

水と灯油の近赤外スペクトルと 発光ダイオードを用いた 近赤外分光の教材化の検討

松村敬治・永野亜弥[†]・松岡亜由美[†]

Near-Infrared Spectra of Water and Kerosene and
Potentiality of Science Teaching Materials Using Light Emitting
Diodes to Explain Near-Infrared Spectroscopy

Keiji Matsumura, Aya Nagano, and Ayumi Matsuoka

はじめに

光と物質の相互作用が起きる条件は、光の周波数が物質を構成する原子や分子の固有運動の振動数に一致することである。その条件を満たす「光の種類」と「物質の固有運動の種類」は、周波数の低い方から、それぞれ、「マイクロ波」と「分子の回転運動」、「赤外線」と「分子の振動運動」、そして、「可視光・紫外線」と「分子の電子の運動」あるいは「原子の外殻電子の運動」である。これらを分光学的に測定するときは、それぞれ、「マイクロ波分光による回転スペクトルの測定」、「赤外分光による振動スペクトルの測定」、そして、「可視・紫外分光による電子スペクトルの測定」と呼ばれるものになる。

我々は従来から物質と光の相互作用を利用した教材作りを行ってきた。マイクロ波分光では、液体の試料にマイクロ波を照射することで、分子の形を判定する教材を製作[1]した。一方、可視・紫外分光では、発光ダイオードを基板

[†] 本学児童教育学科 19 期生

上に波長順に並べて配置した「虹ボード」と呼ばれる演示実験用の教材を製作[2,3]した。また、同じ可視領域で、シャボン玉やセッケン膜の膜厚を干渉スペクトルにより高精度に測定する教材も製作[4-9]した。しかし、赤外分光に関連した教材はまだ製作していない。そこで、本研究は赤外領域の振動分光に関連する教材開発を目的としている。

ここで、赤外線を表記法についてコメントする。赤外線の種類は、波長か波数のいずれかを用いて表記することが多い。波長とは、1個の波が空間に占める長さで、単位は μm か nm を用いる。一方、波数の単位は cm^{-1} を用い、カイザーと読んで、1cm当たりの波の数で表す。

通常の振動分光は、波数 $4000 \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ （波長 $2.5 \sim 25 \mu\text{m}$ ）の中赤外線領域で行われる。この中で、とりわけ波数 $1800 \sim 800 \text{ cm}^{-1}$ の領域は、有機化合物の官能基が特徴的な吸収を与えるので分子指紋領域とも呼ばれ、赤外分光の中で最も重要な領域となっている。この領域の赤外分光を高校化学の授業に取り入れた教材は、1976年に梅木ら[10]によって報告されたが、測定機器の設備などの制約のために、この斬新な試みは一部の高校[11]でしか実施されなかった。

赤外分光は、吸収波数により分子の結合の違いを見分けることができるので、分子を実感する教材として有望であるが、赤外分光の教材化の難しさは、高価な分析機器を必要とすることと、目で見えない光を相手にすることにある。そこで本研究では、市販されていて安価に入手可能な近赤外領域で発光する発光ダイオード(LED)にスポットを当て、これを用いた近赤外領域の振動分光の教材化の可能性を検討することにした。

近赤外領域は、波数 $12500 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ （波長 $800 \sim 2500 \text{ nm}$ ）の可視光に近い赤外線の領域のことである。通常の振動運動（基本振動）は中赤外線領域に現れるので、近赤外領域では殆ど吸収を持たないが、水素原子を含む結合の振動運動は結合音や高次倍音がこの領域で比較的強い吸収を持つことが知られている。そこで、本研究では、手始めに、水のOH振動と灯油のCH振動の違いを、近赤外LEDを用いて区別することができるか、水と灯油の分光実験で確認することにした。振動分光の教材として水と灯油を選んだのは、身近で、

入手し易い実験材料だからである。

本稿では、最初に水と灯油の近赤外スペクトルの測定法と解析法について解説し、続いて、水と灯油を近赤外 LED で区別するための検証実験と教材化の可能性についての検討結果について報告する。

水と灯油の近赤外スペクトルの測定

写真 1 に 100 mL のガラス製の角型メディウム瓶に入れた水（蒸留水）と灯油（石油ストーブ用の市販の灯油）を示す。水と灯油の違いは、臭いを嗅げば簡単に区別できるが、見た目ではどちらも透明なので区別がつかない。この水と灯油を分光学的に区別する近赤外 LED を選定するための準備として、近赤外スペクトルを測定した。試料を入れたメディウム瓶は、分光測定を行うときは、長さ 4 cm の吸収セルとなる。

水と灯油の近赤外スペクトルの測定には、2 台の分光器を用いた。写真 2 に波長 950 ~ 1650 nm（波数 10530 ~ 6060 cm^{-1} ）の領域を測定できる Ocean Optics 製の近赤外マルチチャンネル分光器 Flame-NIR とタンゲステンハロゲ

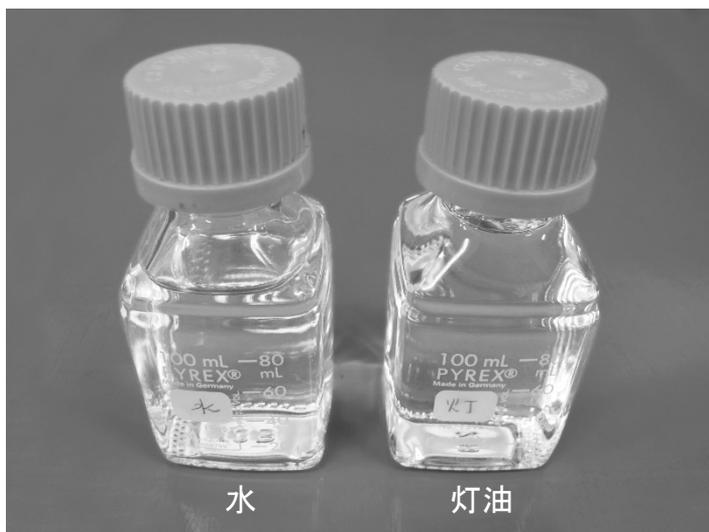


写真 1 ガラス製の角型メディウム瓶に入れた水（左）と灯油（右）



写真2 近赤外スペクトルの測定に用いた分光装置

ン光源 HL-2000-FHSA-LL を用いた分光装置を示す。この写真が示すように、光源から出た光は、吸収セルを透過して分光器に入るまで、光ファイバーを使って誘導した。一方、波長 700 ~ 1000 nm (波数 $14300 \sim 10000 \text{ cm}^{-1}$) の領域の測定には、Ocean Optics 製の広帯域マルチチャンネル分光器 USB2000+XR1-ES を用いて、写真2と同様な光学系の装置を使って行った。分光結果の解析は、2つの分光器からのスペクトルをつなぎ合わせて1つのスペクトルにして行った。

図1に、100 mLの角型メディウム瓶を吸収セルにして測定した水の近赤外領域の透過スペクトルを示す。横軸は波数で、縦軸は透過率 (T%) である。セルの長さが4 cm とかなり長いため、 6000 cm^{-1} から 9000 cm^{-1} の範囲のスペクトルは吸収が強すぎて振動バンドが区別できなくなっている。そこで、長さ1 cmの吸収セルを使って再測定したスペクトルを図2に示す。その図では 8400 cm^{-1} と 7000 cm^{-1} のバンドが区別できていることがわかる。これらのバンドの帰属については、後で解説する。

図3には、角型メディウム瓶 (長さ4 cm) を吸収セルにして測定した灯油

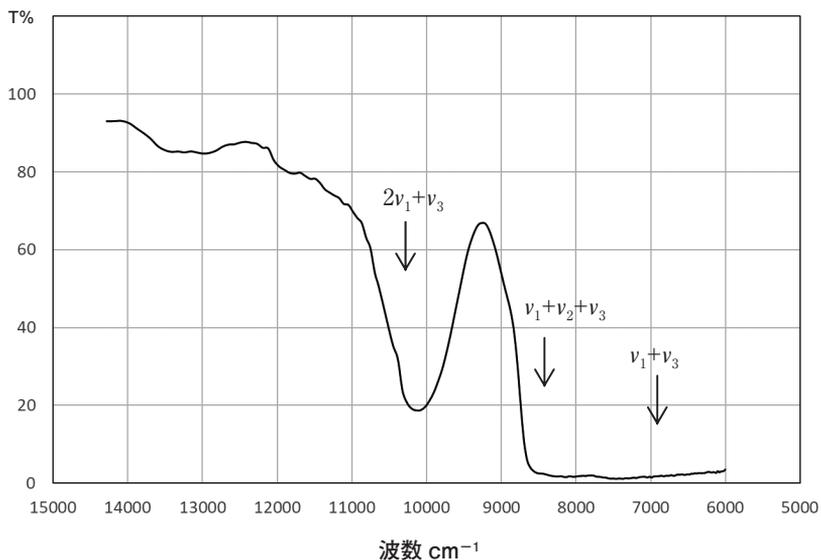


図1 水の近赤外スペクトル (セル長 4 cm)

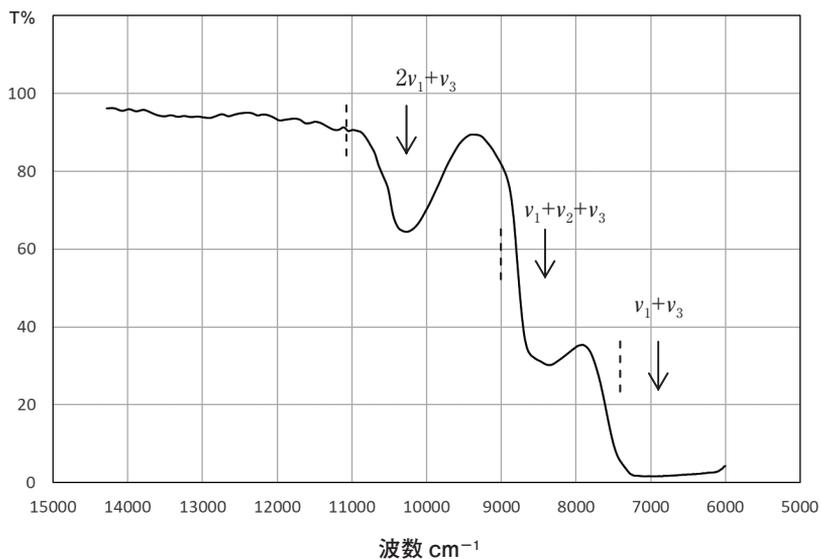


図2 水の近赤外スペクトル (セル長 4 cm, 点線は計算値)

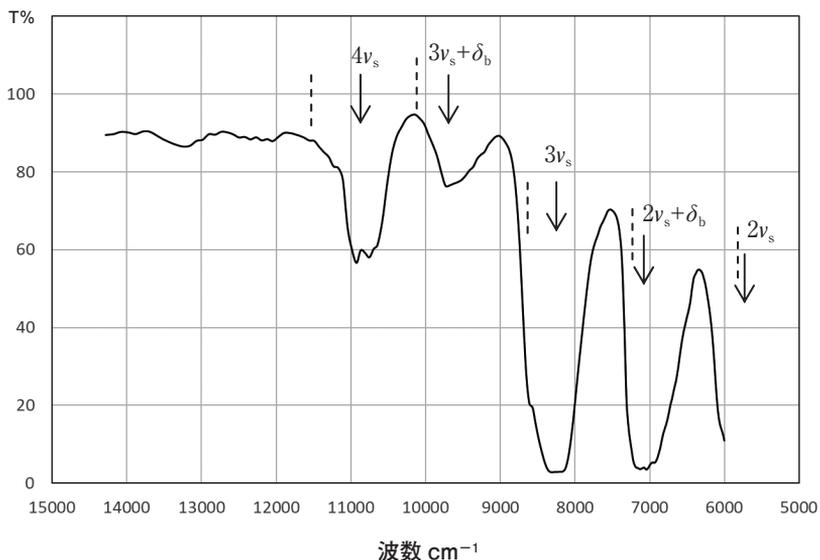


図3 灯油の近赤外スペクトル（セル長4 cm，点線は計算値）

の近赤外領域の透過スペクトルを示す。10860 cm^{-1} と 9680 cm^{-1} に弱い吸収が、8240 cm^{-1} と 7070 cm^{-1} に強い吸収が見える。また、5500 cm^{-1} にも強い吸収が見えかけている。これらのバンドの帰属については、後で解説する。

水 (H_2O) の近赤外スペクトルの帰属

水 (H_2O) は C_{2v} 対称性に属する非直線3原子分子なので、図4に示すような3つの振動モードを持つ。その内訳は、 ν_1 と呼ばれる対称伸縮振動、 ν_2 と呼ばれる変角振動、および、 ν_3 と呼ばれる逆対称伸縮振動である。それぞれの基本音の振動波数はShimanouchi[12]が監修した表から、 ν_1 が 3657 cm^{-1} 、 ν_2 が 1595 cm^{-1} 、 ν_3 が 3756 cm^{-1} となる。今後、 ν_i ($i=1, 2, 3$) という記号に2つの意味を持たせることにする。1つ目は振動モードの表記に用い、2つ目は基本音の振動波数を表す変数として用いる。

H_2O に許される振動運動のエネルギー準位は、 ν_1 、 ν_2 、および ν_3 のそれぞれに対応する振動の量子数の n_1 、 n_2 、および n_3 を用いて、 (n_1, n_2, n_3) と表現す

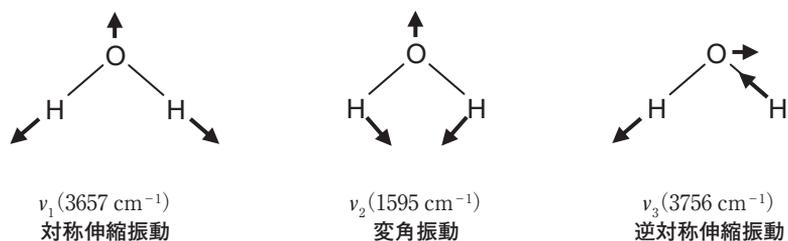


図4 水の3つの振動モードと振動波数

ることにする。ここで、振動の量子数はゼロを含む自然数である。振動運動のエネルギー単位に対しては、文献[13]に厳密な式が提示されているが、本稿では、その式の主要項 (main term) のみを使って近似的に議論する。

赤外分光では基底状態、即ち、(0, 0, 0) 状態から、振動励起状態、即ち、(n_1 , n_2 , n_3) 状態への遷移スペクトルを測定することになるが、そのスペクトルを帰属した結果は、 $n_1\nu_1 + n_2\nu_2 + n_3\nu_3$ バンドと記述される。そして、その遷移波数 (cm^{-1}) は、調和振動だけを仮定すると、次の (1) 式で近似できる。

$$n_1\nu_1 + n_2\nu_2 + n_3\nu_3 = 3657 \times n_1 + 1595 \times n_2 + 3756 \times n_3 \quad (1)$$

実際に測定される遷移波数は、振動ポテンシャルエネルギーの非調和性の寄与があるので、少し小さな目の値になるが、そのことも含めて、(1) 式は、水の近赤外スペクトルを帰属するときを目安となる値を与える。

ここで、スペクトルの強度についてコメントする。調和振動子近似では、基底状態からの基本音の遷移、即ち、量子数の和 $n_1 + n_2 + n_3$ が 1 となる遷移が許容となる。結合音や倍音の遷移、即ち、 $n_1 + n_2 + n_3$ が 2, 3, 4, … となる遷移は、非調和性由来する遷移であり、一般に、スペクトルの強度は、 $n_1 + n_2 + n_3$ の値が 1 つ増えるごとに桁違いに小さくなる。それ故、結合音や倍音が現れる近赤外領域のスペクトルは、基本音が現れる中赤外領域のスペクトルに比べて、強度が極端に弱くなるので、測定するときは、セルの長さを長めに設定する必要がある。

続いて、図2の水の近赤外スペクトルの帰属を(1)式と比較しながら考えてみよう。気体状態の水分子(H_2O)については、赤外から可視領域までの振動分光の結果を、Hertzberg[13]が表にまとめている。しかし、液体状態の水の場合、分子間相互作用が強いために気体状態とは少しだけ異なる値を取るのので、ここでは、文献[14]の液体状態の水のデータを参考にして解説する。

図2の 7000 cm^{-1} 付近の強い吸収は、 $\nu_1 + \nu_3$ バンドで、波数 6890 cm^{-1} (波長 1450 nm)に吸収中心がある[14]。一方、(1)式からの計算値は、 7413 cm^{-1} となり、実測値は計算値よりも 523 cm^{-1} 小さな値になった。そのバンドの高波数側の強い吸収は、 $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ バンドに帰属し、吸収中心は波数 8400 cm^{-1} (波長 1190 nm)であった。これに対応する(1)式からの計算値は、 9008 cm^{-1} となり、実測値は計算値よりも 608 cm^{-1} 小さな値になった。波数 10260 cm^{-1} (波長 975 nm)の吸収は、 $2\nu_1 + \nu_3$ バンドに帰属した。これに対応する(1)式からの計算値は、 11070 cm^{-1} となり、実測値は計算値よりも 810 cm^{-1} 小さな値になった。

図2においては、それぞれのバンドの中心波数の位置を矢印で示し、そのバンドに対応する計算値を点線で示した。いずれも計算値は実測値より大きな値になっているが、両者は良く対応しているので、(1)式が帰属の目安を与えることがわかる。

灯油の近赤外スペクトルの帰属

灯油は、炭素数が9から15の炭化水素を主成分とする原油の蒸留精製物である。ここでは、灯油が飽和炭化水素だけから構成されていると仮定して議論する。一般に、炭素数を n とすると、飽和炭化水素の分子式は $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ と表現できるが、その炭化水素に対する基準振動モードの数は $9n$ 個あるので、 n が大きい場合は、中赤外領域のスペクトルが複雑になる。しかし、近赤外領域で問題となる結合音や倍音は、CH伸縮振動が関与したバンドと、HCH変角振動が関与したバンドだけである。ここでは、CH伸縮振動(stretching)に属する振動を ν_s と記し、HCH変角振動のうち、はさみ振動(bending)に属する振動を δ_b と記すことにする。図5に、それらの振動モードの具体的な形を示

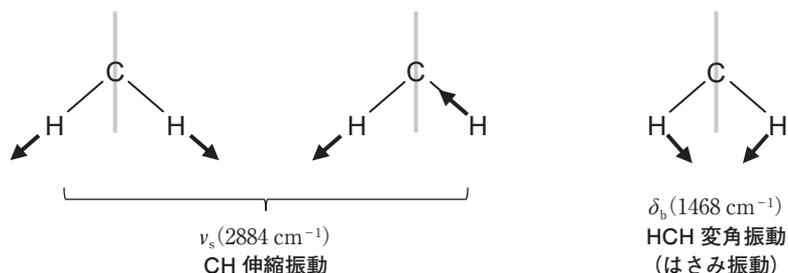


図5 炭化水素（灯油）の結合音や倍音に関係した振動モードと振動波数

す。図において、炭素の元素記号の位置に描いた垂直の棒は、その棒の延長上に炭素骨格があることを示す。ここで重要なことは、 ν_s と δ_b は、それぞれ、単一の基準モードを表しているのではなく、類似した振動モードと振動波数を持つたくさんの振動をひとまとめにして表記しているということである。それぞれの振動波数は、岩本[15]のポリエチレンの値を参考にして、 ν_s に対して 2884 cm^{-1} 、 δ_b に対して 1468 cm^{-1} を用いることにする[16]。ここで、 ν_s と δ_b に対して2つの意味を持たせることにする。1つ目は振動モードの表記に用い、2つ目は振動波数を表す変数として用いる。

近赤外スペクトルに関係する振動単位は、 ν_s と δ_b に対応する振動の量子数（ゼロを含む自然数）の n_s と n_b を用いて (n_s, n_b) と表記することにする。また、基底状態 $(0, 0)$ から振動状態 (n_s, n_b) への遷移は、 $n_s\nu_s + n_b\delta_b$ バンドと呼ぶことにするが、その遷移波数 (cm^{-1}) は、(1)式に類似した次の(2)式で近似できる。

$$n_s\nu_s + n_b\delta_b = 2884 \times n_s + 1468 \times n_b \quad (2)$$

実測される遷移波数は、振動ポテンシャルエネルギーの非調和性の寄与があるので、少し小さな目の値になるが、そのことも含めて、(2)式は、炭化水素の近赤外スペクトルを帰属するときに目安となる値を与える便利な式となる。

ここで、炭化水素の赤外スペクトルの強度についてコメントする。炭化水素も水分子と同じように調和振動子近似では、基底状態からの基本音の遷移、

即ち、量子数の和 $n_s + n_b$ が 1 となる遷移が許容となる。結合音や倍音の遷移、即ち、 $n_s + n_b$ が 2, 3, 4, … となる遷移は、振動の非調和性に由来する遷移であり、一般に、スペクトルの強度は、 $n_s + n_b$ の値が 1 つ増えるごとに、桁違いに弱くなる。それ故、結合音や倍音は、基本音が現れる中赤外領域のスペクトルに比べて、強度が極端に小さくなるので、炭化水素の近赤外領域のスペクトル測定するときは、セルの長さを長めに設定する必要がある。

続いて、図 3 の灯油の近赤外スペクトルを (2) 式を参考にして帰属してみよう。図 3 の 6000 cm^{-1} より低い波数にある強い吸収は、 $2\nu_s$ バンドに帰属し、その中心波数は、ポリエチレンの値[15] から 5720 cm^{-1} と推定した。一方、(2) 式からの計算値は、 5768 cm^{-1} となった。その高波数側の強い吸収は、中心波数が 7070 cm^{-1} (波長 1410 nm) で、 $2\nu_s + \delta_b$ バンドに帰属した。これに対応する計算値は、 7236 cm^{-1} となり、計算値は実測値よりも 166 cm^{-1} 大きな値になった。波数 8240 cm^{-1} (波長 1210 nm) の強い吸収は、 $3\nu_s$ バンドに帰属した。これに対応する計算値は、 8652 cm^{-1} となり、計算値は実測値よりも 412 cm^{-1} 大きな値になった。波数 9680 cm^{-1} (波長 1030 nm) の弱い吸収は、 $3\nu_s + \delta_b$ バンドに帰属した。これに対応する計算値は、 10120 cm^{-1} となり、計算値は実測値よりも 440 cm^{-1} 大きな値になった。波数 10860 cm^{-1} (波長 920 nm) の弱い吸収は、 $4\nu_s$ バンドに帰属した。これに対応する計算値は、 11536 cm^{-1} となり、計算値は実測値よりも 676 cm^{-1} 大きな値になった。図 3 においては、それぞれのバンドの中心波数の位置を矢印で示し、そのバンドに対応する (2) 式からの計算値を点線で示した。いずれも計算値は実測値より大きな値になっているが、両者は良く対応しているので、今回の帰属が妥当であることを示している。

水と灯油を区別するための近赤外 LED の選定

水と灯油を分光学的に区別するために使用する近赤外 LED として、いくつかの候補の中から、次の 4 つを選び出した。

- ① 880 nm で発光する OSRAM の SFH485

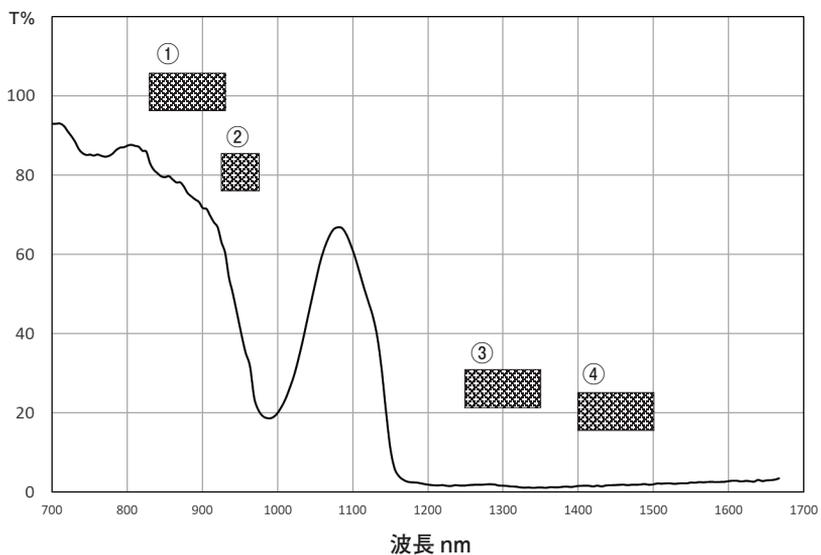


図6 水のスペクトルと4つのLEDの発光領域

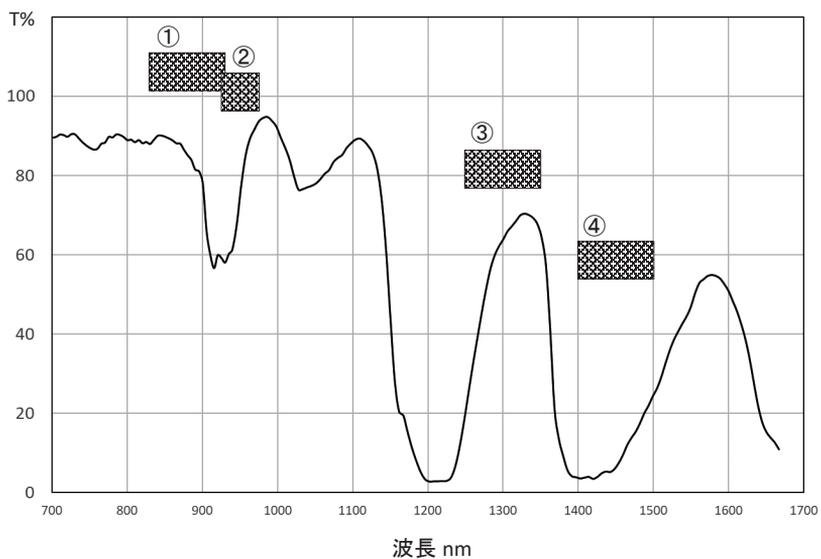


図7 灯油のスペクトルと4つのLEDの発光領域



写真3 近赤外LEDを光源に用いた分光装置

- ② 950 nm で発光する Vishay の TSUS5202
- ③ 1300 nm で発光する京都セミコンダクターの KEDE1304H
- ④ 1450 nm で発光する京都セミコンダクターの KEDE1454H

今後、必要に応じて、4つのLEDを、順番に、①、②、③、および④と呼ぶことにする。これらのLEDの仕様書に記載された発光波長の半値幅は、②のTSUS5202の50 nmを除いて、約100 nmであった。図6の水と図7の灯油のスペクトルチャートには、それぞれ、図2と図3のスペクトルを、横軸を波長に変換し、更に、①、②、③、および④のLEDの発光領域を書き加えて図示した。図6と図7の比較から、それぞれのLEDの水と灯油に対する吸収の違いが簡単に把握でき、これら4つのLEDを用いれば目的の水と油を区別する教材ができることがわかった。

LEDを光源に用いた近赤外分光の検証実験

続いて、4つの近赤外LEDを光源に用いて水と灯油を実験的に区別できる

か、検証実験を行った。具体的には、前節で述べた、①、②、③、および④の LED を光源に用いて、LED 自身のスペクトルと、水で遮った場合のスペクトルと、灯油で遮った場合のスペクトルを測定して光の吸収の違いを確認した。ここで、検出器には近赤外マルチチャンネル分光器あるいは広帯域マルチチャンネル分光器を用い、吸収セルには実効長 4 cm の角型メディウム瓶を用いた。測定の様子を写真 3 に示す。写真 2 との違いは、タングステンハロゲン光源の代わりに、近赤外 LED を光源に用いたことと、光学系に光ファイバーを用いずに LED からセルに放射して透過した光を直接分光器の入射口に直接導入したことである。

4 つの近赤外 LED のそれぞれに対する測定結果を、図 8、図 9、図 10、および図 11 に示す。ただし、図の横軸は波長、縦軸は分光器の CCD 検出器がカウントした光子数である。

図 8 は、①の 880 nm で発光する SFH485 に対して得られたスペクトルである。885 nm 付近で、スペクトルに歪みが見えるが、これは、分光器に組み込まれた回折格子の反射特性によるものである。図 8 の 3 つのスペクトルを比較すると、水も灯油も光を吸収している形跡は無く、むしろ、光の強度が強くなっている。これは、水や灯油を入れた角型メディウム瓶の湾曲した表面が、液体を入れたとき、凸レンズのように働いて光が集まって強くなったものと思われる。

図 9 は、②の 950 nm で発光する TSUS5202 に対して得られたスペクトルである。図を見ると、水は約 50% の光を吸収しているが、灯油は殆ど吸収していないことがわかる。

図 10 は、③の 1300 nm で発光する KEDE1304H に対して得られたスペクトルである。図を見ると、水は光を完全に吸収しているが、灯油は 3 分の 1 程度の光しか吸収していないことがわかる。

図 11 は、④の 1450 nm で発光する KEDE1454H に対して得られたスペクトルである。図を見ると、水だけでなく、灯油も殆どの光を吸収していることがわかる。ただし、灯油の場合は、LED の発光の中心からずれた両端の部分の光が吸収されずに残っていることがわかる。

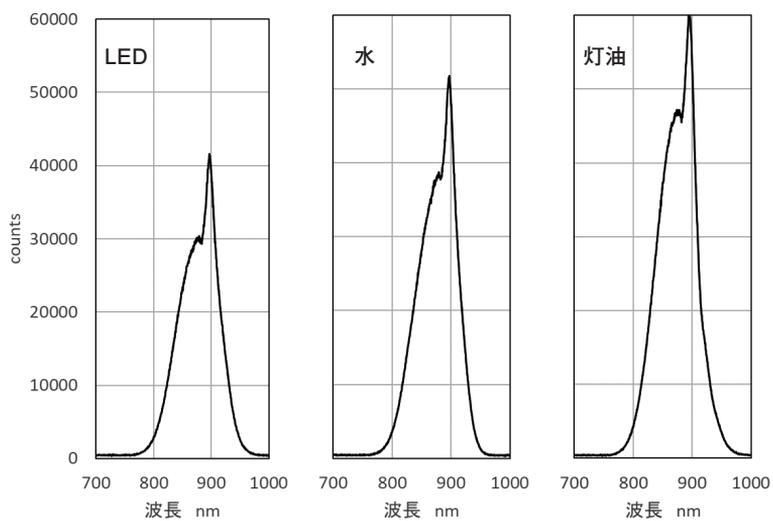


図8 880 nmで発光するLED (①) を光源としたスペクトル

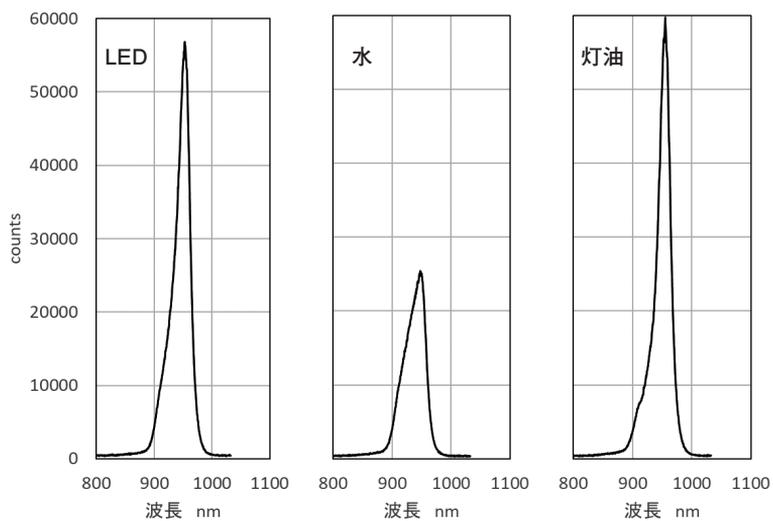


図9 950 nmで発光するLED (②) を光源としたスペクトル

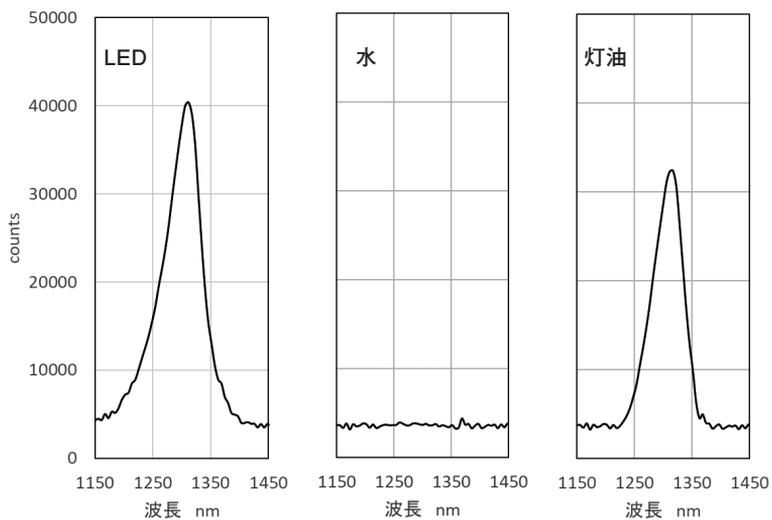


図 10 1300 nm で発光する LED (③) を光源としたスペクトル

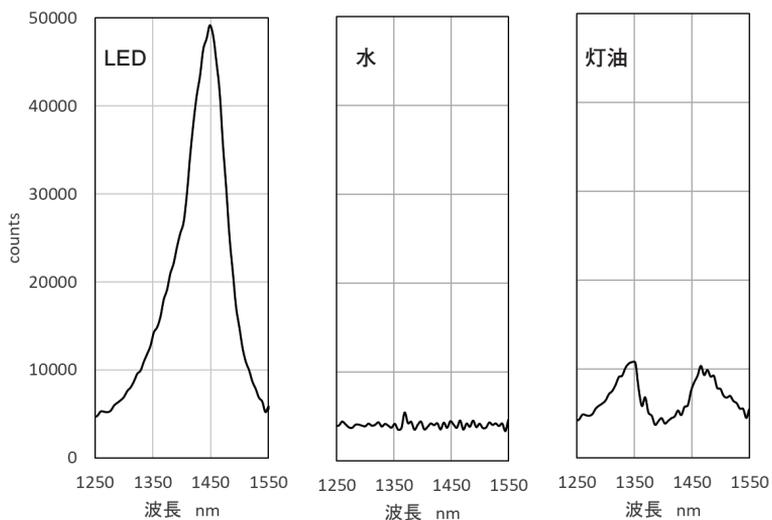


図 11 1450 nm で発光する LED (④) を光源としたスペクトル

以上の結果を、記号を使ってまとめてみよう。LEDからの光を吸収セルが殆ど吸収しない場合を○、半分吸収する場合を▲、殆ど全部吸収する場合を■という記号で表現することにする。そうすると、水と灯油に対して図6から図11までの結果は次のように記号化される。

水 : [①○, ②▲, ③■, ④■]

灯油 : [①○, ②○, ③▲, ④■]

この記号化した結果を見ると、水と灯油が異なる吸収を与えることが一目でわかり、このことは、水と灯油の分子振動の違いが近赤外LEDによつての明瞭に区別できることを示している。

「近赤外LED分光器」の教材としての可能性

教材について議論する前に、実験コストについて言及する。図1や図3のスペクトルを得るためには高価な装置を必要とするが、近赤外LEDを光源に用いて、水に対して [①○, ②▲, ③■, ④■]、灯油に対して [①○, ②○, ③▲, ④■] という判定を行うための実験装置は、市販の電子部品を用いて廉価に製作できる。詳細については省略するが、写真3の分光器の光の入射口の位置に、分光器の代わりにフォトダイオードを使った検出回路を置けば、目的の装置ができて上がる。今後、この装置のことを「近赤外LED分光器」と呼ぶことにする。

この節では、この近赤外LED分光器を教材として使用することの可能性や問題点について検討する。手始めに、この教材をメインにした学習の到達目標を、初級と上級の2つのレベルに分けて考えることにする。

最初に、初級レベルの到達目標を次のように定める。

初級レベルの到達目標：水と灯油の違いをLEDで区別しよう

具体的にはLEDの種類により、水と灯油の光の吸収の仕方が異なることを観察することで、光を用いて物質が区別できることを学習する。光の吸収に関し

ては、虹ボードを使った実験[2,3] を合わせて行くと、物質が光を吸収することの意味が実感できる。また、そのとき、赤外線は可視・紫外線の吸収とは異なり、分子の振動運動によるものであるということを、分子模型を用いて補足説明をすると良い。

続いて、上級レベルの到達目標を次のように定める。

上級レベルの目標：水と灯油の違いを近赤外 LED 分光器で確認する実験を通して、分子の結合の違いを実感しよう

具体的には近赤外 LED の発光波数により水と灯油の光の吸収の仕方が異なることを確かめる実験を通して、赤外線と分子の振動運動の相互作用が化学結合の違いによって異なることを学習することを目的とする。授業では、最初に、図1、図2、および図3を資料として配布して、水と灯油の吸収スペクトルの違いが分子の振動運動の違いから来ていることを、分子模型を用いて説明する。続いて、近赤外 LED の発光波数を図1と図3の中に記入して、吸収について予測した上で、近赤外 LED 分光器による測定実験を行う。実験自体はすぐ終わるので、実験操作や測定結果に対して、印象が残るようにする工夫が必要である。また、近赤外線の性質についても必要に応じて実験することも、測定に対して興味を持つことにつながるので大切である。そして、実験を終えた段階で、水と灯油の近赤外スペクトルの違いが、OH 結合と CH 結合の振動数(力の定数)の違いにより起きることを説明する。このとき、バネ定数(力の定数)の異なるバネ振り子を用いて振動に関する演示実験を行うと内容が理解し易くなる。ちなみに、演示実験では、バネ定数が大きなバネ振り子は振動数が大きくなり、これは OH 結合に対応し、バネ定数が小さなバネ振り子は振動数が小さくなり、これは CH 結合に対応することを説明すれば良い。この、上級レベルの学習は、高校化学の発展学習やクラブ活動などの研究テーマとして推奨される。

おわりに

本研究では、近赤外 LED 分光器の開発と教材化の検討を行った。振動分光の教材化に関して、近赤外分光は中赤外分光よりも難しいというイメージがあるが、図3のスペクトルが(2)式で説明できることから、意外と近赤外分光の方が教材化に適している面があることがわかる。特に、(2)式は、簡単な式であるが、水のスペクトルに対しても適用できる。何故なら、 ν_s の値に対して水の ν_1 と ν_3 の平均値を用い、 δ_b の値に対して ν_2 の値を使えば、(1)式の代わりに(2)式を用いることができるからである。このように、実験環境を整えば、近赤外スペクトルは中赤外スペクトルよりもシンプルな構造を与えるので教材として使い易くなる。

測定に関して、100 mLの角型メディウム瓶を吸収セルとして採用したが、この選択は意外と有用であることが分かった。その理由はいくつかあるが、ここでは2つだけ挙げる。1つ目は、図6と図7が示すように、水と灯油の近赤外スペクトルが明瞭に区別できることが挙げられる。これにより、近赤外 LED を用いた教材の製作が期待できるようになった。2つ目は、このセルに水と灯油を入れたままの状態で液体のマイクロ波分光[1]も行うことができるので、この測定も併せて実施すると、水と灯油を構成する分子に対する理解を深めることができる。

ここで、調和ポテンシャルと非調和ポテンシャルについて、コメントする。調和ポテンシャルは、極小値を中心に左右対称の形をした2次曲線(放物線)の結合ポテンシャルで、原子と原子の間がバネで繋がって振動するというモデルに対応する。調和ポテンシャルを仮定して分子の固有振動数を求めると分子の振動準位が等間隔になり、遷移波数は、(1)式や(2)式で表現できる。しかし、実際の分子は、振動運動が励起されると、結合が伸びる方向に変化する。このことは、実際の結合ポテンシャルは結合が伸びる方向に開いていることを示し、この効果を含むポテンシャルを非調和ポテンシャルと呼ぶ。非調和ポテンシャル考慮した場合、エネルギー準位は、上に行く程詰まってくるので、遷移波数を求めると、(1)式や(2)式から得られる値よりも小さくなる。放物線は、中学校の数学で学習する概念なので、調和ポテンシャルと非調和ポテン

シャルでのエネルギー単位を比較して図示すれば高校生にも定性的な理解を与えることができるはずである。

今回、水と灯油の近赤外スペクトルを測定するとき、近赤外マルチチャンネル分光器と紫外領域から近赤外領域の一部までをカバーする広帯域マルチチャンネル分光器を使用した。近赤外領域の分光測定は想像以上に感度に対する配慮が必要であることがわかった。このことは、赤外線が可視光や紫外線に比べて光子のエネルギーが小さいことから来していると思われるが、こうしたことも今回の測定を行って始めて実感したことである。

謝辞

本研究は、JSPS 科研費（課題番号 16K00980）の助成を受けて行ったものである。

参考文献および注

- [1] 松村敬治：「マイクロ波分光を使った液体分子の形を判定する教材」西南学院大学人間科学論集 **16**(1), 175-202 (2020).
- [2] 松村敬治：「発光ダイオードの『虹ボード』を用いた可視スペクトルの演示実験—吸収スペクトルを実感する教材の開発—」化学と教育 **51**(6), 374-375 (2003).
- [3] 松村敬治：「『虹ボード』を用いた可視スペクトルを実感する教材—『虹ボード』の制作から小・中学校の理科教育への応用まで—」西南学院大学人間科学論集 **1**(2), 109-139 (2006).
- [4] 松村敬治, 最上由佳, 牧園美咲, 田中武彦：「可視分光によるシャボン玉の膜の厚さの測定」西南学院大学人間科学論集, **5**(2), 13-33 (2110).
- [5] 松村敬治, 塩野正明：「しゃぼん玉の薄膜の可視分光による干渉実験—反射光と透過光の干渉スペクトルの同時測定—」科学教育研究 **38**(3), 188-195 (2014).
- [6] 松村敬治, 塩野正明：「しゃぼん玉とセッケン膜の干渉スペクトルの解析のための理論式」西南学院大学人間科学論集 **9**(2), 179-203 (2014).
- [7] 松村敬治：「演示教材のための干渉スペクトルの解析プログラムの作り方—エクセルを用いてシャボン玉やセッケン膜の膜厚を測定する方法—」西南学院大学人間科学論集 **13**(1), 27-43 (2017).
- [8] 松村敬治：「シャボン玉の測定—シャボン玉ができてから割れるまでの膜厚の追跡—」光技術コンタクト **56**(4), 14-22 (2018).
- [9] 松村敬治, 塩野正明：「廉価版の分光器を用いたシャボン玉の干渉実験」西南学院大学人間科学論集 **14**(1), 249-262 (2018).
- [10] 梅木松助, 内木場弘行, 三瓶堯男, 嶋田利郎：「高校化学における赤外分光法」化

- 学教育 **24**(2), 130-133 (1976).
- [11] 福岡久雄、大谷悦久：「高校化学実験における赤外分光光度計 (IR) の利用と実践について—エステル生成反応を中心に—」東京教育大学附属駒場中・高等学校研究報告 **15・16**, 97-111 (1977).
- [12] T. Shimanouchi: "Tables of Molecular Vibrational Frequencies Consolidated Volume I" *Nat. Stand. Ref. Data Ser.* **39**, 1-164 (1972).
- [13] G. Herzberg: *Molecular spectra and Molecular Structure, II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, pp.204-208, 280-282, Nostrand (1945).
- [14] 尾崎幸洋編：『近赤外分光法』pp132-134、講談社サイエンティフィク (2015).
- [15] 岩本令吉：『近赤外スペクトル法』pp96-103、講談社サイエンティフィク (2008).
- [16] ポリエチレンの赤外スペクトルから岩本[14] は、 2918 cm^{-1} を CH_2 逆対称伸縮振動、 2849 cm^{-1} を CH_2 対称伸縮振動、そして、 1473 cm^{-1} と 1463 cm^{-1} を CH_2 はさみ振動と報告している。そこで、本稿ではそれぞれの値を平均して ν_s に対して 2884 cm^{-1} 、そしてに δ_b に対して 1468 cm^{-1} を用いることにする。

西南学院大学人間科学部児童教育学科