

**2.7. Anwendungen II: Dynamik (Basis: interne Verschiebungskoordinaten)****Beispiel: H<sub>2</sub>O**

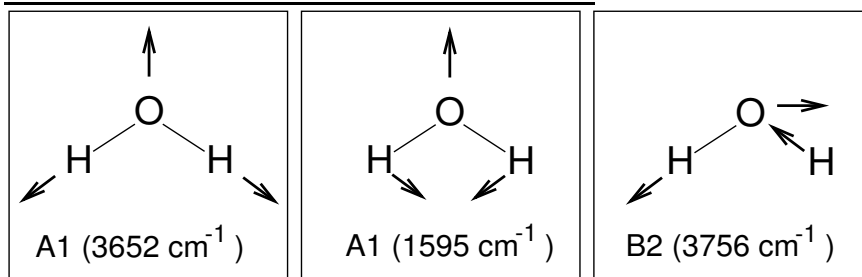
Basis: 2 Atomabstände, 1 Winkel (s. Vorl. 2.13)

Reduktion:

	E	C <sub>2</sub>	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$	a <sub>i</sub>	Rechnung nach Formel Vorl. 2.14
A <sub>1</sub>	1	1	1	1	2*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * 1 + 1 * 1 + 3 * 1]$
A <sub>2</sub>	1	1	-1	-1	0*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * 1 + 1 * (-1) + 3 * (-1)]$
B <sub>1</sub>	1	-1	1	-1	0*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * (-1) + 1 * 1 + 3 * (-1)]$
B <sub>2</sub>	1	-1	-1	1	1*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * (-1) + 1 * (-1) + 3 * 1]$
	2+1= 3	2-1= 1	2-1= 1	2+1= 3		↳ $\Gamma = 2 A_1 + 1 B_2$

Ergebnis: 3N-6 = 3 interne Bewegungen (hier: 2 A<sub>1</sub> + B<sub>2</sub>)

Orthonormale Basen (Normalkoordinaten):

**2.8. Anwendungen III: Dynamik (Basis: kartesische Verschiebungskoord.)****Beispiel: H<sub>2</sub>O**

Basis: 3N kartes. Verschiebungen (s. Vorl. 2.13)

Reduktion:

	E	C <sub>2</sub>	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$	a <sub>i</sub>	Rechnung nach Formel Vorl. 2.14
A <sub>1</sub>	1	1	1	1	3*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * 1 + 1 * 1 + 3 * 1]$
A <sub>2</sub>	1	1	-1	-1	1*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * 1 + 1 * (-1) + 3 * (-1)]$
B <sub>1</sub>	1	-1	1	-1	2*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * (-1) + 1 * 1 + 3 * (-1)]$
B <sub>2</sub>	1	-1	-1	1	3*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * (-1) + 1 * (-1) + 3 * 1]$
	3+1+2+3 = 9	3+1-2-3 = -1	3-1+2-3 = 1	3-1-2+3 = 3		↳ $\Gamma = 3 A_1 + A_2 + 2 B_1 + 3 B_2$

Ergebnis: 3N = 9 interne Bewegungen (s.o.) und Gesamttranslation/libration hier:

- 3 interne Schwingungen (2 A<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, s.o.)
- 3 Gesamttranslationen (A<sub>1</sub>=T<sub>z</sub>, B<sub>1</sub>=T<sub>x</sub>, B<sub>2</sub>=T<sub>y</sub>)
- 3 Gesamtlibrationen (A<sub>2</sub>=R<sub>z</sub>, B<sub>1</sub>=T<sub>y</sub>, B<sub>2</sub>=R<sub>x</sub>)

**Charaktertafel für die Punktgruppe C<sub>2v</sub>**

	E	C <sub>2</sub>	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A <sub>1</sub>	1	1	1	1	z	x <sup>2</sup> , y <sup>2</sup> , z <sup>2</sup>
A <sub>2</sub>	1	1	-1	-1	R <sub>z</sub>	xy
B <sub>1</sub>	1	-1	1	-1	x, R <sub>y</sub>	xz
B <sub>2</sub>	1	-1	-1	1	y, R <sub>x</sub>	yz