

【水分子の分子振動の変位】

水分子は点群 C_{2v} に属し、各原子の変位 $O(x_o, y_o, z_o)$, $H1(x_1, y_1, z_1)$, $H1(x_2, y_2, z_2)$ を基底とした時、 $D = 3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$, 運動の自由度は 9、そのうち並進運動は $A_1 + B_1 + B_2$ 、回転運動は $A_2 + B_1 + B_2$ であるので、分子振動は $2A_1 + B_1$ となる。

射影演算子は

$$P^{(\alpha)} = \frac{d_\alpha}{g} \sum_i \chi^{(\alpha)}(R_i)^* R_i$$

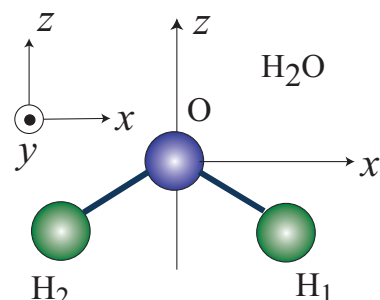
点群 C_{2v} の射影演算子は

$$P^{A_1} = \frac{1}{4}(E + C_2 + \sigma_y + \sigma_x) = \frac{1}{4}(E + C_2)(E + \sigma_x)$$

$$P^{A_2} = \frac{1}{4}(E + C_2 - \sigma_y - \sigma_x) = \frac{1}{4}(E + C_2)(E - \sigma_x)$$

$$P^{B_1} = \frac{1}{4}(E - C_2 + \sigma_y - \sigma_x) = \frac{1}{4}(E - C_2)(E - \sigma_x)$$

$$P^{B_2} = \frac{1}{4}(E - C_2 - \sigma_y + \sigma_x) = \frac{1}{4}(E - C_2)(E + \sigma_x)$$



種関数として、 $f_1 = c_1x_1 + c_2y_1 + c_3z_1$, $f_o = d_1x_o + d_2y_o + d_3z_o$ とすると、

$$P^{A_1} f_1 = \frac{1}{2}(c_1(x_1 - x_2) + c_3(z_1 + z_2))$$

$$P^{A_1} f_o = d_3z_o$$

$$P^{B_1} f_1 = \frac{1}{2}(c_1(x_1 + x_2) + c_3(z_1 - z_2))$$

$$P^{B_1} f_o = d_1x_o$$

c_1, c_3, d_3 の符号の組み合わせを考えると、下図のように振動パターンが求められる。

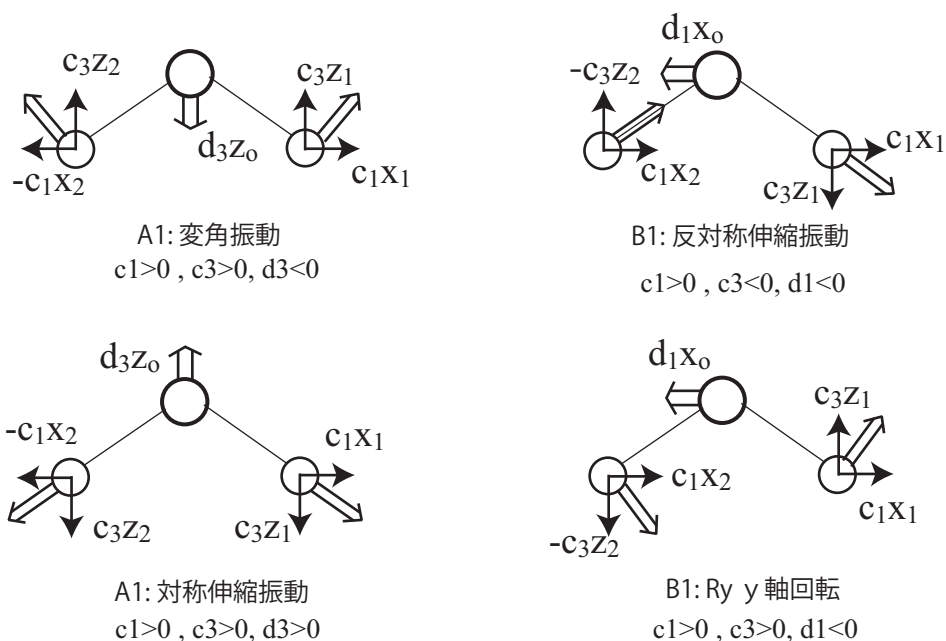


図 1: H_2O A_1 と B_1 の振動変位