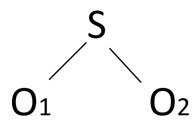
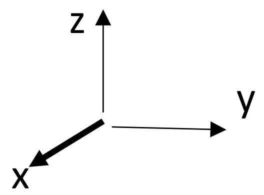
Translació i Rotació en molècules senzilles:

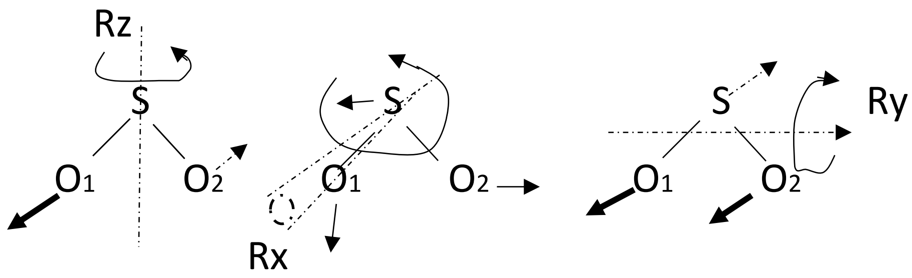
Se treballa respecte a cada àtom de la molécula

per exemple:



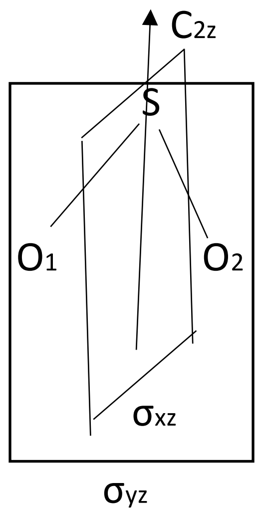


La seva rotació, en les 3 dimensions, serà Rx, Ry, Rz:



sabem que SO_2 té els següents elements de simetria:

E, C_{2z}, σ_{xz} , σ_{yz} i que pertany al grup C_{2v}.



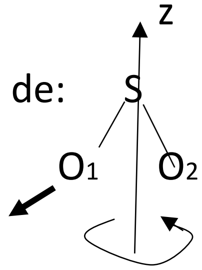
respecte a l'O_1, aplicant R_x, R_y, R_z a l'element C_{2z}:

$$E: \begin{array}{ccc} R_x & R_y & R_z \end{array} \quad \begin{array}{c} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \qquad C_{2z}: \begin{array}{ccc} R_x & R_y & R_z \end{array} \quad \begin{array}{c} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}$$

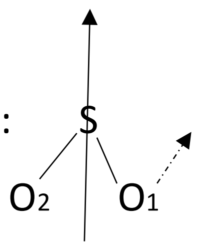
$$\sigma_{xz}: \begin{array}{ccc} R_x & R_y & R_z \end{array} \quad \begin{array}{c} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \qquad \sigma_{yz}: \begin{array}{ccc} R_x & R_y & R_z \end{array} \quad \begin{array}{c} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Per exemple

la fletxa de R_z a O_1, al aplicar-li C_{2z}, passa de:

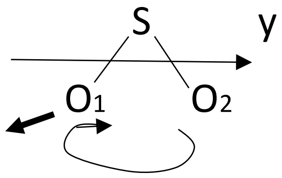


a:

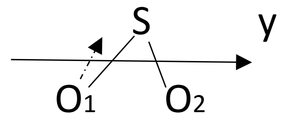


o sigui que la fletxa que representa la R_z passa al costat oposat i aleshores la component a la matriu serà -1.

Mentrestant, en el cas de Ry,



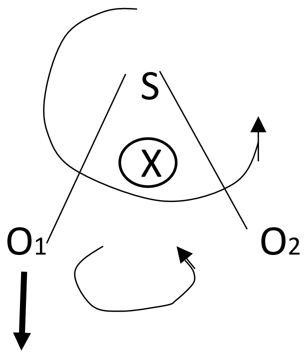
Es passa de a



Per tant també tindrà

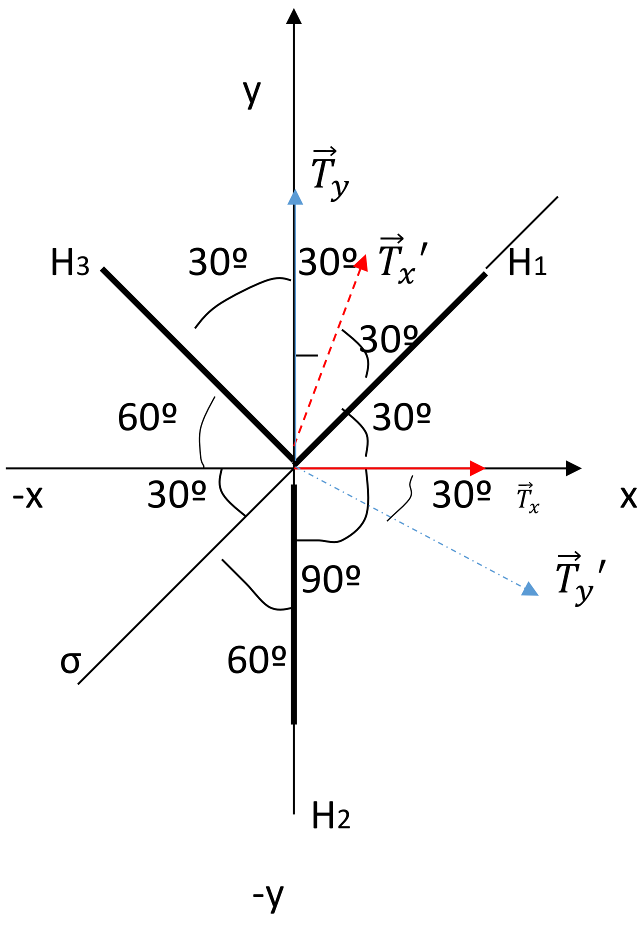
un component -1.

Mentre que Rx:



tindrà component +1.

NH_3



<u>Ara anem per l'element σ :</u>(com a representació dels 3 σ_v).

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_x \\ T_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_x' \\ T_y' \end{pmatrix}$$

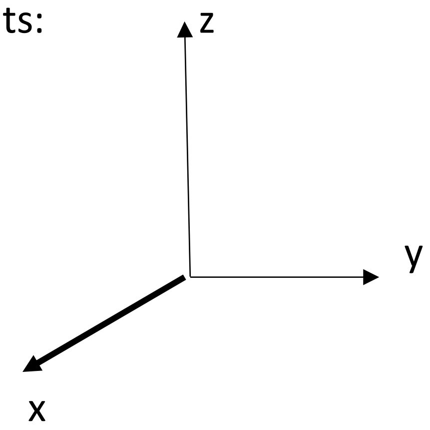
$\mathrm{Sin}30(T_x)+ \mathrm{Cos}30(+T_y)= T_x'$

$\mathrm{Cos}30(T_x)+ \mathrm{Sin}30(-T_y)= T_y'$

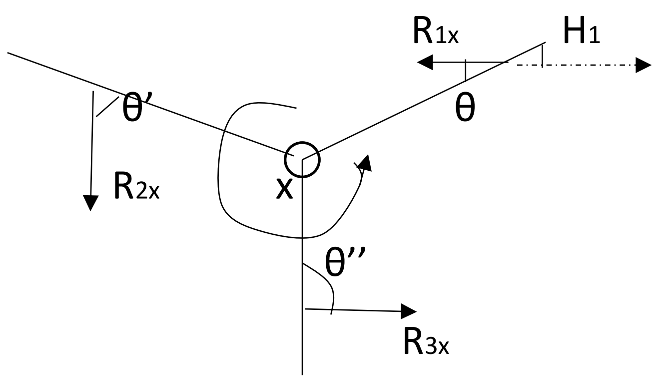
Per tant: $B_1'' = \begin{pmatrix} \text{Sin30} & \text{Cos30} \\ \text{Cos30} & -\text{Sin30} \end{pmatrix}$ i $B_2'' = (+1)$

És a dir que $\vec{T}_x$ i $\vec{T}_y$ van junts tots dos, aleshores la dimensió del bloc B_1'' serà 2. El $\vec{T}_z$ no varia: $B_2'' = +1$

Prenent els eixos següents:



En el cas de les rotacions, treballant amb l'H_1:



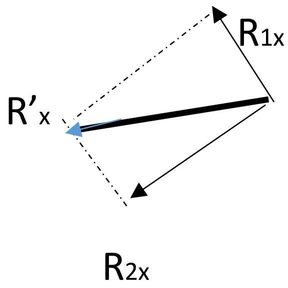
Prenent l'element de simetria C_3^1 (eix que va perpendicular al paper cap a mi i que denoto amb x) i operant les bases de representació Rx, Ry, Rz sobre H_1, obtenim:

Suposem que θ= θ'= θ''= 90º

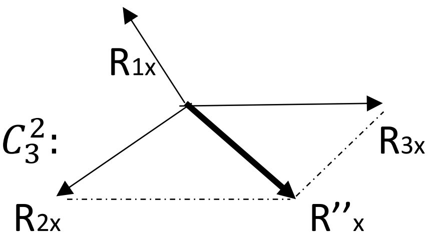
R'_x= f(R_{1x} R_{2x} R_{3x})   i R''_x= f(R_{1x} R_{2x} R_{3x})

En canvi, si els θ són ≠ 90º,

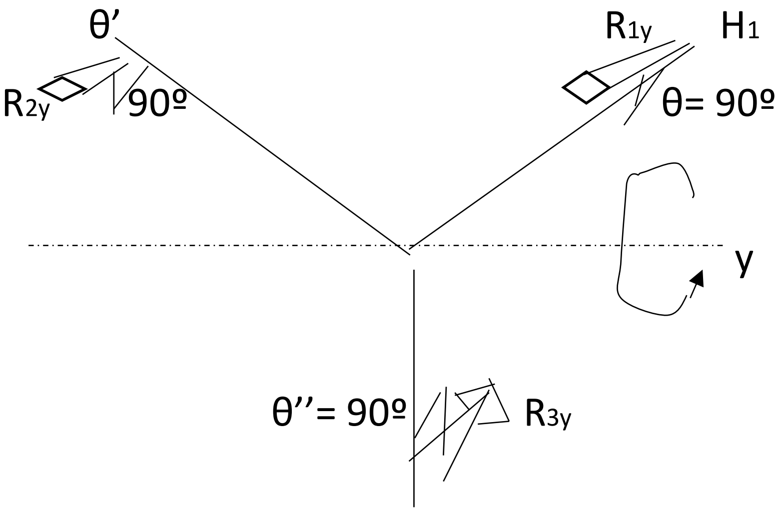
C_3^1:



C_3^2:



Ara treballaré amb les rotacions sobre l'eix y i sobre H_1 :

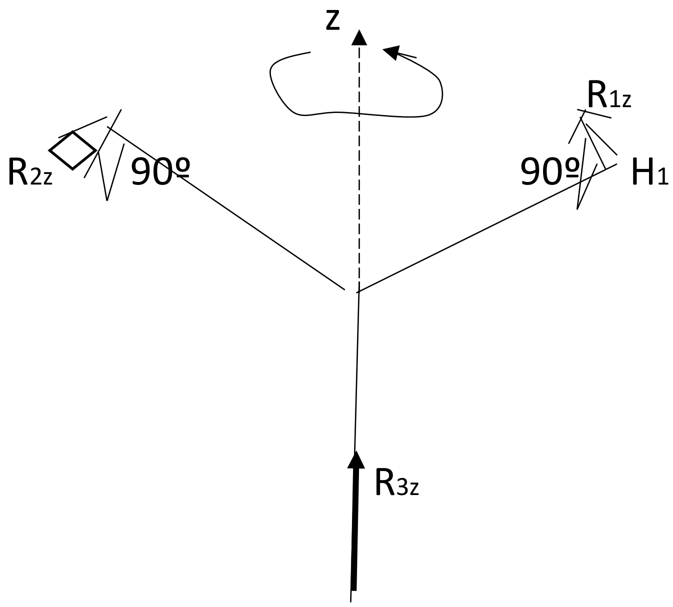


R'_y= f(R_{1y} R_{2y} R_{3y})   i R''_y= f(R_{1y} R_{2y} R_{3y})

Suposem que els angles són de 90º

C_3^1: R'_y= R_{2y} =R_{1y}

C_3^2: R''_y= - R_{3y}



Suposem que els angles també són tots de 90º respecte l'eix x i z.

R'$_z$= f(R$_{1z}$ R$_{2z}$ R$_{3z}$)   i   R''$_z$= f(R$_{1z}$ R$_{2z}$ R$_{3z}$)

C_3^1: R'$_z$= - R$_{2z}$

Quant a C_3^2, puc inventar-me la llei de la mà dreta i creure que hi ha una força que fa pujar R''$_z$ cap amunt!. No és zero!.