

2.7. Anwendungen II: Dynamik (Basis: interne Verschiebungskoordinaten)**Beispiel: H₂O**

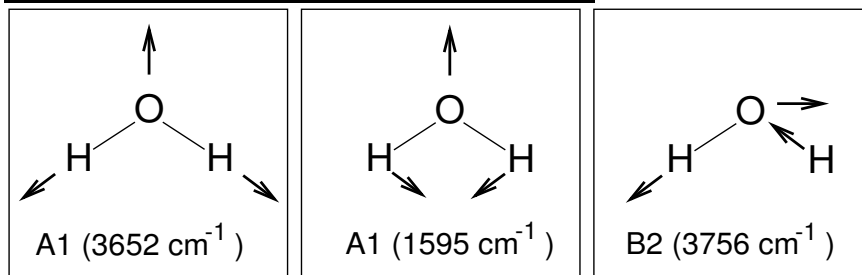
Basis: 2 Atomabstände, 1 Winkel (s. Vorl. 2.13)

Reduktion:

	E	C ₂	σ_{xz}	σ_{yz}	a _i	Rechnung nach Formel Vorl. 2.14
A ₁	1	1	1	1	2*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * 1 + 1 * 1 + 3 * 1]$
A ₂	1	1	-1	-1	0*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * 1 + 1 * (-1) + 3 * (-1)]$
B ₁	1	-1	1	-1	0*	$\frac{1}{4}[3 * 1 + 1 * (-1) + 1 * 1 + 3 * (-1)]$
B ₂	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		$\mapsto \Gamma = 2 A_1 + 1 B_2$

Ergebnis: 3N-6 = 3 interne Bewegungen (hier: 2 A₁ + B₂)

Orthonormale Basen (Normalkoordinaten):

**2.8. Anwendungen III: Dynamik (Basis: kartesische Verschiebungskoord.)****Beispiel: H₂O**

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

Reduktion:

	E	C ₂	σ_{xz}	σ_{yz}	a _i	Rechnung nach Formel Vorl. 2.14
A ₁	1	1	1	1	3*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * 1 + 1 * 1 + 3 * 1]$
A ₂	1	1	-1	-1	1*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * 1 + 1 * (-1) + 3 * (-1)]$
B ₁	1	-1	1	-1	2*	$\frac{1}{4}[9 * 1 + (-1) * (-1) + 1 * 1 + 3 * (-1)]$
B ₂	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		$\mapsto \Gamma = 3 A_1 + A_2 + 2 B_1 + 3 B_2$

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

- 3 interne Schwingungen (2 A₁, B₂, s.o.)
- 3 Gesamttranslationen (A₁=T_z, B₁=T_x, B₂=T_y)
- 3 Gesamtlibrationen (A₂=R_z, B₁=T_y, B₂=R_x)

Charaktertafel für die Punktgruppe C_{2v}

	E	C ₂	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
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