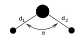
6.4. Darstellungstheorie (Fortsetzung, Normalkoordinaten von H_2O)

I. Basis: interne Verschiebungsvektoren



Basis: 2 Bindungslängenänderungen d, 1 Winkeländerung α

reduzible 3-dim. Darstellung:

❶ Matrix für E: $\mathbf{E}\vec{x} = \vec{x}$; tr(E)=3

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❷ Matrix für C_2; $tr(C_2)) = 1$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ d_1 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❸ Matrix für σ_{xz}; $tr(\sigma_{xz}) = 1$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ d_1 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❹ Matrix für σ_{yz}; $tr(\sigma_{yz}) = 3$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

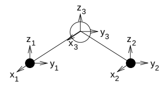
1-dimensionale Darstellung (Spuren der Matrizen, Charaktere): 3 1 1 3

Reduktion:

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	a_i	Rechnung nach Formel
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 A_1 + B_2)

II. Basis: 3N kartesische Verschiebungsvektoren



reduzible 9-dim. Darstellung:

❶ Matrix für E: $\mathbf{E}\vec{x} = \vec{x}$; tr(E)=9

$$\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix}$$

❷ Matrix für C_2; $tr(C_2)) = -1$

$$\begin{pmatrix} -1&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&-1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&-1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&-1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&-1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^O \\ y^O \\ z^O \\ x^{H1} \\ y^{H1} \\ z^{H1} \\ x^{H2} \\ y^{H2} \\ z^{H2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x^O \\ -y^O \\ z^O \\ -x^{H2} \\ -y^{H2} \\ z^{H2} \\ -x^{H1} \\ -y^{H1} \\ z^{H1} \end{pmatrix}$$

❸ Matrix für σ_{xz}; $tr(\sigma_{xz}) = 1$

$$\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&-1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&-1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix}$$

❹ Matrix für σ_{yz}; $tr(\sigma_{yz}) = 3$

$$\begin{pmatrix} -1&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&-1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&-1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix}$$

1-dimensionale Darstellung (Spuren der Matrizen, Charaktere): 9 -1 1 3

Reduktion:

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	a_i	Rechnung nach Formel
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 Gesamtbewegungen (intene + Gesamttranslationen und Gesamtlibrationen)