

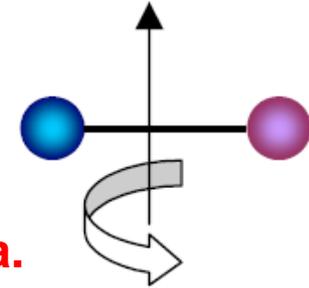
Spettroscopia rotazionale

In prima approssimazione la descrizione dello **spettro rotazionale di una molecola** fa riferimento alla trattazione QM del moto rotazionale di un **rotatore rigido**.

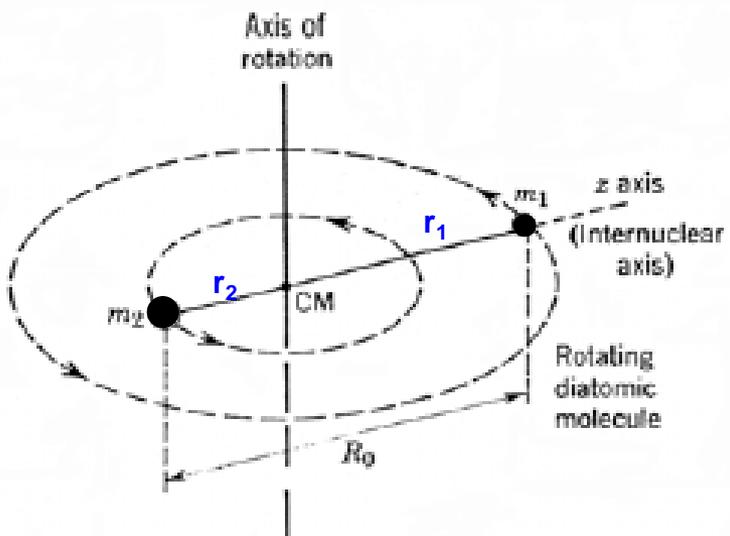
Consideriamo il **moto rotazionale** di una **molecola biatomica**



due masse che ruotano attorno ad un asse perpendicolare al legame e passante per il suo baricentro



V=0, solo energia cinetica.



$$R_0 = r_1 + r_2$$

$$r_1 m_1 = r_2 m_2$$



Classicamente
$$E_{ROT} = \frac{1}{2} m_1 r_1^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \omega^2 = \frac{1}{2} I \omega^2$$

momento di inerzia

$$I = \sum_i m_i r_i^2$$

essendo
$$L = m_1 r_1^2 \omega + m_2 r_2^2 \omega = I \omega$$

$$E_{ROT} = \frac{1}{2} \frac{L^2}{I}$$

I può essere anche espresso in funzione di R_0 e μ

$$I = R_0^2 \mu$$

$$E_{ROT} = \frac{1}{2} \frac{L^2}{I} = \frac{1}{2} \frac{L^2}{\mu R_0^2}$$

trattazione quantistica $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$ ← operatore Laplaciano

Conversione di ∇^2 da coord. cartesiane a sferiche

$$\nabla^2 = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{R^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

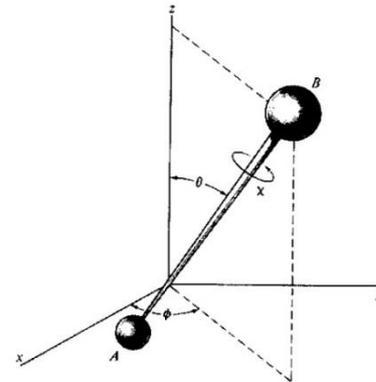


Figure 4.1
Diatomic molecule AB rotating in space-fixed axes. The origin of coordinates is at the center of mass of the molecule.

Per il rotatore rigido con $R=R_0=\text{cost}$

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] = \frac{L^2}{2\mu R_0^2}$$

Ponendo $I = \mu R_0^2$ si ottiene

$$H_r = \frac{L^2}{2I}$$

Per trovare l'energia dei livelli rotazionali (autovalori) bisogna risolvere l'equazione di Sch. con questo Hamiltoniano

$$H_r \Phi_r(R) = E \Phi_r(R)$$

$$H_r \Phi_r (R) = E \Phi_r (R)$$

Poiché H commuta con L^2 , le autofunzioni di L^2 (**armoniche sferiche** $Y_{l,m}(\theta, \phi)$) sono autofunzioni di H_r con **autovalori**

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad \mathbf{J, \text{ numero quantico rotazionale}}$$

Si utilizzano i simboli \mathbf{J} ed \mathbf{M} per indicare i due numeri quantici da cui dipendono le autofunzioni del rotatore $Y_{J,M}(\theta, \varphi)$

$$\mathbf{J = 0, 1, 2, \dots}$$

$$\mathbf{M = J, J-1, \dots, -J}$$

\mathbf{J} definisce i valori permessi del momento angolare rotazionale

\mathbf{M}_J definisce le direzioni permesse per ciascun valore del momento angolare rotazionale

poiché l'energia non dipende da \mathbf{M}_J **ciascun livello rotazionale è $(2J+1)$ volte degenere**
(in assenza di campi esterni)

$$H_r Y_{l,m}(\mathcal{G}, \varphi) = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) Y_{l,m}(\mathcal{G}, \varphi)$$

Le armoniche sferiche costituiscono gli stati stazionari del moto rotazionale

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = NP_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$



funzioni associate di Legendre

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Table 5.1. Spherical harmonics $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ for $l = 0, 1, 2, 3$

$Y_{00} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_{30} = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	$Y_{3,\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$
$Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	$Y_{3,\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi}$
$Y_{20} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_{3,\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi}$
$Y_{2,\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$	
$Y_{2,\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$	

Livelli energetici del rotatore rigido

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

ogni livello rotazionale è
(2J+1) volte degenere
(in assenza di campi esterni)

E' conveniente esprimere l'energia in termini di numero d'onda $\tilde{\nu} (cm^{-1})$;

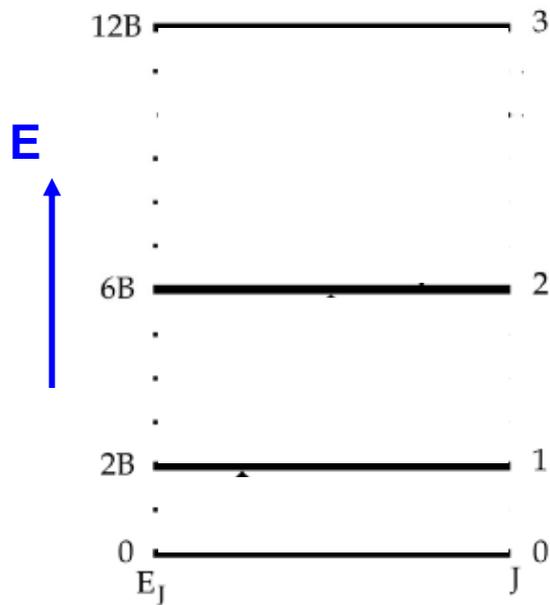
termine rotazionale

$$\tilde{\nu} = \frac{E}{hc} \longrightarrow \underbrace{F_J}_{\text{termine rotazionale}} = \frac{h}{8\pi^2 Ic} J(J+1) = \underbrace{BJ(J+1)}_{\text{costante rotazionale}}$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}$$

B è una costante molecolare

Diagramma dei livelli rotazionali



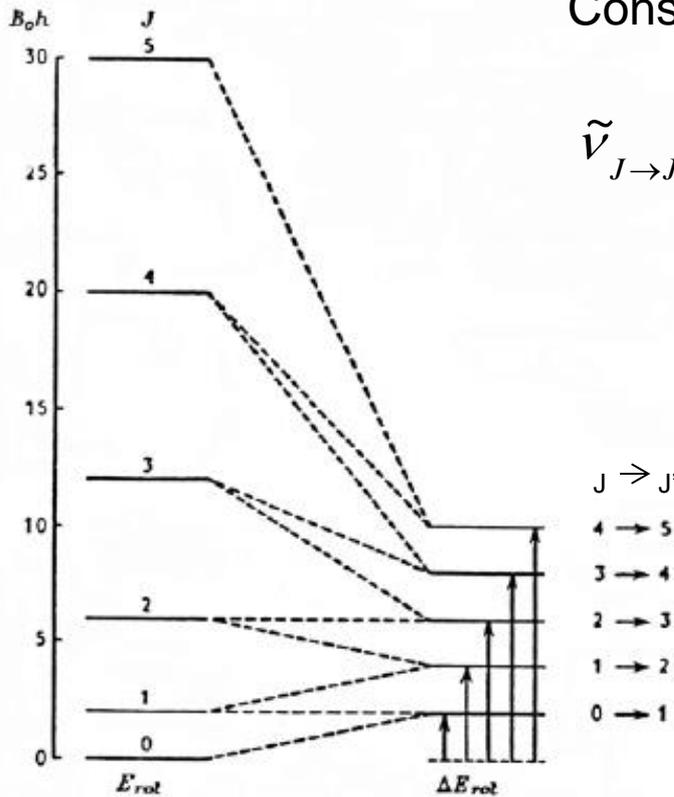
$$F_J = BJ(J + 1)$$

Figura: distribuzione dei livelli rotazionali di un rotatore rigido biatomico

Notiamo:

- esiste un' energia uguale a zero ($Y_{00} = \sqrt{1/4\pi}$)
- l'energia aumenta col quadrato di J , quindi i livelli divergono al crescere di J
- ogni livello è $(2J+1)$ volte degenere (possibili orientazioni del momento angolare)

Posizione delle righe spettrali



Consideriamo la transizione tra due livelli $J \rightarrow J'$

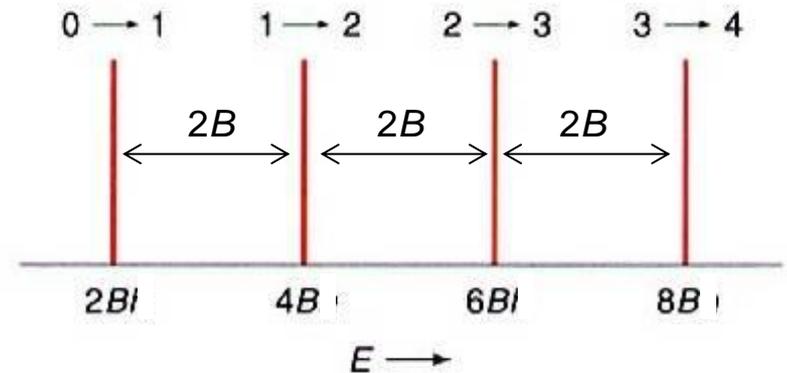
$$\tilde{\nu}_{J \rightarrow J'} \longrightarrow F_{J'} - F_J = BJ'(J'+1) - BJ(J+1)$$

Se $J'=J+1$ (livelli contigui)

$$\Delta F_{J+1, J} = 2B(J+1)$$

Le righe spettrali quindi appaiono a $2B$, $4B$, $6B$, $8B$

RIGHE EQUISPAZiate



$$\Delta F = 2B(J + 1)$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 I c}$$

- B diminuisce all'aumentare di $I \rightarrow$ le molecole più grandi presentano livelli rotazionali molto più vicini

- I valori di B sono nel range di unità-decine di $\text{cm}^{-1} \rightarrow$ transizioni nel campo delle microonde

	B (cm^{-1})
HF	20.56
HCl	10.43
CO	1.92

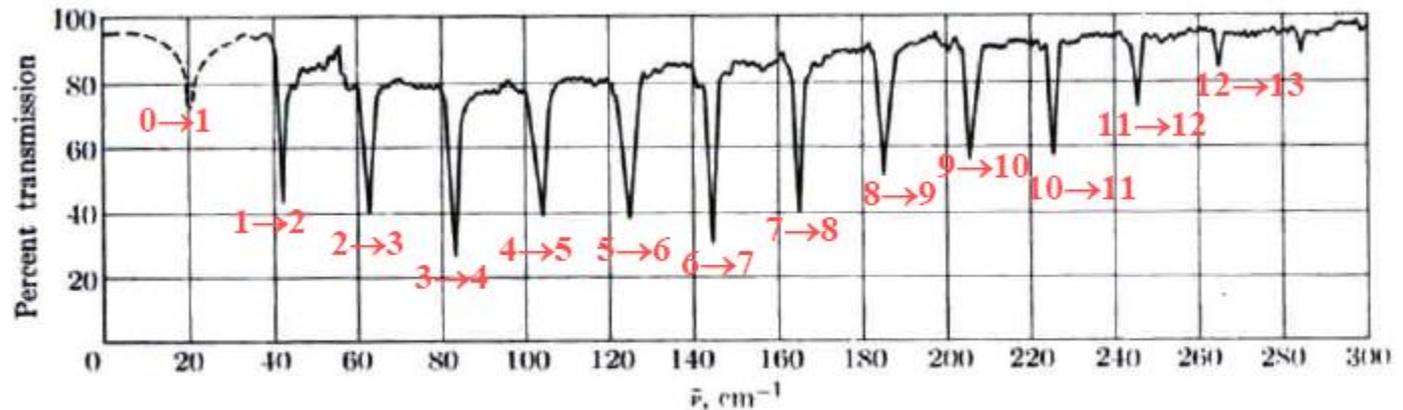


Fig. 5-31. Rotational absorption spectrum of HCl in the gaseous phase.

La misura dell'intervallo di frequenza tra righe successive consente di conoscere B da cui si può ricavare il momento di inerzia I e la distanza di equilibrio tra i nuclei (essendo note le masse). La precisione è molto alta ($\approx 10^{-3} \text{ \AA}$)

Intensità delle transizioni rotazionali

Le transizioni rotazionali non hanno tutte la stessa intensità. L'intensità delle transizioni dipende :

- dalla probabilità della transizione (regole di selezione rotazionali)
- dalla popolazione degli stati rotazionali

Regole di selezione per transizioni rotazionali

L'intensità della transizione è proporzionale alla probabilità di transizione $\left| \overline{M}_{if} \right|^2$

$$\overline{M}_{if} = \langle \psi_f | \overline{\mu} | \psi_i \rangle \neq 0 \quad \psi_i = Y_{J,M}(\theta, \phi), \quad \psi_f = Y_{J',M'}(\theta, \phi)$$



momento della transizione

$$\overline{M}_{if} = \langle Y_{J',M'} | \overline{\mu} | Y_{J,M} \rangle \neq 0$$

Regola di selezione generale

Caratteristiche generali che la molecola deve possedere perché $\underline{M}_{if} \neq 0$

$$\overline{M}_{if} = \langle Y_{J',M'} | \overline{\mu} | Y_{J,M} \rangle \neq 0$$

Si considerano le 3 componenti di M_{if} corrispondenti alle 3 componenti del momento di dipolo che ruota con la molecola. Le componenti del momento di dipolo espresse in coordinate polari sono :

$$\mu_x = \mu_0 \sin \theta \cos \varphi$$

$$\mu_y = \mu_0 \sin \theta \sin \varphi$$

$$\mu_z = \mu_0 \cos \theta$$

si osserva che le componenti del momento della transizione sono diverse da zero solo se

$$\overline{\mu} \neq 0$$



Regola di selezione generale

Per osservare transizioni rotazionali la molecola deve possedere un momento di dipolo permanente.



molecole biatomiche : solo le molecole biatomiche eteronucleari hanno uno spettro rotazionale di assorbimento. Le molecole omonucleari non danno origine a spettro rotazionale di assorbimento.

La regola di selezione generale mostra che l'intensità dipende dalla grandezza del dipolo permanente della molecola, μ_0 : molecole fortemente polari danno origine a righe rotazionali più intense di quelle di molecole più debolmente polari

CO, $\mu_0 = 0.10$ D. HCN, $\mu_0 = 3.00$ D.

L'intensità nel caso HCN è quindi ~ 1000 volte quella di CO.

Regole di selezione specifica

Esprimono le condizioni per le quali il momento della transizione \underline{M}_{if} è $\neq 0$ in funzione della variazione dei numeri quantici J, M

Per una molecola lineare le condizioni che devono essere soddisfatte perché $\underline{M}_{if} \neq 0$ sono

$$\Delta J = \pm 1$$

$$\Delta M_J = 0, \pm 1 \text{ (di interesse solo per molecole in un campo elettrico o magnetico)}$$

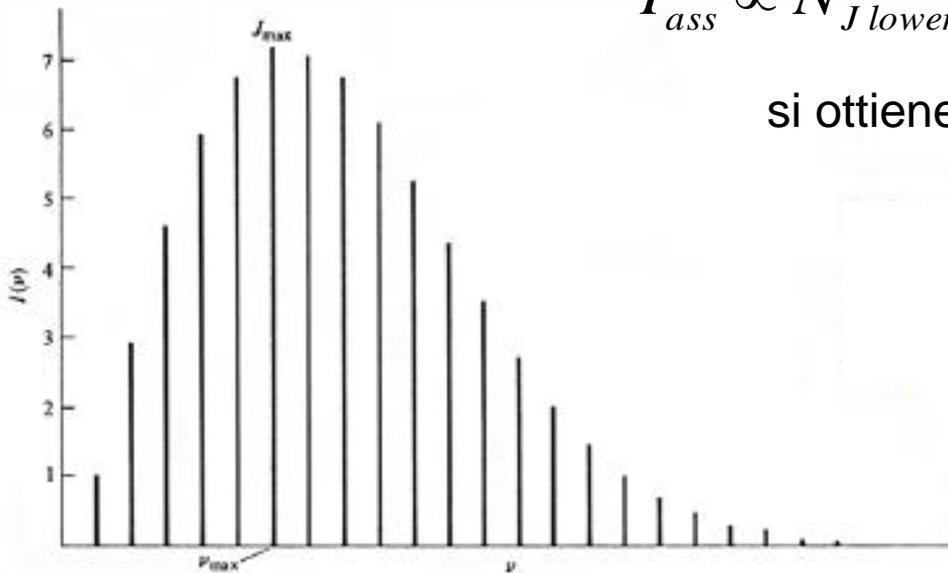
Dipendenza dell'intensità dalla popolazione dei livelli rotazionali

Oltre che dal valore numerico di M_{if} , che varia poco con J, l' **intensità** delle righe rotazionali dipende significativamente dalla **popolazione del livello energetico da cui parte la transizione**.

Se si considera che

$$I_{ass} \propto N_{J\ lower} \propto g_J e^{-(E_J/kT)} = (2J + 1)e^{-BJ(J+1)/kT}$$

si ottiene uno spettro del tipo riportato in figura



Ci sono due fattori opposti che influiscono

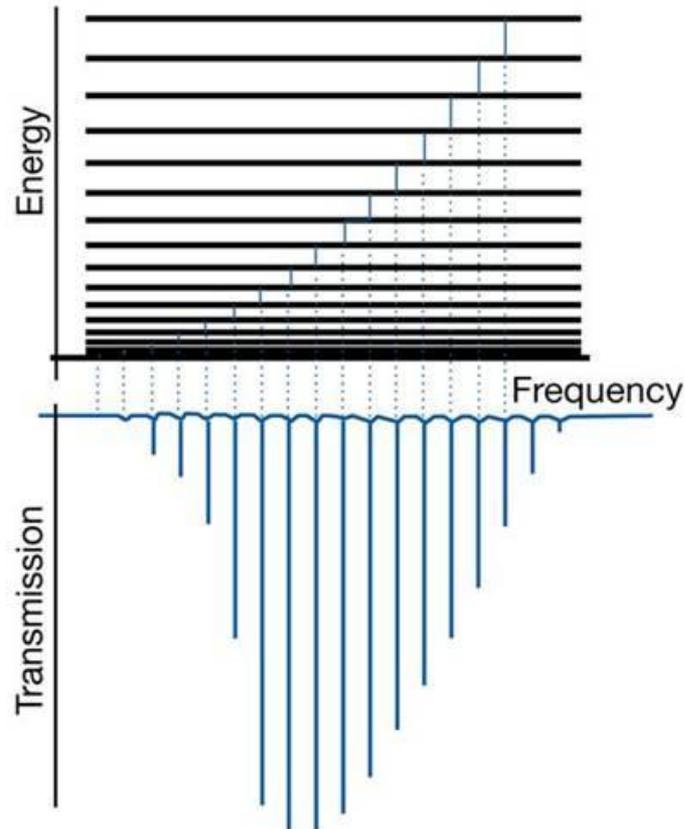
- $(2J + 1)$ aumenta all'aumentare di J
- $\exp(-E_J/kT)$ diminuisce rapidamente all'aumentare di J

L'occupazione (e quindi l'intensità) cresce con J per valori di J piccoli; poi il fattore esponenziale interviene abbassando la popolazione dei livelli e per valori di J alti l'andamento decresce esponenzialmente.

Per HBr a T ambiente il valore J_{max} (transizione con intensità massima) = 3

➡ I aumenta per valori di J bassi; per valori alti di J il fattore esponenziale ha il sopravvento e $N_J \rightarrow 0$

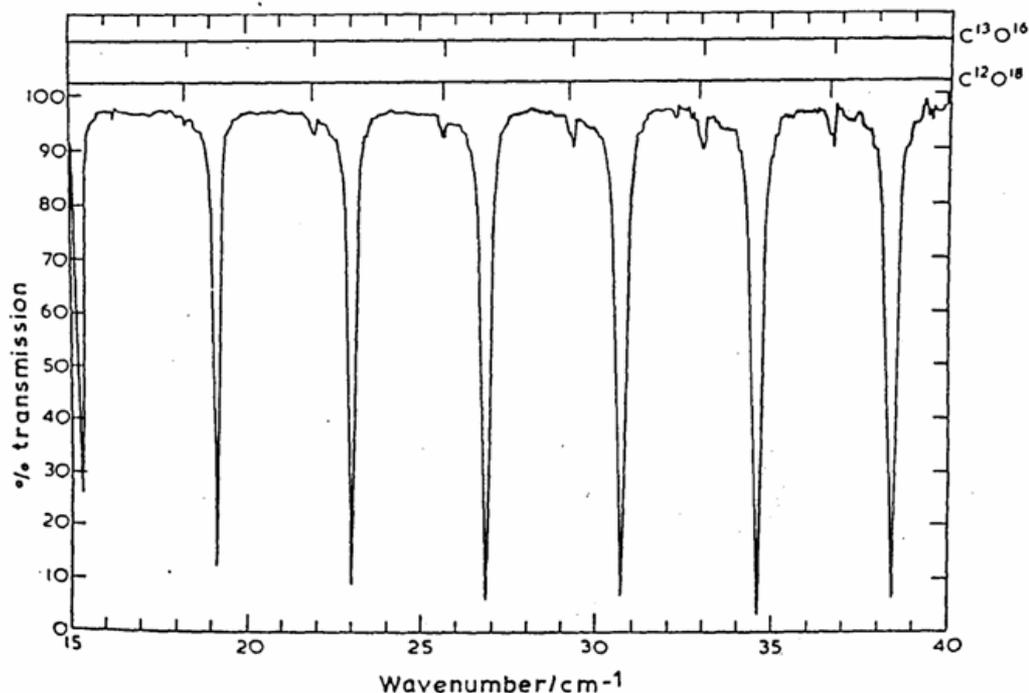
Livelli energetici



Spettro rotazionale

Spettro di assorbimento rotazionale puro di CO

La fig. mostra le transizioni da J=3 (3→4) a J=9 (9→10)



Dalla separazione tra le righe rotazionali si può ricavare B :

$B = 1.921 \text{ cm}^{-1}$
(distanza tra J=3 e J=9
corrispondente a 12B)

$$B = \frac{h}{8\pi^2 cI}$$

Calcolando la massa ridotta
di $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$

$$\mu = 1.139 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

si può ottenere la **distanza interatomica**

$$r = 1.13 \text{ \AA}$$

Effetto isotopico

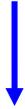
$$^{12}\text{C}^{16}\text{O} \quad 2\tilde{B} = 3.842 \text{ cm}^{-1}$$

$$^{13}\text{C}^{16}\text{O} \quad 2\tilde{B} = 3.673 \text{ cm}^{-1}$$

$$^{12}\text{C}^{18}\text{O} \quad 2\tilde{B} = 3.659 \text{ cm}^{-1}$$

Distorsione centrifuga

La *spaziatura* tra righe contigue *non* è *rigorosamente costante*



tendenza a diminuire all'aumentare di J

Il legame non è perfettamente rigido : quanto piu' elevata è l'energia rotazionale (J) tanto piu' i nuclei tendono ad essere allontanati dalla forza centrifuga



r aumenta e B diminuisce



le energie rotazionali risultano modificate da un fattore correttivo per la distorsione centrifuga

Si dimostra che $F(J) = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2$

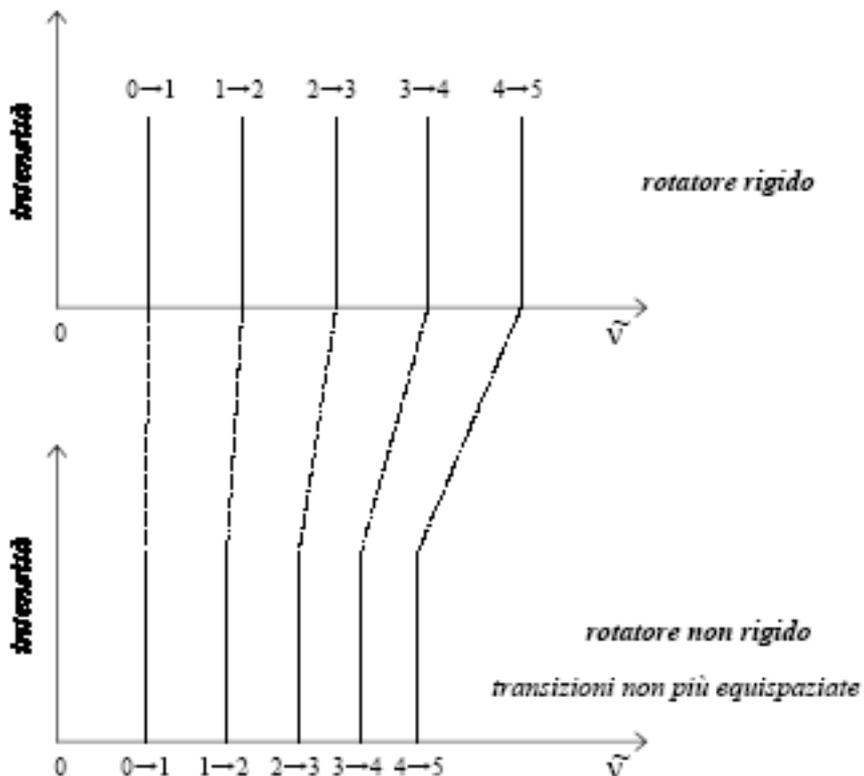
costante di distorsione centrifuga

L'effetto della distorsione centrifuga sarà tanto maggiore quanto più piccola è la costante di forza del legame e la frequenza vibrazionale.

$$D = \frac{4B^3}{\omega^2}$$

La relazione generale per la frequenza di transizione $J \rightarrow J'$ è:

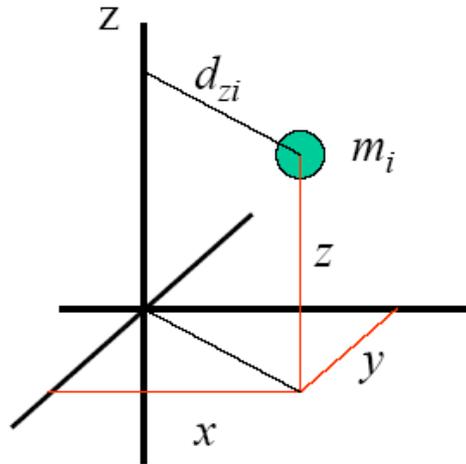
$$\tilde{\nu} = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3$$



Un diagramma dei valori osservati di $\tilde{\nu}/(J+1)$ contro $(J+1)^2$ fornisce una retta di intercetta $2B$ e pendenza $-4D$

Molecole poliatomiche (modello rotatore rigido)

La rotazione di una molecola poliatomica puo' essere descritta in termini di momenti di inerzia rispetto a 3 assi mutuamente perpendicolari



- set di assi cartesiani qualsiasi con **l'origine nel centro di massa**
- i **momenti di inerzia rispetto ai 3 assi** sono:

$$I_{zz} = \sum_i m_i d_{zi}^2 = \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2) \quad \text{rotazione attorno a z}$$

$$I_{xx} = \sum_i m_i d_{xi}^2 = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) \quad \text{rotazione attorno a x}$$

$$I_{yy} = \sum_i m_i d_{yi}^2 = \sum_i m_i (z_i^2 + x_i^2) \quad \text{rotazione attorno a y}$$

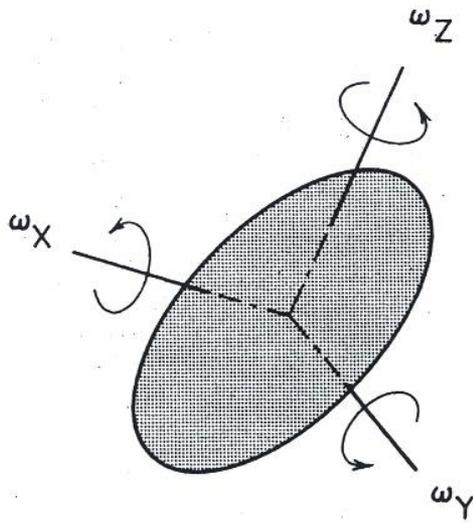
prodotti di inerzia

$$I_{xy} = I_{yx} - \sum_{i=1}^n m_i x_i y_i$$

$$I_{xz} = I_{zx} - \sum_{i=1}^n m_i x_i z_i$$

$$I_{yz} = I_{zy} - \sum_{i=1}^n m_i y_i z_i$$

Si dimostra che per ogni corpo rigido esiste una particolare terna di assi mutuamente perpendicolari centrata nel baricentro che rende la matrice di inerzia diagonale



Il moto di rotazione di un corpo rigido può essere specificato in termini delle velocità angolari attorno ad una terna arbitraria di assi ortogonali con l'origine nel baricentro.

La terna è solidale con il sistema rigido

Questo sistema di coordinate costituisce un sistema di *assi principali di inerzia* generalmente indicati come *a, b e c*. In questo sistema di coordinate *I* è diagonale

Rispetto ai 3 assi principali *a, b e c* sono definiti i **momenti principali di inerzia I_a, I_b, I_c**

$$I_a = \sum_i m_i d_{a_i}^2$$

$$I_b = \sum_i m_i d_{b_i}^2$$

$$I_c = \sum_i m_i d_{c_i}^2$$

In questo sistema, se ω_i è la velocità angolare attorno a ciascuno di questi 3 assi, l'energia cinetica relativa al moto rotazionale sarà data da

$$E_{rot} = \frac{1}{2} (I_a \omega_a^2 + I_b \omega_b^2 + I_c \omega_c^2)$$

$$E_{rot} = \frac{J_a^2}{2I_a} + \frac{J_b^2}{2I_b} + \frac{J_c^2}{2I_c}$$

- per gli assi a , b e c vale la convenzione

$$I_a \leq I_b \leq I_c$$

- le relazioni tra i momenti principali di inerzia dipendono dalle proprietà di simmetria della molecola e su questa base si possono classificare i vari tipi di rotatori molecolari
- in generale un asse di rotazione C_n coincide con uno degli assi principali

Si dimostra che per ogni corpo rigido esiste una particolare terna di assi mutuamente perpendicolari centrata nel baricentro che rende la matrice di inerzia diagonale

Un sistema di coordinate nel quale I è diagonale costituisce un sistema di assi *principali di inerzia* generalmente indicati come a , b e c .

Rispetto ai 3 assi principali a , b e c sono definiti i **momenti principali di inerzia I_a , I_b , I_c**

$$I_a = \sum_i m_i d_{a_i}^2$$

$$I_b = \sum_i m_i d_{b_i}^2$$

$$I_c = \sum_i m_i d_{c_i}^2$$

In questo sistema

• le componenti del momento angolare J rispetto agli assi principali sono

$$J_a = I_a \omega_a$$

$$J_b = I_b \omega_b$$

$$J_c = I_c \omega_c$$

• l'energia cinetica è

$$E_{rot} = \frac{1}{2} (I_a \omega_a^2 + I_b \omega_b^2 + I_c \omega_c^2)$$

- per gli assi a , b e c vale la convenzione

$$I_a \leq I_b \leq I_c$$

- le relazioni tra i momenti principali di inerzia dipendono dalle proprietà di simmetria della molecola e su questa base si possono classificare i vari tipi di rotatori molecolari
- in generale un asse di rotazione C_n coincide con uno degli assi principali

- **Rotatori lineari** : $I_c = I_b > I_a = 0$

a asse internucleare rispetto al quale il momento di inerzia =0 ; **b e c** hanno direzione \perp ad **a**

$C_{\infty v}$; $D_{\infty h}$ H_2 ; C_2 ; CO ; NO ; H-CN ; ...

• **Rotatori simmetrici** : hanno due momenti di inerzia uguali e un unico momento principale di inerzia:

- Prolati : $I_a < I_b = I_c$
- Oblati : $I_c > I_a = I_b$

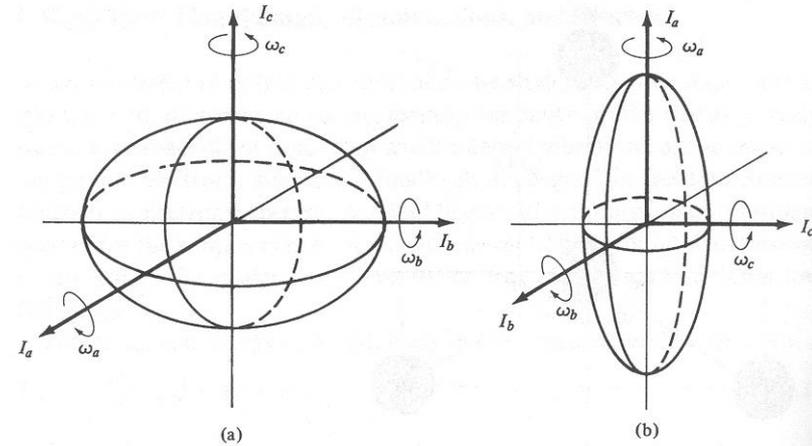


Figure 7.2
Principal rotation axes for (a) an oblate symmetric top and (b) a prolate symmetric top.

gruppi C_{nv} ; D_{nh} ($n \geq 3$) esempio: NH_3 ; $CHCl_3$; C_6H_6 , BF_3

• **Rotatori sferici** : i 3 momenti di inerzia sono uguali

$$I_c = I_b = I_a$$

(O_h ; T_d) esempio: CH_4 ; CCl_4 ; SF_6 ...

• **Rotatori asimmetrici** : i 3 momenti di inerzia sono tutti diversi:

$$I_a < I_b < I_c$$

H_2O ; CH_2O ; CH_3OH

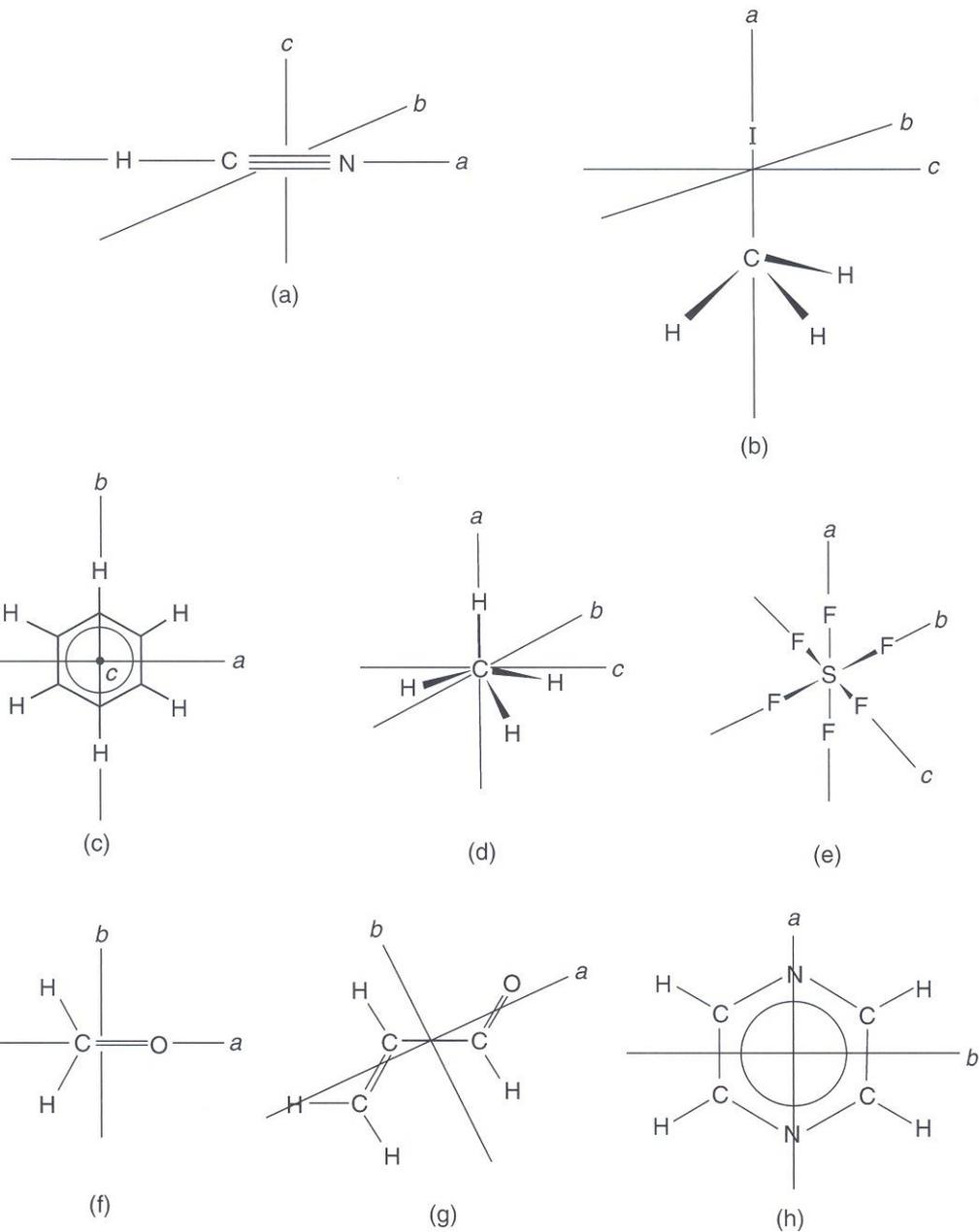


Figure 5.1 Principal inertial axes of (a) hydrogen cyanide, (b) methyl iodide, (c) benzene, (d) methane, (e) sulphur hexafluoride, (f) formaldehyde, (g) *s-trans*-acrolein and (h) pyrazine

Spettri rotazionali di molecole poliatomiche

Vogliamo trovare le espressioni per l'energia rotazionale dei rotatori

Espressione classica per l'energia rotazionale di un corpo che puo' ruotare in 3 dimensioni

$$E_{rot} = \frac{J_a^2}{2I_a} + \frac{J_b^2}{2I_b} + \frac{J_c^2}{2I_c}$$

J_a, J_b, J_c componenti del momento angolare \underline{J}
lungo gli assi principali

Sostituendo in E_{rot} gli operatori corrispondenti di momento angolare si puo' trovare l'espressione quantistica dell'energia rotazionale

• Rotatore sferico

In questi rotatori $I_a = I_b = I_c = I$

I livelli energetici hanno la seguente espressione (in cm^{-1})

$$F_J = BJ(J + 1)$$

Molecole altamente simmetriche (T_d , O_h) hanno momento di dipolo elettrico nullo quindi non hanno spettri rotazionale puri.

Per effetto della distorsione centrifuga alcune molecole possono acquisire momento di dipolo

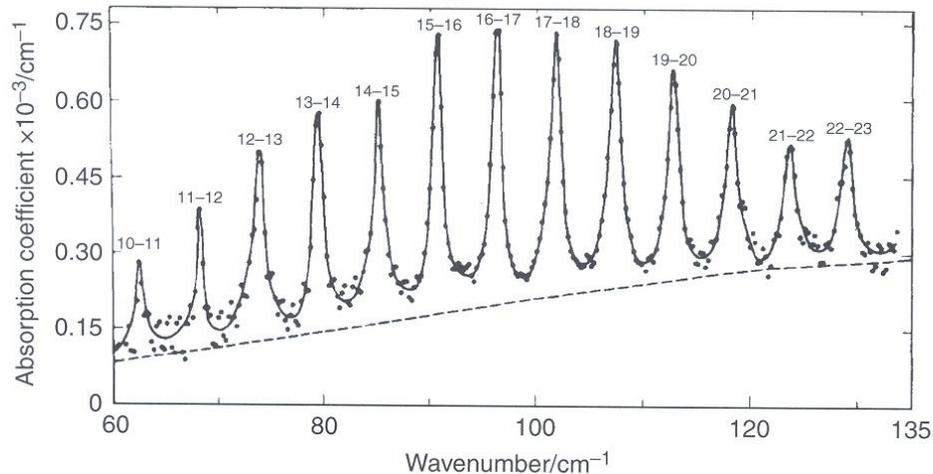


Figure 5.10 Part of the far-infrared spectrum of silane. (Reproduced, with permission, from Rosenberg, A. and Ozier, I., *Can. J. Phys.*, **52**, 575, 1974)

• Rotatori simmetrici

Per queste molecole due momenti di inerzia sono uguali e il terzo è diverso:

- rotatore prolato : $I_a < I_b = I_c$
- rotatore oblato : $I_c > I_a = I_b$

Energia per il rotatore prolato

$$E_r = \frac{1}{2} \left(\frac{J^2}{I_b} - \frac{J_a^2}{I_b} + \frac{J_a^2}{I_a} \right) \longrightarrow E_r = \frac{\hbar^2}{2I_b} J(J+1) + \frac{\hbar^2 K^2}{2} \left(\frac{1}{I_a} - \frac{1}{I_b} \right) \quad \begin{array}{l} J=0,1,2,\dots \\ K=0,\pm 1, \pm 2, \dots, \pm J. \end{array}$$

Energia per il rotatore oblato

$$E_r = \frac{1}{2} \left(\frac{J^2}{I_b} - \frac{J_c^2}{I_b} + \frac{J_c^2}{I_c} \right) \longrightarrow E_r = \frac{\hbar^2}{2I_b} J(J+1) + \frac{\hbar^2 K^2}{2} \left(\frac{1}{I_c} - \frac{1}{I_b} \right)$$

Termini rotazionali

- rotatore prolato

$$F_J = BJ(J + 1) + (A - B)K^2$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I_b} \quad \text{e} \quad A = \frac{h}{8\pi^2 c I_a}$$

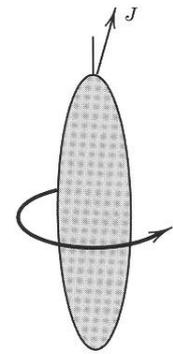
- rotatore oblato

$$F_J = BJ(J + 1) + (C - B)K^2$$

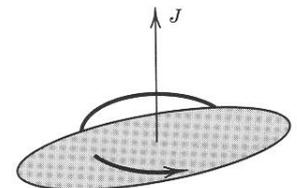
$$C = \frac{h}{8\pi^2 c I_c}$$

Il **numero quantico K** esprime la componente del momento angolare di rotazione lungo l'asse principale di inerzia

- $K = 0$: non c'è rotazione attorno all'asse di simmetria e la rotazione avviene attorno all'asse perpendicolare
- K massimo : la rotazione avviene praticamente sempre attorno all'asse di simmetria



(a) $K \approx J$



(b) $K = 0$

Figure 13.4 Meaning of the quantum number K .

Sebbene i livelli rotazionali dei rotatori simmetrici abbiano una struttura piu' complessa che nel caso lineare, le regole di selezione sono del tipo

$$\Delta J = \pm 1 ; \Delta K = 0$$

e quindi l'espressione per la frequenza di transizione rotazionale è ancora del tipo

$$\tilde{\nu} = F(J + 1, K) - F(J, K) = 2B(J + 1)$$

—————> le transizioni sono ancora equispaziate di $2B$

• Rotatore lineare

Per queste molecole $I_c = I_b > I_a = 0$

lo spettro ha la stessa forma delle molecole lineari con

$$F_J = BJ(J + 1)$$

Degenerazione dei livelli

- rispetto al numero quantico K (proiezione del mom.angolare sull'asse principale fisso nella molecola)

$(2J+1)$ valori possibili

- rispetto al numero quantico M (proiezione del mom.angolare su un asse fisso nello spazio)

$(2J+1)$ valori possibili



la degenerazione di ogni livello è $(2J+1)^2$

Rotational constants in cm^{-1} for some asymmetric, symmetric, and spherical top molecules

Species	Point group	A	B	C
H_2O	C_{2v}	27.877	14.512	9.285
H_2CO	C_{2v}	9.4053	1.2953	1.1342
HCO_2H	C_s	2.58548	0.402112	0.347447
$\text{CH}_3^{35}\text{Cl}$	C_{3v}	5.09	0.443401	—
$\text{CH}_3^{127}\text{I}$	C_{3v}	5.11	0.250217	—
C_2H_6	D_{3d}	2.681	0.6621	—
NH_3	C_{3v}	—	9.4443	6.196
C_6H_6	D_{6h}	—	0.1896	0.0948
CH_4	T_d	—	5.2412	—