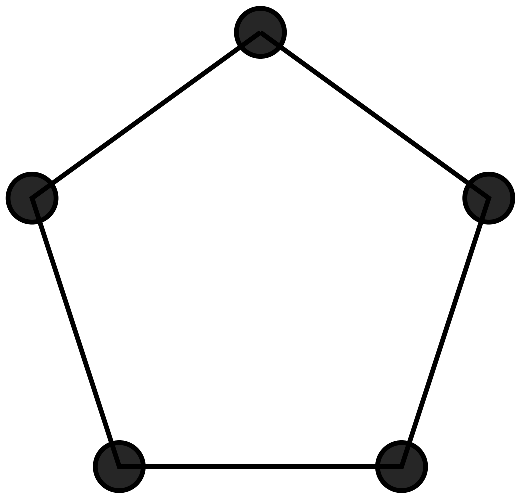
Fag 74984 Symmetri i fysikken

LØSNINGSFORSLAG TIL EKSAMEN 15.12.1997

Løsning oppgave 1:

I denne oppgaven skulle vi se på symmetrigruppen for cyclopentan, $C_5\,H_{10}$. Vi betrakter dette molekylet som geometrisk struktur bestående av fem like store kuler plassert i hjørnene av en likesidig femkant i xy-planet, illustrert ved figuren under.



a) De symmetritransformasjonene som avbilder strukturen på seg selv er

1. Rotasjoner av molekylet med $\frac{2\pi n}{5}$ radianer om z-aksen ($n = 0, \cdots, 4$):
$$\{E, C_5, C_5^2, C_5^3, C_5^4\}.$$
2. Speilinger i vertikale plan som går gjennom ett av de fem hjørnene, og midt gjennom motstående sidekant:
$$\left\{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}, \sigma_v^{(4)}, \sigma_v^{(5)}\right\}.$$
3. Rotasjoner med π radianer om akser som går gjennom ett av de fem hjørnene, og midt gjennom motsående sidekant
$$\left\{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, C_2^{(5)}\right\}$$
Vi kan også skrive $C_2^{(i)} = \sigma_h\,\sigma_v^{(i)}$.
4. Rotasjons-speilinger, dvs. rotasjoner med $\frac{2n\pi}{5}$ radianer ($n = 0, \cdots, 4$) kombinert med en speiling σ_h i xy-planet.
$$\{\sigma_h, \sigma_h\,C_5, \sigma_h\,C_5^2, \sigma_h\,C_5^3, \sigma_h\,C_5^4\}$$

Der er selvsagte andre (like gode) måter å beskrive disse symmetrielementene på.

b) Symmetrigruppen over kalles for $\boldsymbol{D_{5h}}$ i Schönflies notasjon. Det er nyttig å merke seg at (siden σ_h kommuterer med C_5 og $\sigma_v^{(i)}$) denne gruppen kan skrives på tensor produkt form, $\boldsymbol{D_{5h}} = \boldsymbol{C_{5v}} \times \{E, \sigma_h\}$. Dette forenkler endel av analysen.

c) Det mulige antallet elementer i enhver undergruppe av gruppen over må være

$$\mathbf{1,\ 2,\ 4,\ 5,\ 10,\ 20}$$

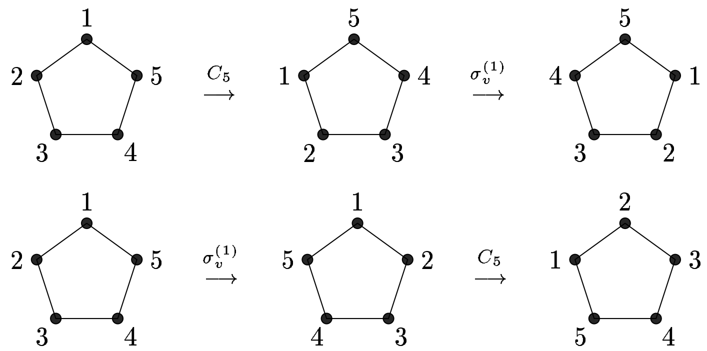
fordi dette antallet må være delbart med 20 (Lagranges teorem).

d) En gruppe $\mathcal{G}$ er abelsk dersom alle gruppe-elementene kommuterer med hverandre, dvs. at

$$g_i \circ g_j = g_j \circ g_i \qquad \text{for alle } g_i, g_j \in \mathcal{G}$$

Den gruppen vi ser på i denne oppgaven er **ikke abelsk**. Som figuren under viser er f.eks

$$\sigma_v^{(1)} \circ C_5 \neq C_5 \circ \sigma_v^{(1)}.$$



e) En *ekte* undergruppe $\mathcal{H}$ av en gruppe $\mathcal{G}$ er en undergruppe som (i) ikke er lik $\mathcal{G}$ selv, og (ii) ikke består av enhetselementet alene. Altså $\{E\} \neq \mathcal{H} \neq \mathcal{G}$. En *invariant* (eller normal) undergruppe $\mathcal{N}$ av en gruppe $\mathcal{G}$ er en undergruppe som har alle sine venstre og høyre kosett like. Dvs. at (som mengder)

$$g\,\mathcal{N} = \mathcal{N}\,g$$

for alle $g \in \mathcal{G}$.

f) Vi begynner med å se på de sykliske undergruppene som blir generert av ett element (ulik enheten) i $\mathcal{G}$.

$\boldsymbol{\sigma_h}$ $\mathcal{H}_1 = \{E, \sigma_h\}$ er en invariant undergruppe (fordi det horisontale speilplanet ikke transformerer under gruppen) av orden 2.

$\boldsymbol{\sigma_v}$ $\mathcal{H}_2 = \left\{E, \sigma_v^{(1)}\right\}, \ldots,\ \mathcal{H}_6 = \left\{E, \sigma_v^{(5)}\right\}$ utgjør 5 konjugerte (og derfor ikke invariante) undergrupper av orden 2.

$\boldsymbol{C_2}$ $\mathcal{H}_7 = \left\{E, C_2^{(1)}\right\}, \ldots,\ \mathcal{H}_{11} = \left\{E, C_2^{(5)}\right\}$ utgjør 5 konjugerte (og derfor ikke invariante) undergrupper av orden 2.

$\boldsymbol{C_5}$ $\mathcal{H}_{12} = \{E, C_5, C_5^2, C_5^3, C_5^4\}$ er en invariant undergruppe (fordi den 5-tallige rotasjonsaksen ikke transformerer under gruppen) av orden 5.

$\boldsymbol{\sigma_h C_5}$ $\mathcal{H}_{13} = \{E, \sigma_h\, C_5, C_5^2, \sigma_h C_5^3, C_5^4, \sigma_h, C_5, \sigma_h C_5^2, C_5^3, \sigma_h C_5^4\}$ er en invariant undergruppe av orden 10.

Vi kan så forsette med å se på gruppene som blir generert av *to* elementer (ulik enheten, og i to forskjellige sykliske undergrupper. Ved å kombinere alle mulige par av sykliske undergrupper finner vi som nye undergrupper

σ_h,σ_v $\mathcal{H}_{14} = \left\{E, \sigma_h, \sigma_v^{(1)}, \sigma_h\sigma_v^{(1)}\right\}, \ldots, \mathcal{H}_{18} = \left\{E, \sigma_h, \sigma_v^{(5)}, \sigma_h\sigma_v^{(5)}\right\}$ utgjør 5 konjugerte undergrupper av orden 4.

C_5,σ_v $\mathcal{H}_{19} = \left\{E, C_5, C_5^2, C_5^3, C_5^4, \sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}, \sigma_v^{(4)}, \sigma_v^{(5)}\right\}$ er en invariant undergruppe av orden 10. Dette er presist $\boldsymbol{C_{5v}}$.

C_5,C_2 $\mathcal{H}_{20} = \left\{E, C_5, C_5^2, C_5^3, C_5^4, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, C_2^{(5)}\right\}$ er en invariant undergruppe av orden 10, som bare inneholder ekte rotasjoner.

Kombinasjon av disse gruppene med elementer fra enda flere sykliske undergrupper gir ikke nye ekte undergrupper.

Oppsummert har vi derfor funnet

Orden 2:	1 invariant	5+5 konjugerte
Orden 4:	0 invariante	5 konjugerte
Orden 5:	1 invariant	0 konjugerte
Orden 10:	3 invariante	0 konjugerte

g) Antallet elementer i en konjugasjonsklasse må gå opp i antallet elementer i gruppen. Det mulige antall elementer i konjugasjonsklassene til en gruppe av orden 20 er derfor

1, 2, 4, 5, 10

Merk at det er utelukket at man kan ha 20 elementer i en konjugasjonsklasse, fordi enhetselementet E alltid utgjør en klasse for seg, og fordi hvert gruppe-element tilhører nøyaktig én konjugasjonsklasse.

h) Siden $\boldsymbol{D_{5h}} = \boldsymbol{C_{5v}} \times \{E, \sigma_h\}$ kan vi først se på konjugasjonsklassene i $\boldsymbol{C_{5v}}$ og $\{E, \sigma_h\}$ separat. Vi har dekomposisjonene (i konjugasjonsklasser)

$$\boldsymbol{C_{5v}} = \{E\} \cup \{C_5, C_5^4\} \cup \{C_5^2, C_5^3\} \cup \{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}, \sigma_v^{(4)}, \sigma_v^{(5)}\}$$

og

$$\{E, \sigma_h\} = \{E\} \cup \{\sigma_h\}$$

så vi får

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D_{5h}} \;\; = \;\; & \{E\} \cup \{C_5, C_5^4\} \cup \{C_5^2, C_5^3\} \cup \{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}, \sigma_v^{(4)}, \sigma_v^{(5)}\} \cup \\ & \{\sigma_h\} \cup \{\sigma_h C_5, \sigma_h C_5^4\} \cup \{\sigma_h C_5^2, \sigma_h C_5^3\} \cup \{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, C_2^{(5)}\}. \end{aligned}$$

Gruppen har altså 8 konjugasjonsklasser.

i) En representasjon av en gruppe er en avbildning av gruppen til ett sett med matriser, konsistent med gruppe-sammensetningsregelen. Dvs., for hver $g_i \in \mathcal{G}$ er det definert en matrise $D(g_i)$, slik at

$$D(g_i)\, D(g_j) = D(g_i \circ g_j)$$

for alle g_i, g_j. En irredusible representasjon er en representasjon som ikke kan blokkdiagonaliseres ved en similaritetstransformasjon.

j) Antallet irredusible representasjoner er lik antallet konjugasjonsklasser, så $\boldsymbol{D_{5h}}$ må ha 8 irredusible reprsentasjoner. Disse må ha dimensjoner d_i slik at

$$\sum_{i=1}^{8} d_i^2 = 20. \tag{1}$$

Ved systematisk prøving finner vi at den eneste mulige løsning (med positive heltall) til denne betingelsen er at

$$\{d_1, \ldots, d_8\} = \{1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2\}, \tag{2}$$

altså 4 én-dimensjonale og 4 to-dimensjonale representasjoner. (Siden $\boldsymbol{D_{5h}} = \boldsymbol{C_{5v}} \times \{E, \sigma_h\}$ er det litt enklere å analysere $\boldsymbol{C_{5v}}$ og $\{E, \sigma_h\}$ separat først.)

k) Karakteren til en representasjon er definert som sporet av representasjonsmatrisen

$$\chi(g) = \mathrm{Tr}\,\{D(g)\} = \sum_{n=1}^{d} D(g)_{nn}. \tag{3}$$

Karakteren avhenger bare av hvilken konjugasjonsklasse g ligger i. Alle endelig-dimensjonale representasjoner (som er det vi behandler her) kan unitariseres, dvs. at representasjonsmatrisene kan velges unitære,

$$D(g)^{-1}_{mn} = D(g)^{*}_{nm}.$$

Siden representasjons-egenskapen gjør at $D(g^{-1} = D(g)^{-1}$ blir

$$\chi(g^{-1}) = \mathrm{Tr}\,\{D(g)^{-1}\} = \sum_{n=1}^{d} D(g)^{*}_{nn} = \chi(g)^{*}. \tag{4}$$

Hvis nå g^{-1} og g ligger i samme konjugasjonsklasse må $\chi(g) = \chi(g)^{*}$, altså er karakteren reell for denne konjugasjonsklassen.

l) Vi har to orthogonalitetsrelasjoner for karakterene til settet av irredusible representasjoner:

$$\sum_{k=1}^{N} h_k\, \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^{*}\, \chi^{(\beta)}(\mathcal{C}_k) = g\,\delta_{\alpha\beta}, \tag{5}$$

og

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_i)^{*}\, \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_j) = \delta_{ij}\,\frac{g}{h_i}. \tag{6}$$

Her er N antallet konjugasjonsklasser (lik antallet inekvivalente irredusible representasjoner), h_k antallet elementer i konjugasjonsklassen $\mathcal{C}_k$, og g lik antallet elementer i gruppen. De to relasjonene uttrykker at $\left\{\sqrt{(h_k/g)}\,\chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)\right\}$ utgjør en komplett orthonormert basis på rommet av konjugasjonsklasser.

m) Siden $\boldsymbol{D_{5h}} = \boldsymbol{C_{5v}} \times \{E, \sigma_h\}$ er det litt enklere å finne de irredusible representasjonen til $\boldsymbol{C_{5v}}$ og $\{E, \sigma_h\}$ først. $\boldsymbol{C_{5v}}$ må har 2 irredusible representasjoner av dimensjon 1, og to av dimensjon 2. Da kan vi øyeblikkelig sette opp første rad og kolonne i karaktertabellen:

	$\{E\}$	$\{2C_5\}$	$\{2C_5^2\}$	$\{5\sigma_v\}$
A_1	1	1	1	1
A_2	1			
E_1	2			
E_2	2			

Siden elementer og inverse elementer alltid ligger i samme konjugasjonsklasse for denne gruppen må karaktertabellen være reell. Siden karakterene for én-dimensjonale representasjoner også er representasjons-matriser, må $A_2(C_5^2) = A_2(C_5)^2$, og $A_2(C_5)^5 = A_2(E) = 1$, som bare har reell løsning $A_2(C_2) = A_2(C_2^2) = 1$. Orthogonalitet bestemmer så at $A_2(\sigma_v) = -1$. Derved har vi kommet fram til den foreløbige karaktertabellen

	$\{E\}$	$\{2C_5\}$	$\{2C_5^2\}$	$\{5\sigma_v\}$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1
E_1	2	u	v	w
E_2	2	x	y	z

Orthogonalitet av E_1 på A_1 og A_2 gir ligningene

$$2 + 2u + 2v + 5w = 0$$
$$2 + 2u + 2v - 5w = 0,$$

som impliserer $v = -(1+u)$ og $w = 0$. Normering av E_1 gir så ligningen

$$4 + 2u^2 + 2(1+u)^2 = 10,$$

eller

$$u^2 + u + 1 = 0,$$

med løsning

$$u = \frac{-1+\sqrt{5}}{2}, \quad v = \frac{-1-\sqrt{5}}{2}. \tag{7}$$

Ved å gjenta overstående prosedyre for E_2 får vi (naturligvis!) de samme ligningene. Vi må bare velge motsatt fortegn framfor rot-tegnet i løsningen,

$$x = \frac{-1-\sqrt{5}}{2}, \quad y = \frac{-1+\sqrt{5}}{2}, \quad z = 0. \tag{8}$$

Derved har vi konstruert hele karaktertabellen for $\boldsymbol{C_{5v}}$:

	$\{E\}$	$\{2C_5\}$	$\{2C_5^2\}$	$\{5\sigma_v\}$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1
E_1	2	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	0
E_2	2	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	0

Vi kombinerer denne tabellen med karaktertabellen for $\{E, \sigma_h\}$,

	$\{E\}$	$\{\sigma_h\}$
A'	1	1
A''	1	-1

og finner at karaktertabellen for $\boldsymbol{D_{5h}}$ blir

	$\{E\}$	$\{2C_5\}$	$\{2C_5^2\}$	$\{5\sigma_v\}$	$\{\sigma_h\}$	$\{2\sigma_h C_5\}$	$\{2\sigma_h C_5^2\}$	$\{5C_2\}$
A_1'	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2'	1	1	1	-1	1	1	1	-1
E_1'	2	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	0	2	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	0
E_2'	2	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	0	2	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	0
A_1''	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
A_2''	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
E_1''	2	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	0	-2	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	0
E_2''	2	$\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$	0	-2	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	0

Løsning oppgave 2:

Nedenforstående tabell sammenfatter endel karakterer som blir beregnet senere i denne oppgaven:

	$\{E\}$	$\{2C_5\}$	$\{2C_5^2\}$	$\{5\sigma_v\}$	$\{\sigma_h\}$	$\{2\sigma_h C_5\}$	$\{2\sigma_h C_5^2\}$	$\{5C_2\}$
χ	15	0	0	1	5	0	0	-1
χ_{trans}	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	1	-1	$\frac{-3+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{-3-\sqrt{5}}{2}$	-1
χ_{rot}	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	-1	-1	$\frac{3-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{3+\sqrt{5}}{2}$	-1
χ_{vib}	9	$-1-\sqrt{5}$	$-1+\sqrt{5}$	1	5	0	0	1
χ_{pol}	6	1	1	2	2	$2-\sqrt{5}$	$2+\sqrt{5}$	2

a) For å bestemme karaktertabellen for den 15-dimensjonale representasjonen trenger vi (heldigvis!) bare diagonal-elementene til representasjonsmatrisen. Da er det også tilstrekkelig å studere forholdene ved de hjørnene som står fast under transformasjonen. La oss se på konjugasjonsklassene én for én:

$\boldsymbol{E}$ Vi finner trivielt at $\chi(\{E\}) = 15$, dimensjonen til representasjonen.

$\boldsymbol{C_5}$ Vi finner trivielt at $\chi(\{2C_5\}) = \chi(\{2C_5^2\}) = 0$, fordi ingen hjørner står fast under disse transformasjonene. Av samme grunn blir $\chi(\{2\sigma_h C_5\}) = \chi(\{2\sigma_h C_5^2\}) = 0$.

$\boldsymbol{\sigma_v}$ Alle speilingene vil holde nøyaktig ett hjørne fast, slik at f. eks.

$$(u_1^x, u_2^y, u_1^z) \to (u_1^x, -u_1^y, u_1^z),$$

med resten av transformasjonsmatrisen off-diagonal. Dette gir $\chi(\{5\sigma_v\}) = 2 - 1 = 1$.

$\boldsymbol{\sigma_h}$ Denne speilingen holder alle hjørnene fast, slik at

$$(u_i^x, u_i^y, u_i^z) \to (u_i^x, u_i^y, -u_i^z).$$

Dette gir $\chi(\{\sigma_h\} = 5 \times (2-1) = 5$.

$\boldsymbol{C_2}$ Denne rotasjonen holder nøyaktig ett hjørne fast, slik at f. eks.

$$(u_1^x, u_1^y, u_1^z) \to (-u_1^x, -u_1^y, u_1^z),$$

med resten av transformasjonsmatrisen off-diagonal. Dette gir $\chi(\{5C_2\}) = 1 - 2 = -1$.

Tilsammen gir dette en karakter χ som tabulert over.

b) En translasjon er en polar vektor, så vi kan se generelt på hvordan en slik vektor transformerer. Igjen er det nok å studere diagonalelementene av transformasjonen. Vi ser på konjugasjonsklassene én for én.

$\boldsymbol{E}$ Vi har trivielt at $\chi_{\text{trans}}(\{E\}) = 3$, dimensjonen til representasjonen.

$\boldsymbol{C_5}$ En rotasjon med vinkel φ om z-aksen vil transformere

$$(x, y, z) \to (\cos\varphi\, x + \cdots, \cos\varphi\, y + \cdots, z)\,.$$

Dette gir en karakter $1 + 2\cos\varphi$. Altså blir

$$\chi_{\text{trans}}(\{2C_5\}) = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{5} = \frac{1+\sqrt{5}}{2},$$
$$\chi_{\text{trans}}(\{2C_5\}) = 1 + 2\cos\frac{4\pi}{5} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}.$$

σ En speiling i f. eks. xz-planet, resp. xy-planet, vil transformere

$$(x, y, z) \to (x, -y, z), \quad (x, y, z) \to (x, y, -z).$$

Altså blir

$$\chi_{\text{trans}}(\{5\sigma_v\}) = \chi_{\text{trans}}(\{\sigma_h\}) = 2 - 1 = 1.$$

$\sigma_h C_5$ Siden rotasjoner om z-aksen kommuterer med speiling i xy-planet ser vi at

$$(x, y, z) \to (\cos\varphi\, x + \cdots, \cos\varphi\, y + \cdots, -z),$$

slik at karakteren blir $-1 + 2\,\cos\varphi$. Altså blir

$$\chi_{\text{trans}}(\{\sigma_h C_5\}) = -1 + 2\,\cos\frac{2\pi}{5} = \frac{-3+\sqrt{5}}{2},$$
$$\chi_{\text{trans}}(\{\sigma_h C_5^2\}) = -1 + 2\,\cos\frac{4\pi}{5} = \frac{-3-\sqrt{5}}{2}.$$

C_2 En rotasjon med π vil f. eks. transformere

$$(x, y, z) \to (x, -y, -z),$$

som gir $\chi_{\text{trans}}(\{C_2\}) = 1 - 2 = -1$.

Alt i alt gir dette karakteren χ_{trans} tabulert over.

c) En rotasjon er en aksial vektor, så vi kan se generelt på hvordan en slik vektor transformerer. Dette er som for polare vektorer, med den forskjell at det er et ekstra minus-tegn for hver speiling (eller inversjon). Karakteren χ_{rot} kan derfor settes opp direkte, med resultat som tabulert over.

d) Karakteren for vibrasjonsspekteret finnes nå fra

$$\chi_{\text{vib}} = \chi - \chi_{\text{trans}} - \chi_{\text{rot}},$$

med resultat som tabulert over. For å dekomponere denne i karakterer til irredusible representasjoner skriver vi

$$\chi_{\text{vib}} = C_1\, A_1' + C_2\, A_2' + \cdots + C_8\, E_2'',$$

og løser for vektoren $\mathcal{C}_{\text{vib}} = (C_1, \ldots, C_8)$ (som bør få bare heltallige, ikke-negative elementer). Vi finner

$$\mathcal{C}_{\text{vib}} = (1, 0, 1, 2, 0, 0, 0, 1),$$

altså at

$$\chi_{\text{vib}} = A_1' + E_1' + 2\,E_2' + E_2''. \tag{9}$$

e) Betingelsen for infrarød absorpsjon i en gitt irredusible mode er at den må ha et dipolmoment (som er en polar vektor). Moden må altså være inneholdt i dekomposisjonen av en polar vektor, ekvivalent med dekomposisjonen av χ_{trans}. På samme måte som over skriver vi

$$\chi_{\text{trans}} = C_1\, A_1' + C_2\, A_2' + \cdots + C_8\, E_2'',$$

og løser for vektoren $\mathcal{C}_{\text{trans}} = (C_1, \ldots, C_8)$. Vi finner

$$\mathcal{C}_{\text{trans}} = (0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0),$$

dvs. at

$$\chi_{\text{trans}} = E_1' + A_1''. \tag{10}$$

Sammenlignet med resultatet fra forrige punkt ser vi at bare én vibrasjonsmode, E_1'-moden, er aktiv for infrarød absorpsjon.

f) Betingelsen for Raman spredning på en gitt irredusible mode er at den må ha en polarisasjonstensor, dvs. være inneholdt i dekomposisjonen av en representasjon som transformerer som $\left(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\right)$. Vi må derfor først finne karakteren til denne representasjonen.

E Vi har $\chi_{\text{pol}}(\{E\}) = 6$, dimensjonen til representasjonen.

$\boldsymbol{C_5}$ Under en rotasjon med φ om z-aksen finner vi at

$$\begin{aligned}&\left(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\right) \to \left(\cos^2\varphi\, x^2 + \cdots, \cos^2\varphi\, y^2 + \cdots, z^2,\right.\\&\left.(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi)\, xy + \cdots, \cos\varphi\, xz + \cdots, \cos\varphi\, yz + \cdots\right),\end{aligned}$$

slik at karakteren blir $1 + 2\,\cos\varphi + 3\,\cos^2\varphi - \sin^2\varphi$. Altså blir

$$\begin{aligned}\chi_{\text{pol}}(\{2C_5\}) &= 1 + 2\,\cos\frac{2\pi}{5} + 3\cos^2\frac{2\pi}{5} - \sin^2\frac{2\pi}{5} = 1,\\ \chi_{\text{pol}}(\{2C_5^2\}) &= 1 + 2\,\cos\frac{4\pi}{5} + 3\cos^2\frac{4\pi}{5} - \sin^2\frac{4\pi}{5} = 1.\end{aligned}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ Under en speiling i f. eks xz-planet vil

$$\left(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\right) \to \left(x^2, y^2, z^2, -xy, xz, -yz\right),$$

slik at karakteren blir $4 - 2 = 2$. Det samme gjelder for speiling i xy-planet. Altså blir

$$\chi_{\text{pol}}(\{5\sigma_v\}) = \chi_{\text{pol}}(\{\sigma_h\}) = 2.$$

$\boldsymbol{\sigma_h C_5}$ Siden rotasjoner om z-aksen kommuterer med speiling i xy-planet ($z \to -z$) ser vi at

$$\begin{aligned}&\left(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\right) \to \left(\cos^2\varphi\, x^2 + \cdots, \cos^2\varphi\, y^2 + \cdots, z^2,\right.\\&\left.(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi)xy + \cdots, -\cos\varphi\, xz + \cdots, -\cos\varphi\, yz + \cdots\right),\end{aligned}$$

slik at karakteren blir $1 - 2\,\cos\varphi + 3\,\cos^2\varphi - \sin^2\varphi$. Altså blir

$$\begin{aligned}\chi_{\text{pol}}(\{2\sigma_h C_5\}) &= 1 - 2\,\cos\frac{2\pi}{5} + 3\cos^2\frac{2\pi}{5} - \sin^2\frac{2\pi}{5} = 2 - \sqrt{5},\\ \chi_{\text{pol}}(\{2\sigma_h C_5^2\}) &= 1 - 2\,\cos\frac{4\pi}{5} + 3\cos^2\frac{4\pi}{5} - \sin^2\frac{4\pi}{5} = 2 + \sqrt{5}.\end{aligned}$$

$\boldsymbol{C_2}$ En to-tallig rotasjon om f. eks. x-aksen transformerer

$$\left(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\right) \to \left(x^2, y^2, z^2, -xy, -xz, yz\right),$$

slik at karakteren blir $4 - 2 = 2$. Altså blir

$$\chi_{\text{pol}}(\{5C_2\}) = 2.$$

Tilsammen gir dette en karakter χ_{pol} som tabulert over. På samme måte som før skriver vi

$$\chi_{\text{pol}} = C_1\, A_1' + \cdots + C_8\, E_2'',$$

og løser for vektoren $\mathcal{C}_{\text{pol}} = (C_1, \ldots, C_8)$. Vi finner

$$\mathcal{C}_{\text{pol}} = (2, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0),$$

dvs. at

$$\chi_{\text{pol}} = 2\,A_1' + E_2' + E_1''. \tag{11}$$

Sammenlignet med resultatene fra punkt **d)** ser vi at A_1'-moden og de to E_2'-modene er aktive for Raman spredning.