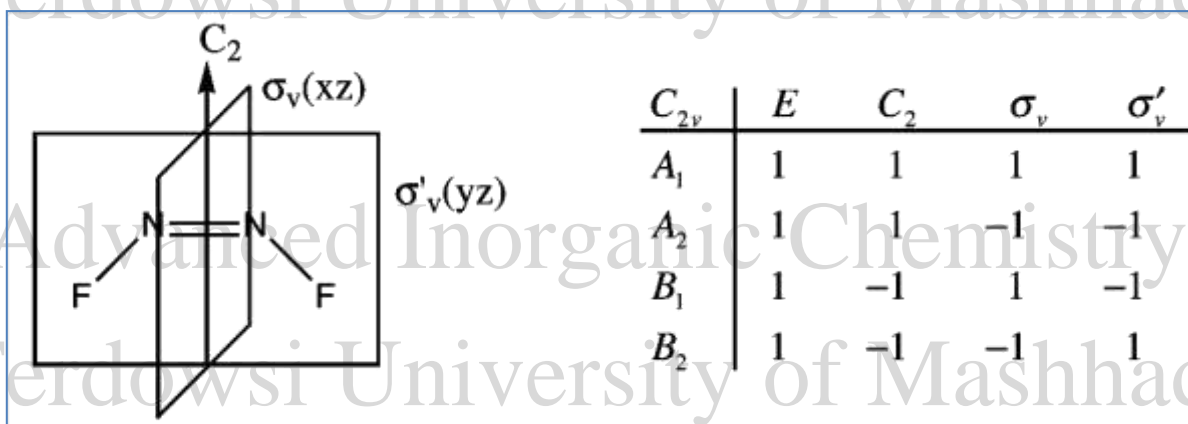


# Advanced Inorganic Chemistry

در مولکول  $cis-N_2F_2$  حالت های ارتعاشی فعال در رامان و IR تعیین نمایید.



نمایش کاهش پذیر آن را تعیین می نمایم

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$
<i>unshifted atoms</i>	4	0	0	4
$\chi$ (per atom)	3	-1	1	1
$\Gamma_{3N}(N_2F_2)$	12	0	0	4

$\Gamma_{3N}$  آن را کاهش می دهیم داریم

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$	
$\Gamma_{3N}(N_2F_2)$	12	0	0	4	
$A_1$	1	1	1	1	$\Rightarrow \frac{1}{4}[(1 \cdot 12 \cdot 1) + 0 + (1 \cdot 4 \cdot 1)] = \frac{16}{4} = 4$
$A_2$	1	1	-1	-1	$\Rightarrow \frac{1}{4}[(2 \cdot 15 \cdot 1) + 0 + (1 \cdot 4 \cdot -1)] = \frac{8}{4} = 2$
$B_1$	1	-1	1	-1	$\Rightarrow \frac{1}{4}[(1 \cdot 12 \cdot 1) + 0 + (1 \cdot 4 \cdot -1)] = \frac{8}{4} = 2$
$B_2$	1	-1	-1	1	$\Rightarrow \frac{1}{4}[(2 \cdot 15 \cdot 1) + 0 + (1 \cdot 4 \cdot 1)] = \frac{16}{4} = 4$

$\Gamma_{3N}(N_2F_2) = 4A_1 + 2A_2 + 2B_1 + 4B_2$

حرکات انتقالی و چرخشی مرکز ثقل را از جدول کاراکتر استخراج و از  $\Gamma_{3N}$  کم نموده تا  $\Gamma_v$  بدست آید.

# Advanced Inorganic Chemistry

# Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad

$$\Gamma_T = A_1 + B_1 + B_2$$

$$\Gamma_R = A_2 + B_1 + B_2$$

$$\Gamma_T + \Gamma_R = A_1 + A_2 + 2B_1 + 2B_2$$

$$\Gamma_V = \Gamma_{3N} - (\Gamma_T + \Gamma_R) = \frac{(4A_1 + 2A_2 + 2B_1 + 4B_2) - (A_1 + A_2 + 2B_1 + 2B_2)}{3A_1 + A_2 + 2B_2}$$

Ferdowsi University of Mashhad فعالیت IR و Raman

فعال IR  $\Gamma_T = A_1 + B_1 + B_2$

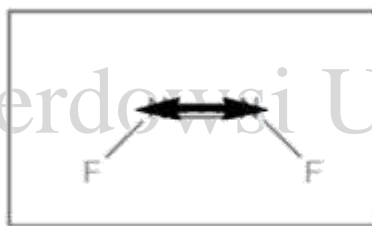
فعال Raman  $\Gamma_f = A_1 + A_2 + B_1 + B_2$

$$\Gamma_V = 3A_1 + A_2 + 2B_2$$

Ferdowsi University of Mashhad

برای تعیین حالات کششی داریم

کشش پیوند N=N



N=N stretch will be  $A_1$

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$
$\Gamma(s_{N=N})$	1	1	1	1

کشش پیوند N-F



$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$
$\Gamma(s_{N-F})$	2	0	0	2
$A_1$	1	1	1	1
$\Rightarrow \frac{1}{4}[(1 \cdot 2 \cdot 1) + 0 + (1 \cdot 2 \cdot 1)] = \frac{4}{4} = 1$				
$\Gamma(s_{N-F}) - A_1$	1	-1	-1	1
$\Rightarrow B_2$				
$\Gamma(s_{N-F}) = A_1 + B_2$				

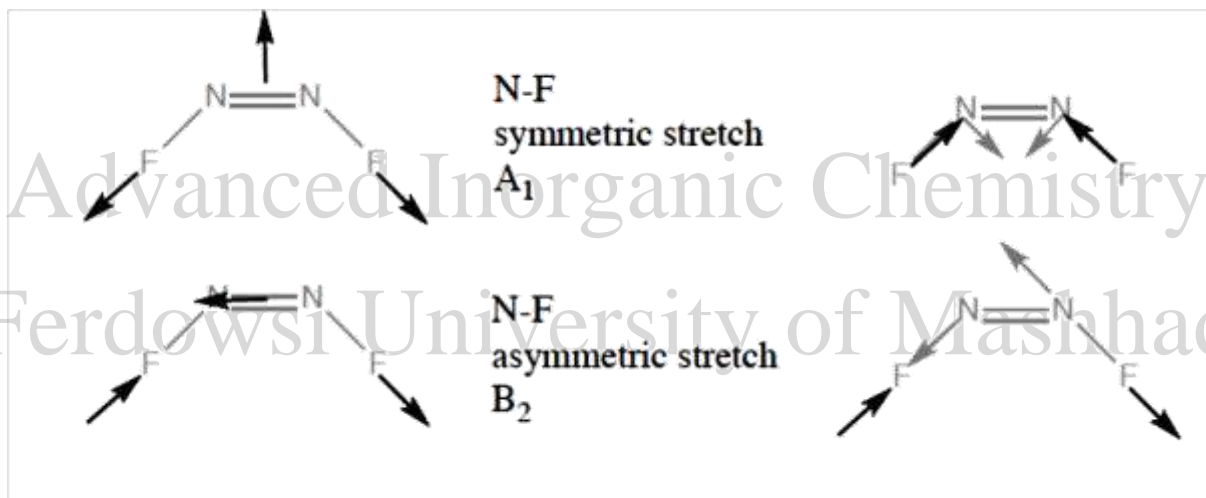
Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad

# Advanced Inorganic Chemistry

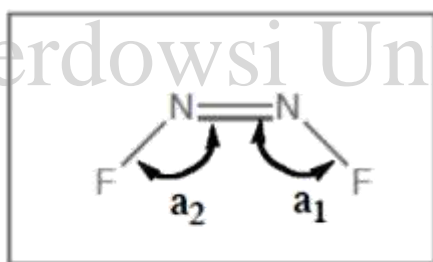
Ferdowsi University of Mashhad

$$\Gamma_{\text{stretches}} = 2A_1 + B_2$$



Advanced Inorganic Chemistry

حرکت در صفحه



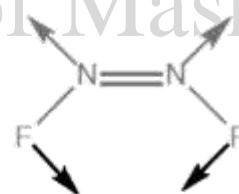
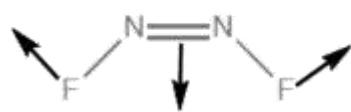
$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$
$\Gamma(a_{N-N-F})$	2	0	0	2

$$\Gamma(a_{N-N-F}) = A_1 + B_2$$

Advanced Inorganic Chemistry

که به صورت زیر می باشند.

Ferdowsi University of Mashhad



Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad

با توجه به اطلاعات زیر

$$\Gamma_V = 3A_1 + A_2 + 2B_2$$

Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad

# Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad

$$\Gamma_{N=N \text{ stretch}} = A_1$$

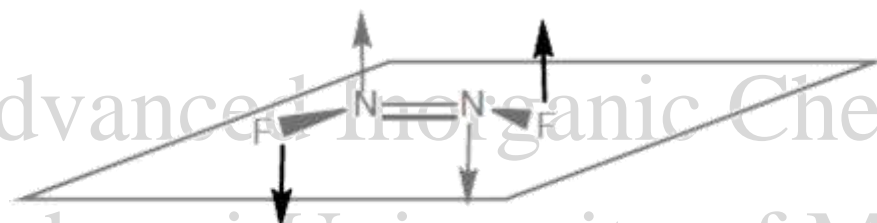
$$\Gamma_{N-F \text{ stretch}} = A_1 + B_2$$

$$\Gamma_{in-plane} = A_1 + B_2$$

با کم کردن مقادیر حرکات کششی و خمشی در صفحه از مقدار  $\Gamma_V$ ، خمش خارج از صفحه

بدست می آید.

$$\Gamma_{out \ of \ plan} = A_2$$



asymmetric bend  $A_2$

به طور خلاصه به عنوان نتیجه داریم

Infrared (gas; $cm^{-1}$ )	Raman (gas; $cm^{-1}$ )	Symmetry	Normal mode
IR	(pol)	$A_1$	N=N stretch
IR	(depol)	$B_1$	N-F asym stretch
IR	(pol)	$A_1$	N-F sym stretch
IR	(pol)	$A_1$	in-plane sym bend
IR	(depol)	$B_2$	in-plane asym bend
	(depol)	$A_2$	out-of-plane asym bend

Ferdowsi University of Mashhad

# Advanced Inorganic Chemistry

Ferdowsi University of Mashhad