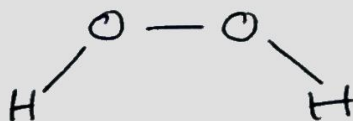


Encontrar los modos activos en infrarrojo para el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en su configuración cis-plana y cis-no plana.

a) Configuración cis-plana



grupo puntual: C_{2v}

tabla de caracteres:

C_{2v}	E	C_2	$\sqrt{v}(x,z)$	$\sqrt{v}(y,z)$	lineal	cuadrado
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

determinación de modos activos:

C_{2v}	E	C_2	$\sqrt{v}(x,z)$	$\sqrt{v}(y,z)$
# átomos en vibración	4	0	0	4
Coordenadas a la trop	3	-1	1	1
Γ_{total}	12	0	0	4

$$aA_1 = \frac{1}{4} (12(1)(1) + 0(1)(1) + 0(1)(1) + 4(1)(1)) = \frac{16}{4} = 4$$

$$aA_2 = \frac{1}{4} (12(1)(1) + 0(1)(1) + 0(-1)(1) + 4(-1)(1)) = \frac{8}{4} = 2$$

$$aB_1 = \frac{1}{4} (12(1)(1) + 0(-1)(1) + 0(1)(1) + 4(-1)(1)) = \frac{8}{4} = 2$$

$$aB_2 = \frac{1}{4} (12(1)(1) + 0(-1)(1) + 0(-1)(1) + 4(1)(1)) = \frac{16}{4} = 4$$

$$\Gamma_{\text{total}} = 4A_1 + 2A_2 + 2B_1 + 4B_2$$

$$\Gamma_{\text{no gen}} = A_1 + A_2 + 2B_1 + 2B_2$$

$$\Gamma_{\text{gen}} = \Gamma_{\text{total}} - \Gamma_{\text{no gen}} = 3A_1 + A_2 + 2B_2$$

A_1 active on IR

A_2 no active on IR

B_2 active on IR \therefore

5 bonds on IR: $3A_1$ y $2B_2$

b) Configuración cis-na flones



grupos puntual: C_2

tabla de caracteres:

C_2	E	C_2	lineal	cuadráticas
A	1	1	z, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B	1	-1	x, y, R_x, R_y	yz, x, z

determinación de modos activos

C_2	E	C_2
# átomos monocentros	4	0
contribución a la lengua	3	-1
Γ_{tot}	12	0

$$aA = \frac{1}{2} (12(1)(1) + 0(1)(1)) = \frac{12}{2} = 6$$

$$aB = \frac{1}{2} (12(1)(1) + 0(-1)(1)) = \frac{12}{2} = 6$$

$$\Gamma_{\text{vib}} = 6A + 6B$$

$$\Gamma_{\text{rota}} = 2A + 4B$$

$$\Gamma_{\text{gen}} = \Gamma_{\text{vib}} - \Gamma_{\text{rota}} = 4A + 2B$$

A activo en IR
B activo en IR :.

6 modos en IR : 4A_g
2B