



Добро пожаловать!

Тема 6 Симметрия молекул и нормальных колебаний

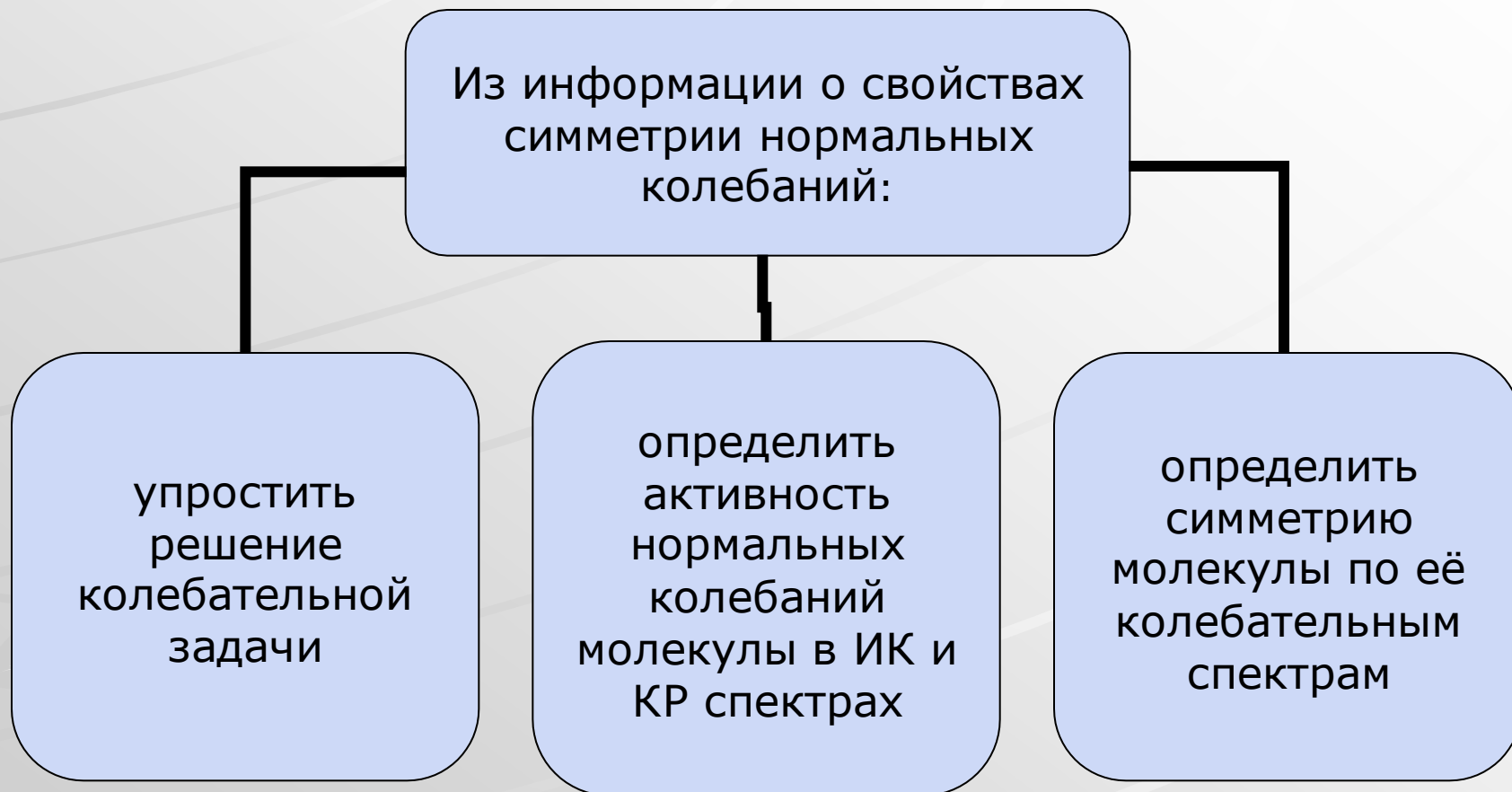
1 Точечные группы симметрии, элементы симметрии

2 Определение группы симметрии молекулы

3 Типы симметрии нормальных колебаний молекулы

4 Активность колебаний многоатомной молекулы в ИК и КР спектрах

1 Точечные группы симметрии, элементы симметрии



Симметрия молекулы

Элемент симметрии

Симметрия молекулы

Точечная группа симметрии

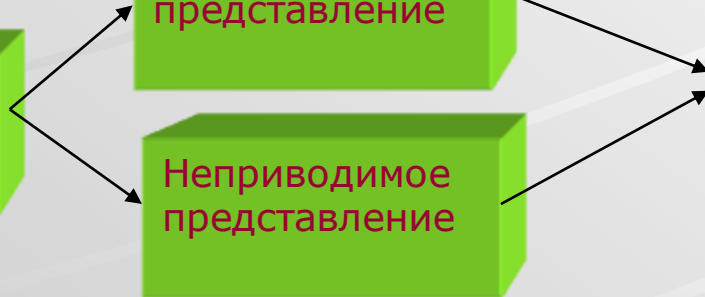
Порядок группы симметрии

Представление группы симметрии

Приводимое представление

Неприводимое представление

Характер представления



Элементы (операции) симметрии

Элементы симметрии

- ❖ C_n – ось симметрии n -го порядка ($\theta = \frac{2\pi}{n}$);
- ❖ σ – плоскость симметрии;
- ❖ I – центр инверсии
- ❖ S_n – зеркально-поворотная ось симметрии n -го порядка ($\theta = \frac{2\pi}{n}$) отражение в плоскости, перпендикулярной оси;
- ❖ I (или C_1) – тождественный элемент

2 Определение группы симметрии молекулы

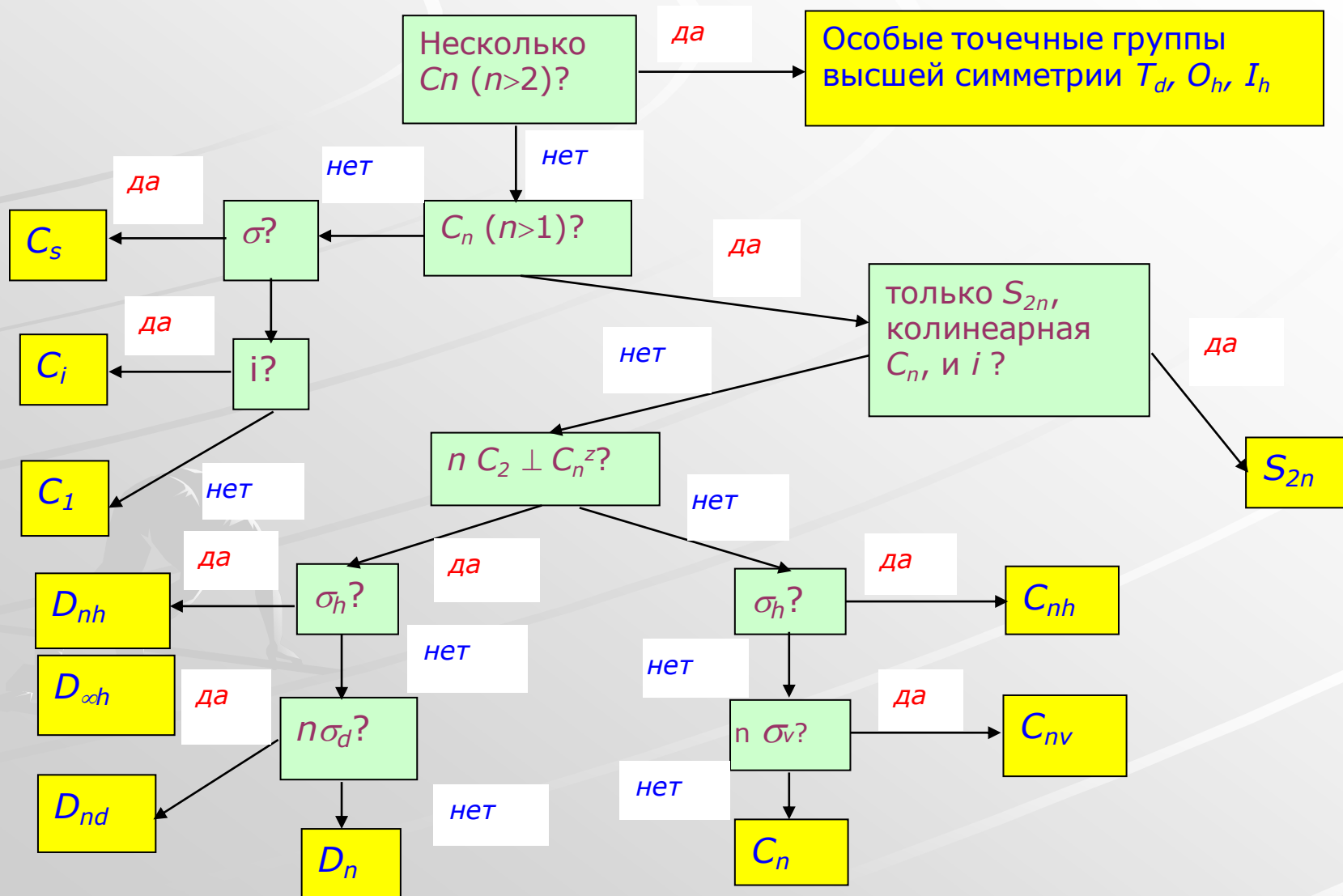
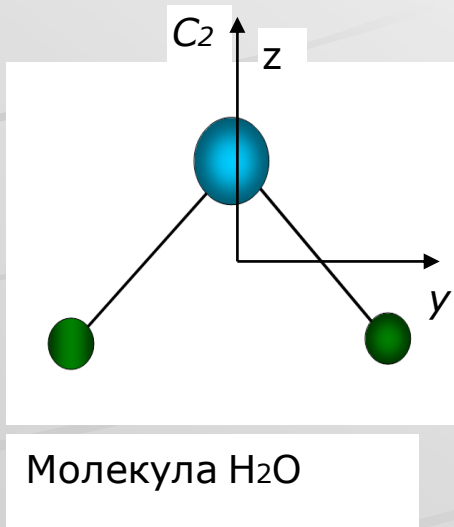


Рисунок 6.1 – Алгоритм определения точечной группы симметрии многоатомной молекулы

Точечная группа симметрия C_{2v}



C_{2v}	I	C_2^z	σ_u (xz)	σ_u (yz)			
A_1	1	1	1	1	T_z		xx, yy, zz
A_2	1	1	-1	-1		R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	T_x	R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	T_y	R_x	yz

Точечная группа симметрии

Элементы симметрии

Типы симметрии (неприводимые представления)

Характеры неприводимых представлений

3 Нормальные колебания многоатомной молекулы классифицируются по *типам симметрии*

A и *B* - невырожденные колебания,
E - двукратно вырожденные колебания,
F - трёхкратно вырожденные колебания

A - колебание, симметричное относительно C_n^z ;
 σ , i (если осей симметрии нет);

B - колебание, антисимметричное относительно C_n^z ;
 σ , i (если осей симметрии нет)

g - колебание, симметричное относительно i

u - колебание, антисимметричное относительно i

1 - колебание, симметричное относительно σ_u

2 - колебание, антисимметричное относительно σ_u

' - колебание, симметричное относительно σ_h .

" - колебание, антисимметричное относительно σ_h .

Определение числа колебаний s -го типа симметрии

$$n^s = \frac{1}{h} \sum_i h_i \chi_i(R) \chi_i^s(R) \quad (6.1)$$

h – число операций симметрии в группе (порядок группы),
 h_i – число операций симметрии в i -ом классе симметрии,
 $\chi_i(R)$ – характер приводимого представления в i -ом классе для операции симметрии R ,
 $\chi_i^s(R)$ – характер неприводимого представления в i -ом классе для операции симметрии R

$$\chi(I) = 3N,$$

$$\chi(\sigma) = N_\sigma,$$

$$\chi(i) = -3N_i,$$

$$\chi(C_n^p) = N_{C_n^p} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi p}{n} \right),$$

$$(6.2) \quad n_V^s = n^s - n^s(T) - n^s(R) \quad (6.3)$$

$$\chi(S_{2n}^p) = N_{S_{2n}^p} \left[(-1)^p + 2 \cos \frac{2\pi p}{n} \right]$$

N_σ , N_i , $N_{C_n^p}$, $N_{S_{2n}^p}$

– число ядер, положение которых не изменяется при выполнении соответствующей операции симметрии;
 $p = 1, 2, \dots, n-1$.

4 Активность колебаний многоатомной молекулы в ИК и КР спектрах

C_{2v}	I	C_2^z	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	ИК		КР	n^s	n_v^s
A_1	1	1	1	1	T_z		xx, yy, zz	3	$2:(\nu^s \delta), \text{ИК, КР}$
A_2	1	1	-1	-1		R_z	xy	1	0
B_1	1	-1	1	-1	T_x	R_y	xz	2	0
B_2	1	-1	-1	1	T_y	R_x	yz	3	$\nu^{as}, \text{ИК, КР}$
$\chi_i(R)$	9	-1	1	3					

A close-up photograph of a field of pink geranium flowers with green, lobed leaves. The flowers are in various stages of bloom, with some fully open and others as buds. The background is a soft-focus green field.

Желаю успехов!