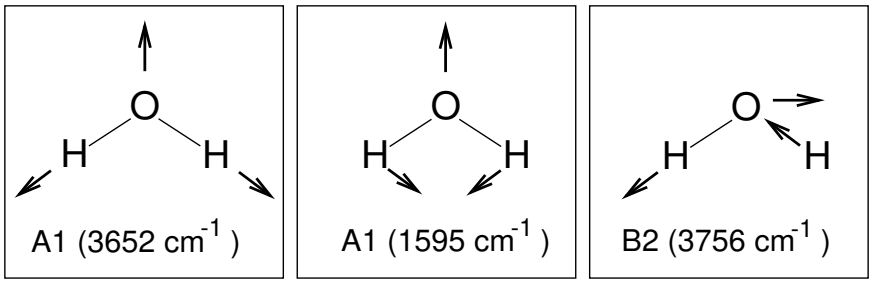
2.7. Anwendungen II: Dynamik (Basis: interne Verschiebungskoordinaten)
Beispiel: H_2O

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=	2-1=	2-1=	2+1=		
	3	1	1	3		$\mapsto \Gamma = 2\ A_1 + 1\ B_2$

Ergebnis: 3N-6 = 3 interne Bewegungen (hier: 2 A_1 + B_2)
Orthonormale Basen (Normalkoordinaten):



2.8. Anwendungen III: Dynamik (Basis: kartesische Verschiebungskoord.)
Beispiel: H_2O

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	3+1-2-3	3-1+2-3	3-1-2+3		
	= 9	= -1	= 1	= 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 A_1, B_2, s.o.)
- 3 Gesamttranslationen (A_1=T_z, B_1=T_x, B_2=T_y)
- 3 Gesamtlibrationen (A_2=R_z, B_1=T_y, B_2=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