XII. Az O_h csoport

A kocka összes szimmetriatranszformációját tartalmazza. O-ból szimmetria-középpont hozzáadásával keletkezik:

$$O_h = O \times C_i$$

A C_3-tengelyek S_6-tengelyekké válnak, 6+3 új szimmetriasík keletkezik.

- 48 elemű csoport
- 10 osztály: $E, 8C_3, 3C_2, 6C_4, 6C_2', I, 8S_6, 3\sigma_h, 6S_4, 6\sigma_d$

XIII.–XIV. Ikozaédercsoportok

Y : egy szabályos ikozaéder szimmetriatengelyei

Y_h : $Y_h = Y \times C_i$ (az ikozaéder összes szimmetriája)

Kristályokban nem fordulnak elő.

Szimmetriaoperációk, mint koordinátatranszformációk

Forgatás a z-tengely körül $\phi = \frac{2\pi}{n}$ szöggel (C_n);

esetleges tükrözés az (xy)-síkra:

$$R = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$$

+ : nem tartalmazza I-t
− : tartalmazza I-t

+ : valódi forgatás
− : nem valódi forgatás

Ha a forgástengely nem esik egybe a z-tengellyel, akkor

$$R' = T R T^{-1}$$

T: ortogonális transzformáció

Az ortogonális hasonlósági transzformáció az R forgásmátrix nyomát invariáns hagyja:

$$Tr(R') = Tr(R) = f_R = 2\cos\phi \pm 1$$

Skalárok koordinátatranszformációkkal szemben invariánsak

Polárvektorok úgy transzformálódnak, mint a koordináták

$$x'_m = \sum_i R_{mi} x_i$$

Axiálvektorok (pl. az impulzusnyomaték) valódi forgatás esetén R-rel, nem valódi forgatás esetén −R-rel transzformálódnak.

Tenzorok úgy transzformálódnak, mint a koordináták szorzatai:

$$x'_m x'_n = \sum_{i,k} R_{mi} R_{nk} x_i x_k \qquad P'_{mn} = \sum_{i,k} R_{mi} R_{nk} P_{ik}$$

Csoportok ábrázolásai

G csoportelem

g a csoport rendje

$\Psi_1 = \Psi_1(x, y, z)$ egyértékű

$\Downarrow$

$\Psi_1, \Psi_2, \dots \Psi_g$

általában különböző függvény

$\Downarrow$

lineárisan függetlenek:

$\Psi_1, \Psi_2, \dots \Psi_f$ $\quad f \leq g$

$$\boxed{\hat{G}\Psi_i = \sum_k G_{ki}\Psi_k}$$

$\Psi_1, \Psi_2, \dots \Psi_f$ választható ortonormált módon (bázis):

$$\int \Psi_i^* \Psi_k \, dq = \delta_{ik}$$

$$\boxed{G_{ik} = \int \Psi_i^* \hat{G} \Psi_k \, dq}$$

Csoportelem	Operátor	Mátrix
G	$\hat{G}$	G_{ik}
H	$\hat{H}$	H_{ik}
GH	$\hat{G}\hat{H}$	$(GH)_{ik} = \sum_l G_{il} H_{lk}$

$\Uparrow$

ábrázolás

f: az ábrázolás dimenziója

Forgatás, tükrözés nem változtatja meg a skaláris szorzatot $\Rightarrow$ $\hat{G}$ unitér operátor $\Rightarrow$ G_{ik} unitér mátrix.

A bázis transzformációja az $\hat{S}$ unitér operátorral

$$\Psi_i' = \hat{S}\,\Psi_i$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{G}' = \hat{S}^{-1}\hat{G}\,\hat{S}$$

G'_{ik} és G_{ik} G ekvivalens ábrázolásai

A G_{ik} ábrázolás karaktere: $\sum_i G_{ii} = \mathrm{Tr}\,G = \chi(G)$

A mátrix nyoma invariáns egy unitér mátrixszal történő hasonlósági transzformációval szemben. Ezért ekvivalens ábrázolások karakterei egyenlők és egy osztályba tartozó csoportelemek ábrázolásának karakterei is egyenlők. E valamennyi ábrázolása egységmátrix. Ezért

$$\boxed{\chi(E) = f}$$

Ha a $\Psi_1, \Psi_2, \ldots \Psi_f$ bázisfüggvények a csoport valamennyi elemének alkalmazásakor olyan $f_1, f_2, \ldots$ db. függvényből álló részekre bomlanak $(f_1+f_2+\ldots = f)$, amelyek csak egymás között transzformálódnak, akkor a hozzájuk tartozó ábrázolás reducibilis, ellenkező esetben irreducibilis.

Reducibilis ábrázolás irreducibilis ábrázolásokra bontható; egy irreducibilis ilyenkor többször is elő-fordulhat.

$$\boxed{\text{Egy csoport irreducibilis ábrázolásainak száma egyenlő a csoport osztályainak számával } (r).}$$

Karaktertábla:

Pont-csoport	$C^{(1)}$	$C^{(2)}$	$\dots$	$C^{(r)}$ ⇐ osztályok
$\Gamma^{(1)}$	$\chi^{(1)}(C^{(1)})$	$\chi^{(1)}(C^{(2)})$	$\dots$	$\chi^{(1)}(C^{(r)})$
$\Gamma^{(2)}$	$\chi^{(2)}(C^{(1)})$	$\dots$		
$\vdots$	$\vdots$			
$\Gamma^{(r)}$				$\chi^{(r)}(C^{(r)})$

⇑
irreducibilis ábrázolások

Példa:

D_3	E	$2C_3$	$3U_2$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Ortogonalitási tétel (általános alak):

$$\boxed{\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{km}}$$

Ha $i=k$ és $l=m$, akkor

$$\sum_G G_{ii}^{(\alpha)} G_{ll}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il}$$

i-re, l-re összegezve:

$$\sum_G \sum_{i=1}^{f_\alpha} G_{ii}^{(\alpha)} \sum_{l=1}^{f_\beta} G_{ll}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{f_\alpha} \sum_{l=1}^{f_\beta} \delta_{il}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)}(G)^*$$

$$\sum_{i=1}^{f_\alpha} \sum_{l=1}^{f_\beta} \delta_{il} = \min(f_\alpha, f_\beta)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)}(G)^* = g\, \delta_{\alpha\beta}}$$

$$\boxed{\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)\, \chi^{(\beta)}(G)^* = g\, \delta_{\alpha\beta}}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\sum_G |\chi^{(\alpha)}(G)|^2 = g}$$

(Reducibilis ábrázolásra ez ng, ahol n a tartalmazott irreducibilis ábrázolások száma.)

$$\Downarrow$$

Két irreducibilis ábrázolás akkor és csak akkor ekvivalens, ha karaktereik megegyeznek.

Csoportelemek helyett osztályokra összegezve:

$$\sum_C g_c\, \chi^{(\alpha)}(C)\, \chi^{(\beta)}(C)^* = g\, \delta_{\alpha\beta}$$

g_c: a C osztály elemeinek száma

Osztályok szerinti ortogonalitás:

$$\boxed{\sum_\alpha \chi^{(\alpha)}(C)\, \chi^{(\alpha)}(C') = \frac{g}{g_c}\, \delta_{CC'}}$$

Triviális ábrázolás (egységábrázolás): $\chi(G) = 1$ bármely G-re. Egységábrázolása minden csoportnak van (A_{1g}); így transzformálódnak a skalárok (invariáns). Ha (β) az egységábrázolás, akkor minden más (α) irreducibilis ábrázolásra:

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) = \sum_C g_c\, \chi^{(\alpha)}(C) = 0$$

Reducibilis ábrázolás felbontása irreducibilisekre

(„kiredukálás")

$\chi(G)$: f-dimenziós reducibilis ábrázolás karaktere

$$\sum_{\beta=1}^{r} a^{(\beta)} f_\beta = f$$

$\Uparrow$

$a(\beta)$ irreducibilis ábrázolás előfordulásainak száma

$$\chi(G) = \sum_{\beta=1}^{r} a^{(\beta)} \chi^{(\beta)}(G) \quad \Big| \cdot \chi^{(\alpha)}(G)^* \quad \sum_G$$

$$\boxed{a^{(\alpha)} = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G)\chi^{(\alpha)}(G)^* = \frac{1}{g}\sum_C g_c \chi(C)\chi^{(\alpha)}(C)^*}$$

- Összefüggés az irreducibilis ábrázolások dimenziószáma és a csoport rendje között:

Az osztályok szerinti ortogonalitás $C = C' = E$ esetére:

$$\boxed{\sum_\alpha f_\alpha^2 = g}$$

$\Downarrow$

Abel-csoport minden eleme külön osztály ($r = g$), tehát Abel-csoportok minden ábrázolása egydimenziós.

$\Downarrow$

Ciklikus csoportok minden ábrázolása egydimenziós.

- Bármely Ψ függvény felírható egy csoport irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódó függvények összegeként:

$$\boxed{\Psi = \sum_\alpha \sum_i \Psi_i^{(\alpha)}, \quad \text{ahol} \quad \Psi_i^{(\alpha)} = \frac{f_\alpha}{g} \sum_G G_{ii}^{(\alpha)*} \hat{G} \Psi}$$

(Visszahelyettesítve az ortogonalitási tételből adódik.)

Irreducibilis ábrázolások direkt szorzata

Egy csoport két irreducibilis ábrázolását megvalósító függvényrendszer:

$$\Psi_1^{(\alpha)}, \Psi_2^{(\alpha)}, \dots \Psi_{f_\alpha}^{(\alpha)}$$

$$\Psi_1^{(\beta)}, \Psi_2^{(\beta)}, \dots \Psi_{f_\beta}^{(\beta)}$$

Képezzük a $\Psi_i^{(\alpha)} \Psi_k^{(\beta)}$ típusú szorzatokat: $f_\alpha f_\beta$ elemű függvényrendszer, amely egy $f_\alpha f_\beta$ dimenziójú (általában reducibilis) ábrázolás szerint transzformálódik. Ez az előbbi két ábrázolás direkt szorzata (Kronecker-szorzata).

> Két ábrázolás direkt szorzatának karakterei az őt alkotó ábrázolások karaktereinek szorzatai.

Bizonyítás:

$$\hat{G} \Psi_i^{(\alpha)} = \sum_\ell G_{\ell i}^{(\alpha)} \Psi_\ell^{(\alpha)}; \qquad \hat{G} \Psi_k^{(\beta)} = \sum_m G_{mk}^{(\beta)} \Psi_m^{(\beta)}$$

$$\hat{G}\left(\psi_i^{(\alpha)}\psi_k^{(\beta)}\right) = \left(\hat{G}\psi_i^{(\alpha)}\right)\left(\hat{G}\psi_k^{(\beta)}\right) = \sum_{l,m} G_{li}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)} \psi_l^{(\alpha)}\psi_m^{(\beta)}$$

A direkt szorzat karaktere:

$$\boxed{\left(\chi^{(\alpha)} \times \chi^{(\beta)}\right)(G)} = \sum_{i,k} \int \left(\psi_i^{(\alpha)}\psi_k^{(\beta)}\right)^* \hat{G} \left(\psi_i^{(\alpha)}\psi_k^{(\beta)}\right) dq =$$

$$= \sum_{i,k,l,m} G_{li}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)} \delta_{il}\delta_{km} = \sum_{i,k} G_{ii}^{(\alpha)} G_{kk}^{(\beta)} =$$

$$= \sum_i G_{ii}^{(\alpha)} \sum_k G_{kk}^{(\beta)} = \boxed{\chi^{(\alpha)}(G)\,\chi^{(\beta)}(G)}$$

Ha két olyan $\psi_1, \psi_2, \dots \psi_f$ és $\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_f$ függvényrendszerünk van, amely ugyanazon irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódik, akkor az f^2 db. $\psi_i \varphi_k$ függvény ezen ábrázolás önmagával való direkt szorzatát valósítja meg; a karakterek:

$$(\chi \times \chi)(G) = [\chi(G)]^2$$

A $\psi_i \varphi_k$ függvényrendszer szétbontható:

$\psi_i \varphi_k + \psi_k \varphi_i$ $\qquad f(f+1)/2$ db. szimmetrikus és

$\psi_i \varphi_k - \psi_k \varphi_i$ $\qquad f(f-1)/2$ db. antiszimmetrikus

kombinációra, melyek csak önmaguk között transzformálódnak és így két alacsonyabb dimenziójú (általában még tovább redukálható) ábrázolást valósítanak meg:

Ábrázolás	Karakter
Szimmetrikus szorzat	$[\chi^2](G)$
Antiszimmetrikus szorzat	$\{\chi^2\}(G)$

Közvetlenül belátható, hogy

$$\boxed{\begin{aligned}[\chi^2](G) &= \frac{1}{2}\left\{[\chi(G)]^2+\chi(G^2)\right\}\\ \{\chi^2\}(G) &= \frac{1}{2}\left\{[\chi(G)]^2-\chi(G^2)\right\}\end{aligned}}$$

Két különböző irreducibilis ábrázolás direkt szorzatának irreducibilis részekre való felbontása csak akkor tartalmazza az egységábrázolást (és ilyenkor pontosan egyszer), ha az összeszorzott ábrázolások egymás komplex konjugáltjai. ⇒ Valós ábrázolások esetén egységábrázolás csak az irreducibilis ábrázolás önmagával vett direkt szorzatában lép fel (annak szimmetrikus részében).

Bizonyítás: $(\chi^{(\alpha)}\times\chi^{(\beta)})(G) = \chi^{(\alpha)}(G)\,\chi^{(\beta)}(G)$

Az egységábrázolás előfordulásainak száma:

$$a^{(A_1)} = \frac{1}{g}\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)\,\underbrace{\chi^{(\beta)}(G)}_{\left[\underbrace{\chi^{(\beta)}(G)^*}_{\chi^{(\beta')}(G)}\right]^*}\,\underbrace{\chi^{(A_1)}(G)^*}_{1} = \delta_{\alpha\beta'}$$

Az egységábrázolás a szimmetrikus szorzatban lép fel, mivel $\sum_i \psi_i\varphi_i$ a szimmetrikus függvényekből állítható elő és bármilyen unitér transzformációval szemben invariáns. –

Két csoport direkt szorzatának irreducibilis ábrázolásai

A csoport $\quad\quad\quad\quad \Psi_i^{(\alpha)}$ bázisfüggvények

B csoport $\quad\quad\quad\quad \Psi_k^{(\beta)}$ bázisfüggvények

$\Downarrow$

A $\Psi_i^{(\alpha)} \Psi_k^{(\beta)}$ szorzatok az $A \times B$ csoport $f_\alpha f_\beta$ dimenziós irreducibilis ábrázolásának bázisfüggvényei lesznek és $\chi(AB) = \chi^{(\alpha)}(A)\,\chi^{(\beta)}(B)$. Az A és B csoport valamennyi irreducibilis ábrázolását ilyen értelemben összeszorozva megkapjuk $A \times B$ összes irreducibilis ábrázolását.

A pontcsoportok irreducibilis ábrázolásai

Jelölés: $\quad$ A, B $\quad$ egydimenziós $\quad\quad$ Mulliken-szimbólumok

E $\quad$ kétdimenziós

F (vagy T) $\quad$ háromdimenziós

A : szimmetrikus
B : antiszimmetrikus
} az n-ed rendű főtengely körüli forgatásokkal szemben

Felső index: $'$ szimmetrikus, $''$ antiszimmetrikus } σ_h-ra

Alsó index: g szimmetrikus, u antiszimmetrikus } I-re (+ sorszám)

Példa karaktertáblára:

C_4		E	C_4	C_2	C_4^3
	S_4	E	S_4	C_2	S_4^3
A; z	A	1	1	1	1
B	B; z	1	-1	1	-1
E; $x \pm iy$	E; $x \pm iy$	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{matrix} i \\ -i \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 \\ -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -i \\ i \end{matrix}$

E : komplex konjugált ábrázolások; fizikailag elfajultak
(ha nincs mágneses tér)

C_4 és S_4 izomorf csoportok

x, y, z : így transzformálódnak a koordináták.

Összesen 11 lényegesen különböző karaktertábla van; ezek

22 egymással részben izomorf pontcsoportot írnak le.
További 10 csoport C_s-sel ill. C_i-vel való direkt
szorzatként áll elő.

Rezgések osztályozása

Rácsrezgések vagy molekularezgések összenergiája:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{k=1}^{f_\alpha} \left(\dot{Q}_k^2 + \omega_\alpha^2 Q_k^2 \right)$$

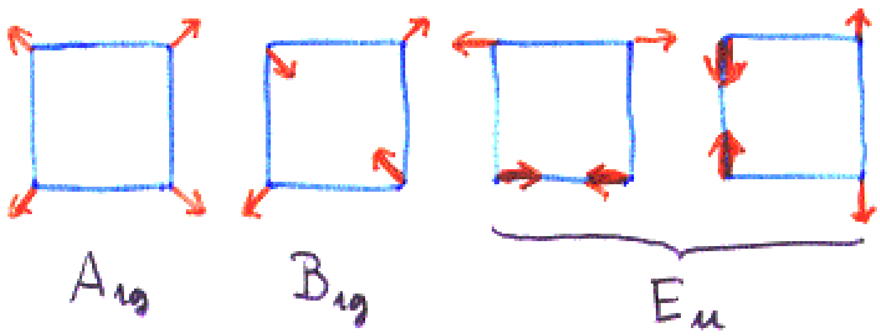
Q_k : normálkoordináták

ω_α f_α-szorosan elfajult normálrezgés

A rendszer szimmetriaoperációi az energiát nem változtatják, ezért Q_k-k csak az elfajult normálrezgések között transzformálódhatnak (előjelváltás megengedett). Ezért Q_k-k a pontcsoport egy ábrázolásának bázisfüggvényei (az elfajult normálrezgések egy irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak).

> Valamennyi rezgés (beleértve a transzlációt és a rotációt is) osztályozható a pontcsoport irreducibilis ábrázolásai szerint.

D_{4h}



N-atomos rendszer 3N szabadsági fokú ⇒ a Q_k-k által meghatározott ábrázolás általában 3N-dimenziós; ezt kell kiredukálni. Ehhez elég a 3N-dimenziós ábrázolás karaktereit meghatározni.

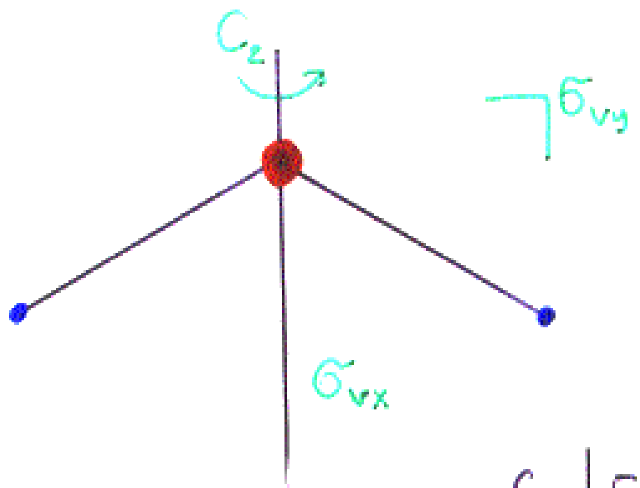
A karakterhez csak a szimmetriaoperáció során helyben maradó atomok adnak járulékot.

$$\boxed{\chi_{3N}(R) = N_c(R) f_R = N_c(R)(\pm 1 + 2\cos\phi)}$$

$\Uparrow$ helyben maradó atomok száma

Ebből az irreducibilis ábrázolások meghatározhatók; a transzláció (vektor: x, y, z) és a rotáció (axiál-vektor: X, Y, Z) kiszűrhető.

Példa: a vízmolekula rezgései



Pontcsoport: C_{2v}

C_{2v}	E	C_2	σ_{vy}	σ_{vx}	
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	−1	−1	Z
B_1	1	−1	1	−1	x, Y
B_2	1	−1	−1	1	y, X

C_{2v}	E	C_2	σ_{vy}	σ_{vx}
f_R	3	-1	1	1
N_c	3	1	1	3
$\chi_{3N}(R)$	9	-1	1	3
Transzláció: $\pm 1 + 2\cos\phi$	3	-1	1	1
Rotáció: $1 \pm 2\cos\phi$	3	-1	-1	-1

$$a^{(A_1)} = \frac{1}{4}\left[9 \cdot 1 + (-1)\cdot 1 + 1 \cdot 1 + 3 \cdot 1\right] = 3$$

$$a^{(A_2)} = \ldots = 1 \; ; \quad a^{(B_1)} = 2 \; ; \quad a^{(B_2)} = 3$$

$$\Gamma_{3N} = 3A_1 + A_2 + 2B_1 + 3B_2$$

De ebből

$$\Gamma_{Tr} = A_1 + B_1 + B_2$$

$$\Gamma_{Rot} = A_2 + B_1 + B_2$$

vagyis

$$\boxed{\Gamma_{vib} = 2A_1 + B_2}$$

Periodikus szerkezetekben (kristályrácsok) új szimmetria-elemek lépnek fel (primitív transzláció, csavartengely, csúszósík), amelyek 230 tércsoportra vezetnek. Az új szimmetriaoperációk azonban minden atomot elmozdítanak, ezért a Γ_{3N} ábrázolás karaktereihez nem adnak járulékot.

A kvantummechanika kiválasztási szabályai

Átmeneti valószínűségek operátorok mátrixelemeit tartalmazzák:

$$O_{\alpha\beta} = \int \psi^{(\beta)*} \hat{O}\, \psi^{(\alpha)}\, dq$$

Valós bázist választva a c.c. elhagyható

Mivel a szimmetriaoperációkkal szemben a rendszer Hamilton-operátora invariáns, az egy energiasajátértékhez tartozó sajátfüggvények egy irreducibilis ábrázolás bázisát alkotják, vagyis a rendszer energiasajátértékei (termjei) osztályozhatók a rendszer szimmetriacsoportjának irreducibilis ábrázolásai szerint.

Közvetlenül belátható, hogy ha $\psi_i^{(\alpha)}$ a G csoport egy $\Gamma^{(\alpha)}$ általában reducibilis ábrázolásának egyik bázisfüggvénye, úgy

$$\int \psi_i^{(\alpha)}\, dq \neq 0$$

akkor és csak akkor, ha $\Gamma^{(\alpha)}$ az egységábrázolás, vagy azt tartalmazza.

$$\int \psi^{(\beta)} \psi^{(\alpha)}\, dq \neq 0$$

akkor és csak akkor, ha $\Gamma^{(\alpha)}$ és $\Gamma^{(\beta)}$ tartalmaznak közös irreducibilis ábrázolást

$$\Uparrow$$

$$\Gamma^{(\beta)} \times \Gamma^{(\alpha)}$$

$$\int \overset{\Gamma^{(\beta)}}{\overset{\downarrow}{\psi^{(\beta)}}}\ \overset{\Gamma^{(0)}}{\overset{\downarrow}{\hat{O}}}\ \overset{\Gamma^{(\alpha)}}{\overset{\downarrow}{\psi^{(\alpha)}}}\, dq \neq 0$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\Gamma^{(\beta)} \times \Gamma^{(0)} \times \Gamma^{(\alpha)}}$$

akkor és csak akkor, ha $\Gamma^{(\beta)} \times \Gamma^{(0)} \times \Gamma^{(\alpha)}$ tartalmazza az egységábrázolást. Ez akkor és csak akkor teljesül, ha $\Gamma^{(\beta)} \times \Gamma^{(0)}$ és $\Gamma^{(\alpha)}$ tartalmaznak közös irreducibilis ábrázolásokat.

<u>Példák</u>

- $\hat{O}$ skalár $\Rightarrow$ $\Gamma^{(0)}$ az egységábrázolás.
  Átmenetek csak azonos irreducibilis ábrázoláshoz tartozó termek között lehetségesek.

- Infravörös abszorpció: $\underline{\hat{O}}$ a dipólusnyomaték (vektor), vagyis komponensei a koordináták irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak (karaktertábla: x, y, z). A $\psi^{(\alpha)}$ kezdőállapot a zérus-fonon állapot (skalár) $\Rightarrow$ $\Gamma^{(\alpha)}$ az egységábrázolás. Átmenet a $\psi^{(\beta)}$ egy-fonon állapotba akkor van, ha a fonon irreducibilis ábrázolása legalább az egyik koordináta irreducibilis ábrázolásával megegyezik.

- Raman-szórás: $\underline{\underline{\hat{O}}}$ szimmetrikus tenzor. Ennek elemei úgy transzformálódnak, mint a koordináták szimmetrikus szorzatai.
  $$\underbrace{[\chi^2](G)}_{\text{szim. tenzor}} = \frac{1}{2}\left\{[\underbrace{\chi(G)}_{\text{vektor}}]^2 + \chi(G^2)\right\}$$

C_{2v} szimmetria esetén:

	E	C_2	σ_{vy}	σ_{vx}
$\chi(G)$	3	-1	1	1
$[\chi(G)]^2$	9	1	1	1
G^2	E	E	E	E
$\chi(G^2)$	3	3	3	3
$[\chi^2](G)$	6	2	2	2

$$\Downarrow$$

$$\Gamma^{(0)} = 3A_1 + A_2 + B_1 + B_2$$

Ha a kezdőállapot 0-fonon állapot, akkor valamennyi fonon-módusba van átmenet, vagyis mind Raman-aktív.