

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

以瞬間正則模分析水的拉曼光譜：
延伸偶極感應交互作用

Raman spectrum of liquid water in instantaneous normal mode :

extend dipole-induced-dipole interaction

研究生：唐平翰

指導教授：吳天鳴 教授

中華民國九十五年

以瞬間正則模分析水的拉曼光譜：延伸偶極感應交互作用
Raman spectrum of liquid water in instantaneous normal mode :
extend dipole-induced-dipole interaction

研究生：唐平翰

Student : Ping-Han Tang

指導教授：吳天鳴

Advisor : Ten-Ming Wu

國立交通大學

物理研究所



Submitted to Institute of Physics College of Science

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Physics

July 2006

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十五年七月

以瞬間正則模分析水的拉曼光譜：延伸偶極感應交互作用

學生：唐平翰

指導教授：吳天鳴

國立交通大學物理研究所碩士班

摘要

利用 MD simulation 模擬水分子在液體中的運動，在相隔一定的時間間距內，取得水分子分佈組態。從這些組態中，我們可以得到各個時間點的 collective polarizability。當電磁波打入液體水時，隨時變的 collective polarizability 會使入射電磁波散射，產生拉曼光譜。此篇論文主要是利用 instantaneous normal mode (簡稱 INM)的方法來分析 rigid water 的拉曼光譜。在其他的論文中是用 time correlation function(TCF)來分析水的拉曼光譜，而本論文的目的是要和他們的結果做比較，並進一步地對水的 local structure 作分類，探討其拉曼光譜的差異。

Raman spectrum of liquid water in instantaneous normal mode :
extend dipole-induced-dipole interaction

Student : Ping-Han Tang

Advisor : Dr. Ten-Ming Wu

Institute of Physics
National Chiao Tung University

ABSTRACT

By using the MD simulation to simulate the motion of molecules in water. In the same time interval, we collect the configurations of water. From these configurations, we obtain collective polarizability at different instants. When the incident electromagnetic waves penetrate into liquid water, time dependent collective polarizability causes electromagnetic waves to scatter, and the Raman spectrum is observed. In this project, we use the instantaneous normal modes to analyze the Raman spectrum of water. In other paper , the time correlation function(TCF) was used to analyze the spectrum. Our purpose is to compare our results with theirs. Also, by classifying the local structure of water molecules, we discuss the difference of Raman spectrum due to different local structures.

誌謝

很高興的能夠在吳老師的指導下，順利地畢業。也很感謝父母，在我的碩士生涯中，全心全意的支持。還有我的碩班同學們：

林勤倫	沈和昀	葉永順	柯勝藍	林君睿
楊肇嘉	莊依芳	李烜逸	謝明宏	陳雅玲
葉淑宜	江品頁	吳曉婷	王櫻旋	

以及在各方面，都很出色的學長們：

昆憲	邦杰	宗哲	光胤	德明
----	----	----	----	----

碩班兩年，有他們陪伴，讓我成長了不少，也學習到很多。也謝謝交大物理所提供了一個很好的環境，讓我更有信心地迎接一個嶄新的博士生涯。



目錄

中文摘要.....	i
英文摘要.....	ii
謝誌.....	iii
目錄.....	iv
圖目錄.....	v
符號說明.....	vi
第一章、緒論.....	1
第二章、理論背景.....	2
(一) INM 分析.....	2
(二) 集體極化張量(Collective polarizability tensor).....	6
(三) 拉曼光譜.....	9
第三章、水的拉曼光譜.....	12
第四章、水分子的 local structure 對拉曼光譜的影響.....	17
(一) voronoi analysis.....	17
(二) Collective polarizability tensor 分類.....	19
(三) General coordinates 分類.....	22
(四) 結果與討論.....	24
第五章、結論.....	36
附錄 A.....	37
附錄 B.....	39
參考文獻.....	43

圖目錄

圖一(a)(b).....	2
圖二.....	5
圖三(a)(b).....	6
圖四.....	14
圖五.....	15
圖六.....	15
圖七.....	16
圖八.....	17
圖九.....	24
圖十.....	24
圖十一.....	25
圖十二.....	26
圖十三.....	27
圖十四.....	28
圖十五.....	28
圖十六.....	29
圖十七.....	30
圖十八.....	31
圖十九.....	32
圖二十(a).....	33
圖二十(b)(c).....	34
圖二十(d).....	35



符號說明

N : 水分子總數

m : 水分子質量

$I_{j\mu}$: 第 j 個水分子的轉動慣量

q_α : 正則模座標

$Z_{j\mu}$: 系統的廣義座標

\hat{D} : Hessian matrix

$\overline{\mu}_i$: 第 i 個水分子的總電偶

\overline{p}_i^M : 第 i 個水分子的永久電偶

$\overline{\alpha}_i^M$: 第 i 個水分子的 polarizability

\overline{p}_i^C : 第 i 個水分子集體的永久電偶交互作用項

$\overline{\alpha}_i^C$: 第 i 個水分子的 collective polarizability

$\overline{E}^{(e)}$: 外加電場

Π : collective polarizability tensor

\mathcal{Y} : ideal polarizability anisotropy

k_B : 波茲曼常數

$\theta_i(L)$: selection operator

N_L : group L 內的總粒子數

η : aspherecity