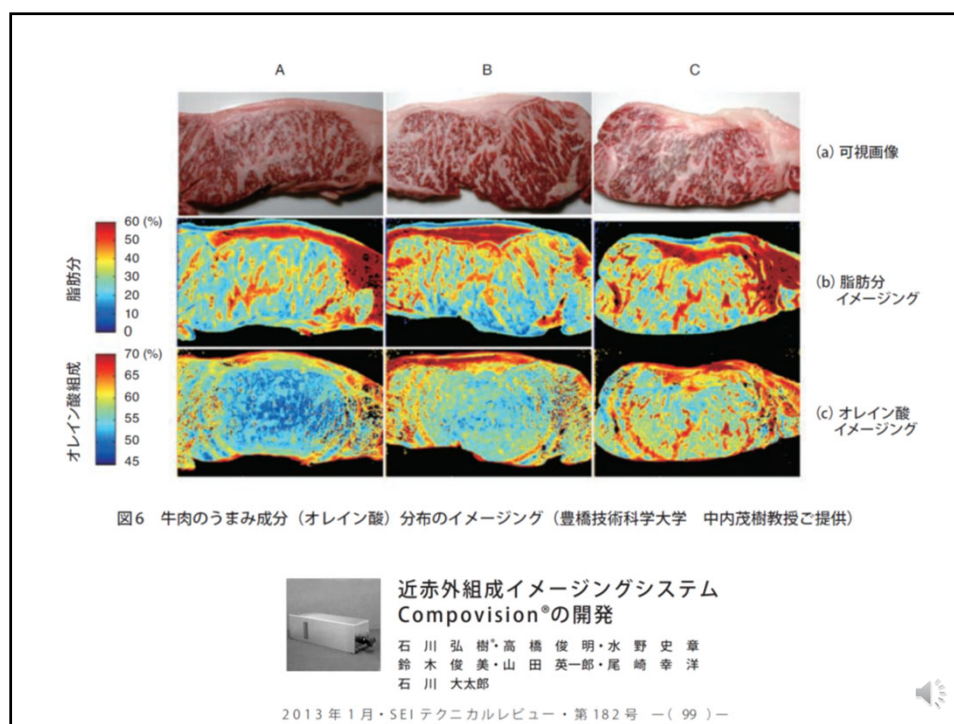
水分子の吸収



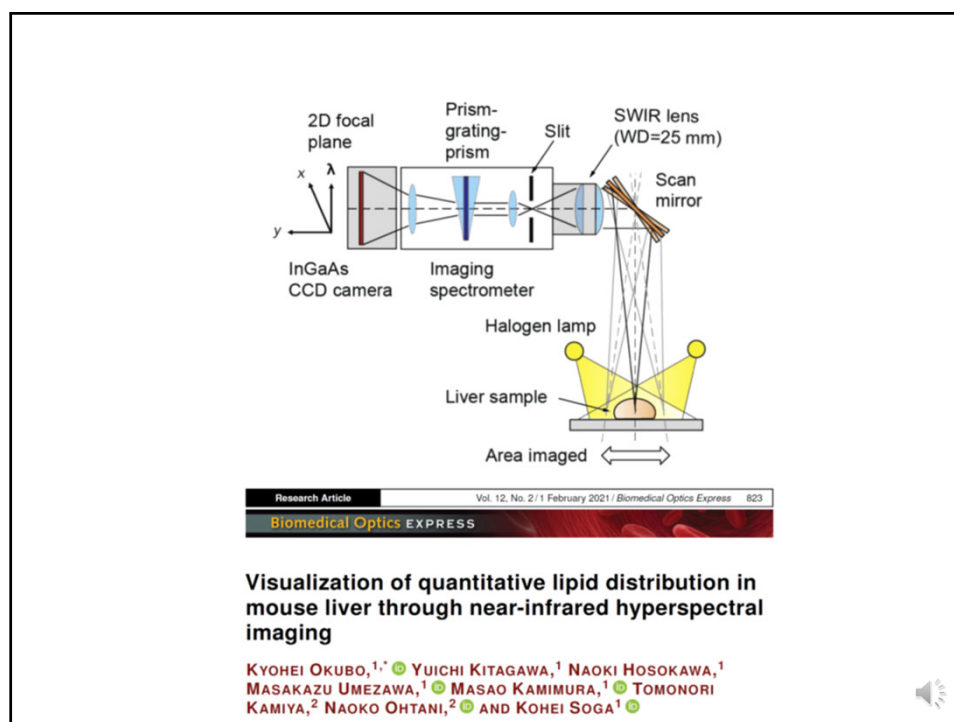
29



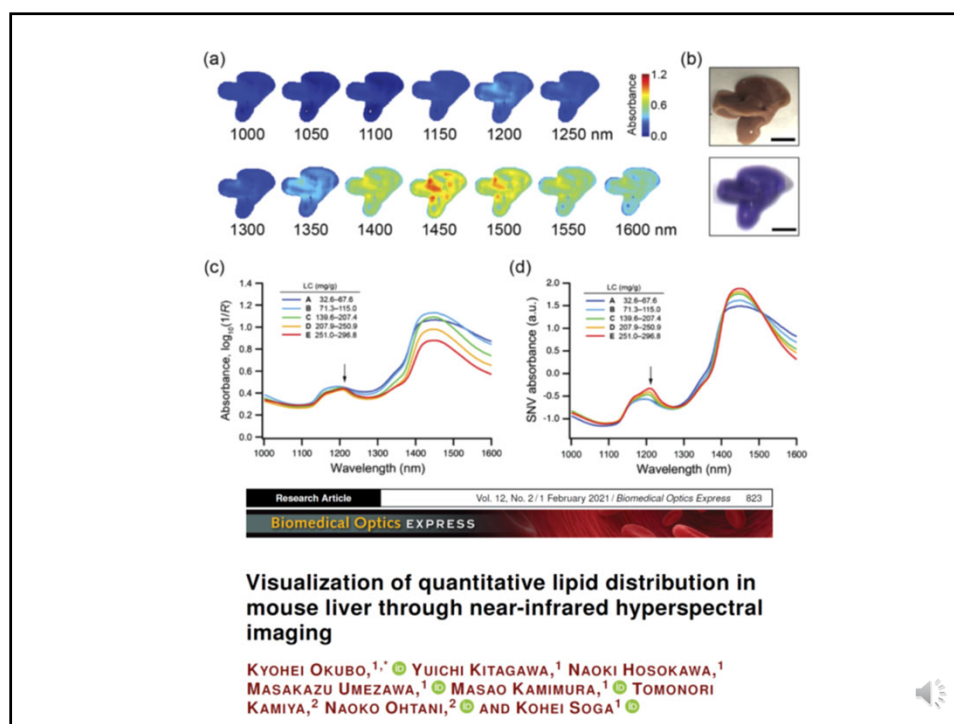
30



31



32



33

近赤外分光法の用途

- **宇宙** - 天体の組成を調べる。例えば宇宙探査機「はやぶさ」はこの装置によって小惑星「イトカワ」を調査した。
- **食品産業** - 小麦粉、スターチ、食用油、食肉等の材料系の成分分析から、クッキー、チョコレート、チーズ、乳製品等の加工食品系の成分分析に用いられており、さらには、日本酒、ワイン、醤油などの液体の測定にも多く用いられている。
- **農業** - 代表的なものとして、お茶の成分測定(窒素、タンニン、水分など)や、野菜の硝酸イオン濃度、ミカンなどの糖度評価/選別に用いられる。
- **畜産** - 一般的に多く用いられるのは、飼料の検査分野である。また、鶏などの腹腔内脂肪の検査にも用いられることもある。
- **医薬品** - ヨーロッパでの利用を皮切りに、アメリカでも21世紀になり本格的に使用されてきている。近年日本においても、諸外国との取引の関係から、導入する企業が増えている。目的としては、原材料の受け入れ検査や工程管理(混合均一性の確認)に用いられることが多い。また、その他にも、結晶形や結晶化度のチェックに用いることが出来ることが知られている。
- **医科学・神経科学** - 近赤外線は皮膚や頭蓋骨によっても完全には遮られず、生体組織に含まれるヘモグロビンやミオグロビンは酸素と結合した時としない時とで近赤外領域での吸光特性が異なる。これらの性質を利用して、生体の非侵襲計測に利用することができる。1940年代にGlenn Allan Millikan[1]は、in vivoでの血中ヘモグロビンの酸素飽和度の計測を試みた。この方式は1970年代に青柳卓雄によってパルスオキシメーターに発展し、近赤外線を用いた経皮的動脈酸素飽和度(SpO2)計測が実用化された。また、近年では大脳皮質における血流量、酸素消費などの計測に発展している。

34

6. 振動分光法の使い方

- ダイヤモンドライクカーボンの結合



Diamond and Related Materials 11 (2002) 1053–1061

**DIAMOND
AND
RELATED
MATERIALS**

www.elsevier.com/locate/diamond

Determination of bonding in diamond-like carbon by Raman spectroscopy

Andrea Carlo Ferrari*

Engineering Department, University of Cambridge, Cambridge CB2 1PZ, UK

A. C. Ferrari et al., Diamond and Related Mater., 11 (2002) 1053.



35

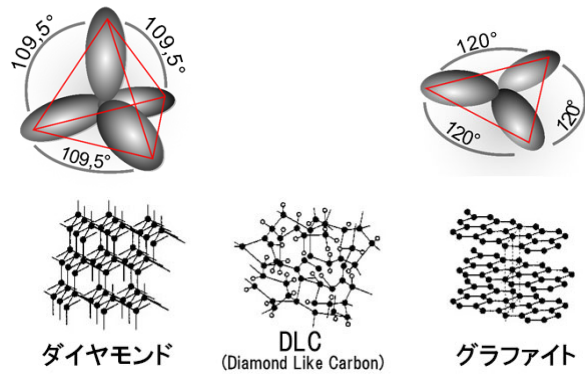
ダイヤモンドライクカーボン (diamond - like carbon : DLC)

- 主として炭化水素、あるいは、炭素の同素体から成る非晶質（アモルファス）の硬質膜
- 特徴
 - 膜厚さは数十ナノメートルから数十マイクロメートル
 - 硬さはビッカース硬さ相当で1500から7000Hv
 - 硬質、潤滑性、耐摩耗性、化学的安定性、表面平滑性、離型性、耐焼付き性
- 用途：
 - ハードディスクの表面、剃刀（かみそり）の刃、軽金属切削加工用の工具・金型、ペットボトルの内面、パッキンの表面皮膜、自動車・オートバイ用エンジン、トランスミッション、サスペンションなどの部品、光学部品の保護膜、治具の表面皮膜、スピーカー（トゥイーター）



36

ダイヤモンドライクカーボン (diamond - like carbon : DLC)



37

ダイヤモンドライクカーボン (diamond - like carbon : DLC)

- sp^2 混成軌道からなる二次元構造と、 sp^3 混成軌道からなる三次元構造が混在する
- これらの結合の比率が物性に大きな影響を及ぼす



38

DLCとラマン分光

- ラマン分光からわかること
 1. sp^2 相のクラスタリング
 2. 結合長と結合角の乱れ
 3. sp^2 結合による環状・鎖状構造の存在
 4. sp^2 結合と sp^3 結合の比

1. clustering of the sp^2 phase;
2. bond length and bond angle disorder;
3. presence of sp^2 rings or chains;
4. the sp^2/sp^3 ratio.

A. C. Ferrari et al., Diamond and Related Mater., 11 (2002) 1053.

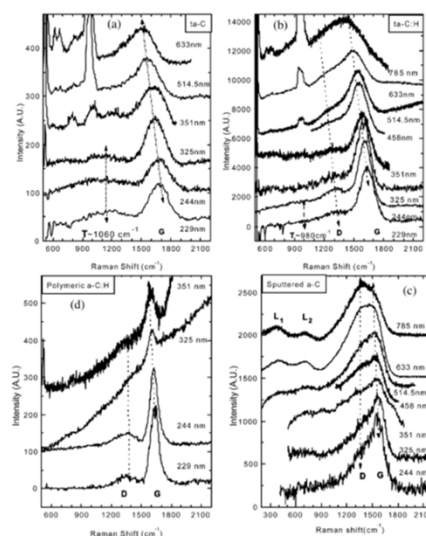


39

DLCとラマン分光

A. C. Ferrari et al., Diamond and Related Mater., 11 (2002) 1053.

- 試料
 - sp^2 • グラファイト
 - nc-G ナノ結晶グラファイト
 - a-C sp^2 非晶質グラファイト
 - sp^3 → ta-C 欠陥導入ダイヤモンド
- MW-Raman分光法
 - Multi Wavelength Raman Sp.

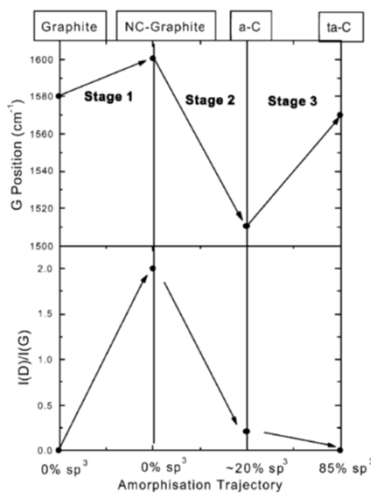


40

DLCとラマン分光

A. C. Ferrari et al., Diamond and Related Mater., 11 (2002) 1053.

- 試料
 - sp^2
 - グラファイト
 - nc-G ナノ結晶グラファイト
 - a-C sp^2 非晶質グラファイト
 - sp^3
 - ta-C 欠陥導入ダイヤモンド
- MW-Raman分光法
 - Multi Wavelength Raman Sp.



41

6. 振動分光法の使い方

N. Jamin et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 95 (1998) 4837-4840.

- 生体試料の赤外吸収スペクトル
- 1個のマウス細胞の赤外吸収スペクトル。
 - 紫：生細胞、青：死細胞

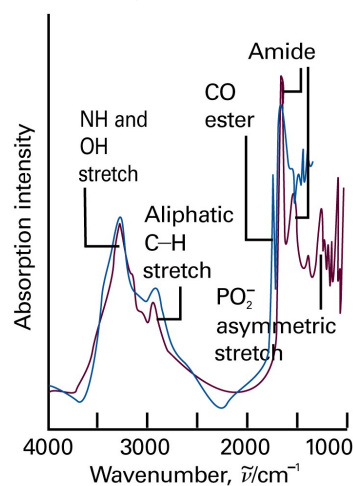


Figure 13-49
Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
© 2006 Peter Atkins and Julio de Paula

42

1個のマウス細胞の赤外吸収スペクトル

N. Jamin et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 95 (1998) 4837-4840.

A. Optical Image

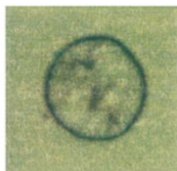
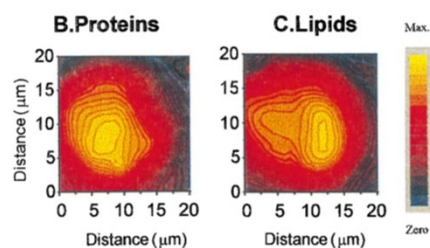


FIG. 2. Chemical distribution of the protein and lipid characteristics of IR bands (amide II and CH_2 asymmetric stretching bands, respectively). (A) Optical image. (B) Protein distribution. (C) Lipid distribution. The mapping has been obtained by analyzing the intensity variation of a two-dimensional set of infrared spectra (14×14 points, step equal to $3 \mu\text{m}$). Each spectrum was recorded in transmission through a $3 \times 3\text{-}\mu\text{m}^2$ aperture. The total recording time was 180 min. The spatial resolution is about between 2 and $3 \mu\text{m}$.



43

1個のマウス細胞の赤外吸収スペクトル

N. Jamin et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 95 (1998) 4837-4840.

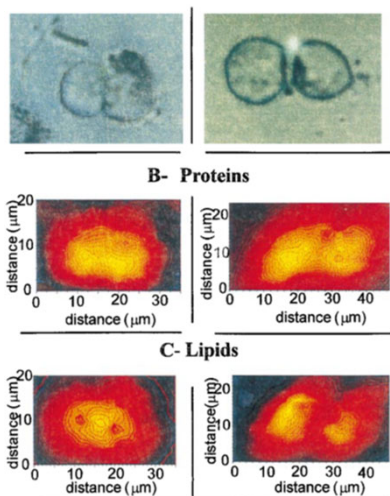


FIG. 3. Chemical distribution of proteins and lipids of cells undergoing mitosis. (A) Optical image. (B) Protein. (C) Lipid distributions. The images of protein and lipid distribution result from the analysis of sets of infrared spectra: 18×11 spectra every $2\text{-}\mu\text{m}$ step (aperture size $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, 4 cm^{-1} resolution, 128 scans for each spectrum) (B Left and C Left), and 13×9 spectra every $3\text{-}\mu\text{m}$ step (aperture size $3 \times 3 \mu\text{m}^2$, 4 cm^{-1} resolution, 128 scans per spectrum) (B Right and C Right) were recorded.

44

赤外顕微鏡

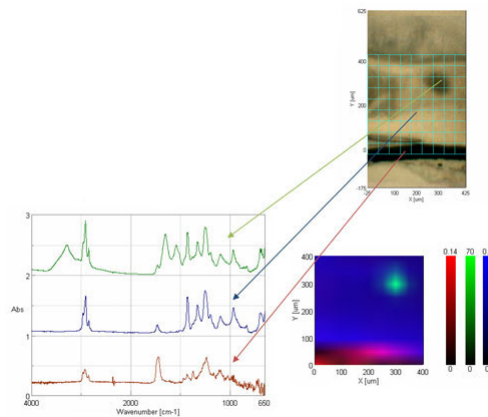


図1 多層膜の観察画像（右上）、多層膜のスペクトル（左下）、RGB表示（右下）

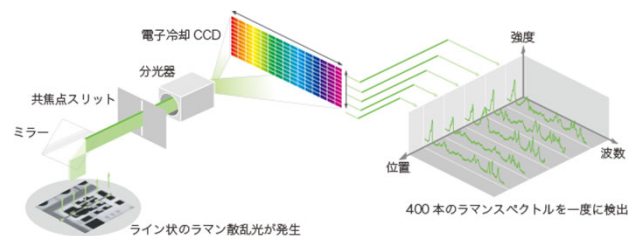
<https://www.jasco.co.jp/jpn/product/IRT5000/irt5000.html>



45

ラマン顕微鏡

- 製品検査にも使われる



<https://www.nanophoton.jp/products/ramantouch>



46

第12回のまとめ

- マイクロ波吸収の選択則: 分子が永久分極を持つこと
 - 回転準位間における遷移選択則
 - 直線回転子 $\Delta J = \pm 1, \Delta m_J = 0, \pm 1$
 - 対称回転子 $\Delta J = \pm 1, \Delta m_J = 0, \pm 1, \Delta K = 0$
- 回転ラマンスペクトル ラマン散乱+回転準位
 - ラマン散乱と回転準位が結合する
 - 選択則
 - 直線回転子 $\Delta J = 0, \pm 2$ 対称回転子 $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, \Delta K = 0$
- 振動回転スペクトル 赤外吸収+回転準位
 - 赤外活性: 原子の振動によって分極が変化する
 - 赤外吸収と回転準位が結合する
 - 選択則
 - 赤外活性 $\Delta J = 0 \quad \Delta J = \pm 1$
- 振動スペクトルの使い方



47

第12回の課題

【課題 1】

$^{14}\text{N}^1\text{H}_3$ 分子は対称回転子なので、純回転(マイクロ波吸収)遷移において選択則 $\Delta J = \pm 1, \Delta K = 0$ を満たす。

$$F(J, K) = BJ(J+1) + (C-B)K^2 \\ = (10.1\text{cm}^{-1})J(J+1) - (3.66\text{cm}^{-1})K^2$$

から、純回転スペクトルの形を予測しなさい。

【課題 2】

次の各分子の回転定数から結合長を見積もりなさい。ただし、 $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$ 、原子質量単位は $u = 1.6605 \times 10^{-27}\text{kg}$ 、円周率は3.1416、光速は $2.9979 \times 10^8\text{ m/s}$ とする。

分子	$^1\text{H}^{35}\text{Cl}$	$^1\text{H}^{79}\text{Br}$	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	$^{14}\text{N}^{16}\text{O}$
B [cm^{-1}]	10.591	8.473	1.931	1.705



48