

Лабораторная работа № 1. Форма и симметрия молекулы. Колебания молекул

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: для заданной молекулы определить вид (качественно) ИК- и КР-спектров и форму нормальных колебаний

ЗАДАЧИ:

1. Определение формы молекулы и симметрии
2. Определение молекулы
3. Определение количества механических степеней свободы.
4. Определение структуры приводимого координатного представления в декартовых координатах
5. Определение структуры координатного представления для трансляционного, вращательного и колебательного движений
6. Определение симметрии компонент дипольного момента и компонент тензора поляризуемости.
7. Определение активности полос в ИК- и КР-спектрах.
8. Предсказание вида вращательного контура колебательных полос
9. Качественная оценка интенсивности полос в ИК- и КР-спектрах
10. Определение формы нормальных колебаний (графически)