

Качественная оценка интенсивности полос в ИК- и КР-спектрах

Знание симметрии нормальных координат позволяет в ряде случаев предсказать (качественно) и интенсивность колебательных полос в инфракрасных спектрах. Если для рассматриваемой молекулы известны величина и направление дипольного момента, его можно разложить на компоненты по координатным осям и оценить (качественно) величины соответствующих производных. Существуют некоторые общие правила, позволяющие оценить интенсивность полос определенной симметрии. Так, для линейных молекул деформационные колебания, изменяющие углы между связями, соответствуют всегда значительным величинам производной дипольного момента, поскольку в равновесной конфигурации компоненты дипольного момента, перпендикулярные оси молекулы, равны нулю. Соответствующие колебания всегда имеют сравнительно высокую интенсивность вне зависимости от того, какую интенсивность имеют другие колебания.

Аналогично для плоских молекул неплоскостные колебания по той же причине имеют также высокую интенсивность. Интенсивность плоских колебаний плоских молекул (разной симметрии) заранее предсказать трудно.

В спектрах комбинационного рассеяния также можно указать некоторые общие правила, позволяющие выделить колебания, имеющие высокую интенсивность. Так, обычно диагональные компоненты тензора поляризуемости α_{xx} , α_{yy} , α_{zz} почти всегда больше недиагональных. Приблизительно это справедливо и для их изменений. Поэтому полносимметричные колебания практически всегда имеют более высокую интенсивность, чем неполносимметричные.