

а именно

$$\sin \varphi \{2m^{1/2}e_{3x} - M^{1/2}(e_{1x} + e_{2x})\} = M^{1/2} \cos \varphi (e_{1y} - e_{2y}). \quad (6.36)$$

Для двух колебаний A_1 более сложный расчет приводит к линейной комбинации смещений, показанных на рис. 6.4,— величина каждого смещения зависит от детальной формы потенциала.

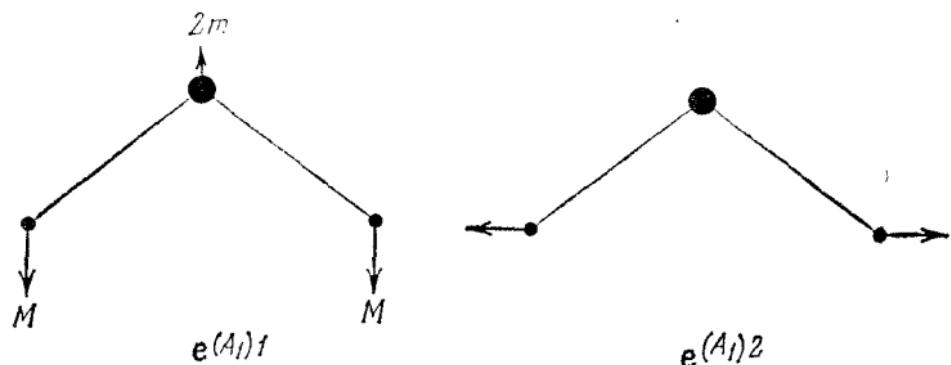


Рис. 6.4.

Другой пример расчета величин смещений можно найти в задаче 6.1 (ее решение имеется в приложении к т. 2).

ЛИТЕРАТУРА

Для дальнейшего ознакомления с теорией молекулярных колебаний рекомендуем книгу

Wilson E. B., Decius J. C., Cross P. C., Molecular Vibrations. The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra, McGraw-Hill, New York, 1955. [Имеется перевод: Вильсон Е., Дешиус Дж., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул.— М.: ИЛ, 1960.]

Подробнее вопросы спектроскопии рассматриваются в работах

Herzberg G., Infra-Red and Raman Spectra of Polyatomic Molecules, Van Nostrand, Princeton, 1945. [Имеется перевод: Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул.— М.: ИЛ, 1949.]

Herzberg G., Molecular Spectra and Molecular Structure, III, Van Nostrand, Princeton, 1966. [Имеется перевод: Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул.— М.: Мир, 1969.]

Birman J. L., Theory of Space Groups and Infra-Red and Raman Lattice Processes in Insulating Crystals.— В кн.: Handbuch der Physik, XXV (2b); Light and Matter.— В кн.: Handbuch der Physik, B. XXV (1b).

ЗАДАЧИ

- 6.1.** Некая гипотетическая молекула состоит из четырех одинаковых атомов, расположенных по углам плоского прямоугольника (группа симметрии D_{2h} ; гл. 9). Определите характеры ее колебательных мод и классифицируйте последние по симметрии. Существует ли здесь вырождение? Изобразите на рисунке смещения атомов при нормальной моде симметрии B_3^- (в обозначениях таблицы характеров из приложения 1).
- 6.2.** Плоская молекула трехфтористого бора BF_3 , в которой атомы фтора расположены по вершинам, а атом бора — в центре равностороннего треугольника, принадлежит к группе симметрии D_{3h} (гл. 9). Классифицируйте ее нормальные моды колебаний и отметьте все случаи вырождения.
- 6.3.** Какую форму имеют инфракрасный спектр и спектр комбинационного рассеяния в случае молекулы из задачи 6.1?

Другие задачи на молекулярные колебания будут даны в конце гл. 9 после более подробного рассмотрения всех возможных точечных групп.