

Таблица. 5

Правила отбора для вращательных переходов в спектрах комбинационного рассеяния

Тип волчка	Вид полосы			Правило отбора
	Тип колебания	Компонент поляризуемости	Поляризация	
Линейный	полносимметричный вырожденный	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ α_{yz}, α_{zx}	поляризованный	$\Delta J = 0, \pm 2$
			деполяризованный	$\Delta J = 0^*, \pm 1, \pm 2$
Сферический	полносимметричный дважды вырожденный трижды вырожденный	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$ ($\alpha_{xx} + \alpha_{yy} - 2\alpha_{zz}, \alpha_{xx} - \alpha_{yy}$) α_{yz} ($\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$)	поляризованный	$\Delta J = 0^{**}$
			деполяризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2$
			деполяризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2$
Симметричный	полносимметричный неполносимметричный*** невырожденный вырожденный	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}$ ($\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}$)**** (α_{yz}, α_{zx})	поляризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2, \Delta K = 0$
			деполяризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2, \Delta K \pm 2$
			деполяризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2, \Delta K \pm 2$
			деполяризованный	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2, \Delta K \pm 2$
Асимметричный				$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, J' + J'' \geq 2$

* – слабая Q-ветвь

** – сильная Q-ветвь

*** – только в молекулах, имеющих ось 4-го порядка

**** – для некоторых точечных групп симметрии встречаются две компоненты поляризуемости, для некоторых – одна