

実習日 2021年 12月 18日 学籍番号 2120029

氏名 政野 玄空

実習 1

L

 μ

q

 $u = qL$

	結合距離 (Å)	双極子モーメント (debye)	形式電荷 (C)
HF	0.911	1.97	7.21×10^{-20}
HCl	1.266	1.50	3.95×10^{-20}
HBr	1.413	1.15	2.72×10^{-20}

 $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ $1 \text{ debye} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ cm}$

実習 2

計算値 $\times 0.89$

q.

実測値 (cm^{-1})	計算値	補正值	誤差	Intensity
2349 逆対称伸縮	2584	2300	-2%	1.00
1333 対称伸縮	1518	1351	1%	0.00
666 変角	745	663	0%	0.07
双極子モーメント (debye): 0.00				

実測値と補正値の差 %

実習 3

逆対称伸縮

	μ (debye)	C-O (Å)	C-O' (Å)	$\angle \text{O-C-O}' (^{\circ})$
step 1	2.29	1.312	0.974	180°
step 2	1.66	1.024	1.263	180°
step 3	0.00	1.143	1.143	180°
step 4	1.66	1.263	1.024	180°
step 5	2.29	1.312	0.974	180°

対称伸縮

	μ (debye)	C-O (Å)	C-O' (Å)	$\angle \text{O-C-O}' (^{\circ})$
step 1	0.00	1.055	1.055	180°
step 2	0.00	1.081	1.081	180°
step 3	0.00	1.143	1.143	180°
step 4	0.00	1.206	1.206	180°
step 5	0.00	1.232	1.232	180°

変角

	μ (debye)	C-O (Å)	C-O' (Å)	$\angle \text{O-C-O}' (^{\circ})$
step 1	0.63	1.156	1.156	63.16
step 2	0.45	1.149	1.149	68.05
step 3	0.00	1.143	1.143	80°
step 4	0.45	1.149	1.149	68.05
step 5	0.63	1.156	1.156	63.16