

Molekulární vibrace

- 1) Známe bodovou grupu η molekuly = známe její character table (včetně transformací monomů a binomů)

$$\frac{\eta \mid g_\alpha \Gamma_\alpha \mid \text{transformační pravidla}}{\Gamma_j \mid X_\alpha(\Gamma_j) \mid}$$

a řád $h = \sum g_\alpha$ této grupy.

Dimenze (multiplicita) l_j jednotlivých vibrací Γ_j : $\sum_j l_j^2 = h$

nedegenerované módy: A (symetrické vzhledem k hlavní ose),
B (antisymetrické vzhledem k hlavní ose)

dvojitě degenerované: E

trojité degenerované: T

indexy: vzhledem k σ_v : 1 (symetrické), 2 (antisymetrické)

vzhledem k i : g (symetrické), u (antisymetrické)

vzhledem k σ_h : ' (symetrické), " (antisymetrické)

- 2) Příspěvek χ_R operace symetrie R do charakteru $\Gamma = \{X_\alpha(\Gamma)\}$ reducibilní reprezentace; za každý atom touto symetrií nepohnutý:

$$\begin{aligned} R: & \chi_R \\ C_n^k: & 1 + 2 \cos(2\pi k/n) \quad (E \equiv C_1^k) \\ S_n^k: & -1 + 2 \cos(2\pi k/n) \quad (\sigma \equiv S_1^1, i = S_2^1) \end{aligned}$$

- 3) Počet a_j vibrací typu A_j v mechanické reprezentaci $\sum_j a_j A_j$

$$a_j = (1/h) \sum_\alpha g_\alpha X_\alpha(\Gamma_j) X_\alpha(\Gamma)$$

- 4) Z celkového počtu vibrací mechanické reprezentace se pro nelineární molekuly odečte $6N$ stupňů volnosti - jedna vibrace za každou ze tří translací (transformační pravidla x, y, z) a jedna za každou ze tří rotací (transformační pravidla R_x, R_y, R_z) z character table. Pro lineární molekuly se neodečítá rotace podle jejich osy.

- 5) IR aktivní jsou ty zbylé módy, které se transformují jako monomy, Ramansky aktivní jsou ty, které se transformují jako binomy.

vyřučovací pravidlo: grupy obsahující střed symetrie mají disjunktní množinu Ramansky (index g) a IR aktivních (index u) vibračních módů.