

D_{3h} point group

not Abelian, 6(8) irreducible representations

Subgroups: C_s, C₂, C₃, D₃, C_{2v}, C_{3v}, C_{3h}

Character table

	E	2C ₃	3C' ₂	σ _h	2S ₃	3σ _v	linear, rotations	quadratic
A' ₁	1	1	1	1	1	1		x ² +y ² , z ²
A' ₂	1	1	-1	1	1	-1	R _z	
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y)	(x ² -y ² , xy)
A'' ₁	1	1	1	-1	-1	-1		
A'' ₂	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R _x , R _y)	(xz, yz)

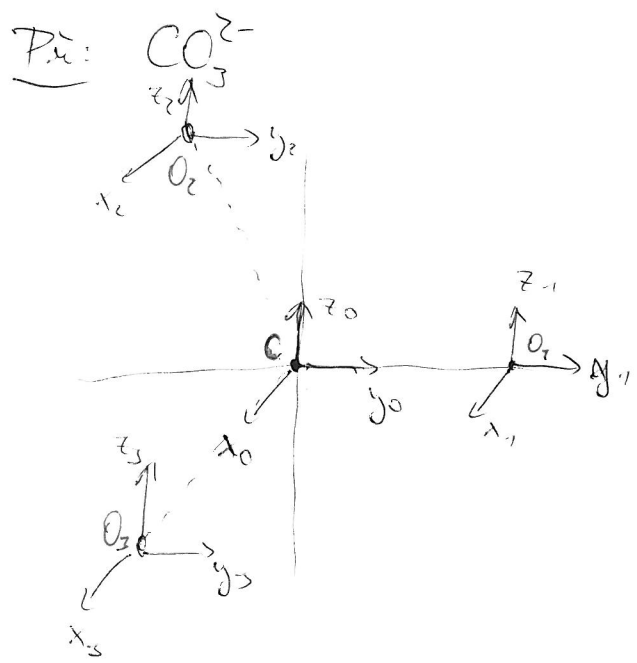
Product table

	A' ₁	A' ₂	E'	A'' ₁	A'' ₂	E''
A' ₁	A' ₁	A' ₂	E'	A'' ₁	A'' ₂	E''
A' ₂	A' ₂	A' ₁	E'	A'' ₂	A'' ₁	E''
E'	E'	E'	A' ₁ +A' ₂ +E'	E''	E''	A'' ₁ +A'' ₂ +E''
A'' ₁	A'' ₁	A'' ₂	E''	A' ₁	A' ₂	E'
A'' ₂	A'' ₂	A'' ₁	E''	A' ₂	A' ₁	E'
E''	E''	E''	A'' ₁ +A'' ₂ +E''	E'	E'	A' ₁ +A' ₂ +E'

You may print and redistribute verbatim copies of this document.

OPTICKÁ SPEKTRA CO₃²⁻

#G = 12



D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_6$	$3\sigma_v$	
A_1'	1	1	1	1	1	1	(x^2, y^2, z^2)
A_2'	1	1	-1	1	1	-1	$(x^2 - y^2, xy)$
$(x, y) E'$	2	-1	0	2	-1	0	(x^2, y^2)
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1	
$(z) A_2''$	1	1	-1	-1	-1	1	
$(z, R) E''$	2	-1	0	-2	1	0	(x, y, z)
Γ^{3N}	12	0	-2	4	-2	2	

strictly speaking, x_i are already the scaled q_i coordinates and the vec. space is not our "natural" $(\mathbb{R}^3)^4$

- charakter: \rightarrow nemukou přispěje jím atom, likost se nepohne;
 - \rightarrow ten přispěje charakterem vekt. repře
- $\chi(C_3) = 1 + 2\cos\varphi$
 $\chi(S_6) = -1 + 2\cos\varphi$
 $\chi(C_2) = 0$ $\chi(C_2) = -1$, $\chi(S_2) = -2$, $\chi(\sigma) = \chi(S_2) = 1$

$\Rightarrow \Gamma^{3N} = A_1' \oplus A_2' \oplus 3E' \oplus 2A_2'' \oplus E''$

$\Gamma^{rot} = A_2' \oplus E''$
 $\Gamma^{trans} = E' \oplus A_2''$

$\Rightarrow \Gamma^{vib} = A_1' \oplus 2E' \oplus A_2''$ - 6 modů

• infrared: $\langle 0 | \vec{\mu} | \nu_i = 1 \rangle$
 $\Gamma^{IR} = E' \oplus A_2'' \Rightarrow 2E' \oplus A_2''$ jsou IR aktívni
 A_1' je IR neaktívni

• Raman $\langle 0 | \alpha | \nu_i = 1 \rangle$
 $\Gamma^{R} = A_1' \oplus E' \oplus E'' \Rightarrow A_1' \oplus 2E'$ jsou R-aktívni
 A_2'' není v R. vlně

• otázka: ne všechny moduly ~~se~~ je zastoupena vibrace podle C-O vazby? ~~se~~ ne ~~minimální~~ vazeb?

$\Gamma^3 (3 \ 0 \ 1 \ 3 \ 0 \ 1) = A_1' \oplus E'$ = (představím si házi) 3 vazeb

- A_2'' je jen deformace mimo rovinnu (skibitní vata se oběhly C-O vazeb není, ale ne v 1. řádku)
- změny vazeb dostávají v obou E' - je to mix (obrázek)

(6)

