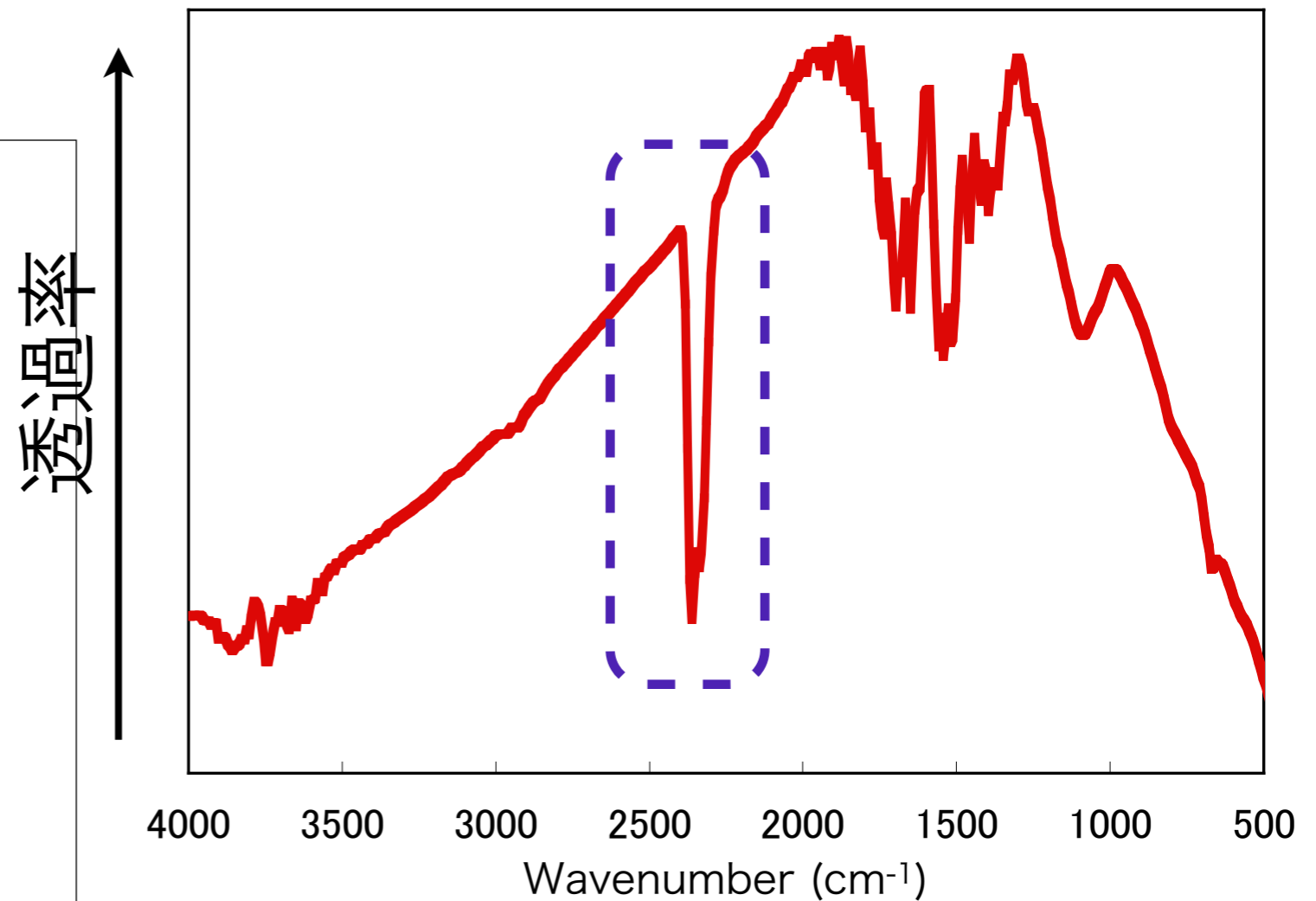


# 赤外分光法 (IR) でわかるCO<sub>2</sub>の温室効果

## 空気のIRスペクトル



空気中に0.04%しか存在しないCO<sub>2</sub>由来の  
吸収が大きく観測される

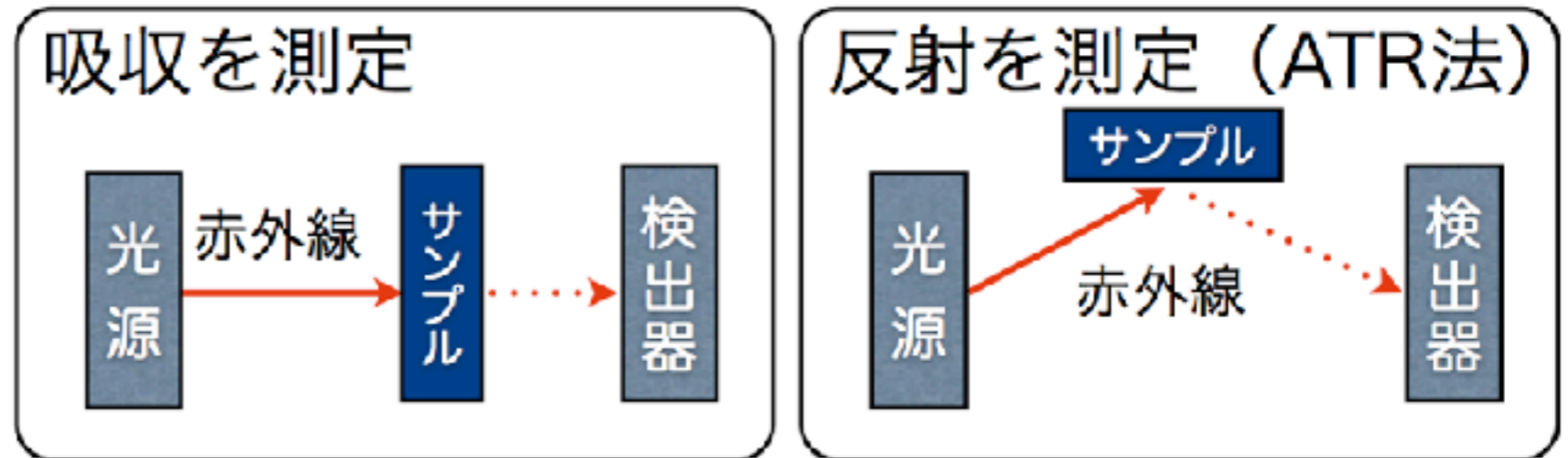


CO<sub>2</sub>が赤外線を吸収して運動する (運動=熱)

# IRの測定装置と測定方法



島津製作所製 IR Spirit



本当はもっと複雑に曲げているが単純化  
試料表面にもぐり込んだ光の吸収を利用

## サンプルの形態と一般的な測定方法

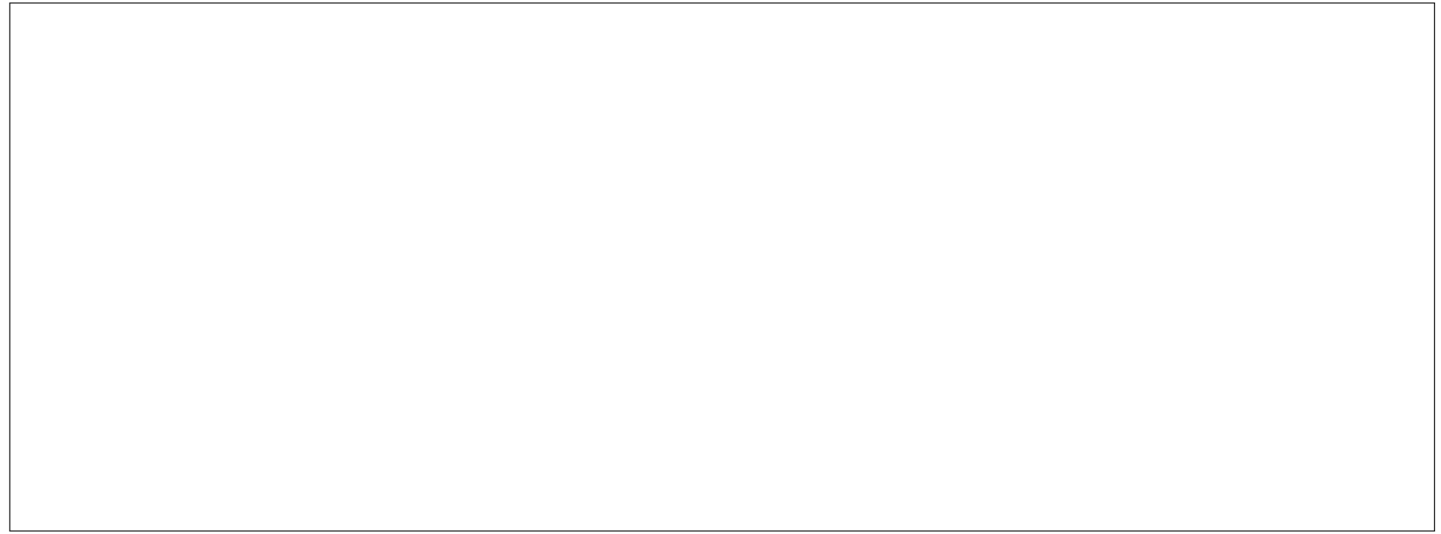
- 液体・フィルム → そのまま測定
- 粉末 → KBrに混ぜて錠剤にして測定  
そのまま測定 (ATR法)
- 溶液 → 溶液セルで測定

※ ATR (Attenuated Total Reflection 全反射測定法：吸収測定より低波数が強く、高波数が弱く検出される)

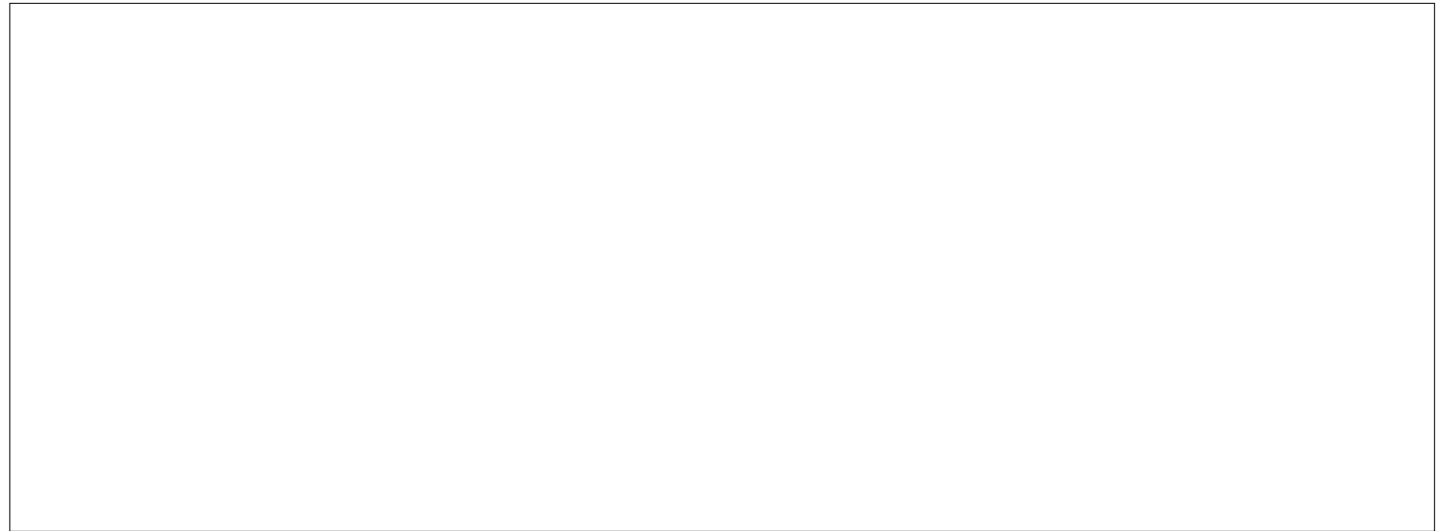
# IRで何が分かるか？ (p.415)

---

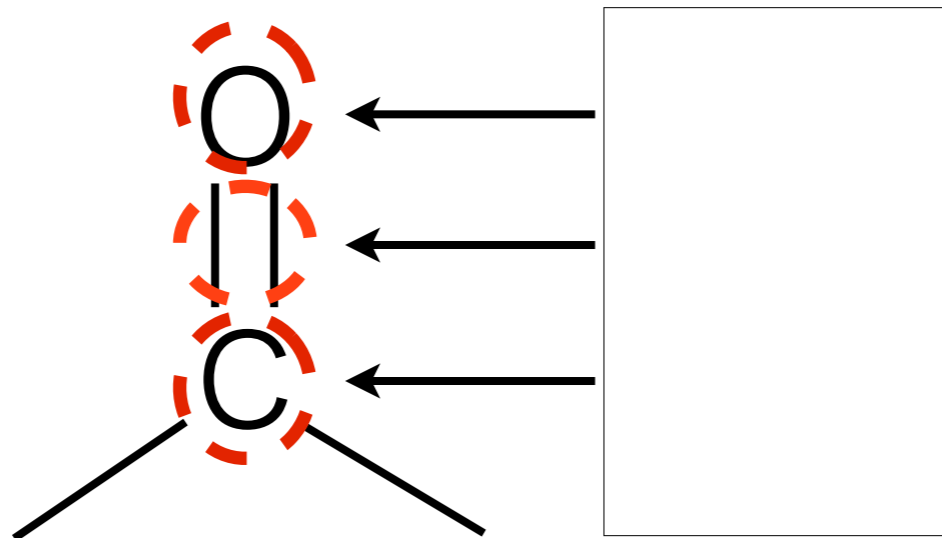
NMR . . . . .



IR . . . . .

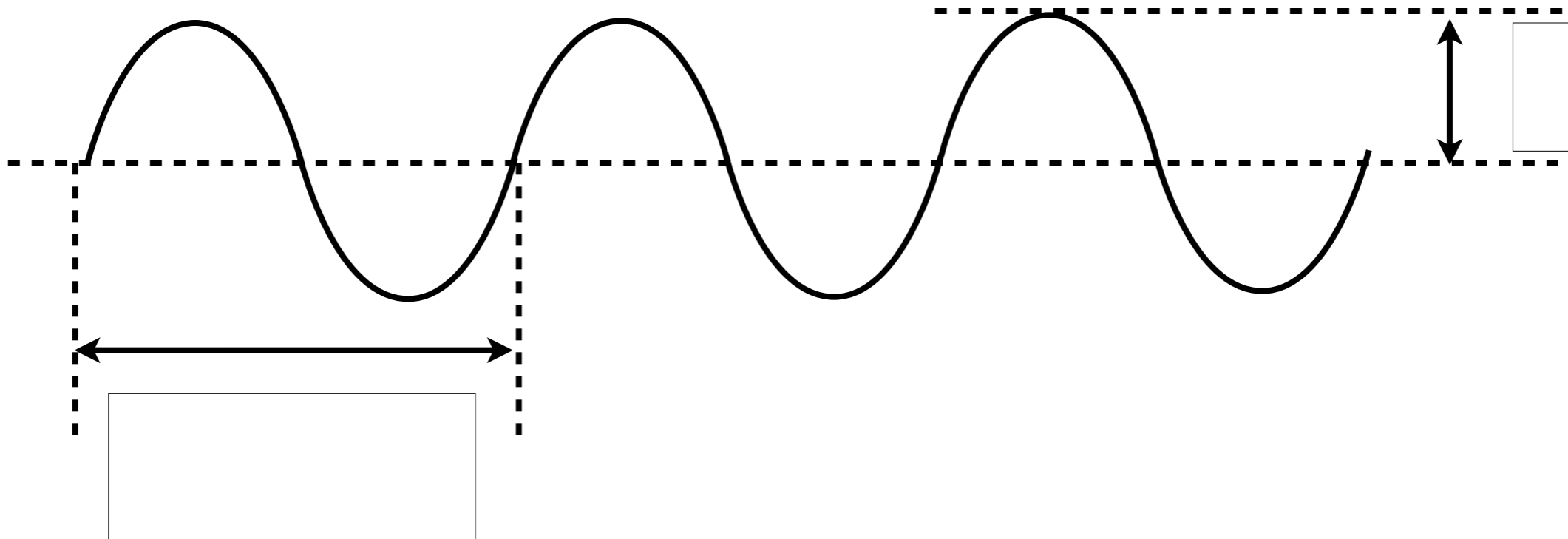


-----  
それぞれの  
情報を  
得るに  
は？



# 電磁波 (p.412)

電磁波とは . . . .



空間そのものが振動するので、  
媒質がない真空中でも伝播する

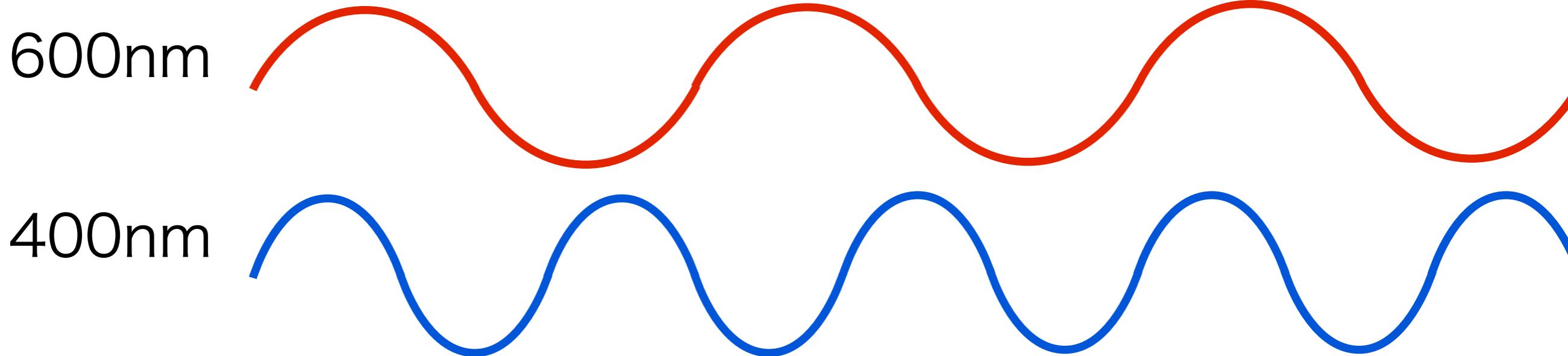
# 電磁波の波長と振動数と速度 (p.413)

波の速度



例 波長600nmと400nmの場合

同じ速度



エネルギー[eV]	1200	120	12	1.2	0.12	0.012
波数[cm <sup>-1</sup> ]	10 <sup>7</sup>	10 <sup>6</sup>	10 <sup>5</sup>	10 <sup>4</sup>	10 <sup>3</sup>	10 <sup>2</sup>
波長	1nm	10nm	100nm	1μm	10μm	100μm

電磁波の種類	X線	紫外線	可視光線	赤外線	マイクロ波
--------	----	-----	------	-----	-------

近赤外線  
3μm~80μm

中赤外線  
3μm~15μm

遠赤外線  
15μm~100μm

波数は波長の逆数

以下のウェブサイトは色々な光の特徴・利用例が分かる

<https://www.tele.soumu.go.jp/j/adm/freq/search/myuse/summary/>

# エネルギー

赤外領域（人間には見えない）



$10^{-4}$

$10^{-3}$

$10^{-2}$

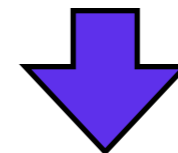
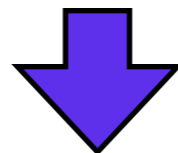
$10^{-1}$

波長  
(cm)  $(\lambda)$   
ラムダ

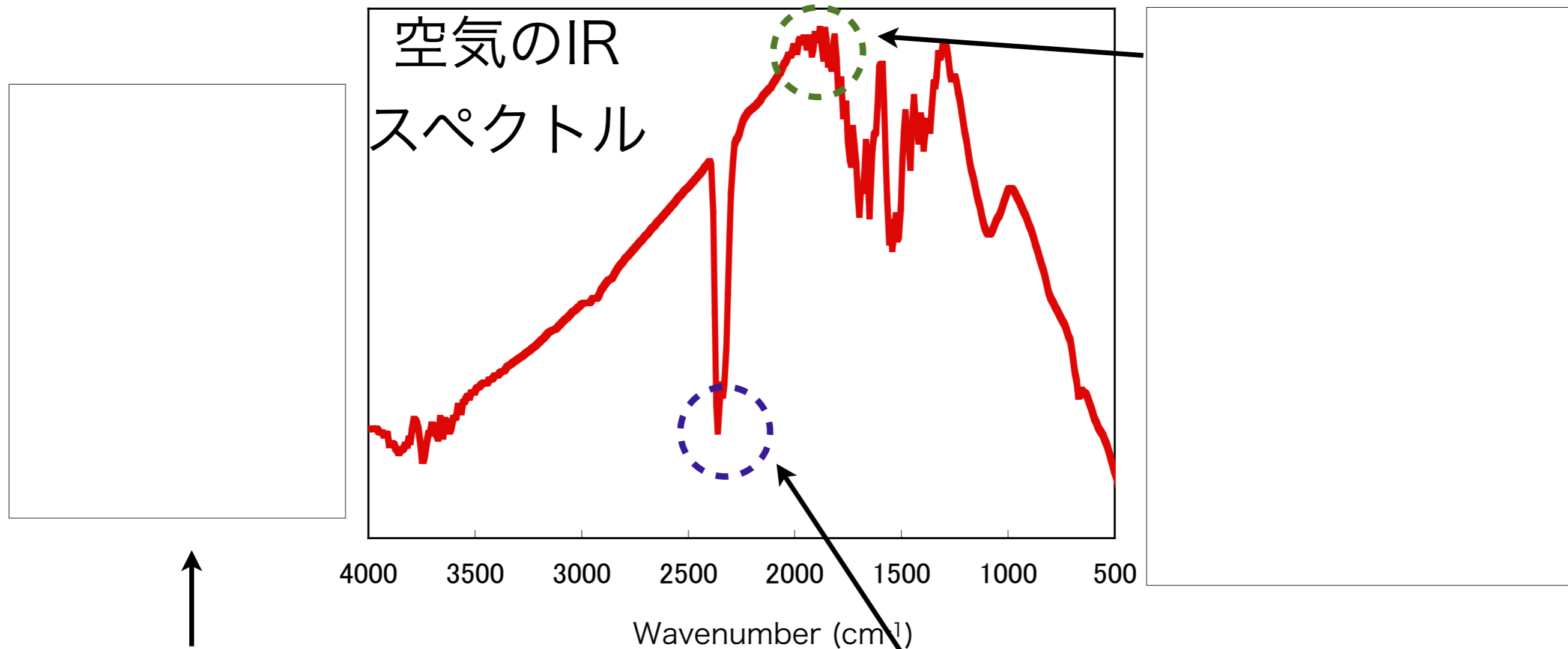
wavelength

$2.5 \times 10^{-4}$

$2.5 \times 10^{-3}$



# IRスペクトルの例 (p.414)



↑  
どちらかで  
表示される

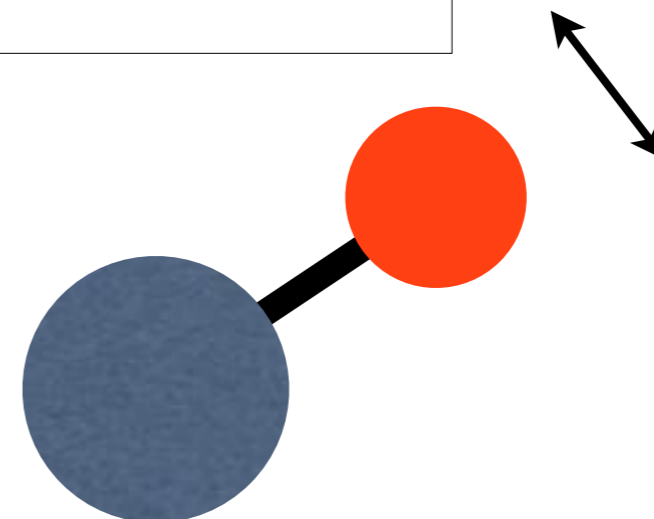
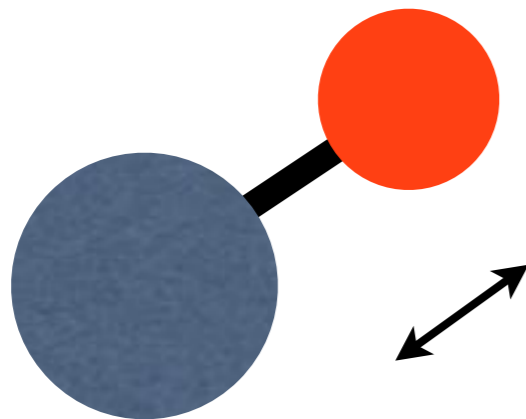
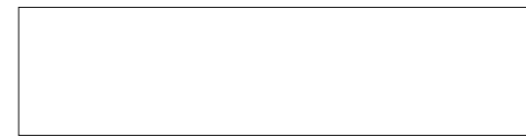
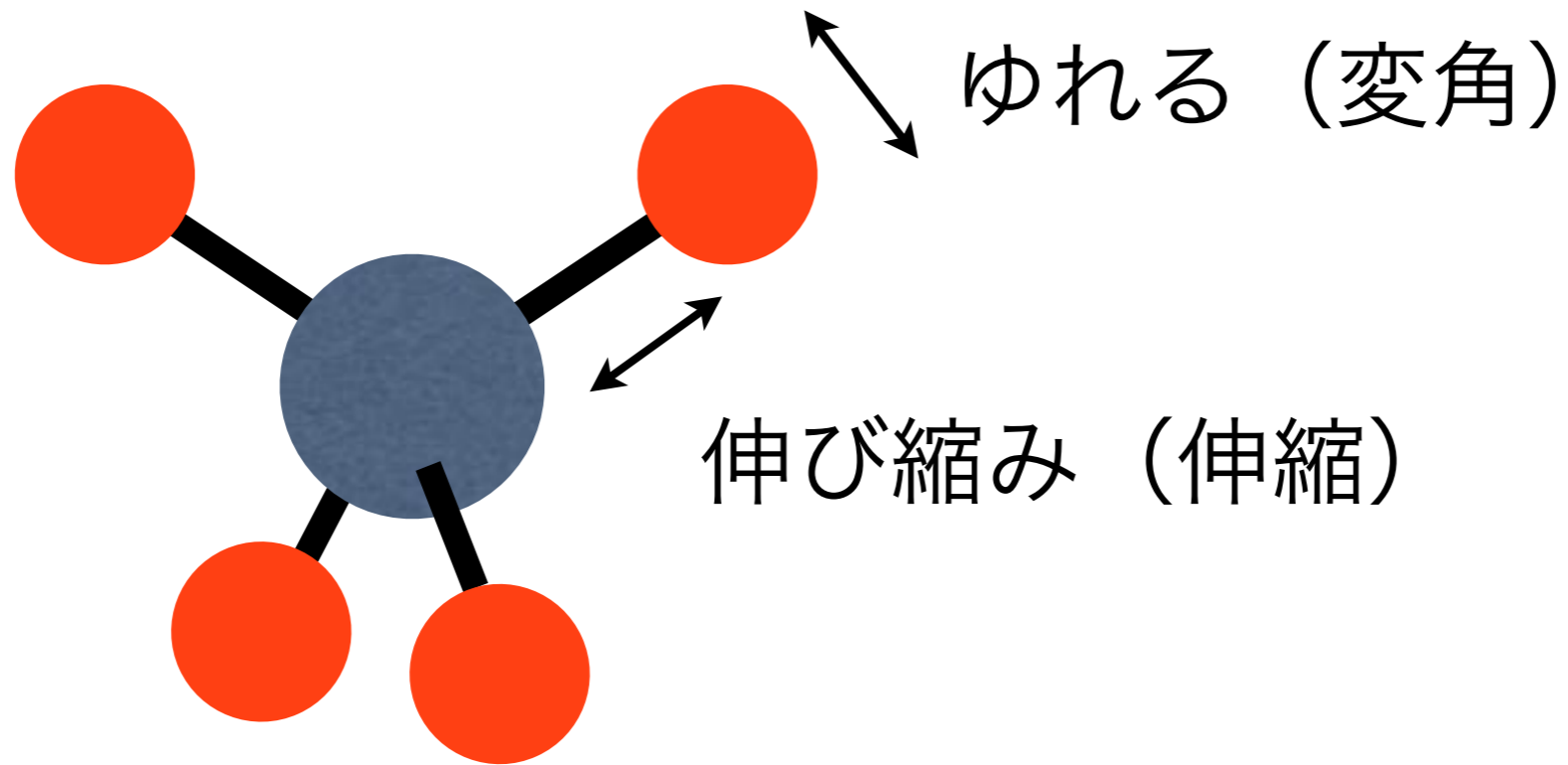
**透過率100% = 吸収0%**

**透過率0% = 吸収100%**



# IRの吸収で何が起きるか？ (p.415)

前提： 結合は常に動いている

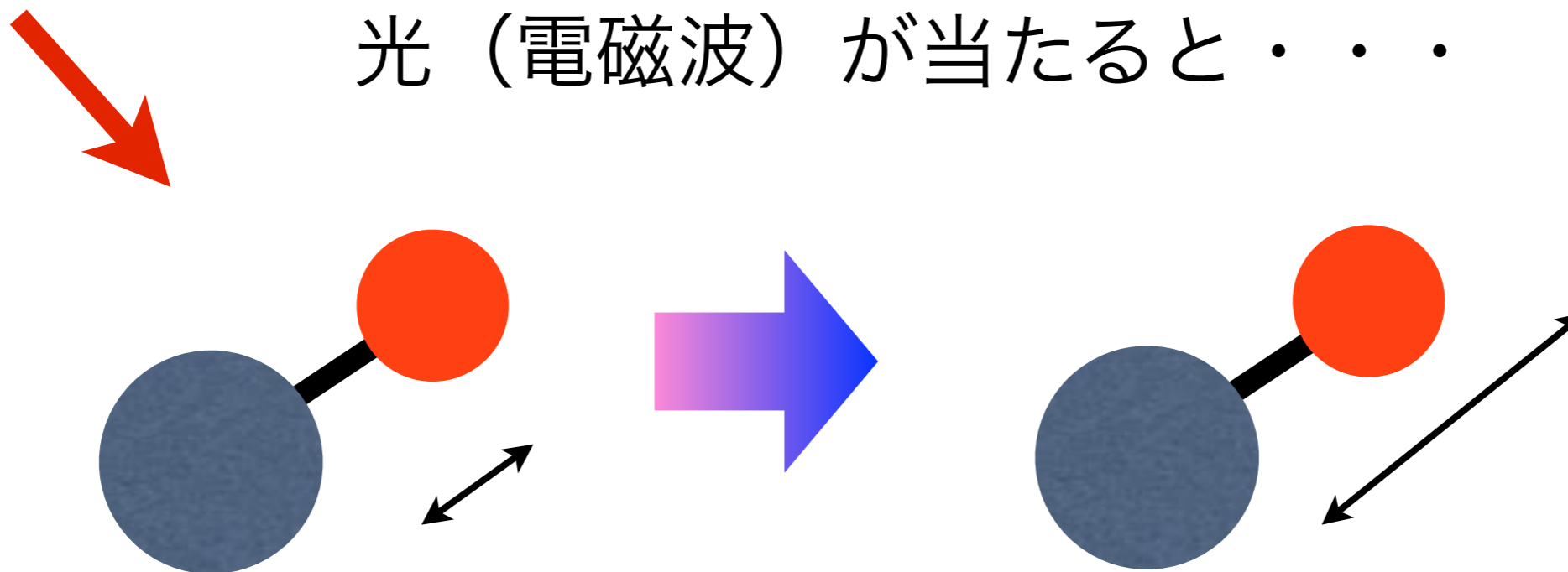


**結合の種類ごとに振動数が決まっている**

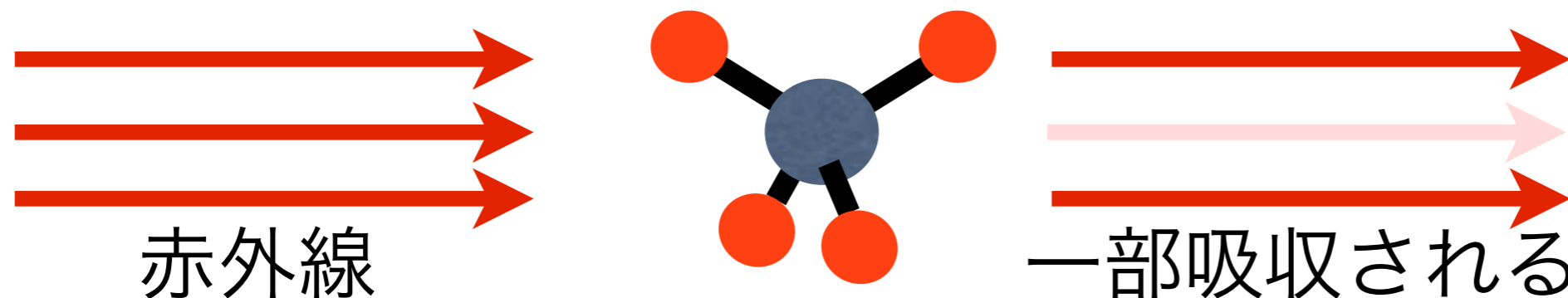
# IRの吸収で何が起きるか？

結合の振動に等しい振動数をもつ

光（電磁波）が当たると・・・



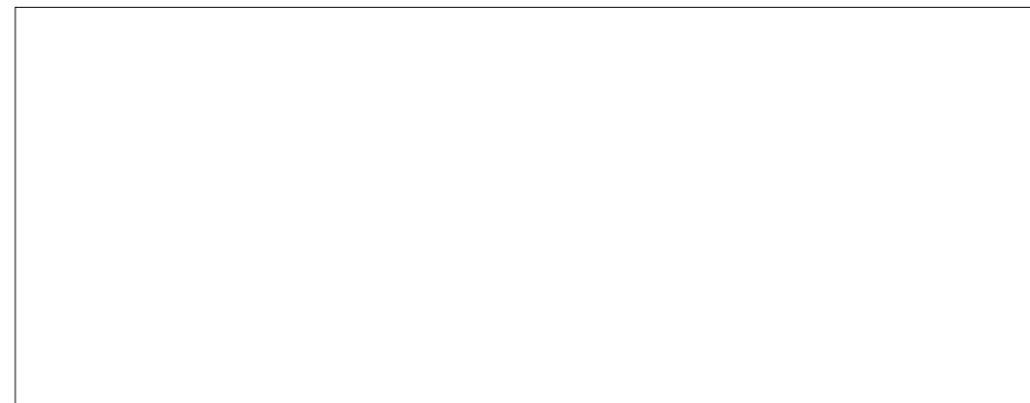
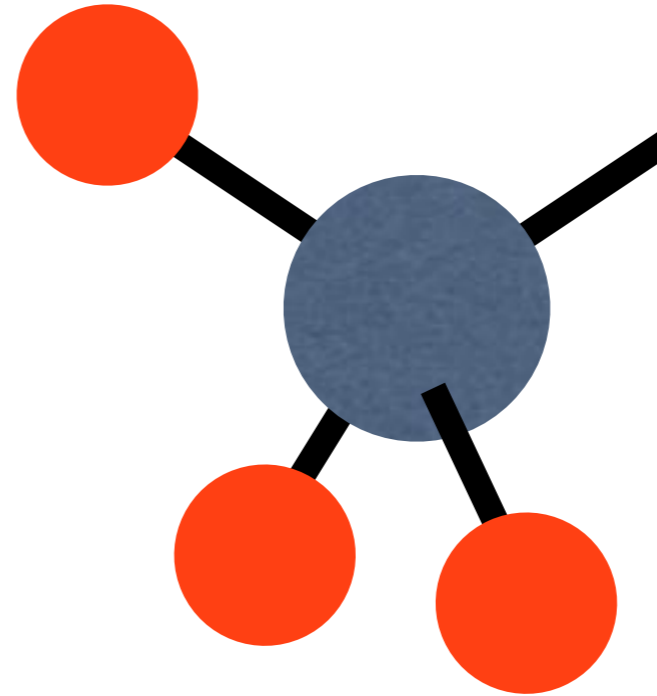
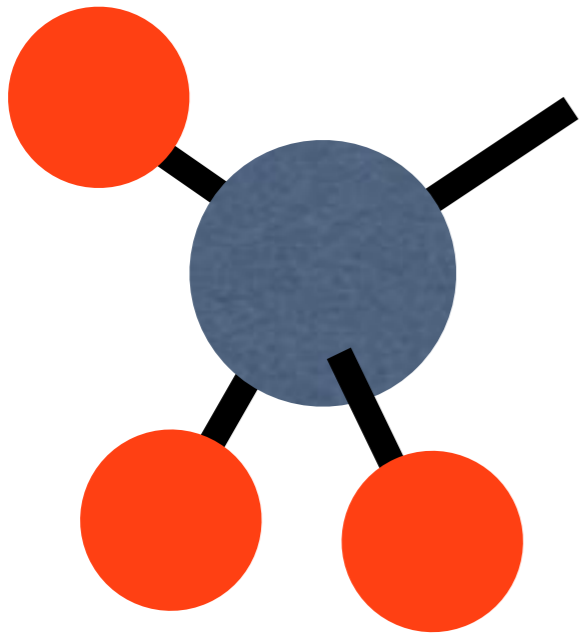
これを利用した測定



振動数ごとに  
吸収された  
光の量を測定

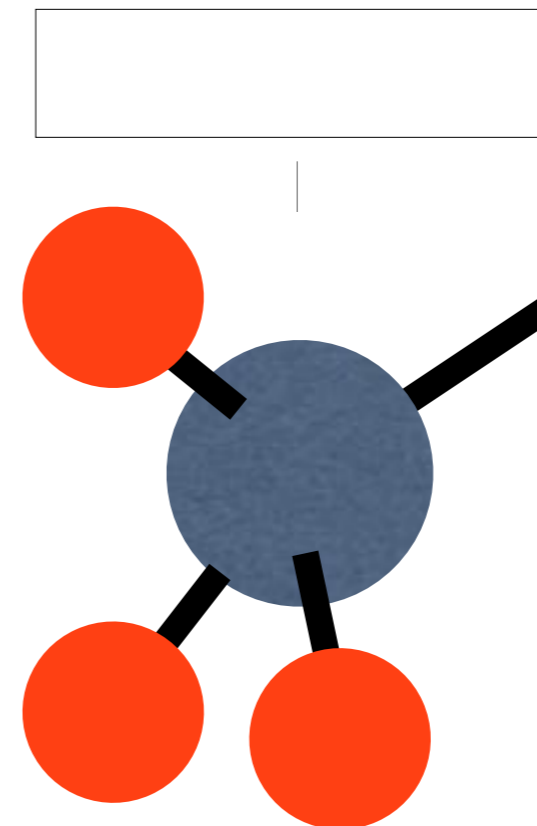
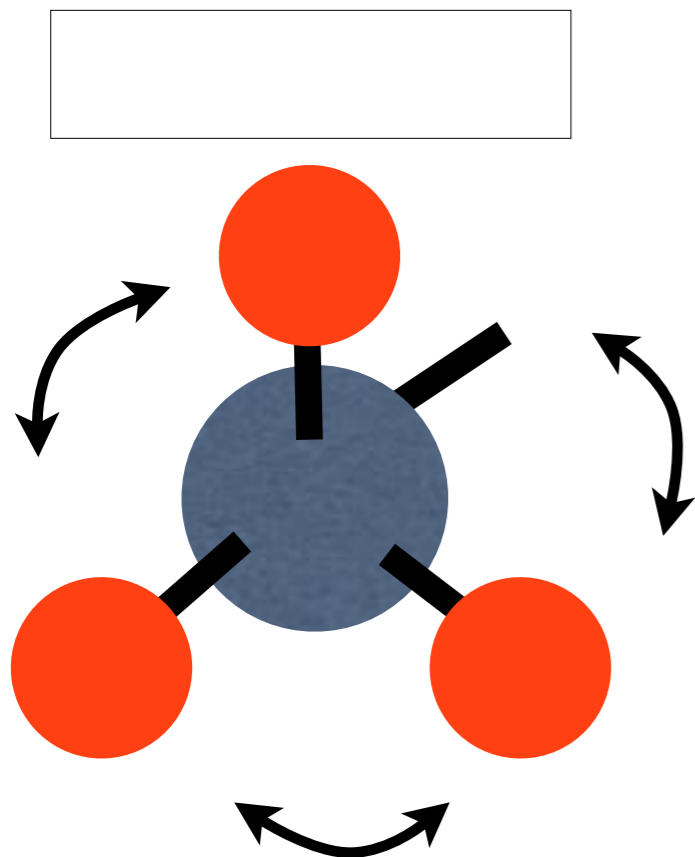
# 振動の種類 (p.415)

---



**一般に伸縮振動の方が変角振動より重要**

# 振動の種類 (p.415)



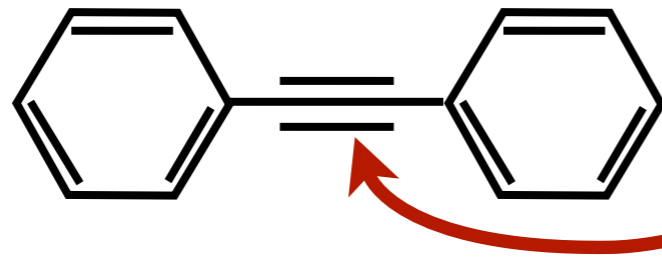
## 参考

いずれも方向の違いによって振動数は変わる  
 (対称面内変角 (はさみ) ・ 逆対称面内変角 (横ゆれ) など)

# IRで注意すべきこと

- 全ての官能基が目立つ吸収を持つわけではない

例



非常に弱く

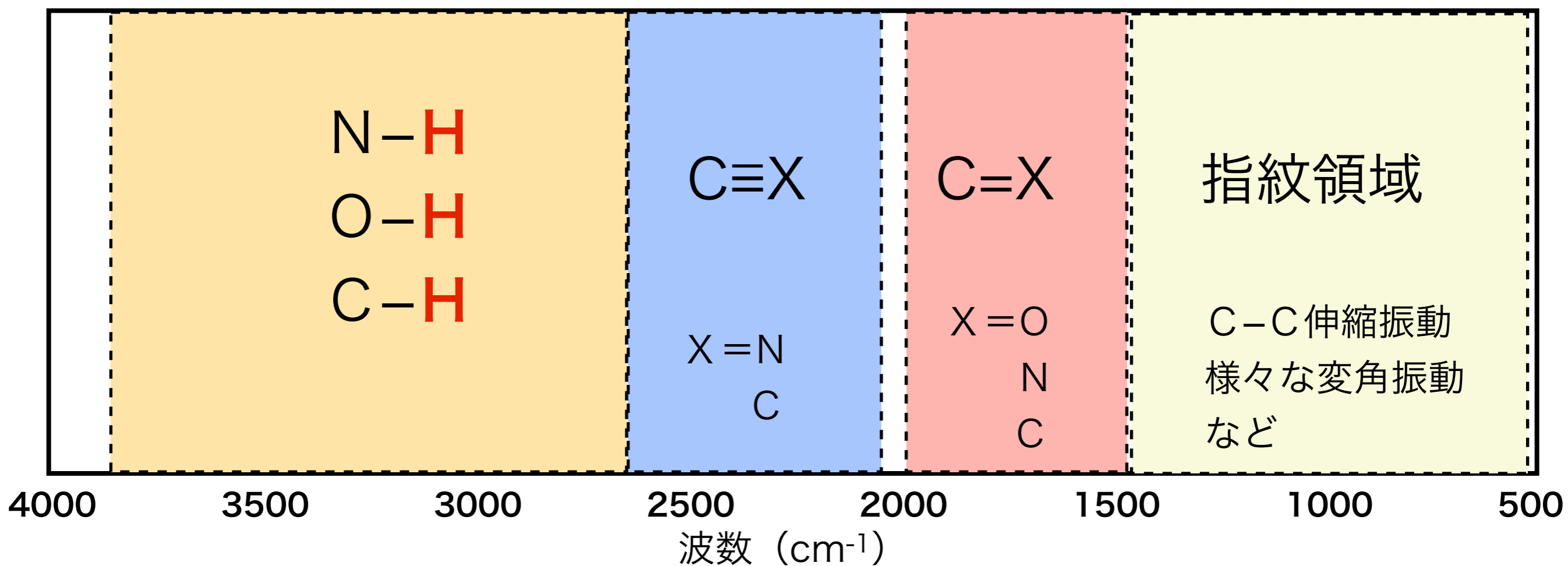
ほとんど観測されない

- 全体としての形状よりもピーク位置（横軸の波数）が重要
- 何が存在しているかを見るのに有効  
（目立つものであれば微量でも観測可）

例： 1枚目のCO<sub>2</sub>

# IRの特性吸収領域と官能基 (417-418)

それぞれ伸縮振動



# それぞれの振動領域が異なる理由

**X-H 単結合**      **三重結合**      **二重結合**      **C-X 単結合**



4000      3500      3000      2500      2000      1500      1000      500  
波数 (cm<sup>-1</sup>)

短      大      **波長**      **振動数**      長      小

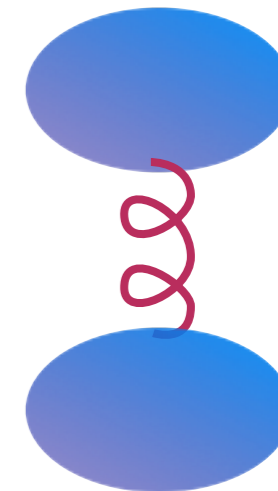
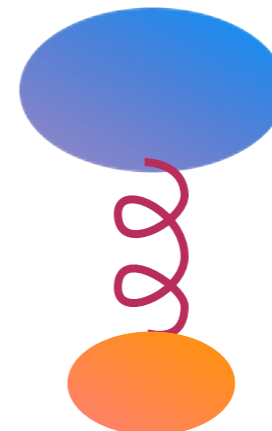
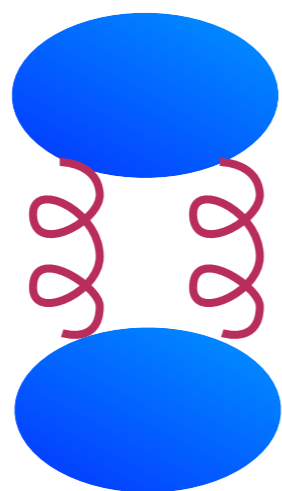
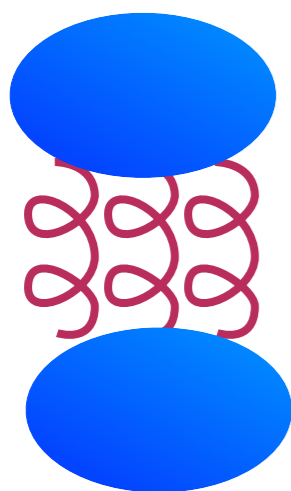
三重結合

二重結合

単結合

C-H

C-C



# 特に重要な特性吸収

**X-H 単結合**

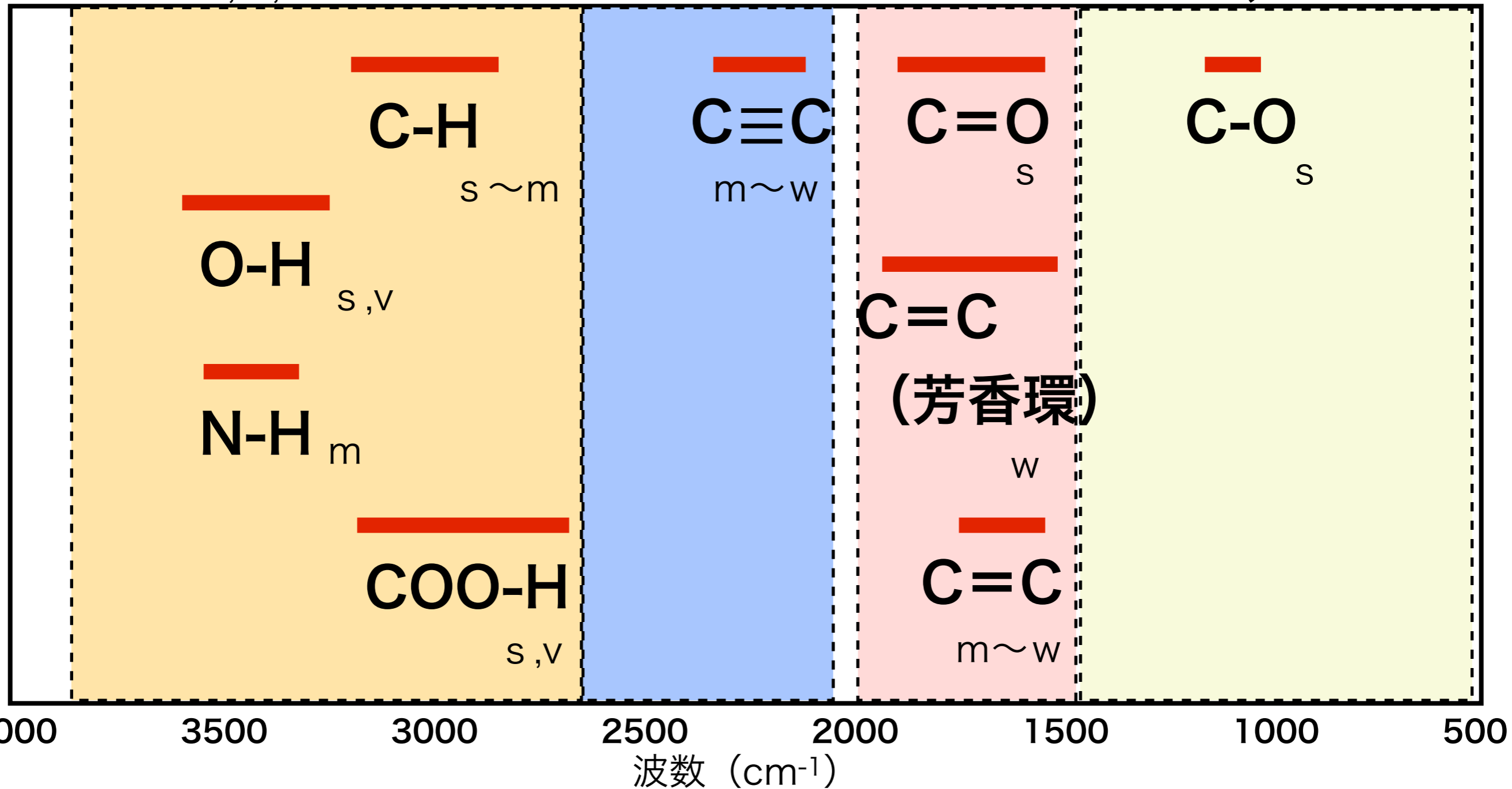
X = C, O, N etc.

**三重結合**

**二重結合**

**C-X 単結合**

X ≠ H



s : 強い

m : 中程度

w : 弱い

v : 幅広い



# 様々な官能基の特性吸収 (表12・1改)

官能基	吸収位置 ( $\text{cm}^{-1}$ )	吸収強度	官能基	吸収位置 ( $\text{cm}^{-1}$ )	吸収強度
アルカン C-H		m	ニトロ NO <sub>2</sub>		s
アルケン =C-H C=C		m m	芳香環 C-H C=C	1450-1600	m s ~ m m (△)
アルキン ≡C-H C≡C		s m	アミン N-H N-C	1030-1400	m m (△)
ハロゲン化アルキル C-Cl C-Br	600-800 500-600	s (△) s (△)	カルボニル C=O		s
アルコール O-H C-O		s、v s	カルボン酸 O-H		s、v
エステル・エーテル等の C-O		s	ニトリル C≡N		m

△は実用性が低い (他の吸収との判別が困難)

# 問題12・7

---

(a)  $1710\text{cm}^{-1}$ に強い吸収をもつ化合物

(b)  $1540\text{cm}^{-1}$ に強い吸収をもつ化合物

(c)  $1720\text{cm}^{-1}$ と $2500\sim 3100\text{cm}^{-1}$ に強い吸収をもつ化合物