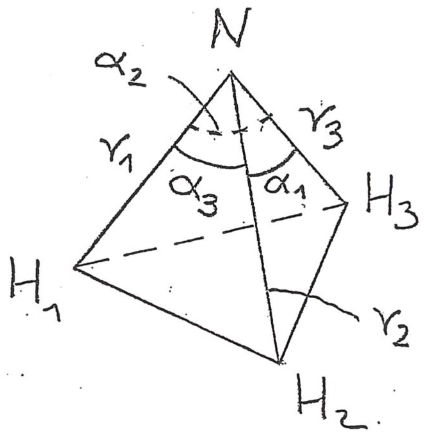
2. Beispiel NH_3 : *interne Auslenkungskoordinaten*

Es gibt 3N-6 = 6 interne Koordinaten und damit 6 Normalkoordinaten.



Wähle: r_1, r_2, r_3, α_1, α_2, α_3

Symmetriegruppe: C_{3v}

Bei Symmetrieoperationen transformieren sich die r's und α's nur untereinander. Man kann beide Koordinaten getrennt behandeln. Beide bilden Basis einer reduziblen DS.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$\tilde{\chi}(r)$	3	0	1
$\tilde{\chi}(\alpha)$	3	0	1
$\tilde{\chi}$	6	0	2

C_3 macht jeweils zyklische Vertauschung $\Rightarrow \tilde{\chi} = 0$

σ_v vertauscht 2 Koordinaten und läßt 3. invar. $\Rightarrow \tilde{\chi} = 1$

Reduktion mit der Charaktertafel

(r und α identisch) $n_i = \frac{1}{h} \sum_\mu \chi_\mu^{(i)} \tilde{\chi}_\mu g_\mu$

$n(A_1) = 1/6\,[3 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 \cdot 1 + 3 \cdot 1 \cdot 1] = 1$

$n(A_2) = 1/6\,[3 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 \cdot 1 - 3 \cdot 1 \cdot 1] = 0$

$n(E) = 1/6\,[3 \cdot 2 \cdot 1 + 0 \cdot 2 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 \cdot 3] = 1$

$\Rightarrow \quad \tilde{\Gamma}(r) = A_1 \oplus E$

$\tilde{\Gamma}(\alpha) = A_1 \oplus E$

$\boxed{\tilde{\Gamma} = 2A_1 \oplus 2E} \equiv \Gamma_{vib}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{2 doppelt entartete} \\ \text{Normalmoden (E)} \end{array} \right.$

Es gibt zwei totalsymmetrische und zwei doppelt entartete Schwingungen (je eine Streck- und Winkelschwingung, die natürlich mischen).

Vereinfachtes Beispiel: Reguläres X_3-Molekül