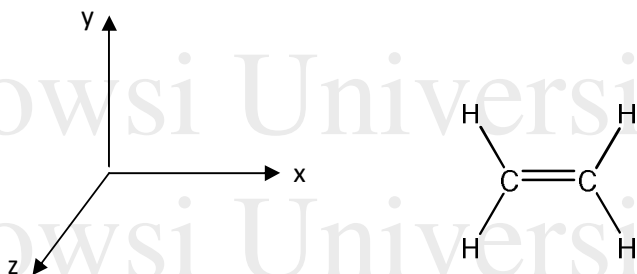


در مولکول اتیلین حالت های ارتعاشی فعال در رامان و IR را برای الف) کشش C-C (ب) کشش متقارن C-H (پ) خمش متقارن H-C-H (قیچی) تعیین نمایید.



Character table for D_{2h} point group

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	linear, rotations	quadratic
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R_y	xz
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

Γ را برای گونه های مختلف تعیین می نمایم

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
اتم های تغییر نیافته	6	0	0	2	0	6	2	0
ماهیت	3	-1	-1	-1	3	1	1	1
Γ_{3N}	18	0	0	-2	0	6	2	0

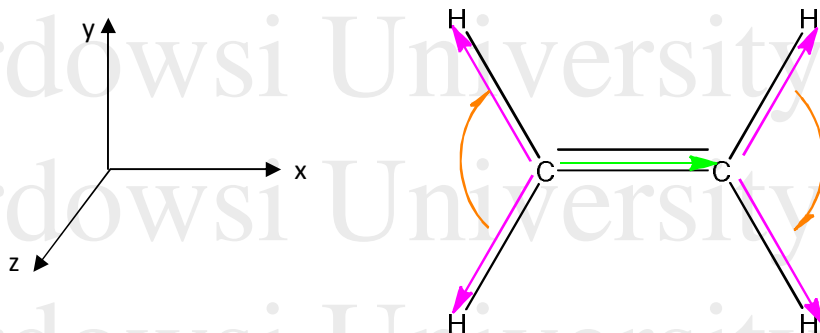
با کاهش داریم

$$\Gamma_{3N} = 3A_{1g} + A_{1u} + 3B_{1g} + 2B_{1u} + 2B_{2g} + 3B_{2u} + 3B_{3u} + B_{3g}$$

$$\Gamma_{3N} - (\Gamma_T + \Gamma_R) = 3A_{1g} + A_{1u} + 2B_{1g} + B_{1u} + B_{2g} + 2B_{2u} + 2B_{3u} - (B_{1u} + B_{2u} + B_{3u} + B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}) =$$

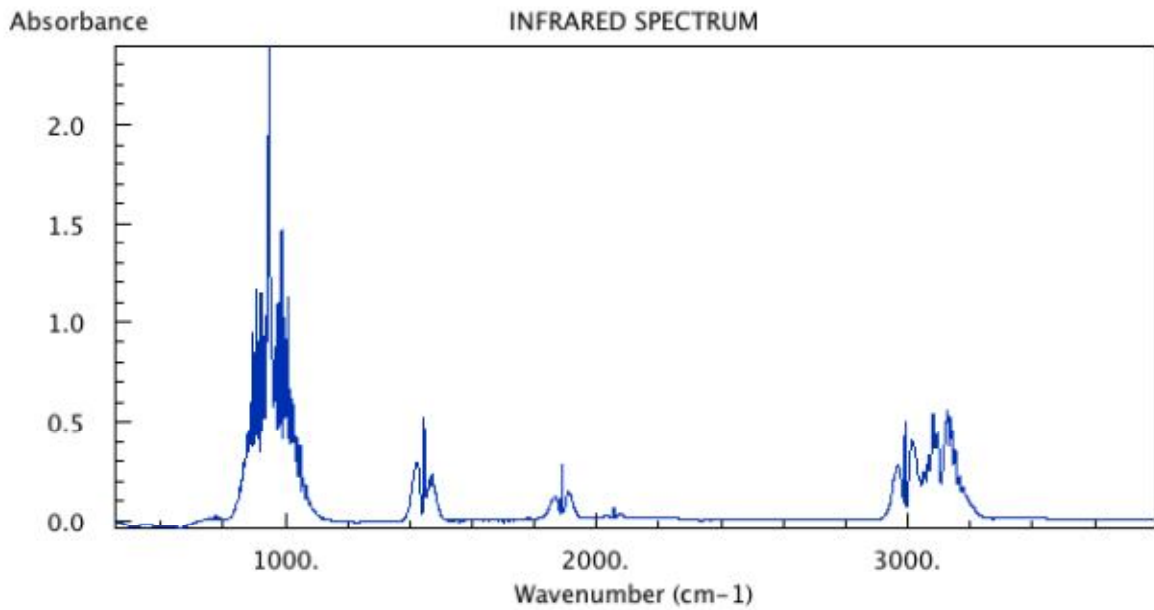
$$\Gamma_v = 3A_{1g} + A_{1u} + 2B_{1g} + B_{1u} + B_{2g} + 2B_{2u} + 2B_{3u}$$

برای تعیین ارتعاش کششی پیوند ها را تفکیک و محاسبه می نماییم.



	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)	i	σ (xy)	σ (xz)	σ (yz)
Γ_{C-C}	1	1	1	1	1	1	1	1
$= A_{1g}$								
Γ_{C-H}	4	0	0	0	0	0	4	0
$= A_{1g} + B_{2g} + B_{1u} + B_{3u}$								
Γ_{H-C-H}	2	0	0	-2	0	2	-2	0
$= B_{1g} + B_{2u}$								
$\text{خمش کل} = A_{1g} + A_{1u} + B_{2g} + B_{3g} + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$								

ETHYLENE



Two anomalies?

- Where is 826 band?
- What is this band?

b_{1u}	7	CH2 wag	949
b_{2u}	9	CH2 a-str	3106
b_{2u}	10	CH2 rock	826
b_{3u}	11	CH2 s-str	2989
b_{3u}	12	CH2 scis	1444

