

WYKŁAD 5

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

• *Prof. dr hab. Halina Abramczyk*

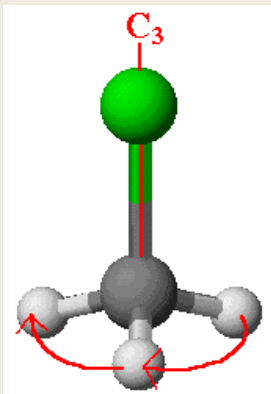
• *Dr inż. Beata Brożek-Płuska*

POLITECHNIKA ŁÓDZKA

• *Wydział Chemiczny, Instytut Techniki Radiacyjnej*

• *Laboratorium Laserowej Spektroskopii Molekularnej*

- Jak wiemy już spektroskopia IR i spektroskopia Ramana opisują drgania (wibracje lub oscylacje) cząsteczek. Każda cząsteczka ma $3N-6$ ($3N-5$ dla cząsteczek liniowych) wibracji, ale nie wszystkie są widoczne (aktywne) w IR i spektroskopii Ramana. Niektóre wibracje mają silne pasma w IR, inne zaś w spektroskopii Ramana. Niektóre cząsteczki spełniają regułę wykluczania- jeśli pasmo jest aktywne w IR- nie jest aktywne w spektroskopii Ramana i odwrotnie. Wszystko zależy od reguły wyboru, które już wcześniej poznaliśmy. Z kolei reguły wyboru zależą od SYMETRII cząsteczek. Znając symetrię cząsteczek możemy przewidzieć, które drganie jest aktywne w IR, a które w spektroskopii Ramana.
- W wykładzie tym poznamy w jaki sposób możemy określić reguły wyboru na podstawie symetrii stosując metodę matematyczną zwaną TEORIA GRUP.



C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

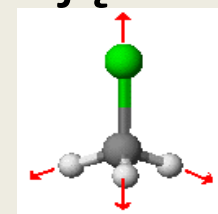
- Przykładowo cząsteczka CH_3Cl (rys1) należy do grupy symetrii nazwanej C_{3v} (rys.2) . Co to oznacza?
- W każdej grupie symetrii znajdują się określone elementy symetrii, np. obrót, odbicie względem określonej płaszczyzny, i.t.d. Wykonanie tej operacji na cząsteczce powoduje, że nic się w cząsteczce nie zmienia-atomy wracają do swych pierwotnych położeń. Np., dla cząsteczki CH_3Cl obrót o 120° wokół osi C_3 niczego nie zmienia, co więcej możemy wykonać 3 obroty (dlatego oś nazywa się C_3), Tak więc oś C_3 jest jednym z elementów symetrii, zaś obrót wokół tej osi jest operacją symetrii.
- Zbiór elementów symetrii określających budowę określonej cząsteczki determinuje przynależność do **GRUPY PUNKTOWEJ**.
- Tak więc, cząsteczka chlorometanu CH_3Cl należy do grupy punktowej C_{3v} .

TYPY SYMETRII

[kliknij tutaj](#)

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

- Pełna informacja o cząsteczce jest zawarta w tzw. Tablicy charakterów przedstawionej na rys 2. W lewym górnym rogu mamy nazwę grupy punktowej. Następnie symbole E , $2C_3$ oraz $3\sigma_v$ oznaczają elementy symetrii grupy C_{3v} czyli element identyczności E , dwie osie obrotu o 120° wokół osi C_3 oraz trzy płaszczyzny symetrii σ_v . Symbol σ_v oznacza płaszczyznę w której leży oś obrotu najwyższej symetrii (tutaj oś C_{3v}). Symbole w lewej kolumnie (A_1 , A_2 , E) noszą nazwę nieredukowalnych reprezentacji (na tym poziomie dyskusji nie musimy wnikać głębiej co kryje ten termin). Na naszym poziomie dyskusji zagadnienia wygodnie jest traktować te symbole jako informację o typie symetrii drgania.
- Np., A_1 jest drganiem całkowicie symetrycznym.

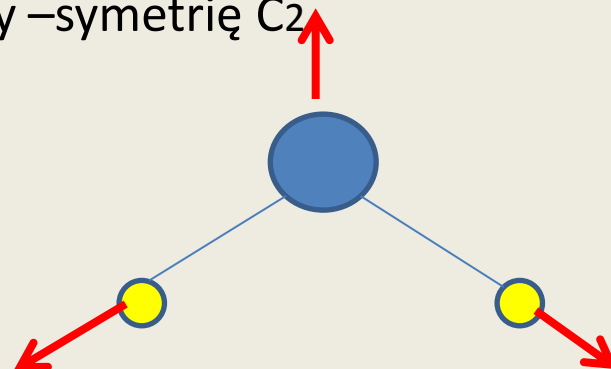
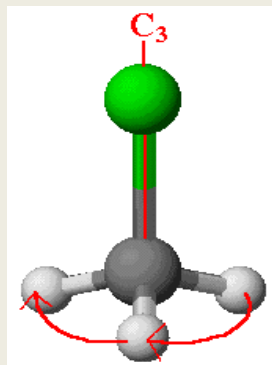


Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Cząsteczka może wykazywać wiele różnych **elementów symetrii** którym odpowiadają operacje symetrii. **Operacja symetrii jest to operacja, która zmieniając położenia atomów cząsteczki nie zmienia jej konfiguracji, czyli nie zmienia jej samej.**

Wśród najczęściej spotykanych elementów symetrii można wyróżnić:

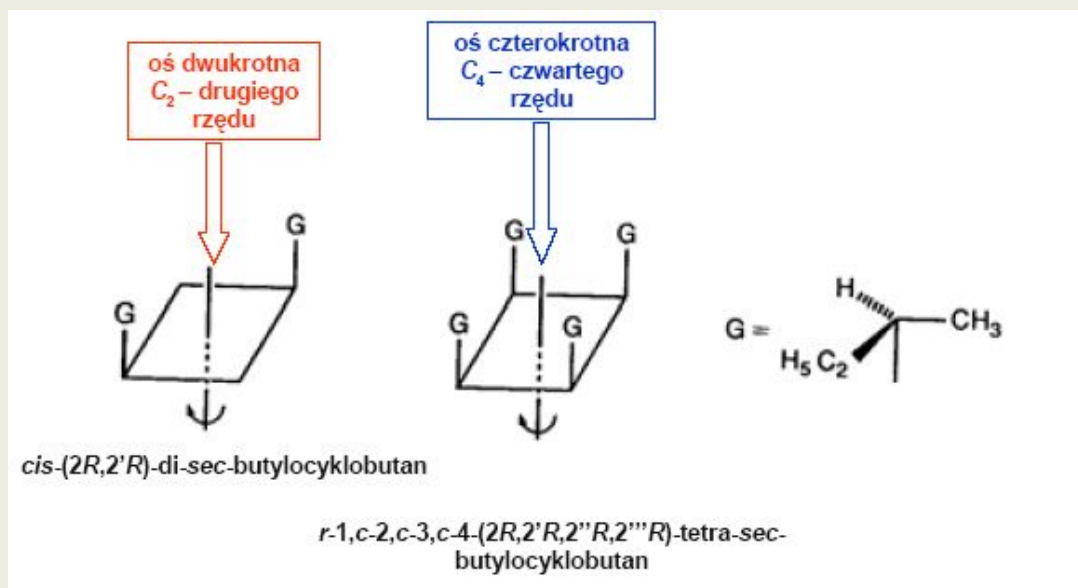
- **Oś symetrii** oznaczana symbolem C_p . Indeks p oznacza krotność osi i może przyjmować różne wartości $p=1,2,3,\dots, 6$ oraz ∞ . Operacja symetrii polegająca na obrocie cząsteczki wokół osi o kąt $360^\circ/p$ powoduje sprowadzenie cząsteczki do jej pierwotnej postaci. Np. cząsteczka amoniaku ma oś symetrii C_3 , zaś cząsteczka wody –symetrię C_2



Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Przykłady elementów symetrii molekuł wieloatomowych

Oś symetrii



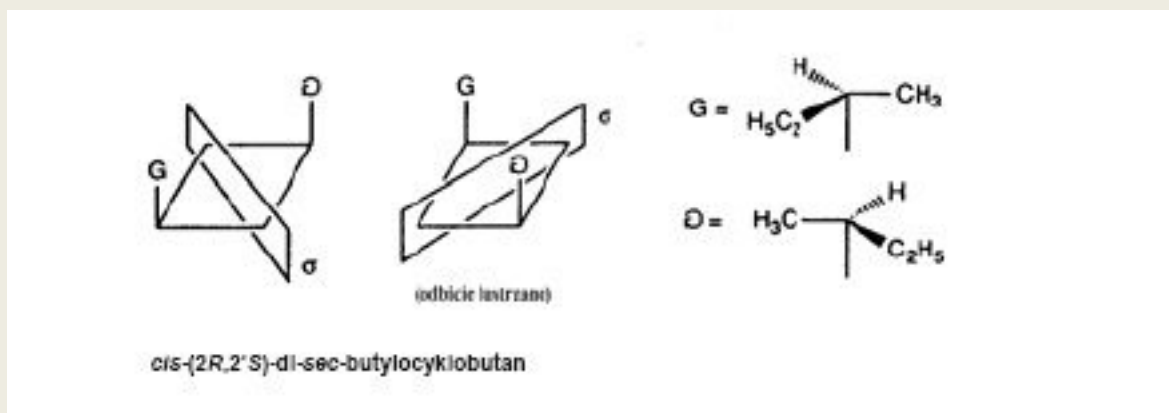
Reguły znajdowania osi obrotu

- 1) Atomy leżące na osi obrotu przechodzą przy obrocie na siebie
- 2) Dla każdego atomu nie leżącego na osi obrotu C_n musi istnieć n takich samych atomów leżących symetrycznie na okręgu wokół osi obrotu (każdy z obrotów C_n , $C_{n/2}$, .. $C_{n/n-1}$, C_n $n = E$ musi przeprowadzać ten atom na atom identyczny)
- 3) Atomy występujące pojedynczo w cząsteczce muszą leżeć na osi obrotu C_n

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Przykłady elementów symetrii molekuł wieloatomowych

Płaszczyzna symetrii oznaczana symbolem σ jest operacją symetrii, która polega na sprowadzeniu molekuły do pierwotnej postaci po zwierciadlanym odbiciu w płaszczyźnie σ . Płaszczyzna symetrii, w której leży oś o najwyższej krotności nazywa się pionową płaszczyzną symetrii i oznacza jest symbolem σ_v . Natomiast oś, do której płaszczyzna o najwyższej krotności jest prostopadła nazywana jest płaszczyzną poziomą i oznacza jest symbolem σ_h . Symbol σ_d oznacza płaszczyznę diagonalną.



Reguły znajdowania płaszczyzn odbicia

- 1) Atomy leżące na płaszczyźnie odbicia przechodzą przy odbiciu na siebie
- 2) Atomy nie leżące w płaszczyźnie odbicia muszą mieć po drugiej stronie płaszczyzny atomy bliźniacze
- 3) Atom występujący pojedynczo musi leżeć w płaszczyźnie odbicia
- 4) Częsteczki płaskie mają co najmniej jedną płaszczyznę odbicia (tj. płaszczyznę cząsteczki)

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Wychylenia atomów w drganiach normalnych mają określoną symetrię względem elementów symetrii molekuly. Na tym kryterium oparte jest zaszeregowanie drgań normalnych do odpowiednich typów symetrii.

Drgania niezdegenerowane zaliczmy do typu A lub B.

- Typ **A** obejmuje drgania niezdegenerowane, symetryczne względem osi o najwyższej krotności lub gdy oś taka nie występuje symetryczne względem trzech osi wzajemnie prostopadłych.
- Typ **B** obejmuje drgania niezdegenerowane antysymetryczne względem osi o najwyższej krotności lub gdy oś taka nie występuje symetryczne względem trzech osi wzajemnie prostopadłych.
- Typ **E** obejmuje wszystkie drgania dwukrotnie zdegenerowane.
- Typ **F** oznaczany również jako **T** obejmuje wszystkie drgania trójkrotnie zdegenerowane.

TYPY SYMETRII kliknij tutaj

Dodatkowe indeksy przy symbolu typu określają symetrię drgania względem innych elementów symetrii molekuly tak np.: symbol **g** oznacza symetryczność drgania a symbol **u** antysymetryczność drgania względem środka symetrii. Na przykład drganie typu B_g oznacza drganie antysymetryczne względem osi o najwyższej krotności i symetryczne względem środka symetrii. Indeks **1** oznacza symetryczność, a symbol **2** antysymetryczność drgania względem osi innej niż oś o najwyższej krotności. Np.; drganie typu A_2 oznacza drganie symetryczne względem osi o najwyższej krotności i antysymetryczne względem innej osi. Indeks **'** oznacza symetryczność, a indeks **''** antysymetryczność drgania względem płaszczyzny σ .

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

Rys 2

- Liczby pod elementami symetrii noszą nazwę **charakterów**. **Charakter = 1** oznacza, że drganie jest całkowicie symetryczne względem określonego elementu symetrii grupy punktowej.
- Jeżeli znamy grupę punktową cząsteczki, etykiety symetrii dla określonego drgania (1, 1, 2, -1 itd na rys 2) dla określonych drgań normalnych (o określonej symetrii – o tym mówią oznaczenia w pierwszej kolumnie rys 2- A_1 , A_2 , E) możemy zbudować **tablicę charakterów**, która łatwo potrafi określić ilość drgań aktywnych w IR i w spektroskopii Ramana.

[TABLICE CHARAKTERÓW](#)

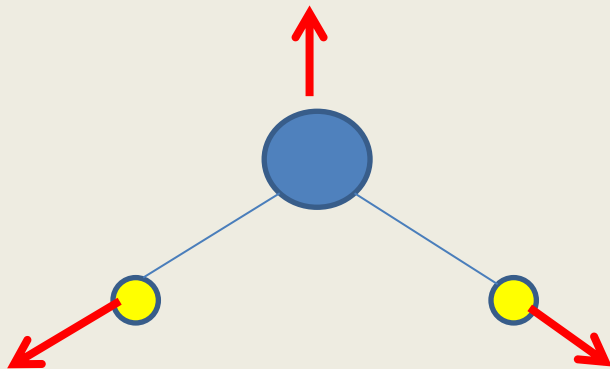
- Na rys. 2 mamy tablicę charakterów dla grupy punktowej C_{3v} . W dwóch ostatnich kolumnach występują oznaczenia x , y , z lub iloczyny z^2 , xy itd.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

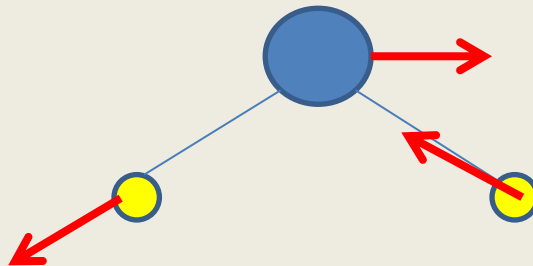
Jeżeli etykiety symetrii dla drgań normalnych odpowiadają x , y , z wtedy drgania podstawowe (0-1) będą aktywne w IR. Gdy zaś etykiety będą iloczynem położeń x , y lub z (takie jak x^2 lub yz) to drganie będzie aktywne w spektroskopii Ramana. Dlaczego?

Pamiętamy z reguł wyboru, że drganie jest aktywne w IR, gdy zmianie ulega moment dipolowy w czasie drgania, czyli również współrzędne x, y, z . Z kolei dla spektroskopii Ramana drganie jest aktywne, gdy zmianie ulega polaryzowalność, która jest tensorem zależącym od iloczynu składowych (np. x^2 lub yz , itd.)

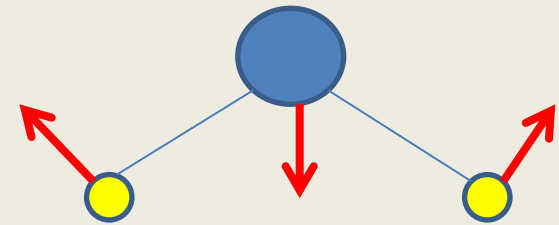
Rozważmy drgania dla cząsteczki wody stosując teorię grup, aby przewidzieć, które drgania są aktywne w IR a które w spektroskopii Ramana



A1 drganie rozciągające
symetryczne



B1 drganie rozciągające
antysymetryczne



A1 drganie zginające

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Analiza drgań cząsteczki H₂O

Elementami symetrii cząsteczki H₂O są: oś dwukrotna i dwie pionowe płaszczyzny symetrii (jedna z ich jest płaszczyzną molekuly σ_v , druga zaś jest prostopadła do pierwszej σ'_v). Oś dwukrotna pokrywa się z linią przecięcia obu płaszczyzn. Charakterystycznym dla cząsteczki H₂O jest również element identyczności E.

Taki zespół elementów symetrii zaszeregowuje molekułę do **grupy symetrii C_{2v}**.

Oscylacje zrębów atomowych oznaczają ich przemieszczenia z pozycji stanu równowagi, które pozostają w jakiejś relacji względem elementów symetrii molekuly. Jeśli w przypadku molekuly H₂O dokonamy operacji symetrii grupy C_{2v} na składowej wychylenia któregoś atomu wzdłuż kierunku z (kierunek osi C₂) to żadna z operacji nie zmieni tego wychylenia. Wobec tego charakterami χ operacji E, C₂, σ_v , σ'_v , wykonanych na wychyleniu z są liczby +1 w pierwszym rzędzie rzędzie

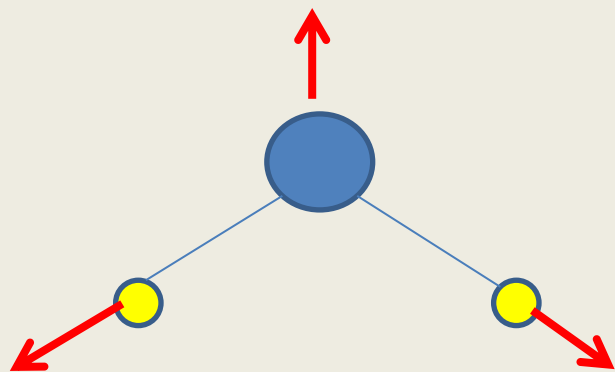
tabeli 2. Zespół charakterów 1 1 1 1 tworzy **reprezentację nieprzywiedłą (nieredukowalną)** γ określającą typ symetrii wychylenia jako A₁.

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

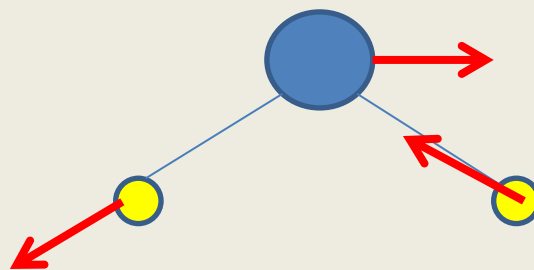
Tabela 2. Tablica charakterów grupy punktowej C_{2v}

C_{2v}	E	C 2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A1	1	1	1	1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A2	1	1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B1	1	-1	1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B2	1	-1	-1	1	T_y, R_x	α_{yz}
I	II				III	IV

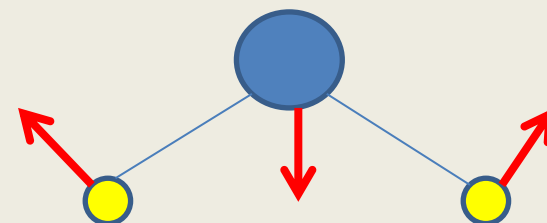
C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A1	1	1	1	1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A2	1	1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B1	1	-1	1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B2	1	-1	-1	1	T_y, R_x	α_{yz}
I	II				III	IV



A1 drganie rozciągające
symetryczne



B1 drganie rozciągające
antysymetryczne



A1 drganie zginające

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Reguły wyboru widm w zakresie IR mówią, iż aktywne są te drgania, w czasie których zmienia się moment dipolowy molekuly. Oznacz to, że **aktywne w IR** są drgania które powodują przekształcenia tego samego typu jak translacje. Zatem w grupie punktowej C_{2v} moment dipolowy zmienia się wzdłuż osi z o największej krotności w drganiach o symetrii A_1 , tym samym drgania typu A_1 dają pasma równoległe. Natomiast drgania należące do typów B_1 i B_2 zmieniają moment dipolowy w kierunkach prostopadłych do osi symetrii o najwyższej krotności i dają pasma prostopadłe. Drgania typu A_2 nie zmieniają zaś momentu dipolowego i są w widmie w poczerwieni nieaktywne.

Operacje symetrii mogą zmieniać nie tylko moment dipolowy ale także składowe tensora polaryzowalności, a tym samym stanowią podstawę aktywności drgania w widmie Ramana. W ostatniej kolumnie tabeli 2 podano, które elementy tensora polaryzowalności ulegają zmianie w danym typie symetrii i tym samym określają **drgania aktywne w widmie Ramana**.

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Tabela 2. Tablica charakterów grupy punktowej C_{2v}

C_{2v}	E	C 2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A1	1	1	1	1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A2	1	1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B1	1	-1	1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B2	1	-1	-1	1	T_y, R_x	α_{yz}
I	II				III	IV

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Aby wyznaczyć liczbę drgań o danej symetrii dla cząsteczki H_2O należy zapoznać się z pełną reprezentacją przywiedlną (redukowalną) Γ charakterystyczną dla tej cząsteczki. Charakter reprezentacji Γ otrzymujemy mnożąc liczbę nieprzemieszczających się atomów przez ich wkład do charakteru danej operacji symetrii.

Wyznaczanie pełnej reprezentacji przywiedlnej H_2O

	Operacje symetrii w grupie C_{2v}			
	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
Liczba nie przemieszczających się atomów	3	1	3	1
Wkład nie przemieszczającego się atomu do charakteru	3	-1	1	1
Reprezentacja przywiedlna Γ	9	-1	3	1

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Kolejne pojęcia potrzebne do dalszego działania to:

- **Rząd grupy punktowej, h** – jest to liczba wszystkich operacji symetrii w danej grupie punktowej.
- **Klasa operacji symetrii** – gromadząca operacje symetrii mające jednakowe charaktery.
- **Rząd j -tej klasy operacji symetrii h_j** – liczba operacji symetrii w j -tej klasie.

Dla danej molekuly można wyznaczyć liczbę n^γ , tj. liczbę translacji, rotacji i oscylacji o typie symetrii γ na podstawie wzoru:

$$n^\gamma = \frac{1}{h} \sum_j h_j \chi_j^\gamma \chi_j^\Gamma$$

w którym χ_j^γ jest charakterem j -tej klasy symetrii odpowiednio w reprezentacji nieprzywiedlnej γ i przywiedlnej Γ .

	Operacje symetrii w grupie C _{2v}			
	E	C ₂	σ _v (xz)	σ' _v (yz)
Liczba nie przemieszczających się atomów	3	1	3	1
Wkład nie przemieszczającego się atomu do charakteru	3	-1	1	1
Reprezentacja przywiedlna Γ	9	-1	3	1

C _{2v}	E	C ₂	σ _v (xz)	σ' _v (yz)		
A ₁	1	1	1	1	T _z	α _{xx} , α _{yy} , α _{zz}
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	α _{xy}
B ₁	1	-1	1	-1	T _x , R _y	α _{xz}
B ₂	1	-1	-1	1	T _y , R _x	α _{yz}
I	II				III	IV

$$n^{A_1} = \frac{1}{4} [1 \times 1 \times 9 + 1 \times 1 \times (-1) + 1 \times 1 \times 3 + 1 \times 1 \times 1] = 3$$

$$n^{A_2} = \frac{1}{4} [1 \times 1 \times 9 + 1 \times 1 \times (-1) + 1 \times (-1) \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 1$$

$$n^{B_1} = \frac{1}{4} [1 \times 1 \times 9 + 1 \times (-1) \times (-1) + 1 \times 1 \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 3$$

$$n^{B_2} = \frac{1}{4} [1 \times 1 \times 9 + 1 \times (-1) \times (-1) + 1 \times (-1) \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 2$$

$$n^{\gamma} = \frac{1}{h} \sum_j h_j \chi_j^{\gamma} \chi_j^{\Gamma}$$

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Korzystając ze wzoru: $n^{\gamma} = \frac{1}{h} \sum_j h_j \chi_j^{\gamma} \chi_j^{\Gamma}$ dla H₂O mamy:

$$n^{A_1} = 1/4 [1 \times 1 \times 9 + 1 \times 1 \times (-1) + 1 \times 1 \times 3 + 1 \times 1 \times 1] = 3$$

$$n^{A_2} = 1/4 [1 \times 1 \times 9 + 1 \times 1 \times (-1) + 1 \times (-1) \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 1$$

$$n^{B_1} = 1/4 [1 \times 1 \times 9 + 1 \times (-1) \times (-1) + 1 \times 1 \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 3$$

$$n^{B_2} = 1/4 [1 \times 1 \times 9 + 1 \times (-1) \times (-1) + 1 \times (-1) \times 3 + 1 \times (-1) \times 1] = 2$$

Otrzymana reprezentacja przywiedlna ma więc postać:

$$\Gamma = 3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$$

Zapisana reprezentacja przywiedlna zawiera 3 translacje i 3 rotacje zgodnie z kolumną III tabeli 2 otrzymujemy reprezentację przywiedlną obejmującą tylko oscylacje (drgania) cząsteczki.

$$\Gamma = 3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$$

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A1	1	1	1	1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A2	1	1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B1	1	-1	1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B2	1	-1	-1	1	T_y, R_x	α_{yz}
I	II				III	IV

Ostatecznie otrzymujemy więc:

$$\Gamma_{osc} = 2A_1 + B_1$$

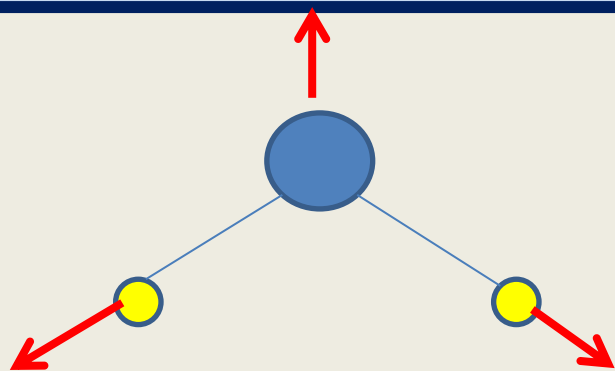
Cząsteczka wody ma więc 2 drgania typu A1 w pełni symetryczne tzn. symetryczne względem wszystkich elementów symetrii. Drgania te są aktywne tak w widmie Ramana (kolumna IV tabela 2) jak i widmie IR (kolumna III tabela 2). Trzecie drganie cząsteczki wody typu B1 również jest aktywne w widmie Ramana jak i IR ([tabela 2](#)).

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

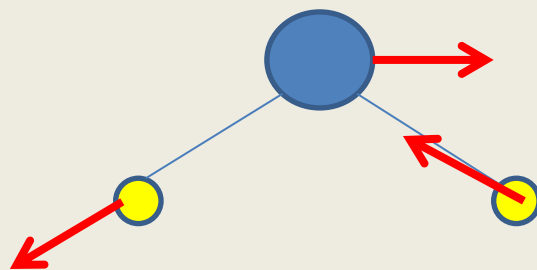
Ostatecznie otrzymujemy więc:

$$\Gamma_{\text{osc}} = 2A_1 + B_1$$

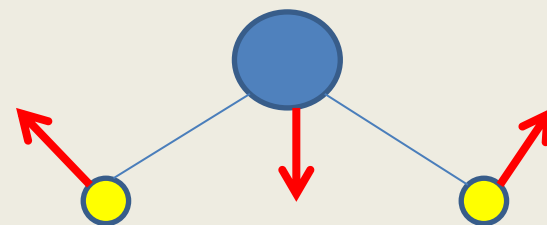
Cząsteczka wody ma więc 2 drgania typu A_1 w pełni symetryczne tzn. symetryczne względem wszystkich elementów symetrii. Drgania te są aktywne tak w widmie Ramana (kolumna IV tabela 2) jak i widmie IR (kolumna III tabela 2). Trzecie drganie cząsteczki wody typu B_1 również jest aktywne w widmie Ramana jak i IR ([tabela 2](#)).



A_1 drganie rozciągające
symetryczne



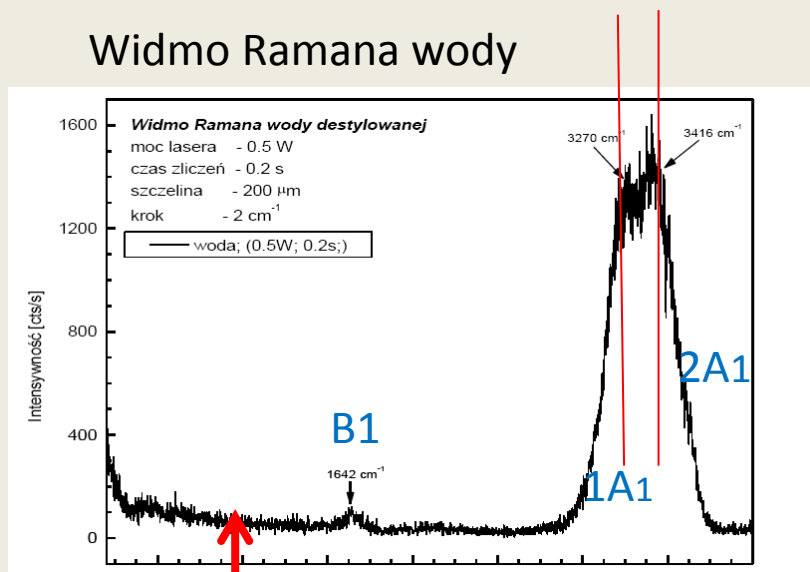
B_1 drganie rozciągające
antysymetryczne



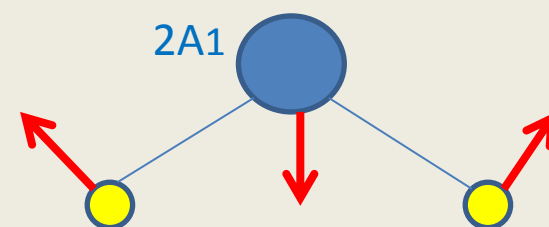
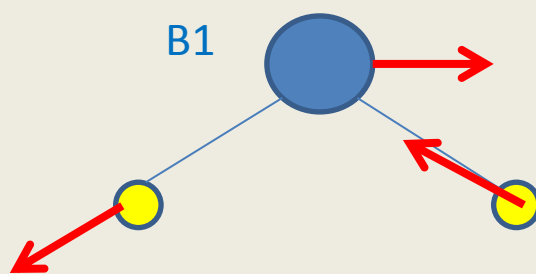
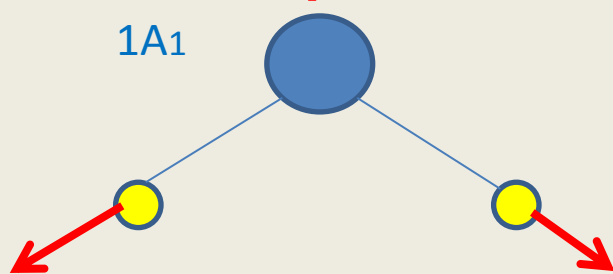
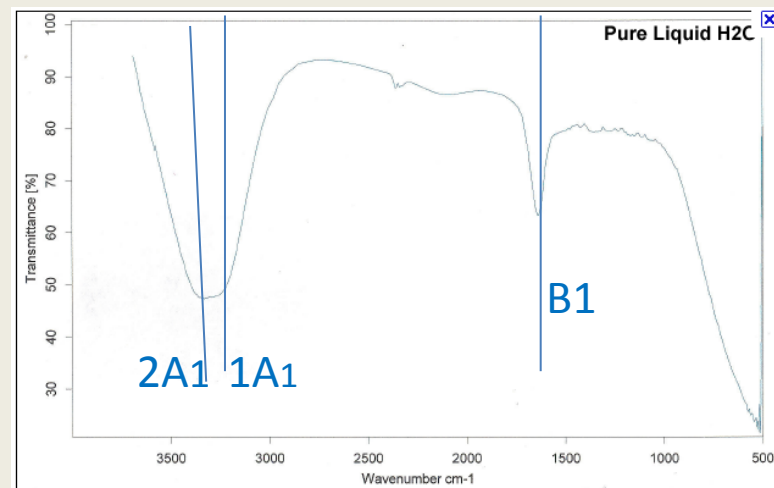
A_1 drganie zginające

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Widmo Ramana wody



Widmo IR wody



A1 drganie rozciągające
symetryczne

B1 drganie rozciągające
antysymetryczne

A1 drganie zginające

Zastosowanie teorii grup w analizie widm oscylacyjnych

Zespół elementów symetrii występujących w molekuale pozwala na zaszeregowanie molekuły do jednej z **grup punktowych**. Najważniejsze grupy punktowe przedstawia Tabela 1.

Grupa punktowa	Elementy symetrii	Przykłady molekuł
C_1	brak elementów symetrii z wyjątkiem E	CHFCIBr
C_s	σ_h	NOCl (nieliniowa)
C_2	C_2	H ₂ O ₂ , H ₂ C=CCl ₂
C_{2v}	$C_2, 2\sigma_v$	H ₂ O, HCHO
C_{3v}	$2C_3, 3\sigma_v$	NH ₃ , HCCl ₃
C_{2h}	C_2, i, σ_h	trans ClHC=CHCl
D_{2h}	$3C_2$ wzajemnie prostopadłe $i, 3\sigma$	H ₂ C=CH ₂ (płaska)
D_{3h}	$2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2S_3, 3\sigma_v$	1,3,5, trichlorobenzen
D_{6h}	$2C_6, 2C_3, 6C_2, C'_2, i, 2S_3, 2S_6, \sigma_h, 3\sigma_d, 3\sigma_v$	benzen
D_{2d}	$3C_2, 2S_4, 2\sigma_d$	H ₂ C=C=CH ₂
D_{3d}	$2C_3, 3C_2, i, 2S_6, 3\sigma_d$	C ₆ H ₂ forma krzesłowa
T_d	$8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d$	CCl ₄ , CH ₄
O_h	$6C_4, 8C_3, 6C_2, 3C'_2, i, 6S_4, 8S_6, 3\sigma_h', 6\sigma_d$	SF ₆ , [PtC ₆] ²⁻
$C_{\infty v}$	$2C_{\infty}, \infty\sigma_v$	HCl, HCN, OCS, HC≡CD
$D_{\infty h}$	$2C_{\infty}, \infty C_2, i, 2S_{\infty}, \infty\sigma_v$	N ₂ , CO ₂ , HC≡CH

Tabela 1. Ważniejsze grupy punktowe i przykłady należących do nich molekuł

<http://faculty.uscupstate.edu/llever/Chem%20542/ShortCl2O4/GroupTheor.htm>

<http://pauli.physics.lsa.umich.edu/p452/gt07.pdf>

Literatura:

Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN 1998.

J. Sadlej, Spektroskopia molekularna, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne
Warszawa, 2002.

http://www.huntresearchgroup.org.uk/teaching/teaching_symmetry_year3/L5_2010_Notes_Vib_Modes.pdf

http://draco.uni.opole.pl/moja_fizyka/numer16/publikacja.pdf