

INSTITUT JOŽEF STEFAN
MEDNARODNA PODIPLOMSKA ŠOLA INSTITUTA JOŽEF STEFAN
PROGRAM NANOZNANOSTI IN NANOTEHNOLOGIJE
SMER NANOFIZIKA

Barbara Horvat

Klasifikacija vibracijskih modov v molekulah

Seminar pri predmetu Teorija nanomaterialov

Nosilec predmeta:
prof. dr. Viktor Kabanov

Ljubljana, 25. 2. 2010

Kazalo

1	Uvod	3
2	Reprezentacija točkovnih grup	7
3	Tabela karakterjev	8
4	Uporaba simetrije	9
5	Primeri	9
5.1	Voda H_2O	9
5.2	Fuleren C_{60}	10
6	Zaključek	11

1 Uvod

Strukturo molekul lahko prikažemo na več načinov:

- z molekularno kompozicijo oz. z molekulsko formulo (1D model s številom ter vrsto atomov)
- z molekularno konstitucijo oz. s strukturno formulo (2D model z vezmi med atomi v molekuli)
- z molekularnimi/konstitucijskimi grafi (začetna točka ter razdalje med njimi se ohranjajo)

Pri molekularnih grafih *simetrijska operacija* preslika predmet v ekvivalentno konfiguracijo, ki je ni moč razlikovati od originala. Simetrijske operacije ne spremenijo fizikalnih lastnosti molekule. *Simetrijski element* je točka, premica ali ravnina. Glede na njih se izvajajo simetrijske operacije.

V molekulah imamo 4 različne simetrijske elemente:

- *center simetrije* (i)
 - če simetrijska operacija “zrcaljenje čez točko” prezrcali vse atome v konfiguracijo identično originalu
- *zrcalna ravnina* (σ)
 - če simetrijska operacija “zrcaljenje čez dano ravnino” prezrcali vse atome v konfiguracijo identično originalu
 - zrcalno ravnino, na katero je rotacijska os najvišjega reda pravokotna, označimo kot σ_h (h pomeni horizontalno/vodoravno)
 - zrcalno ravnino, ki vsebuje rotacijsko os najvišjega reda, označimo kot σ_v (v pomeni vertikalno/navpično)
 - zrcalno ravnino, ki vsebuje rotacijsko os najvišjega reda ter ki seka kot med dvema dvoštevnima osema pravokotnima na simetrijsko os, označimo kot σ_d (d pomeni diagonalno oz. dihedralno). σ_d je poseben primer σ_v
- *n-števna rotacijska os* (C_n)
 - če simetrijska operacija “rotacija okoli” n -števne osi za kot $\frac{2\pi}{n}$, kjer je $n \in \mathbb{N}$, da konfiguracijo identično originalu
 - n imenujemo *red osi*
 - C_n^k je rotacija za kot $\frac{2\pi k}{n}$, kjer sta $n, k \in \mathbb{N}$ in $k = 0 : (n - 1)$, oz. $C_n^k(\frac{2\pi}{n}) = C_n(k\frac{2\pi}{n}) = C_n^{n-k}(-\frac{2\pi}{n})$
- *n-števna rotacijsko-zrcalna/vijačna os* (S_n)
 - če zaporedni simetrijski operaciji tj. rotacija za kot $\frac{2\pi}{n}$ (C_n) ter zrcaljenje čez ravnino pravokotno na os rotacije (σ_h , ki je pravokotna na C_n) preslikata vse atome v konfiguracijo identično originalu. Skratka $S_n = \sigma_h C_n = C_n \sigma_h$

Vsem 4 simetrijskim elementom¹ pripadajo ustrezne simetrijske operacije: \hat{C}_n , $\hat{\sigma}$, \hat{i} ter \hat{S}_n . *Produkt simetrijskih operacij* je zaporedno izvajanje le-teh. Vsako zaporedno izvajanje simetrijskih operacij ustreza drugi simetrijski operaciji. Množica vseh simetrijskih operacij tvori *simetrijsko grupo*² s pomočjo uvedbe nove simetrijske operacije tj. identitete/enote \hat{e} .³

Pravi simetrijski operaciji sta \hat{C}_n ter \hat{e} , neprave pa \hat{i} , \hat{S}_n ter $\hat{\sigma}$. Slednje vsebujejo zrcaljenje ali pa center inverzije. Vse neprave operacije spremenijo ročnost molekule, ker jih lahko zapišemo z zrcaljenji. Vsaka molekula, ki vsebuje neprave simetrijske elemente, ne more biti kiralna. Kiralnost je potreben in zadosten pogoj za obstoj enantiomerov ter potreben, vendar ne zadosten pogoj, da so molekule optično aktivne.

Vsi simetrijski elementi se sekajo v težišču sistema, ki ga nobena simetrijska operacija ne premakne tj. simetrijske grupe molekul so točkovne grupe. V primeru kristalov taka točka ne obstaja tj. govorimo o prostorskih grupah ter o dodatni simetrijski operaciji, translaciji t_a (premiku za vektor \vec{a}).

Glede na simetrijske elemente klasificiramo molekule v simetrijske grupe. Za označitev točkovnih simetrijskih grup molekul se uporablja *Schönfliesov zapis*, za označitev prostorskih simetrijskih grup pa *Hermann-Mauginov sistem*⁴ - glej tabelo (1).

Schönfliesov zapis	$C_0 = C_1 = e$	$C_S = C_{0h}$	$C_i = S_2 = i$	C_2	C_3	C_4	C_6
Hermann-Mauginov zapis	1	m	$\bar{1}$	2	3	4	6
Schönfliesov zapis	S_4	S_6	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{6v}	C_{2h}
Hermann-Mauginov zapis	4	$\bar{3}$	$2mm$	$3m$	$4mm$	$6mm$	$2/m$
Schönfliesov zapis	C_{3h}	C_{4h}	C_{6h}	D_2	D_3	D_4	D_6
Hermann-Mauginov zapis	$\bar{6}$	$4/m$	$6/m$	222	32	422	622
Schönfliesov zapis	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}	D_{2d}	D_{3d}	T
Hermann-Mauginov zapis	mmm	$\bar{6}m2$	$4/mmm$	$6/mmm$	$\bar{4}2m$	$\bar{3}m$	23
Schönfliesov zapis	T_h	T_d	O	O_d			
Hermann-Mauginov zapis	$m\bar{3}$	$43m$	432	$m\bar{3}m$			

Tabela 1: Sistema označitve simetrij za 32 točkovnih/prostorskih grup[1].

Obstaja 14 končnih točkovnih grup: C_n , C_{nh} , C_{nv} , S_n , D_n , D_{nh} , D_{nd} , T , T_d , T_h , O , O_h , Y ter Y_h . V literaturi najdemo še druge oznake, ki so povezane z osnovnimi točkovnimi grupami oz. imajo le drugo ime: $C_s = C_{0h}$, $C_i = S_2$, $C_{\infty v}$ (za linearne molekule brez centra inverzije; neskončne grupe) ter $D_{\infty h}$ (za linearne molekule s centrom inverzije; neskončne grupe).

- C_n (C pomeni ciklični) je grupa, ki vsebuje n -števno os (grupa rotacij)
- C_{nh} je grupa C_n z dodatkom 1 zrcalne ravnine σ_h pravokotne na n -števno os

¹Ob upoštevanju, da $\sigma = S_1$ ter $i = S_2$, ostaneta le 2 simetrijska elementa tj. C_n ter S_n .

²Grupa je množica elementov med katerimi je definirana binarna operacija (produkt). Zanj velja: 1) produkt dveh elementov iz grupe je še vedno v grupi (grupa je zaprta). 2) produkt je asociativen. 3) obstaja enota, nevtralen element, identiteta, ki je enolična. 4) vsak element grupe ima inverz, obraten element, ki je enoličen.

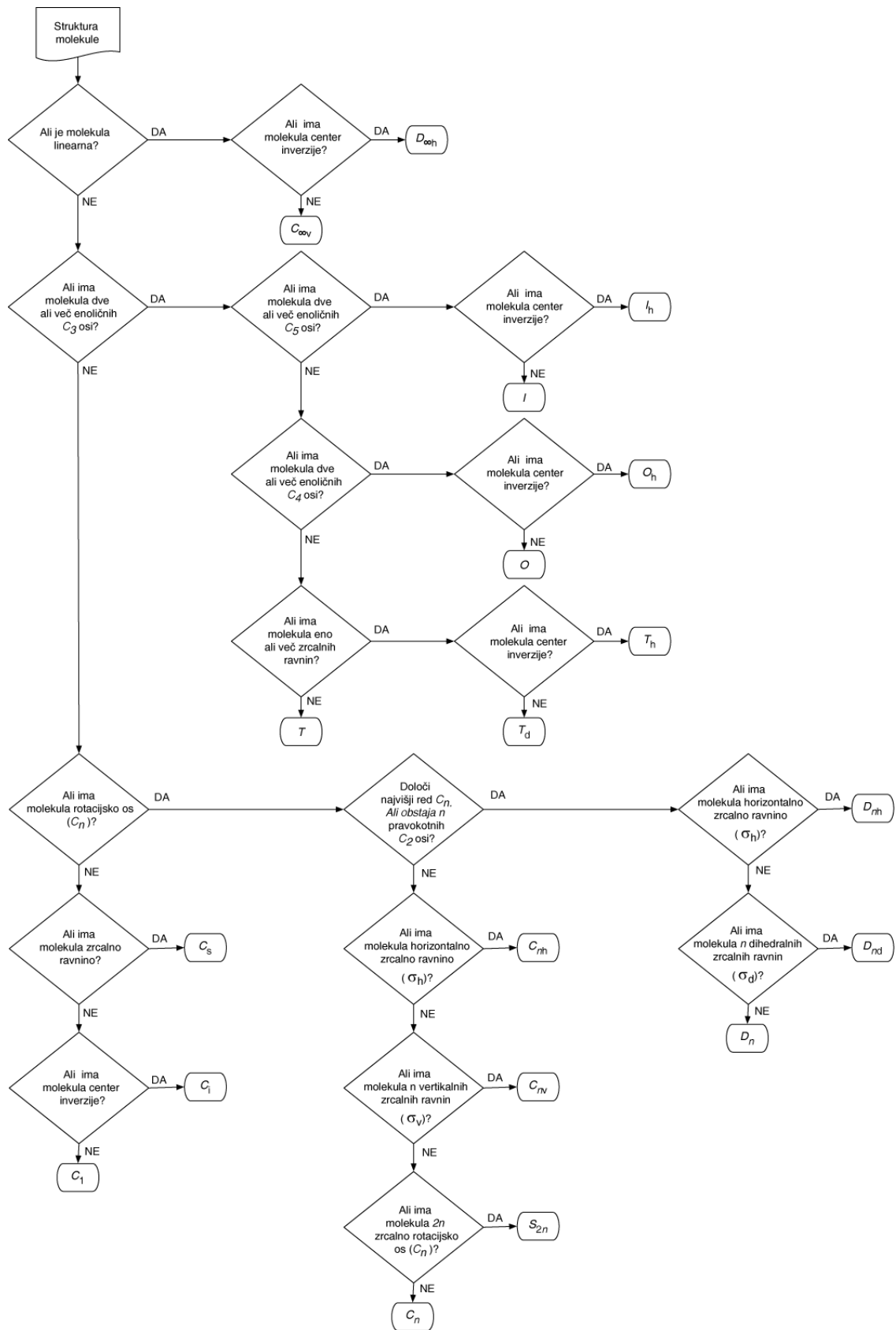
³ $i^2 = \sigma^2 = e$

⁴Hermann-Mauginov sistem vsebuje: število n n -števne osi, če je več osi, za vsako svoj n , zrcalne ravnine so označene z m , ravnine pravokotne na n -števno os z n/m , n -števna zrcalno-rotacijska os pa z \bar{n} . Obstaja pa še Orbifoldov sistem označevanja simetrijskih grup.

- C_{nv} je grupa C_n z dodatkom 1 zrcalne ravnine σ_v vzporedne n-števni osi
- S_n (S pomeni „Spiegel“ oz. zrcalo) je grupa, ki vsebuje n-števno vijačno os
- D_n (D pomeni dihedralno oz. dvostrano) je grupa, ki vsebuje n-števno os ter nanjo pravokotno dvoštevno os
- D_{nh} je grupa D_n z dodatkom 1 zrcalne ravnine pravokotne na n-števno os
- D_{nd} je grupa D_n z dodatkom 1 zrcalne ravnine vzporedne n-števni osi
- T (T pomeni tetrahedron oz. 3-strana piramida) je grupa, ki ima simetrijo tetrahedrona in ne vsebuje nepravilnih operacij (ročnost se ne spremeni)
- T_d je grupa, ki vsebuje nepravilne operacije (spremenijo ročnost)
- T_h je grupa T_d z dodatkom centra inverzije $T_h = T_d \otimes C_i$
- O (O pomeni oktahedron oz. 4-strana bipiramida) je grupa, ki ima simetrijo oktahedrona/kocke brez nepravilnih operacij
- O_h je grupa, ki ima simetrijo oktahedrona/kocke z nepravilnimi operacijami oz. $O_h = O \otimes C_i$
- $Y = I$ je grupa, ki ima simetrijo ikozaedra (nekristalografska grupa)
- $Y_h = I_h$ je grupa I z dodatkom centra inverzije oz. $Y_h = Y \otimes C_i$

Pri točkovnih simetrijskih grupah ni nobenih omejitev za molekule. Kristali pa so razdeljeni v 32 prostorskih simetrijskih grup (število n-števni rotacijskih ter n-števni zrcalno-rotacijskih osi, kjer je $n = 1, 2, 3, 4, 6$ - vse ostale vrednosti n so prepovedane oz. rezervirane za kvazikristale). Kristalne mreže predstavimo s 7 kristalnimi sistemi: triklinskim, monoklinskim, ortorombskim, trigonalnim, tetragonalnim, heksagonalnim ter kubičnim.

Kako določiti kateri grupi pripada molekula, prikazuje shema na sliki (1).



Slika 1: Shema določevanja grupe molekule[2].

2 Reprezentacija točkovnih grup

Ena izmed možnih reprezentacij točkovnih grup je uporaba 3×3 matričnega zapisa. Poljubni vektor v kartezičnih koordinatah (\vec{r}_0) preslikamo s simetrijsko operacijo v nov vektor (\vec{r}_k). Ustrezno transformacijsko matriko M poiščemo z upoštevanjem: $M\vec{r}_0 = \vec{r}_k$. Vsaka matrika predstavlja eno simetrijsko operacijo grupe oz. en element grupe (npr. grupa C_{2v} je sestavljena iz 4 simetrijskih operacij tj. \hat{e} , \hat{C}_2 , $\hat{\sigma}_{xz}$ ter $\hat{\sigma}_{yz}$). Matrična reprezentacija je set vseh matrik izbrane grupe (za grupo C_{2v} je matrična reprezentacija sestavljena iz 4 matrik), ki se z množenjem preslikajo ena v drugo.

Če reprezentacijo lahko predstavimo v bločni diagonalni obliki, govorimo o *razcepni reprezentaciji*. Če reprezentacije ne moremo več razcepiti, govorimo o *nerazcepni reprezentaciji*. S slednjimi predstavimo grupo.

Grupo G sestavljajo elementi g . Red grupe tj. število elementov grupe naj bo h . Dimenzija μ -te nerazcepne reprezentacije (red μ -te matrike) naj bo enaka n_μ (če matriko n_μ -krat množiš samo s sabo, dobiš identiteto). $\Gamma_{mn}^\mu(g)$ naj bo m -ta vrstica, n -ti stolpec nerazcepne reprezentacije $g \in G$ ($\Gamma(g)$ je matrika). Velja *teorem ortogonalnosti*[3]

$$\sum_{g \in G} \Gamma_{mn}^\mu(g) \Gamma_{m'n'}^{\mu'*}(g) = \frac{h}{\sqrt{n_\mu n_{\mu'}}} \delta_{\mu\mu'} \delta_{mm'} \delta_{nn'}. \quad (1)$$

Iz enačbe (1) je možno izpeljati slednje lastnosti:

- *Bernside-ov teorem*

$$h = \sum_{\mu=1}^N n_\mu^2, \quad (2)$$

kjer gre vsota po vseh nerazcepnih reprezentacijah grupe G , N pa je število vseh nerazcepnih reprezentacij.

- če definiramo *karakter grupe* χ kot

$$\chi(g) = \text{Sl}(\Gamma(g)), \quad (3)$$

lahko s pomočjo ortogonalnosti (1) zapišemo ortogonalnost za karakterje

$$h\delta_{\mu\nu} = \sum_{g \in G} \chi_\mu^*(g) \chi_\nu(g). \quad (4)$$

- za vsako razcepno reprezentacijo Γ obstaja unitarna transformacija, ki razcepi vse matrike razcepne reprezentacije v bločno diagonalno obliko. Ker je sled matrike invarianta, se karakterji z unitarno transformacijo ne spremenijo. Tako lahko za karakter grupe $\chi(g)$ zapišemo

$$\chi(g) = \sum_{\mu} N_{\mu} \chi_{\nu}(g), \quad (5)$$

kjer N_{μ} pove, kolikokrat se μ -ta nerazcepna reprezentacija (Γ_{μ}) pojavi v razcepni reprezentaciji Γ . Upoštevajoč ortogonalnost karakterjev različnih nerazcepnih reprezentacij (4) za N_{μ} dobimo

$$N_\mu = \frac{1}{h} \sum_g \chi_\nu^*(g) \chi(g). \quad (6)$$

Karakterja dveh različnih elementov grupe, ki pripadata istemu razredu, sta enaka. Naj bo h_ρ število elementov v razredu ρ , N_ρ število razredov v grupi G , lahko ortogonalnost karakterjev zapišemo v obliki

$$h\delta_{\mu\nu} = \sum_{\rho=1}^{N_\rho} h_\rho \chi_\mu^*(\rho) \chi_\nu(\rho) \quad (7)$$

oziroma

$$N_\mu = \frac{1}{h} \sum_\rho h_\rho \chi_\nu^*(\rho) \chi(\rho). \quad (8)$$

3 Tabela karakterjev

Za vsako točkovno grupo obstaja *tabela karakterjev*, ki povzame podatke o simetrijskih operacijah ter nerazcepnih reprezentacijah. Število nerazcepnih reprezentacij je vedno enako številu razredov simetrijskih operacij (simetrijske operacije, ki imajo identične karakterje), tj. redu h grupe, oz. tabela karakterjev je kvadratna. Sestavljena je iz karakterjev, ki povedo, kako se nerazcepna reprezentacija preslika z določeno simetrijsko operacijo. Z upoštevanjem še, da je h deljiv z dimenzionalnostjo reprezentacije ter Bernside-ovega teorema, lahko konstruiramo karakterje vseh nerazcepnih reprezentacij.

Tabela karakterjev izgleda tako

točkovna grupa	simetrijska operacija združena po razredih
nerazcepna reprezentacija	karakter

Tabela 2: Tabela karakterjev.

Vemo, da simetrijska operacija, ki deluje na molekulo in je iz točkovne grupe obravnavane molekule, ne bo spremenila molekule. Spremeni pa lahko predznak vektorjem oz. samo orbitalo: če se predznak ne spremeni, imamo opravka s *simetrično* operacijo, sicer pa z *antisimetrično*. Reprezentacije (razcepne) označimo z Γ , nerazcepne pa z Γ_μ , ko je rotacija okoli glavne osi simetrična ($e = 1$ ter $\chi(C_n) = 1$), z B , ko je rotacija okoli glavne osi antisimetrična ($e = 1$ ter $\chi(C_n) = -1$), z E , ko je reprezentacija dvojno degenerirana ($e = 2$), s T (ponekod F), ko je reprezentacija trojno degenerirana ($e = 3$), z G , ko je degeneracija četverno degenerirana ($e = 4$) ter s H , ko je degeneracija peterno degenerirana ($e = 5$). g („gerade“) ter u („ungerade“) povesta le, da če ima točkovna grupa center inverzije, le-ta ne spremeni predznaka (simetričen glede na i oz. $\chi(i) > 0$) oz. ga spremeni (antisimetričen glede na i oz. $\chi(i) < 0$). Če obstaja zrcalna ravnina (vendar ne tudi center inverzije) in $\chi(\sigma) > 0$, dodamo nadpis ', če pa $\chi(\sigma) < 0$, pa dodamo nadpis ". Če več nerazcepnih reprezentacij ima vse oznake po kriterijih enake, dodamo poleg ostalih oznak spodaj še zaporedne številke.

Tabele karakterjev vsebujejo tudi podatke, kako se kartezični bazni vektorji, rotacije okoli njih ter njihove kvadratne funkcije preslikajo s simetrijskimi operacijami v primerjavi z nerazcepnimi reprezentacijami. Simetrije preslikav ustrezajo orbitalam.

4 Uporaba simetrije

Kot že omenjeno, lahko s pomočjo simetrije določimo, ali je molekula kiralna oz. optično aktivna (C_1 , C_n , D_n , T , O ter I so „kiralne grupe“). Druga možnost uporabe je določitev polarnosti molekule (imajo permanentni dipolni moment; C_1 , C_s , C_n ter C_{nv} so „polarne grupe“). Tretja pomembna uporaba teorije simetrije je za določanje vibracij molekul.

Prostostna stopnja nam pove število vseh možnih gibanj atomov v molekuli:

- $3N$ prostostnih stopenj imam molekula z N atomi (vzdolž x, y, z)
- nelinearne molekule imajo 3 translacije, 3 rotacije ter $3N - 6$ vibracij (okoli x, y, z)
- linearne molekule imajo 3 translacije, 2 rotaciji ter $3N - 5$ vibracij

S pomočjo tabele karakterjev oz. glede na simetrijske operacije določimo, koliko vektorjev se ne spremeni (vsak atom ima 3 vektorje x, y, z):

- če se atom premakne, ne ostane noben vektor enak
- če se atom ne premakne in se vektor ne spremeni tj. +1
- če se atom ne premakne in se vektor spremeni tj. -1

Vsota dobljenih vrednosti za posamezen razred da razcepno reprezentacijo, ki jo zapišemo z nerazcepnimi komponentami iz enačbe (8).

$\sum_{\mu} \mu N_{\mu}$ so vsa gibanja molekule (mehanska reprezentacija) iz katerih s pomočjo tabele karakterje izluščimo translacije ter rotacije. Preostala gibanja ustrezajo vibracijam.

5 Primeri

5.1 Voda H_2O

S pomočjo skice (1) ugotovimo, da molekulo vode lahko opišemo s pomočjo grupe $C_{2v} = C_2 \otimes \sigma_v$. Njeni podgrupi sta le 2 tj. C_2 ter σ_v , simetrijski elementi so pa 4: e , C_2 , σ_{xz} ter σ_{yz} . Ker je število simetrijskih elementov grupe enako redu grupe h , je $h = 4$. Vemo, da je število nerazcepnih reprezentacij enako številu razredov simetrijskih operacij. Uporabimo Bernside-ov teorem (2), ki pravi, da je vsota kvadratov dimenzij nerazcepnih reprezentacij po številu razredov enaka redu grupe. Tako imamo 2 možnosti: $4 = 2^2$, če bi imeli 1 razred, skratka 1 2-dimenzionalno nerazcepno reprezentacijo, oz. $4 = 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2$, če imamo 4 eno-dimenzionalne nerazcepne reprezentacije tj. 4 razrede. Ob predpostavki, da je grupa C_{2v} Abelova, pride v poštev le druga možnost tj. $4 = 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2$. Upoštevamo še ortogonalnost karakterjev po enačbi (4) tj. vsota kvadratov karakterjev po vrstici (nerazcepni reprezentaciji) je enaka $h = 4$ oz. vsota produktov istoležečih karakterjev po 2 različnih nerazcepnih reprezentacijah je enaka 0.

Tako lahko zapišemo tabelo karakterjev (tabela 3), ki je sestavljena zgolj iz ± 1 , in hkrati upoštevamo označitve nerazcepnih reprezentacij glede na poglavje (3):

C_{2v}	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	linearno/rotacije	kvadratno
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

Tabela 3: Tabela karakterjev za grupo C_{2v} , kateri pripada molekula vode.

Iz zgornje tabele vidimo, da je red grupe C_{2v} enak $h = 4$ (imamo 4 neodvisne simetrijske elemente). Molekula vode ima $N = 3$ atome, torej $3N = 9$ prostostnih stopenj, od katerih pripadajo 3 translacijam, 3 rotacijam ter $3M - 6 = 3$ vibracijam. Upoštevajoč poglavje (4), kjer vsakemu atomu vode pripišemo 3 vektorje ($\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$), katere opazujemo glede na operacije simetrijskih elementov grupe C_{2v} , lahko zapišemo razcepno reprezentacijo

C_{2v}	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
Γ	9	-1	3	1

Tabela 4: Tabela karakterjev za grupo C_{2v} , kateri pripada molekula vode.

S pomočjo enačbe (8) tako lahko zapišemo:

$$N_{A_1} = \frac{1}{4} \sum_R 1_{\chi_{\Gamma}}(R) \chi_{A_1}(R) = \frac{1}{4} (1 * 9 * 1 + 1 * (-1) * 1 + 1 * 3 * 1 + 1 * 1 * 1) = 3. \quad (9)$$

Po istem principu lahko zapišemo še ostale tri: $N_{A_2} = 1$, $N_{B_1} = 3$ ter $N_{B_2} = 2$.

Vsa možna gibanja vode lahko zapišemo kot: $3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$.

S tabelo karakterjev izluščimo translacije $x, y, z = A_1 + B_1 + B_2$.

Na enak način izluščimo rotacije $R_x, R_y, R_z = A_2 + B_1 + B_2$.

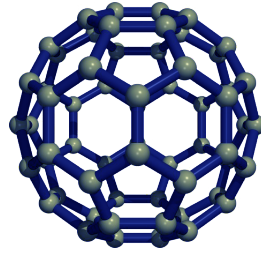
Preostanejo le še vibracije, ki jih zapišemo kot $2A_1 + B_1$.

5.2 Fuleren C_{60}

Ogljik (C) nastopa v več različnih oblikah: diamant (sp^3 hibridizacija), lonsdaleit (heksagonalni diamant), grafit (sp^2 hibridizacija), grafene (en listič grafita), ogljikova nanocevka (grafit/grafen zvit v večplastno/enoplastno nanocevko), fullerit (sp^2 hibridizacija), kroglasti fulereni (ena kroglica v fulleritu) ter amorfni ogljik.

Prvi odkrit fuleren je bil fuleren C_{60} , ki je prikazan na sliki (2). Obstaja 1812 C_{60} izomer. Energijsko najbolj stabilna ureditev 12 petkotnikov ter 20 šestkotnikov je, kadar so petkotniki popolnoma ločeni med sabo (nogometna žoga). Po shemi na sliki (1) pripada taka struktura točkovni grupi I_h : molekula (slika (2)) ni linearna, vsebuje 10 C_3 osi, vsebuje 6 C_5 osi, prav tako pa tudi center inverzije. Simetrijske operacije točkovne grupe I_h so: E , $12C_5$, $12C_5^2$, $20C_3$, $15C_2$, i , $12S_{10}$, $12S_{10}^3$, $20S_6$ ter $15\sigma_h$ tj. 120 simetrijskih operacij ter 10 nerazcepnih reprezentacij.

Naredimo podoben premislek kot v primeru vode: $h = \text{red grupe} = \text{število elementov grupe} = 120$, $\text{število razredov} = \text{število nerazcepnih reprezentacij} = 10$. Po Bernside-ovem teoremu vemo, da je red grupe

Slika 2: Molekula/fuleren C_{60} .

(120) vsota 10-ih kvadratov po nerazcepni reprezentaciji. Ker vsebuje grupa Y_h center inverzije, se število različnih dimenzij nerazcepnih reprezentacij zmanjša za 2. Edina možnost vsote kvadratov je tako $60 = 5^2 + 4^2 + 3^2 + 3^2 + 1^2$. Tudi v tem primeru je potrebno upoštevati ortogonalnost karakterjev.

I_h	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2+z^2(=r^2)$
T_{1g}	3	$-2\omega_1$	$-2\omega_2$	0	-1	3	$-2\omega_1$	$-2\omega_2$	0	-1	I_x, I_y, I_z
T_{2g}	3	$-2\omega_2$	$-2\omega_1$	0	-1	3	$-2\omega_2$	$-2\omega_1$	0	-1	
G_g	4	-1	-1	-1	0	4	-1	-1	-1	0	
H_g	5	0	0	-1	1	5	0	0	-1	1	$3z^2-r^2, x^2-y^2,$ xy, yz, zx
A_u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
T_{1u}	3	$-2\omega_1$	$-2\omega_2$	0	-1	-3	$-2\omega_1$	$-2\omega_2$	0	1	x, y, z
T_{2u}	3	$-2\omega_2$	$-2\omega_1$	0	-1	-3	$2\omega_2$	$2\omega_1$	0	1	
G_u	4	-1	-1	-1	0	-4	1	1	1	0	
H_u	5	0	0	-1	1	-5	0	0	1	-1	

$\omega_1=\cos(4\pi/5), \omega_2=\cos(2\pi/5)$

Slika 3: Tabela karakterjev za grupo I_h [4].

Iz tabele karakterjev na sliki (3) preberemo, da od 180 prostostnih stopenj pripade na rotacije 3 T_{1g} ter na translacije 3 T_{1u} . Poleg tega pa zaradi degeneracije iz 180 prostostnih stopenj ostane le še 46 prostostnih stopenj[5]. Vse vibracijske mode lahko tako zapišemo

$$2A_g(R) + 3T_{1g} + 4T_{2g} + 6G_g + 8H_g(R) + A_u + 4T_{1u}(IR) + 5T_{2u} + 6G_u + 7H_u, \quad (10)$$

kjer R pomeni Ramanovo aktivni modi (simetrija kvadratne oblike), IR pa infrardeči vibracijski modi (simetrija linearne oblike)[5].

6 Zaključek

S pomočjo grup lahko opišemo simetrije opažene v naravi. V njih so shranjeni „podatki“ o lastnostih kristalov, molekul... V tem seminarju sem prikazala kaj lahko vse določimo pri molekulah s pomočjo točkovnih grup: polarizabilnost ter kiralnost molekule, predvsem pa kako določimo vibracijske mode.

Literatura

- [1] D. Bonchev, D. H. Rouvray. *Chemical group theory: introduction and fundamentals*. Gordon and Breach Science Publishers S.A., Amsterdam, 1994.
- [2] Simetrija. <http://symmetry.otterbein.edu/tutorial/pointgroups.html>. Zadnjič dostopano 3. 4. 2010.
- [3] L. D. Landau, L. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory, Third Edition: Volume 3*. Elsevier Science, India, 2003.
- [4] Simetrija. <http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/Ih.html>. Zadnjič dostopano 3. 4. 2010.
- [5] A. Graja, A. Lapinski, S. Krol. *Silent and higher-order vibrations of C_{60} and its compounds*. Journal of Molecular Structure, 404, 147-156, 1997.