

C_{3v} 和 C_{4v} 金属纳米多颗粒-薄膜系统的 Fano 共振光谱的群论

李梦君¹ 李小明²

¹南开大学电子信息与光学工程学院现代光学研究所, 天津 300071

²深圳大学纳米光子学研究中心, 光电工程学院光电子器件与系统教育部/广东省重点实验室, 广东 深圳 518060

摘要 针对 C_{3v} 和 C_{4v} 对称构型金属纳米多颗粒-薄膜系统的 Fano 共振光谱低谷的产生机理, 运用群论的方法给出了详细的推导。在前期研究成果的基础上, 分析证实了当线偏振光电场沿多颗粒所在平面入射时, C_{nv} 对称构型多颗粒-薄膜系统共有 4 个满足相同不可约表示的 E 模式: 在多颗粒所在平面内只有 3 个局域表面等离激元电偶极矩共振对称模式, 其中 2 个模式位于外围环形多颗粒中, 中心颗粒单独具有 1 个模式, 这与 D_{nh} 对称构型多颗粒系统的电偶极矩分布完全相同; 另外 1 个模式虽满足对称性相同的要求, 但其电偶极矩的方向垂直于多颗粒所在的平面。 C_{nv} 点群和 D_{nh} 点群虽然具有相同的光谱线型, 但是薄膜基底的存在会使光谱谷(峰)产生一定的红移或蓝移, 这就为设计金属纳米多颗粒-薄膜系统的光学性质及其广泛应用提供了一定的参考。

关键词 表面光学; 表面等离激元共振光谱; 金属纳米多颗粒-薄膜系统; 群论; Fano 共振光谱低谷; 光谱红(蓝)移

中图分类号 O433.4 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201636.1024001

Group Theory of Fano Resonance Spectra in System of C_{3v} and C_{4v} Metallic Multi-Nanoparticles-Thin Film

Li Mengjun¹ Li Xiaoming²

¹ Institute of Modern Optics, College of Electronic Information and Optical Engineering,
Nankai University, Tianjin 300071, China

² Nanophotonics Research Centre, Key Laboratory of Optoelectronic Devices and Systems of Ministry of
Education and Guangdong Province, College of Optoelectronic Engineering,
Shenzhen University, Shenzhen, Guangdong 518060, China

Abstract The mechanism of Fano resonance spectrum dip resulting from the system of symmetric metallic multi-nanoparticles-thin film belonging to C_{3v} and C_{4v} is deduced in detail using group theory. Based on previous research achievements, it is verified that there are only four E modes meet with the same irreducible representation in the system of C_{nv} symmetric multi-particles-thin film, when the linearly polarized light electric field inputs along the multi-particles plane. There are only three local surface plasmon electric dipole moment resonance symmetry modes in the multi-particles plane, and among them, the periphery ring-multiparticles own two, the central particle own one. These results are completely the same with electric dipole moment distribution of D_{nh} symmetry multiparticles system. The direction of the electric dipolar moments of the rest one is perpendicular to the multi-particles plane although it satisfies the requirement of the same symmetry. In addition, C_{nv} and D_{nh} point groups hold the same spectrum linetype, however, there is some redshift or blueshift of spectrum dip (peak) if the thin film base exists. This work can provide some references for designing the optical properties and its extended applications about the system of metallic multi-nanoparticles-thin film.

Key words optics at surfaces; surface plasmon resonance spectrum; metallic multi-nanoparticles-thin film system; group theory; Fano resonance spectral dip; spectral red (blue) shift

OCIS codes 240.0310; 300.6170; 310.6188; 300.6250

收稿日期: 2016-03-30; 收到修改稿日期: 2016-06-06

作者简介: 李梦君(1986—), 女, 博士研究生, 主要从事微纳光学方面的研究。E-mail: aiwomengjun123@126.com

1 引 言

表面等离激元(SPP)自提出以来一直受到人们的关注^[1],SPP 以其独特的光学性质和广泛的实际应用成为近十几年来人们研究的热点之一,涌现出了大量的理论、模拟和实验性的研究成果^[2-18]。基于金属纳米颗粒的局域表面等离激元(LSPP)由于其光学性质的可控性和对外界环境的超敏感性,逐渐成为人们研究 SPP 的焦点,这使得 LSPP 被广泛应用于表面增强拉曼光谱^[19-20]、光捕获^[21]、化学生物传感^[22-23]以及医疗应用^[24]等领域。其中,金属纳米颗粒-薄膜系统的光学性质引起了人们极大的研究兴趣^[25-26],从较早的 Aravind P K 等^[27]、Holland W R 等^[28]以及 Stuart H R 等^[29]的研究到近年来人们在理论^[4-5,30-32]和模拟实验^[33-34]上都取得了重要的研究成果。对于金属纳米单颗粒-薄膜系统,已经有了相当成熟的理论及实验结果,而有关金属纳米多颗粒-薄膜系统的研究则大部分集中在模拟和实验上,已有的理论成果大多以 SPP 杂化和离散电偶极耦合理论为出发点,但其数学计算过程有一定的繁杂性。

Fano 共振自 1961 年由 Fano 首次提出以来,人们对 Fano 共振的产生机理和广泛应用的研究从未间断过^[35],Fano 共振的概念也由最早的物理领域中的量子系统逐渐扩展到 SPP 纳米颗粒系统(包括对称构型的、引入对称性破缺的、有基底的以及无基底的等离激元超分子^[36]系统)、光子晶体以及电磁超材料等领域。其中,具有对称构型的等离激元超分子系统的 Fano 共振光谱低谷吸引了人们越来越多的关注^[23,37]。关于 Fano 共振光谱低谷的来源,普遍认可的观点为宽频超辐射亮模式和窄频低辐射暗模式之间的耦合,而近几年来也有研究者提出了不同的解释视角^[38-39],这里认为不同的解释视角是来源于由不同方法构建的不同共振模式的基矢量。

将群论应用于等离激元超分子系统的研究已有 10 年之久,群论以其简单、直观和易懂的优点在 SPP 的研究中得到了广泛的应用。文献[11]中,作者阐述了如何应用群论从由原子轨道构建分子轨道的原理出发,利用单个纳米颗粒的 SPP 模式构建具有对称构型的多颗粒 SPP 模式,但该文献中未涉及到具有中心颗粒和基底的情况;而文献[40]非常详细地介绍了如何利用分子点群特征标表由单个纳米柱体等离激元模式构建满足不同对称性要求的多柱体等离激元模式,并将该方法应用到多柱体阵列当中;文献[36]则利用群论对具有中心颗粒的对称多颗粒系统的子群分解及 Fano 共振低谷光谱进行了解释说明。本文在文献[36]的基础上,考虑基底对等离激元超分子系统光谱的影响,运用群论的方法给出详细的推导过程,总结出对金属纳米多颗粒-薄膜系统 Fano 共振光谱低谷更统一的认识。

2 运用群论研究金属纳米多颗粒-薄膜系统的基本原理

位于薄膜基底上的具有对称构型的金属纳米多颗粒系统如图 1 所示,圆柱颗粒的半径为 70 nm、高为 60 nm,颗粒间距为 20 nm。四、五颗粒系统分别属于群论中的 C_{3v} 和 C_{4v} 点群,运用文献[36]中的(2)式,分别得到四、五颗粒系统的不可约分解为:

$$\Gamma_{\text{four}} = 3A_1 + A_2 + 4E, \quad (1)$$

$$\Gamma_{\text{five}} = 3A_1 + A_2 + B_1 + 2B_2 + 4E. \quad (2)$$

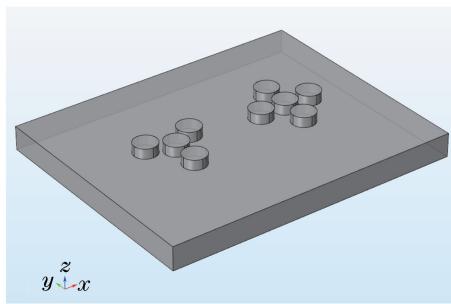


图 1 金属纳米多颗粒-薄膜系统

Fig. 1 Metallic multi-nanoparticles-thin film system

考虑四、五颗粒系统在沿 x 或 y 方向线偏振光激发下的共振光谱,即要求 LSPP 电偶极矩 \mathbf{P} 和外激发电场满足 $\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} \neq 0$,以群论的语言来描述即 LSPP 电偶极矩和外激发电场有相同的不可约表示:

$$\Gamma_p = \Gamma_E, \quad (3)$$

由于外激发电场沿 x 或 y 方向, 即有 $\Gamma_E = \Gamma_{xy}$, 2 种多颗粒系统不可约表示的基为 x 或 y 的都是二维不可约表示 E , 所以有:

$$\Gamma_p = \Gamma_E = \Gamma_{xy} = E, \quad (4)$$

由(1)式和(2)式可知, 位于薄膜基底上的四、五颗粒系统都有 4 个二维简并的 LSPP 电偶极矩共振模式 E 。

文献[11]指出, 在 x 、 y 平面内, 由 D_{3h} 和 D_{4h} 点群得出的对称性 LSPP 电偶极矩分布同样适用于 C_{3v} 和 C_{4v} 点群, 由于 C 点群相对于 D 点群缺少水平反射镜面这一对称操作群元素, 这将导致 C 点群位于 x 、 y 平面外的 LSPP 电偶极矩分布与 x 、 y 平面内的 LSPP 电偶极矩分布具有相同的不可约表示 E , 这就意味着有位于 x 、 y 平面外的 LSPP 电偶极矩分布将不再属于偶极禁戒, 且与外激发电场具有一定的相互作用。另外, 由文献[36]中的结果可以看到, 属于 D 点群的四、五颗粒在 x 、 y 平面内只有 3 个二维简并的 LSPP 电偶极矩共振对称模式 E' 或 E_u , 外围颗粒有 2 个, 中心颗粒具有 1 个独立的与外围颗粒相同的共振对称模式。因此, 四、五颗粒系统在 x 、 y 平面内也只有 3 种二维简并 E' 或 E_u 模式的 LSPP 电偶极矩分布, 另外 1 种虽具有满足不可约表示 E 模式对称性要求的 LSPP 电偶极矩分布, 但电偶极矩方向沿 z 方向, 与外激发电场方向垂直, 故不进行讨论。图 2 所示为 C_{3v} 和 C_{4v} 点群相应的对称性纳米颗粒集合的 LSPP 电偶极矩共振对称模式, 其中模式(a)、(b)和(c)的电偶极矩方向位于 x 、 y 平面内(以二维图显示), 模式(d)的电偶极矩方向位于 z 平面内(以三维图显示)。模式(a)、(b)中箭头的长短表示电偶极矩的大小; 模式(c)用了另外一种箭头以示和外围颗粒电偶极矩的区别; 模式(d)中, 外围单向红色箭头的长短表示电偶极矩的大小, 中心双向红色箭头表示电偶极矩大小和方向的不确定性。

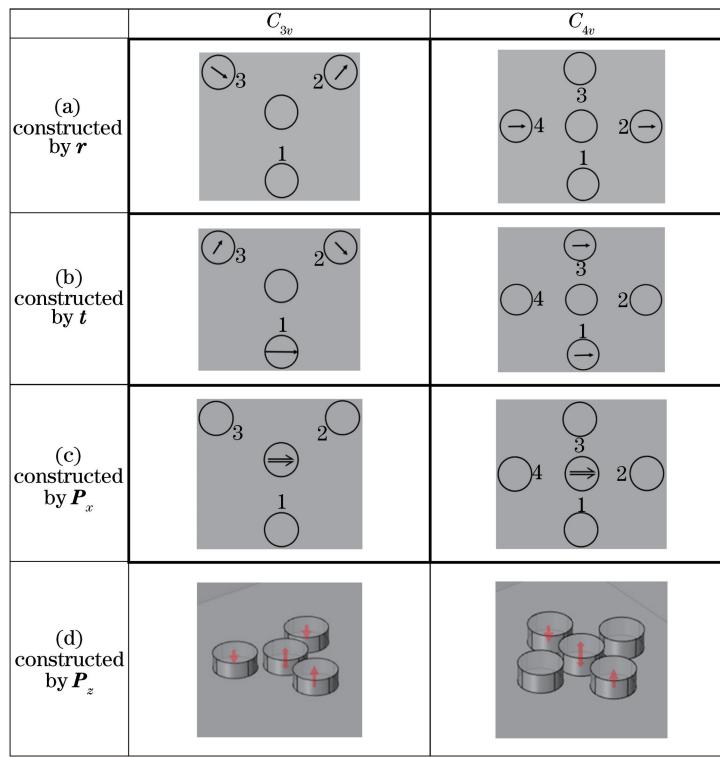


图 2 C_{3v} 和 C_{4v} 多颗粒 LSPP 电偶极矩共振对称模式示意图。(a)由径向向量 r 构建;(b)由角向向量 t 构建;(c)中心颗粒单独具有的模式;(d)由沿 z 方向的 LSPP 电偶极矩构建

Fig. 2 Schematic of LSPP electric dipole moment resonance symmetric modes for C_{3v} and C_{4v} multi-particles.

- (a) Built from radial vector r ;
- (b) built from angular vector t ;
- (c) only one mode belonging to center particle;
- (d) built by LSPP electric dipole moments along with z direction

3 对金属纳米多颗粒-薄膜系统中 Fano 共振的分析与讨论

图 3(a)修改自文献[41],图 3(b)和(c)修改自文献[37]。图 4、图 5 所示为四、五颗粒模型及位于薄膜基底上的四、五颗粒的电场强度分布。图 4(a)和(b)为四颗粒模型的场强分布,图 4(c)和(d)为薄膜基底上的四颗粒场强分布。由图 4 可以看到,在(b)、(d)中即长波长(850 nm)的激发下,2 种四颗粒的电场强度分布几乎完全相同,均可由图 2 中(a)模式和(c)模式线性叠加而成,从图中强度的大小可知,无基底的叠加系数要比有基底存在时的叠加系数大;在图 4(a)、(c)中,即短波长(650 nm)的激发下,2 种四颗粒的电场强度分布也比较相符,均可由图 2 中(a)模式、(b)模式和(c)模式线性叠加而成,由文献[36]可知,在外激发电场沿 x 方向时,只能是(a)模式的系数为负,其他的均为正,从图中强度的大小可知,假设在(b)模式叠加系数一定的情况下,无基底的(a)模式的叠加系数的绝对值要比有基底存在时的大,而有基底存在时的(c)模式的叠加系数要比无基底时的小得多。图 4(c)、图 4(d)、图 5(c)、图 5(d)均修改自文献[37]。对于图 5 的解释方法与图 4 的相同,这里不再赘述。

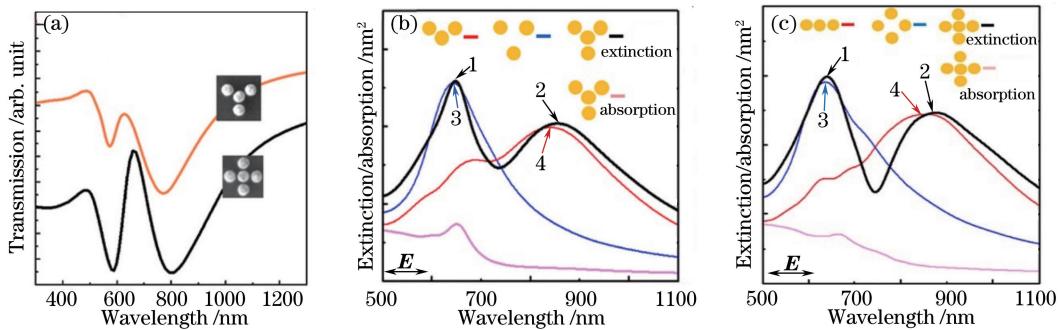


图 3 (a) 无基底存在时四、五颗粒系统的模拟透射光谱;为有基底存在时(a)四、(b)五颗粒系统的模拟消光光谱

Fig. 3 (a) Simulated transmitted spectrum of four and five particles system without substrate;
extinction spectrum of (a) four and (b) five particles system with substrate

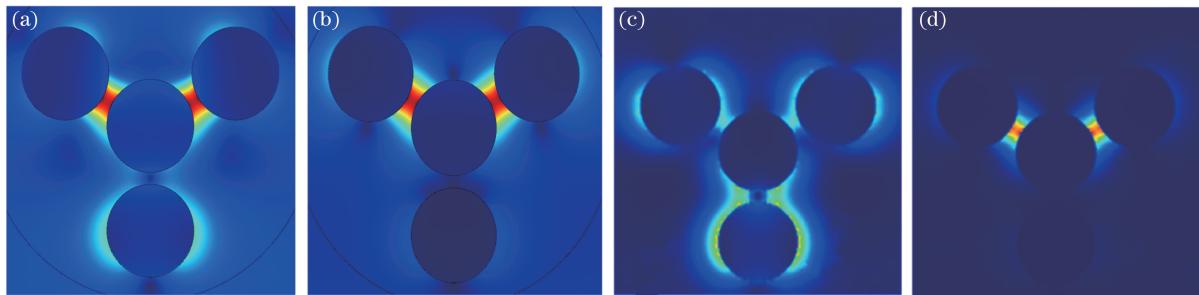


图 4 不同激发波长下的四颗粒模型电场强度分布。(a) 650 nm, 无基底;
(b) 850 nm, 无基底;(c) 650 nm, 有基底;(d) 850 nm, 有基底

Fig. 4 Electric field intensity distributions with different exciting wavelengths about model of four particles.

(a) 650 nm, without substrate; (b) 850 nm, without substrate; (c) 650 nm, with substrate; (d) 850 nm, with substrate

由以上的分析可知,位于薄膜基底上的四、五颗粒系统的 Fano 共振光谱可以由文献[36]中无基底的四、五颗粒模型来分析,即外激发电场在 x 、 y 平面内时,实际激发的 LSPP 电偶极矩模式一定是图 2 中(a)、(b)和(c)3 种基本共振对称模式的线性叠加,但其叠加系数无法由群论给出,必须通过理论计算或实验结果来确定;其 Fano 共振光谱低谷亦来源于位于 x 、 y 平面内的包含共同正交基矢量[(a)模式]的相邻模式干涉相消[(a)模式的系数为负]。

此外,由图 3 可以看到,有、无基底的 2 种类型多颗粒的 Fano 共振光谱线型基本相同。对于四颗粒情况,无基底存在时,谱谷激发波长为 560 nm 和 760 nm;有基底存在时,谱峰激发波长为 650 nm 和 850 nm。对于五颗粒情况,无基底存在时,谱谷激发波长为 580 nm 和 800 nm;有基底存在时,谱峰激发波长为 640 nm 和 880 nm。由此可知,对于有、无基底存在的相同多颗粒系统,2 者都具有相似的光谱线型,主要不同点在于有薄膜基底存在时,谱线低谷(或峰)的位置(即外激发波长)相对于无基底时会有不同程度的红移

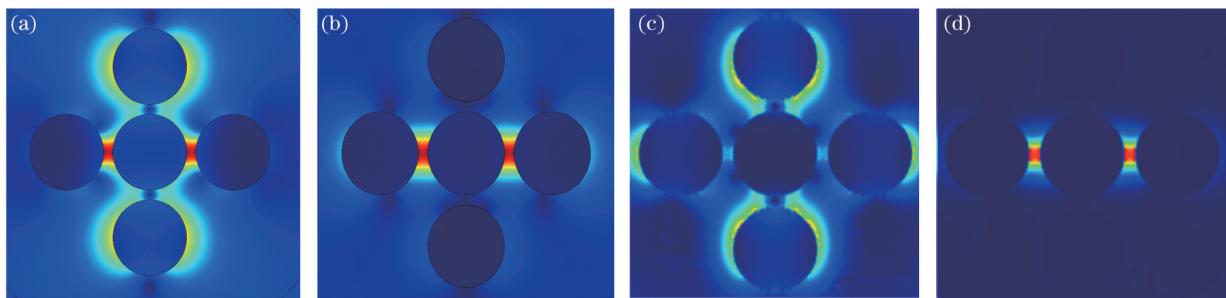


图 5 不同激发波长下的五颗粒模型电场强度分布。(a) 640 nm, 无基底;
(b) 880 nm, 无基底;(c) 640 nm, 有基底;(d) 880 nm, 有基底

Fig. 5 Electric field intensity distributions with different exciting wavelengths about model of five particles.

(a) 640 nm, without substrate; (b) 880 nm, without substrate; (c) 640 nm, with substrate; (d) 880 nm, with substrate
(或蓝移^[4]),四颗粒的红移量都为 90 nm,五颗粒的红移量都为 80 nm,位移量的多少无法由群论来确定,须根据基底的具体参数来给出。

4 结 论

运用群论的方法对薄膜基底上具有对称构型的金属纳米多颗粒的 Fano 共振低谷光谱线型进行了详细的解释说明,这种方法的分析过程简单、直观且易懂,具有一定的普适性。金属纳米多颗粒-薄膜系统相对于文献[36]中的金属纳米多颗粒模型具有更多的可控因素来实现对 Fano 共振光谱线型的设计和控制,除 2 者共有的对多颗粒形状、尺寸、材料和对称性的设计等因素之外,还包括薄膜基底的几何尺寸、结构、材料以及颗粒和基底之间的距离等,这就为金属纳米多颗粒-薄膜系统应用于光学设计、光电传感以及生物医学领域提供了更广阔的思路和更有力的条件。对于这样的方法过程是否普遍适用于属于 C_{nv} 点群多颗粒-薄膜系统 Fano 共振光谱的分析、红移(蓝移)与多颗粒对称性以及薄膜基底参量的具体关系还有待进一步的研究。

参 考 文 献

- 1 Halas N J. Plasmonics: an emerging field fostered by nano letters[J]. Nano Lett, 2010, 10(10): 3816-3822.
- 2 Prodan E, Nordlander P. Plasmon hybridization in spherical nanoparticles[J]. J Chem Phys, 2004, 120(11): 5444-5454.
- 3 Nordlander P, Oubre C, Prodan E, et al. Plasmon hybridization in nanoparticle dimers[J]. Nano Lett, 2004, 4(5): 899-903.
- 4 Nordlander P, Prodan E. Plasmon hybridization in nanoparticles near metallic surfaces[J]. Nano Lett, 2004, 4(11): 2209-2213.
- 5 Papanikolaou N. Optical properties of metallic nanoparticle arrays on a thin metallic film[J]. Phys Rev B, 2007, 75(23): 235426.
- 6 Chen J, Ng J, Ding K, et al. Negative optical torque[J]. Sci Rep, 2014, 4: 6386.
- 7 Kale M J, Christopher P. Plasmons at the interface[J]. Science, 2015, 349(6284): 587-588.
- 8 Tame M S, Mcenery K R, Ozdemir S K, et al. Quantum plasmonics[J]. Nature Phys, 2013, 9: 329-340.
- 9 Yu Jie, Zhang Junxi, Zhang Lide, et al. Surface plasmonic micropolarizers based on Ag nanorod arrays[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(7): 0723001.
- 于杰, 张俊喜, 张立德, 等. 基于 Ag 纳米棒阵列的表面等离激元微型偏振器[J]. 光学学报, 2014, 34(7): 0723001.
- 10 Li X M, Fang H, Weng X Y, et al. Electronic spill-out induced spectral broadening in quantum hydrodynamic nanoplasmatics[J]. Opt Express, 2015, 23(23): 29738-29745.
- 11 Brandl D W, Mirin N A, Nordlander P. Plasmon modes of nanosphere trimmers and quadrupoles[J]. J Phys Chem B, 2006, 110(25): 12302-12310.
- 12 Chuntonov L, Haran G. Trimeric plasmonic molecules: the role of symmetry[J]. Nano Lett, 2011, 11(6): 2440-2445.
- 13 Hopkins B, Liu W, Miroshnichenko A E, et al. Optically isotropic responses induced by discrete rotational symmetry of nanoparticle clusters[J]. Nanoscale, 2013, 5(14): 6395-6403.
- 14 Huang Yunhuan, Xue Baoping. Research of multiple Fano resonances in plasmonic octamer clusters [J]. Laser &

- Optoelectronics Progress, 2015, 52(6): 062401.
- 黄运欢, 薛保平. 等离子体八聚体中多重法诺共振现象的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(6): 062401.
- 15 Lei D Y, Fernandez-Dominguez A I, Sonnenaud Y, et al. Revealing plasmonic gap modes in particle-on-film systems using dark-field-spectroscopy[J]. ACS Nano, 2012, 6(2): 1380-1386.
- 16 Fan J A, Bao K, Lassiter J B, et al. Near-normal incidence dark-field microscopy: applications to nanoplasmonic spectroscopy[J]. Nano Lett, 2012, 12(6): 2817-2821.
- 17 Shafiei F, Monticone F, Le K Q, et al. A subwavelength plasmonic metamolecule exhibiting magnetic-based optical Fano resonance[J]. Nature Nanotech, 2013, 8: 95-99.
- 18 Wang Yue, Wang Xuan, Li Longwei. Properties of light trapping of thin film solar cell based on surface plasmon polaritons[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(9): 092401.
- 王 玥, 王 暄, 李龙威. 基于表面等离激元薄膜太阳能电池陷光特性的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(9): 092401.
- 19 Kneipp K, Kneipp H, Itzkan I, et al. Cheminform abstract: Ultrasensitive chemical analysis by Raman spectroscopy[J]. Chem Rev, 1999, 99(10): 2957-2976.
- 20 Zhang W H, Fischer H, Schmid T, et al. Mode-selective surface-enhanced Raman spectroscopy using nanofabricated plasmonic dipole antennas[J]. J Phys Chem C, 2009, 113(33): 14672-14675.
- 21 Nishijima Y, Rosa L, Juodkazis S. Surface plasmon resonances in periodic and random patterns of gold nano-disks for broadband light harvesting[J]. Opt Express, 2012, 20(10):11466-11477.
- 22 Anker J N, Hall W P, Lyandres O, et al. Biosensing with plasmonic nanosensors[J]. Nature Materi, 2008, 7(6): 442-453.
- 23 Halas N J, Lal S, Chang W S, et al. Plasmons in strongly coupled metallic nanostructures[J]. Chem Rev, 2011, 111(6): 3913-3961.
- 24 Hirsch L R, Stafford R J, Bankson J A, et al. Nanoshell-mediated near-infrared thermal therapy of tumors under magnetic resonance guidance[J]. PNAS, 2003, 100(23): 13549-13554.
- 25 Yan B, Boriskina S V, Reinhard B M. Design and implementation of noble metal nanoparticle cluster arrays for plasmon enhanced biosensing[J]. J Phy Chem C Nanometer Interfaces, 2011, 115(50): 24437-24453.
- 26 Thomas M, Pierre-Michel A, Gaetan L. Coupling between plasmonic films and nanostructures: from basics to applications[J]. Nanophoto, 2015, 4(3): 361-382.
- 27 Aravind P K, Metiu H. The effects of the interaction between resonances in the electromagnetic response of a sphere-plane structure: applications to surface enhanced spectroscopy[J]. Surface Science, 1983, 124(2-3): 506-528.
- 28 Holland W R, Hall D G. Frequency shifts of an electric-dipole resonance near a conducting surface[J]. Phys Rev Lett, 1984, 52(19): 1041-1044.
- 29 Stuart H R, Hall D G. Enhanced dipole-dipole interaction between elementary radiators near a surface[J]. Phys Rev Lett, 1998, 80(25): 5663-5666.
- 30 de Garcia Abajo F J. Colloquium: light scattering by particle and hole arrays[J]. Rev Mod Phys, 2007, 79(4): 1267-1290.
- 31 Vernon K C, Funston A M, Novo C, et al. Influence of particle-substrate interaction on localized plasmon resonances[J]. Nano Lett, 2010, 10(6): 2080-2086.
- 32 Campione S, Guclu C, Ragan R, et al. Enhanced magnetic and electric fields via Fano resonances in metasurfaces of circular clusters of plasmonic nanoparticles[J]. ACS Photonics, 2014, 1(3): 254-260.
- 33 Gilbertson A M, Francescato Y, Roschuk T, et al. Plasmon-induced optical anisotropy in hybrid grapheme-metal nanoparticle systems[J]. Nano Lett, 2015, 15(5): 3458-3464.
- 34 Nicolas R, Leveque G, Marae-Djouda J, et al. Plasmonic mode interferences and Fano resonances in metal-insulator-metal nanostructured interface[J]. Sci Rep, 2015, 5: 14419.
- 35 Lukyanchuk B, Zheludev N I, Maier S A, et al. The Fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials[J]. Nature Materi, 2010, 9: 707-715.
- 36 Li Mengjun, Fang Hui, Li Xiaoming, et al. Subgroup decomposition analyses of D_{3h} and D_{4h} plasmonic metamolecule Fano resonance spectrum[J]. Acta Physica Sinica, 2016, 65(5): 057302.
- 李梦君, 方 晖, 李小明, 等. D_{3h} 和 D_{4h} 等离激元超分子的 Fano 共振光谱的子集合分解解释[J]. 物理学报, 2016, 65(5): 057302.
- 37 Rahmani M, Lei D Y, Giannini V, et al. Subgroup decomposition of plasmonic resonances in hybrid oligomers: modeling

- the resonance lineshape[J]. Nano Lett, 2012, 12(4): 2101-2106.
- 38 Frimmer M, Coenen T, Koenderink A F. Signature of a Fano resonance in a plasmonic metamolecule's local density of optical states[J]. Phys Rev Lett, 2012, 108(7): 077404.
- 39 Hopkins B, Poddubny A N, Miroshnichenko A E, et al. Revisiting the physics of Fano resonances for nanoparticle oligomers[J]. Phys Rev A, 2013, 88(5): 053819.
- 40 Gomez D E, Vernon K C, Davis T J. Symmetry effects on the optical coupling between plasmonic nanoparticles with applications to hierarchical structures[J]. Phys Rev B, 2010, 81(7): 075414.
- 41 Rahmani M, Lukiyanchuk B, Tahmasebi T, et al. Polarization-controlled spatial localization of near-field energy in planar symmetric coupled oligomers[J]. Appl Phys A, 2012, 107(1): 23-30.

附录：

表 1 C_{3v} 特征标表

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_1	1	1	1		
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

表 2 C_{4v} 特征标表

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_1	1	1	1	1	1		
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	(xz, yz)