

# FT-IR-ATR 法による 1, 4-dioxane 水溶液のスペクトル解析

川 端 圭 司\*・高 橋 晋\*\*・矢 嶋 慎 之\*\*\*  
小 嶋 高 良\*\*\*\*・高 橋 燦 吉\*\*\*\*\*

## Spectrum Analysis of Aqueous 1, 4-dioxane Solution by FT-IR-ATR Measuring Method

Keiji KAWABATA, Susumu TAKAHASHI, Noriyuki YAJIMA, Koryo KOJIMA  
and Sankiti TAKAHASHI

### Abstract

Information about the molecule frequency can get it further in the infrared absorption spectrum, and an aq. structure analysis is possible from this molecule frequency.

However, As for the analysis of the infrared absorption spectrum the procedure of the condition gradation of the ice and steam or the Deuterium oxide addition which is isotope is the main stream. Knowledge about the aq. liquid structure that the gradation of the hydrogen bond in the ordinary temperature and the second component were added isn't thought.

This report did the analysis of the aq. V structure ( $10^{-12}$ s order) that the liquid structure which it averaged due to the frequency is shown by using the FT-IR-ATR method, and explained the gradation of the aq. liquid structure that the 2nd component was added.

**Key words** : molecule frequency, hydrogen bond, 1, 4-dioxane

### 1. 緒 言

赤外線吸収分析法は操作が容易で、結果の解析に必要なデータが整備されている等の特徴を持ち、分子振動について平均化した水の液体構造 (V 構造) の検討への適用例も多い。しかし、試料水の温度可変が装置構造的に困難で、温度変化に伴う水の構造変化を捉え難い等から、液体構造の測定法としての評価は低い。また、水蒸気 (気相) では対称伸縮振動帯  $\nu_1$ 、変角振動

帯  $\nu_2$ 、逆対称伸縮振動帯  $\nu_3$  の三つの基準振動帯が観測されるが、水 (液相) と氷 (固相) では、分子間のカップリングや近接した 2 つのピークが重なり合うフェルミ共鳴の影響により伸縮振動帯が幅広い一本の吸収帯になるため、水の赤外線吸収スペクトルの解析は非常に困難である。

高橋ら<sup>1)</sup>は、分子の配向や移動に関して平均化された液体構造 (D 構造) を表す  $^{17}\text{O}$ -NMR 化学シフト法より 1, 4-dioxane 水溶液の液体構造 (D 構造) と 1, 4-dioxane 添加により同温度で水の液体構造が制御できることを明らかにしている。

本報は、FT-IR-ATR 法を用いて水の V 構造の検討を行い、解析困難とされていた伸縮振動帯の解明や第二成分を添加した水溶液の水の液体構造の変化を明らかにし、 $^{17}\text{O}$ -NMR 化学

平成 13 年 12 月 21 日受理

\* 大学院工学研究科機械システム工学専攻博士後期課程・1 年

\*\* システム情報工学科・助手

\*\*\* 大学院工学研究科機械システム工学専攻博士前期課程・2 年

\*\*\*\* 機械情報技術学科・助教授

\*\*\*\*\* 学長