IR・ラマン計算とその解析

2020年10月9日

IR・ラマン計算

酢酸エチル、スチレン分子(図1)について、Winmostarで計算入力ファイルを作成して、B3LYP/6-311G**レベルで構造最適化及びIR・ラマンの量子化学計算を行いました。その計算結果ファイルをWinmostarで読み込み、スペクトル図にして、実験データ[1]と比較しました(図2-4)。図の作成では、計算で得られた波数にB3LYP/6-311G**レベルのスケール因子0.967を掛けています[2]。図2と3のIR、図4のラマン、どの計算も実験スペクトルをほぼ再現しています。

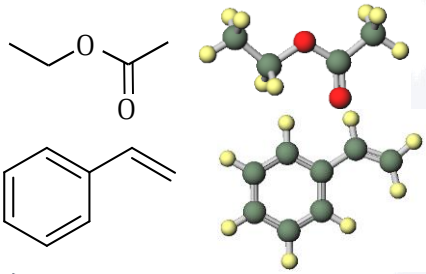

図1 酢酸エチル(上)とスチレン(下)

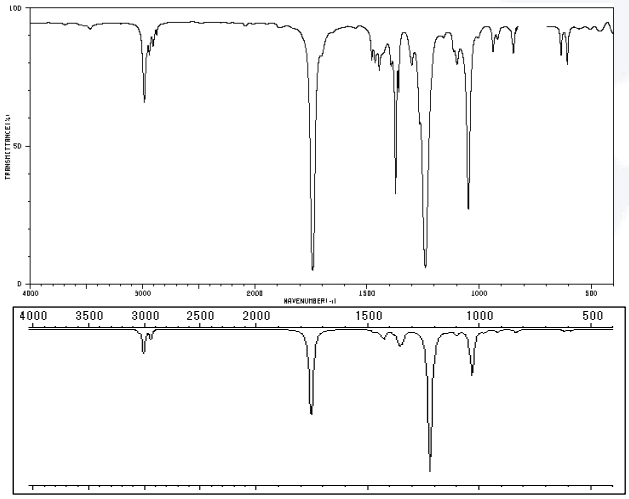

図2 酢酸エチルのIRスペクトル(上:実験[1]、下:計算)

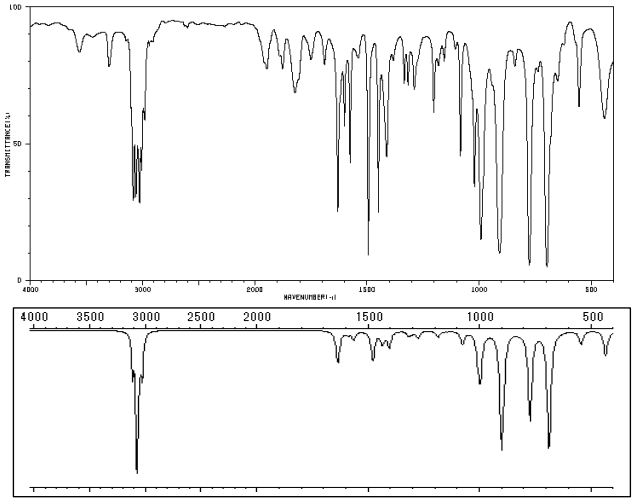

図3 スチレンのIRスペクトル(上:実験[1]、下:計算)

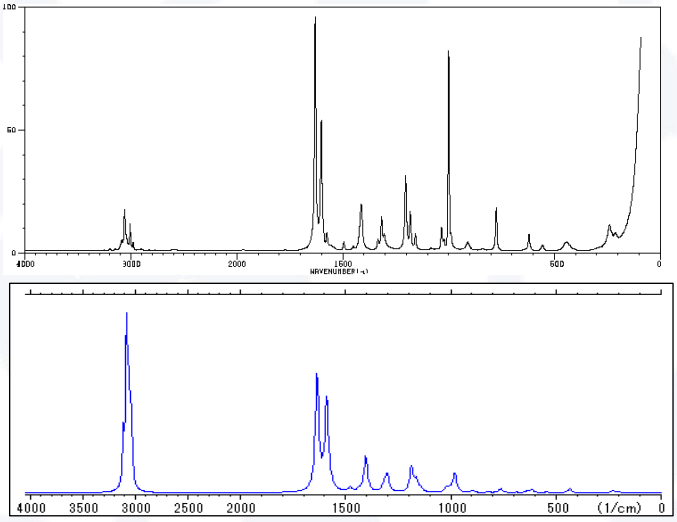

図4 スチレンのラマンスペクトル(上:実験[1]、下:計算)

Winmostarでの解析

Winmostarでは図5のように、それぞれのピークがどの振動モードであるかを簡単に知ることができます。例えば、スチレンIRスペクトル図の1635cm^{-1}付近をクリックして選択(スペクトルウィンドウ左欄の34番目をクリックしても選択できます)した後、 Animationボタンをクリックすると、新たにウインドウが開きC=C伸縮振動のアニメーションが表示されます。

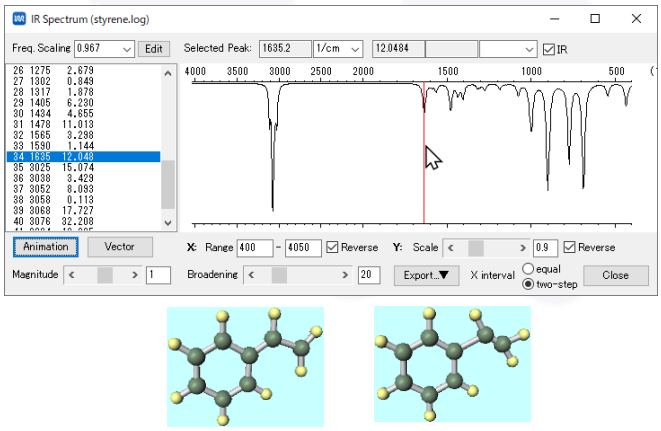

図5 Winmostarでのスチレンの各ピークの情報取得

Winmostarバージョン: 10.2.4

対応ソルバ: GAMESS、Gaussian、NWChem

引用:

[1] SDBSWeb : https://sdbs.db.aist.go.jp (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, 2020/09)

[2] NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, NIST Standard Reference Database Number 101, Release 20, August 2019, Editor: Russell D. Johnson III, http://cccbdb.nist.gov/

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.