

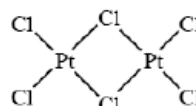
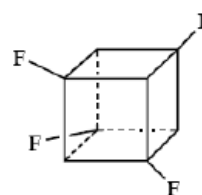
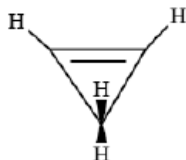
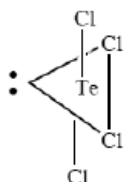
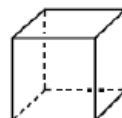
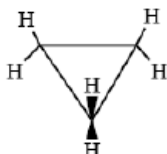
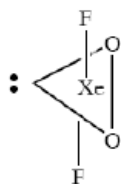
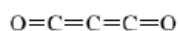
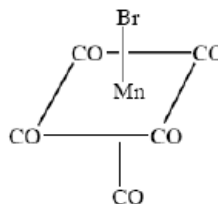
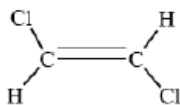
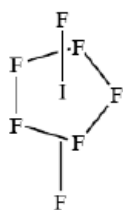
ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (XHM-048)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Ομάδα ασκήσεων 6 : Μοριακή συμμετρία (ομάδες συμμετρίας, δονητική φασματοσκοπία)

1. Με τη βοήθεια διανυσμάτων μετατόπισης να σχεδιάσετε σε κλίμακα τις σχετικές κινήσεις των ατόμων (λαμβάνοντας υπόψη τη μάζα κάθε ατόμου) που αντιστοιχούν στους κανονικούς τρόπους δόνησης συμμετρικής και ασύμμετρης τάσης στα μόρια H_2O , N_2O , F_2O . Από τη βιβλιογραφία να βρείτε την τιμή της συχνότητας για κάθε τρόπο δόνησης και στα τρία μόρια. Υπόδειξη: Θα χρειαστεί να βρείτε τη γωνία δεσμών στα μόρια (να αναφέρετε την πηγή πληροφορίας σας).
2. Να αναφέρετε τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας C_{2h} και να καταρτίσετε τους αντίστοιχους πίνακες πολλαπλασιασμού δείχνοντας γραφικά το αποτέλεσμα των πράξεων συμμετρίας σε κατάλληλο μόριο συμμετρίας C_{2h} . Υπόδειξη: Να ακολουθήσετε το παράδειγμα του H_2O , όπως αυτό παρουσιάστηκε στο μάθημα και παρατίθεται στις διαφάνειες.
3. Να αναφέρετε όλες τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας D_{3h} και να καταρτίσετε τους αντίστοιχους πίνακες πολλαπλασιασμού δείχνοντας γραφικά το αποτέλεσμα των πράξεων συμμετρίας. Υπόδειξη: Να επιλέξετε ως μόριο το BF_3 και να εργαστείτε όπως στο παράδειγμα του H_2O , που παρουσιάστηκε στο μάθημα και παρατίθεται στις διαφάνειες.
4. Χρησιμοποιώντας το μόριο της φορμαλδεΐδης (H_2CO) ως βάση να προσδιορίσετε τους πίνακες αναπαράστασης της αντίστοιχης ομάδας συμμετρίας
 - α) λαμβάνοντας υπόψη τα 4 άτομα του μορίου (υπόδειξη: να διακρίνετε τα H σε H_a και H_b - προκύπτουν πίνακες 4×4) και
 - β) λαμβάνοντας υπόψη τις καρτεσιανές συντεταγμένες x,y,z, κάθε ατόμου (προκύπτουν πίνακες 12×12).
 - γ) με βάση τους πίνακες 12×12 να προσδιορίσετε τα αποτελέσματα των πράξεων: C_{2v} , σ_v .
5. Να σχεδιάσετε τη δομή στο χώρο και να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας για τα ακόλουθα μόρια : NH_3 (πυραμιδικό), BF_3 (επίπεδο), PtCl_4 (επίπεδο), ο-φαινανθρολίνη, πυριδίνη, φουράνιο, φορμαλδεΐδη, κυκλοπροπένιο, κυκλο-προπάνιο, ανθρακένιο, ορθο/μετα/παρα-διχλωροβενζόλιο.
6. Να προτείνετε μόρια με ομάδα συμμετρίας : C_{2h} , D_{3h} , C_{4v} , D_{5h} , C_s , D_{4h} , O_h , T_d . Σε κάθε περίπτωση να δείξετε τα σχετικά στοιχεία συμμετρίας.
7. Να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας σημείου του βενζολίου (C_6H_6), του $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}$ και όλων των δυνατών ισομερών των τρι-υποκατεστημένων παραγώγων του βενζολίου $\text{C}_6\text{H}_3\text{X}_3$ και $\text{C}_6\text{H}_3\text{X}_2\text{Y}$ ($\text{X} \neq \text{Y}$). Πόσοι κανονικοί τρόποι δόνησης υπάρχουν στα μόρια αυτά;
8. Να χρησιμοποιήσετε τις ιδιότητες συμμετρίας για να προσδιορίσετε αν το ολοκλήρωμα $\langle p_z | z | p_y \rangle$ έχει τιμή 0 σε μόριο συμμετρίας C_{4v} .
9. Έστω μόριο του γενικού μοριακού τύπου AX_4 (4 δεσμοί A-X). Να προτείνετε έξι (6) πιθανές δομές που αντιστοιχούν σε ομάδα συμμετρίας σημείου βαθμού (τάξης) $h \geq 4$. Να θεωρήσετε και την περίπτωση στην οποία τα άτομα X δεν είναι κατ' ανάγκην ίδια.
10. Να θεωρήσετε παράγωγα του οκταεδρικού μορίου AX_6 (O_h) της μορφής AX_5Z , AX_4Z_2 και AX_3Z_3 και αφού σχεδιάσετε τις πιθανές δομές να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας καθεμιάς.

11. Να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας για τα ακόλουθα μόρια :



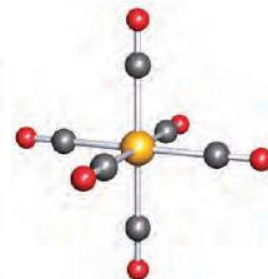
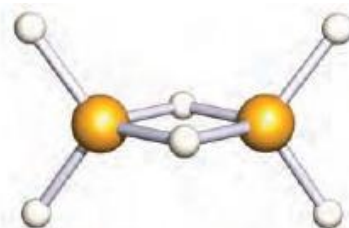
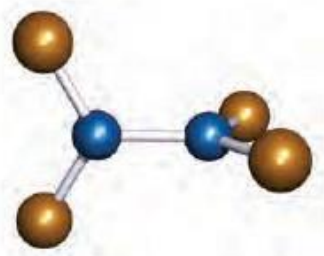
12. Να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας για τα ακόλουθα μόρια :

α) B_2Br_4

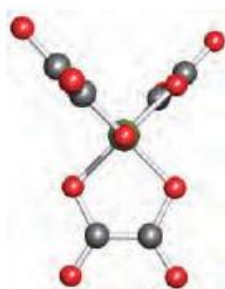
β) B_2F_4 (επίπεδο μόριο),

γ) Ga_2H_6

δ) $W(CO)_6$



13. Να προσδιορίσετε την ομάδα συμμετρίας για το ανιόν $[Fe(C_2O_4)_3]^{3-}$ του οποίου η δομή στο χώρο δίνεται στη συνέχεια (C_2O_4 :οξαλικό ανιόν. Η δομή στα δεξιά παρουσιάζεται κατά μήκος των δεσμών O-Fe-O).

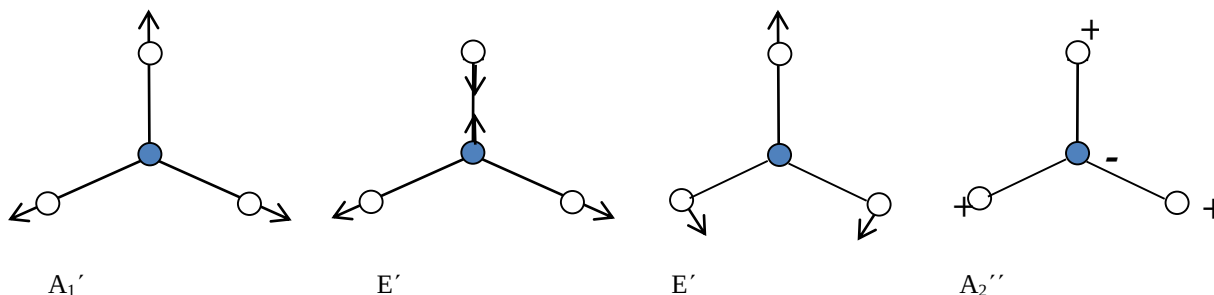


14. Να προσδιορισθεί ο αριθμός και να παρασταθούν σχηματικά οι τρόποι δόνησης (normal modes) των μορίων HBr, OCS (γραμμικό), SO_2 (μη γραμμικό), CO, CO_2 , H_2O .

15. Να προσδιορίσετε τη συμμετρία (ΜΑΠ) των κανονικών τρόπων δόνησης του αιθυλενίου (C_2H_4). Ποιοι είναι ενεργοί όσον αφορά σε δονητικές μεταβάσεις απορρόφησης στο IR και σκέδασης Raman;

Δ. Άγγλος (anglos@uoc.gr)

16. Να προσδιορίσετε τη συμμετρία (ΜΑΠ) των κανονικών τρόπων δόνησης του CCl_4 .
- Ποιοι είναι ενεργοί όσον αφορά σε δονητικές μεταβάσεις απορρόφησης στο IR και σκέδασης Raman;
 - Ποια είναι η συμμετρία καθεμιάς από τις ταινίες που παρατηρούμε στο φάσμα Raman του CCl_4 , που παρουσιάζεται στις διαφάνειες του μαθήματος; Να αιτιολογήσετε ή να αναφέρετε πηγή βιβλιογραφίας από την οποία αντλήσατε την πληροφορία.
17. Να θεωρήσετε το μόριο N_2F_2 σε cis και trans γεωμετρία. Να προσδιορίσετε την αντίστοιχη ομάδα συμμετρίας και στη συνέχεια τη συμμετρία (ΜΑΠ) των κανονικών τρόπων δόνησης του μορίου στις δύο περιπτώσεις. Να υποδείξετε ποιοι τρόποι δόνησης είναι ενεργοί όσον αφορά σε δονητικές μεταβάσεις απορρόφησης στο IR και σκέδασης Raman. Στη συνέχεια να θεωρήσετε την τάση του δεσμού NF, την τάση του δεσμού NN και την κάμψη της γωνίας NNF και να εκφράσετε τις αντίστοιχες αναπαραστάσεις (Γ_{NN} , Γ_{NF} , Γ_{NNF}) ως συνάρτηση των ΜΑΠ της αντίστοιχης ομάδας συμμετρίας. Με βάση αυτήν την ανάλυση είναι δυνατό να προσδιοριστεί ποιοι τρόποι δόνησης περιορίζονται στο επίπεδο του μορίου (in-plane) και ποιοι εκτός του επιπέδου (out-of-plane).
18. α) Να προσδιορίσετε τη συμμετρία (ΜΑΠ) των κανονικών τρόπων δόνησης του BF_3 (επίπεδη γεωμετρία). Ποιοι είναι ενεργοί όσον αφορά σε δονητικές μεταβάσεις απορρόφησης στο IR και σκέδασης Raman;
- β) Ειδικότερα, να αιτιολογήσετε την απάντησή σας σχετικά με τους τρόπους δόνησης A_1' και A_2'' υποδεικνύοντας με τη βοήθεια απλού σχηματικού διαγράμματος πώς μεταβάλλεται η διπολική ροπή και η πολωσιμότητα κατά την ταλάντωση.



19. ΑτΦΧ : Ασκήσεις A10A.1- A10A.8, Προβλήματα Π10A.1- Π10A.5
 ΑτΦΧ : Ασκήσεις A11Δ.1- A11Δ.7
 ΑτΦΧ-2014 : Ασκήσεις 11.1 – 11.11(β), Προβλήματα 11.1-11.3, 11.10-11.14

Σημαντικό βοήθημα

Μ. Π. Σιγάλας, Ν. Δ. Χαριστός, Λ. Δ. Αντώνογλου, 'Μοριακή Συμμετρία και Θεωρία Ομάδων, Θεωρία και Εφαρμογές' (ΣΕΑΒ 2016).

<https://www.openbook.gr/moriaki-symmetria-kai-thewria-omadwn/>

Πρόσθετα προβλήματα (με λύσεις)

[2016 L3 Tutorial Problems \(huntresearchgroup.org.uk\)](http://2016_L3_Tutorial_Problems(huntresearchgroup.org.uk))

[L3_Notes_Vib_Modes \(huntresearchgroup.org.uk\)](http://L3_Notes_Vib_Modes(huntresearchgroup.org.uk))

<https://www.youtube.com/watch?v=BjknQc3bQ8o>

Απεικονίσεις κανονικών τρόπων ταλάντωσης (συμμετρία, συχνότητα)

<http://www.chemtube3d.com/vibrationsH2O.htm>

<http://symmetry.otterbein.edu/>

Επίλυση προβλήματος από το διαγώνισμα Ιανουαρίου 2021

Άσκηση 1 [Ομάδα Α, Τμήμα 2, Θέμα 1γ] [Λύση από τη φοιτήτρια Ν. Αυγέρου]

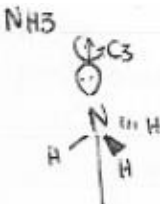
γ) Με δεδομένο ότι για το μόριο της αμμωνίας, NH_3 , προκύπτει $\Gamma_{3N} = 3A_1 + A_2 + 4E$:

- Να προσδιορίσετε την αναγώγιμη αναπαράσταση για τους δονητικούς βαθμούς ελευθερίας, Γ_{vib} .
- Να δώσετε τον αριθμό και τη συμμετρία των κανονικών τρόπων δόνησης, που είναι ενεργοί στη φασματοσκοπία Raman και IR αντίστοιχα. Πόσες κορυφές αναμένετε στο φάσμα Raman;
- Να εξαγάγετε τις δύο γεωμετρικές εκφράσεις για την εκφυλισμένη ταλάντωση ασύμμετρης έκτασης, συμμετρίας E, χρησιμοποιώντας τον πίνακα χαρακτήρων που δίνεται και υποδεικνύοντας τη μεταβολή της έκτασης ενός δεσμού N-H κάτω από καθεμιά από τις πράξεις συμμετρίας. Να αποδώσετε σχηματικά τη μορφή των δύο ταλαντώσεων. (να αιτιολογήσετε με σαφήνεια όλες τις απαντήσεις σας).

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	$(\sigma_v)_1$	$(\sigma_v)_2$	$(\sigma_v)_3$	
A_1	1	1	1	1	1	1	
A_2	1	1	1	-1	-1	-1	
E	2	-1	-1	0	0	0	
$\Gamma_{\text{NH}}(E)$							

Σημείωση

Η άσκηση αυτή είναι όμοια με λυμένη άσκηση που σας έχει δοθεί (XHM048_PChemI_Molecular Symmetry Problems_F2020.pdf) η οποία πραγματεύεται τη συμμετρία και τη γεωμετρία των ταλαντώσεων στο χλωροφόρμιο.


 κύριος άξονας περιστροφής C_3
 και τρία κατακόρυφα επίπεδα σν
 Επομένως το μόριο ανήκει σε ομάδα συμμετρίας C_{3v}

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
A_1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	Rz
E	2	-1	0	$(x, y) (R_x, R_y) (x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$
Γ_{xyz}	3	0	1	$\Gamma_{xyz} = E(x, y) + A_1(z)$
Γ_{rot}	3	0	-1	$\Gamma_{rot} = E(R_x, R_y) + A_2(R_z)$
AA	4	1	2	
$\Gamma_{3N} = AA - \Gamma_{xyz}$	12	0	2	$\Gamma_{3N} = 3A_1 + A_2 + 4E$
$\Gamma_{vib} = \Gamma_{3N} - \Gamma_{xyz} - \Gamma_{rot}$	6	0	2	$\Gamma_{vib} = \Gamma_{3N} - \Gamma_{xyz} - \Gamma_{rot} = 2A_1 + 2E$

Εφ' όσον είναι γνωστή η Γ_{3N} και από τον Πίνακα χαρακτήρων εξάγονται εύκολα οι Γ_{xyz} και Γ_{rot} , προκύπτει άμεσα η Γ_{vib} και δεν απαιτείται χρήση του μΘΟ για την ανάλυση της Γ_{vib} σε συνιστώσες ΜΑΠ.

Χάριν παραδείγματος η εφαρμογή του μΘΟ δίδεται στη συνέχεια.

Ανάλυση της Γ_{vib} στις συνιστώσες ΜΑΠ με τη βοήθεια του μθο: $\alpha(\Gamma_i) = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R) \chi(\Gamma_i)(R)$
 $h=6$
 $\alpha(A_1) = \frac{1}{6} (6 \times 1 \times 1 + 0 \times 1 \times 2 + 2 \times 1 \times 3) = 2$
 $\alpha(A_2) = \frac{1}{6} (6 \times 1 \times 1 + 0 \times 1 \times 2 + 2 \times (-1) \times 3) = 0$
 $\alpha(E) = \frac{1}{6} (6 \times 2 \times 1 + 0 \times (-1) \times 2 + 2 \times 0 \times 3) = 2$
 $\Gamma_{\text{vib}} = 2A_1 + 2E$

(συμμετρικές ταλαντώσεις)
 → Άρα η NH_3 έχει 6 κανονικούς τρόπους ταλάντωσης, 2 με συμμετρία A_1 , και 4 με συμμετρία E . Η ΜΑΠ E είναι 2-διάστατη, το γινόμενο $2E$ υποδηλώνει 4 τρόπους ταλάντωσης οι οποίοι ανά δύο είναι εκφυλισμένοι.
 → Οι ΜΑΠ A_1 και E έχουν ως βάση τα z και (x, y) άρα είναι ενεργές στο IR.
 → Επίσης είναι ενεργές στο Raman γιατί έχουν ως βάση τα δευτεροβάθμια μονώνυμα/πολυώνυμα.
 Άρα στο φάσμα IR και Raman αναμένουμε την εμφάνιση (4) κορυφών.

Πρόσθετες πληροφορίες σχετικά με τις ταλαντώσεις της αμμωνίας.

N-H Symmetric Stretching (a ₁)	N-H asymmetric stretching (e)	N-H asymmetric stretching (e)
3534 cm ⁻¹	3464 cm ⁻¹	3464 cm ⁻¹
(IR intensity = 0.052)	(IR intensity = 0.073)	(IR intensity = 0.073)
(Raman active)	(Raman active)	(Raman active)
H-N-H Scissoring (e)	H-N-H Scissoring (e)	N-H wagging (a ₁)
1765 cm ⁻¹	1765 cm ⁻¹	1139 cm ⁻¹
(IR intensity = 1.4 × 10 ⁻⁶)	(IR intensity = 1.1 × 10 ⁻⁶)	(IR intensity = 1.0)
(Raman active)	(Raman active)	(Raman active)

Ανάλυση ταλαντώσεων έκτασης (δεν ζητείται από την άσκηση)

Εύρεση Γ_{stretch} με παρόμοιο τρόπο αλλά αντί των ατομικών θεωρούμε τους δεσμούς όπου στην περίπτωση της NH_3 οι δεσμοί είναι 3.

Γεν	E	2C3	3C2	
A ₁	1	1	1	x^2+y^2, z^2
A ₂	1	1	-1	Rz
E	2	-1	0	(x, y) (Rx, Ry) (x^2-y^2, xy), (xz, yz)
$\Gamma_{\text{stretch}} = A_0$	3	0	1	

μθο για Γ_{stretch} :
 $\alpha(A_1) = \frac{1}{6} (3 \times 1 \times 1 + 0 \times 1 \times 2 + 1 \times 1 \times 3) = 1$
 $\alpha(A_2) = \frac{1}{6} (3 \times 1 \times 1 + 0 \times 1 \times 2 + 1 \times (-1) \times 3) = 0$
 $\alpha(E) = \frac{1}{6} (3 \times 2 \times 1 + 0 \times 1 \times 2 + 1 \times 0 \times 3) = 1$
 $\Gamma_{\text{stretch}} = A_1 + E$

Άρα η αμμωνία έχει 3 κανονικούς τρόπους ταλάντωσης έκτασης, μια συμμετρική (A_1) και 2 ασυμμετρικές (E), με τις τελευταίες λόγω εκφυλισμού να εμφανίζονται στην ίδια συχνότητα, άρα ως μια κορυφή στο φάσμα IR ή Raman.

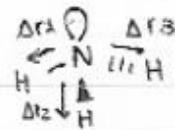
Δ. Αγγλος (anglos@uoc.gr)

Συμβολίζουμε την κάθε ταλάντωση συμμετρίας Γ_i ως μια παράσταση $S(\Gamma_i)$ η οποία είναι η κατάλληλη υπέρθεση των επί μέρους γεωμετρικών μεταβολών, που υφίστανται οι διάφοροι δεσμοί, π.χ. Δr_k ή $\Delta \alpha_k$ οι γωνίες μεταξύ των δεσμών στο μόριο, ο δείκτης k αριθμεί τους ισοδυναμους δεσμούς (ή γωνίες)

Για τη συμμετρική έκταση των δεσμών N-H επιλέγουμε έναν εκ των τριών ισοδυναμικών δεσμών (N-H, $k=3$) συμβολίζουμε την έκταση του ως Δr_1 και καταγράφουμε τη μεταβολή του κάτω από κάθε μια από τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας που ληφθεί με τον αντίστοιχο χαρακτήρα σύμφωνα με τις σχέσεις: $S(\Gamma_i) = \frac{1}{h} \sum_R \hat{\chi}(\Gamma_i(R)) \Delta r_k$

C_{3v}	E	(σ)	$(\sigma)^{-1}$	$(\sigma v)_1$	$(\sigma v)_2$	$(\sigma v)_3$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1	-1
E	2	-1	-1	0	0	0
$S_{NH}(A_1)$	Δr_{NH}	Δr_{NH}	Δr_{NH}	Δr_{NH}	Δr_{NH}	Δr_{NH}
$S_{NH}(A_2)$	Δr_1	Δr_2	Δr_3	Δr_1	Δr_3	Δr_2
$S_{NH}(E)$	$2\Delta r_1$	$-\Delta r_2$	$-\Delta r_3$	0	0	0

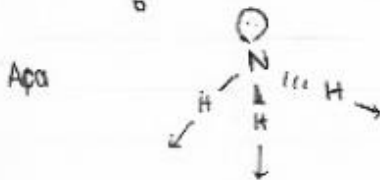
$= \frac{1}{3}(\Delta r_1 + \Delta r_2 + \Delta r_3)$
 $= \frac{1}{3}(2\Delta r_1 - \Delta r_2 - \Delta r_3)$



Ο τρόπος ταλάντωσης $S_{NH}(A_1)$ παρουσιάζει μία συμμετρική έκταση των δεσμών ο τρόπος ταλάντωσης $S_{NH}(E)$ παρουσιάζει ασυμμετρική έκταση κατά την οποία ο ένας δεσμός επιτείνεται (κατά 2 μονάδες μεταβολής μήκους) ενώ οι δύο δεσμοί συρρικνώνονται (κατά μια μονάδα μεταβολής μήκους έκαστος)

$$S(A_1) = \frac{1}{6} (1 \times \hat{E} \times \Delta r_1 + 1 \times \hat{\sigma} \times \Delta r_1 + 1 \times \hat{\sigma}^{-1} \times \Delta r_1 + 1 \times \hat{\sigma} v_1 \times \Delta r_1 + 1 \times \hat{\sigma} v_2 \times \Delta r_1 + 1 \times \hat{\sigma} v_3 \times \Delta r_1)$$

$$\Rightarrow S(A_1) = \frac{1}{6} (\Delta r_1 + \Delta r_2 + \Delta r_3 + \Delta r_1 + \Delta r_2 + \Delta r_3) = \frac{\Delta r_1}{3} + \frac{\Delta r_2}{3} + \frac{\Delta r_3}{3}$$



$$S(E) = \frac{1}{6} (2 \times \hat{E} \times \Delta r_1 - 1 \times \hat{E}_3 \times \Delta r_1 - 1 \times \hat{E}_3^{-1} \Delta r_2) \Rightarrow S(E) = \frac{1}{6} (2\Delta r_1 - \Delta r_2 - \Delta r_3)$$

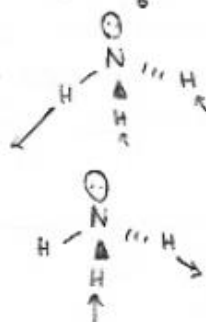
$$S(E) = \frac{1}{6} (2 \times \hat{E} \times \Delta r_2 - 1 \times \hat{E}_3 \times \Delta r_2 - 1 \times \hat{E}_3^{-1} \Delta r_3) \Rightarrow S(E) = \frac{1}{6} (2\Delta r_2 - \Delta r_3 - \Delta r_1) \quad (1)$$

$$S(E) = \frac{1}{6} (2\Delta r_3 - \Delta r_1 - \Delta r_2) \quad (2)$$

$$(1) - (2) \Rightarrow \frac{1}{6} (2\Delta r_2 - \Delta r_3 - \Delta r_1) - \frac{1}{6} (2\Delta r_3 - \Delta r_1 - \Delta r_2) = \frac{\Delta r_2}{2} - \frac{\Delta r_3}{2}$$

Άρα $\frac{2\Delta r_2 - \Delta r_3 - \Delta r_1}{6}$

$$\frac{\Delta r_2 - \Delta r_3}{2}$$



Ο ένας δεσμός

ευθύνεται κατά δύο μονάδες

μεταβολής μήκους ενώ οι άλλοι δύο

κατά μια μονάδα συρρικνώνεται ο τριθέσιος

Ο ένας δεσμός δεν αυξείται

ο ένας ευθύνεται και ο άλλος

συρρικνώνεται

Πίνακες χαρακτήρων

C ₁	E				
A	1				

C _s	E	σ _h			
A'	1	1	x,y,R _z	x ² ,y ² ,z ² ,xy	
A''	1	-1	z,R _x ,R _y	yz,xz	

C _i	E	i			
A _g	1	1	R _x ,R _y ,R _z	x ² ,y ² ,z ² ,xy,xz,yz	
A _u	1	-1	x,y,z		

C ₂	E	C ₂			
A	1	1	z,R _z	x ² ,y ² ,z ² ,xy	
B	1	-1	x,y,R _x ,R _y	yz,xz	

D ₂	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)		
A	1	1	1	1		x ² ,y ² ,z ²
B ₁	1	1	-1	-1	z,R _z	xy
B ₂	1	-1	1	-1	y,R _y	xz
B ₃	1	-1	-1	1	x,R _x	yz

D ₃	E	2C ₃	3C ₂			
A ₁	1	1	1			x ² +y ² ,z ²
A ₂	1	1	-1	z,R _z		
E	2	-1	0	(x,y) (R _x ,R _y)	(x ² -y ² ,xy) (xz,yz)	

D ₄	E	2C ₄	C ₂ (=C ₄ ²)	2C ₂ '	2C ₂ "		
A ₁	1	1	1	1	1	z, R _z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	1	-1	-1		
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)

C _{2v}	E	C ₂	σ _v (xz)	σ _v ' (yz)		
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

C _{3v}	E	2C ₃	3σ _v		
A ₁	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	R _z	
E	2	-1	0	(x,y) (R _x , R _y)	(x ² -y ² , xy) (xz, yz)

C _{4v}	E	2C ₄	C ₂	2σ _v	2σ _d		
A ₁	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
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)

C _{2h}	E	C ₂	i	σ _h		
A _g	1	1	1	1	R _z	x ² , y ² , z ² , xy
B _g	1	-1	1	-1	R _x , R _y	xz, yz
A _u	1	1	-1	-1	z	
B _u	1	-1	-1	1	x, y	

D _{2h}	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)	i	σ(xy)	σ(xz)	σ(yz)		
A _g	1	1	1	1	1	1	1	1		x ² ,y ² ,z ²
B _{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R _z	xy
B _{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R _y	xz
B _{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R _x	yz
A _u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B _{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B _{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

D _{3h}	E	2C ₃	3C ₂	σ _h	2S ₃	3σ _v		
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)

D _{4h}	E	2C ₄	C ₂	2C ₂ '	2C ₂ "	i	2S ₄	σ _h	2σ _v	2σ _d		
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		x ² +y ² ,z ²
A _{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R _z	
B _{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1		x ² -y ²
B _{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		xy
E _g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	(R _x ,R _y)	(xz,yz)
A _{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A _{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B _{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1		
B _{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
E _u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	(x,y)	

D _{6h}	E	2C ₆	2C ₃	C ₂	3C ₂ '	3C ₂ "	i	2S ₃	2S ₆	σ _h	3σ _d	3σ _v		
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R _z	x^2+y^2, z^2
A _{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1		
B _{1g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
B _{2g}	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1		
E _{1g}	2	1	-1	-2	0	0	2	1	-1	-2	0	0	(R _x , R _y)	(xz, yz)
E _{2g}	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0		(x ² -y ² , xy)
A _{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	z	
A _{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1		
B _{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1		
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1		
E _{1u}	2	1	-1	-2	0	0	-2	-1	1	2	0	0	(x, y)	
E _{2u}	2	-1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0		

D _{2d}	E	2S ₄	C ₂	2C ₂ '	2σ _d		
A ₁	1	1	1	1	1	R _z	x^2+y^2, z^2
A ₂	1	1	1	-1	-1		
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)

D _{3d}	E	2C ₃	3C ₂	i	2S ₆	3σ _d		
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	R _z	x^2+y^2, z^2
A _{2g}	1	1	-1	1	1	-1		
E _g	2	-1	0	2	-1	0		(x ² -y ² , xy) (xz, yz)
A _{1u}	1	1	1	-1	-1	-1		
A _{2u}	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E _u	2	-1	0	-2	1	0	(x, y)	

S ₄	E	S ₄	C ₂	S ₄ ³		
A	1	1	1	1	(x, y) (R _x , R _y)	x^2+y^2, z^2
B	1	-1	1	-1		x^2-y^2, xy
E	$\begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} i \\ -i \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -1 \\ -1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -i \\ i \end{Bmatrix}$		(xz, yz)

T	E	4C ₃	4C ₃ ²	3C ₂		$\varepsilon=\exp(2\pi i/3)$
A	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
E	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & -1 \end{Bmatrix}$					$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
T	3	0	0	-1	(R _x ,R _y ,R _z) (x,y,z)	(xy,xz,yz)

T _h	E	4C ₃	4C ₃ ²	3C ₂	i	4S ₆	4S ₆ ⁵	3σ _h		$\varepsilon=\exp(2\pi i/3)$
A _g	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A _u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
E _g	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 \end{Bmatrix}$									$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
E _u	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & -1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & -1 \end{Bmatrix}$									
T _g	3	0	0	-1	1	0	0	-1	(R _x ,R _y ,R _z)	
T _u	3	0	0	-1	-1	0	0	1	(x,y,z)	(xy,xz,yz)

T _d	E	8C ₃	3C ₂	6S ₄	6σ _d		
A ₁	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A ₂	1	1	1	-1	-1		
E	2	-1	2	0	0		$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
T ₁	3	0	-1	1	-1	(R _x ,R _y ,R _z)	
T ₂	3	0	-1	-1	1	(x,y,z)	(xy,xz,yz)

O	E	6C ₄	3C ₂ (=C ₄ ²)	8C ₃	6C ₂		
A ₁	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A ₂	1	-1	1	1	-1		
E	2	0	2	-1	0		$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
T ₁	3	1	-1	0	-1	(R _x ,R _y ,R _z) (x,y,z)	
T ₂	3	-1	-1	0	1		(xy,xz,yz)

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$ ($=C_4^2$)	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1		
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0		$(2z^2-x^2-y^2)$ x^2-y^2
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1		(xy, xz, yz)
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1		
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0		
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	(x, y, z)	
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1		

$C_{\infty v}$	E	$2C_{\infty}^{\Phi}$	...	$\infty\sigma_v$		
$A_1 \equiv \Sigma^+$	1	1	...	1	z	x^2+y^2, z^2
$A_2 \equiv \Sigma^-$	1	1	...	-1	R_z	
$E_1 \equiv \Pi$	2	$2\cos\Phi$	...	0	(x, y) (R_x, R_y)	(xz, yz)
$E_2 \equiv \Delta$	2	$2\cos 2\Phi$	...	0		(x^2-y^2, xy)
$E_3 \equiv \Phi$	2	$2\cos 3\Phi$	...	0		
...	...	...	...	...		

$D_{\infty h}$	E	$2C_{\infty}^{\Phi}$	...	$\infty\sigma_v$	i	$2S_{\infty}^{\Phi}$	...	∞C_2		
Σ_g^+	1	1	...	1	1	1	...	1		x^2+y^2, z^2
Σ_g^-	1	1	...	-1	1	1	...	-1	R_z	
Π_g	2	$2\cos\Phi$	...	0	2	$-2\cos\Phi$	...	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
Δ_g	2	$2\cos 2\Phi$	...	0	2	$2\cos 2\Phi$	...	0		(x^2-y^2, xy)
...	...	...	...	...	...	...	...	...		
Σ_u^+	1	1	...	1	-1	-1	...	-1	z	
Σ_u^-	1	1	...	-1	-1	-1	...	1		
Π_u	2	$2\cos\Phi$	...	0	-2	$2\cos\Phi$	...	0	(x, y)	
Δ_u	2	$2\cos 2\Phi$	...	0	-2	$-2\cos 2\Phi$	...	0		
...	...	...	...	...	...	...	...	...		