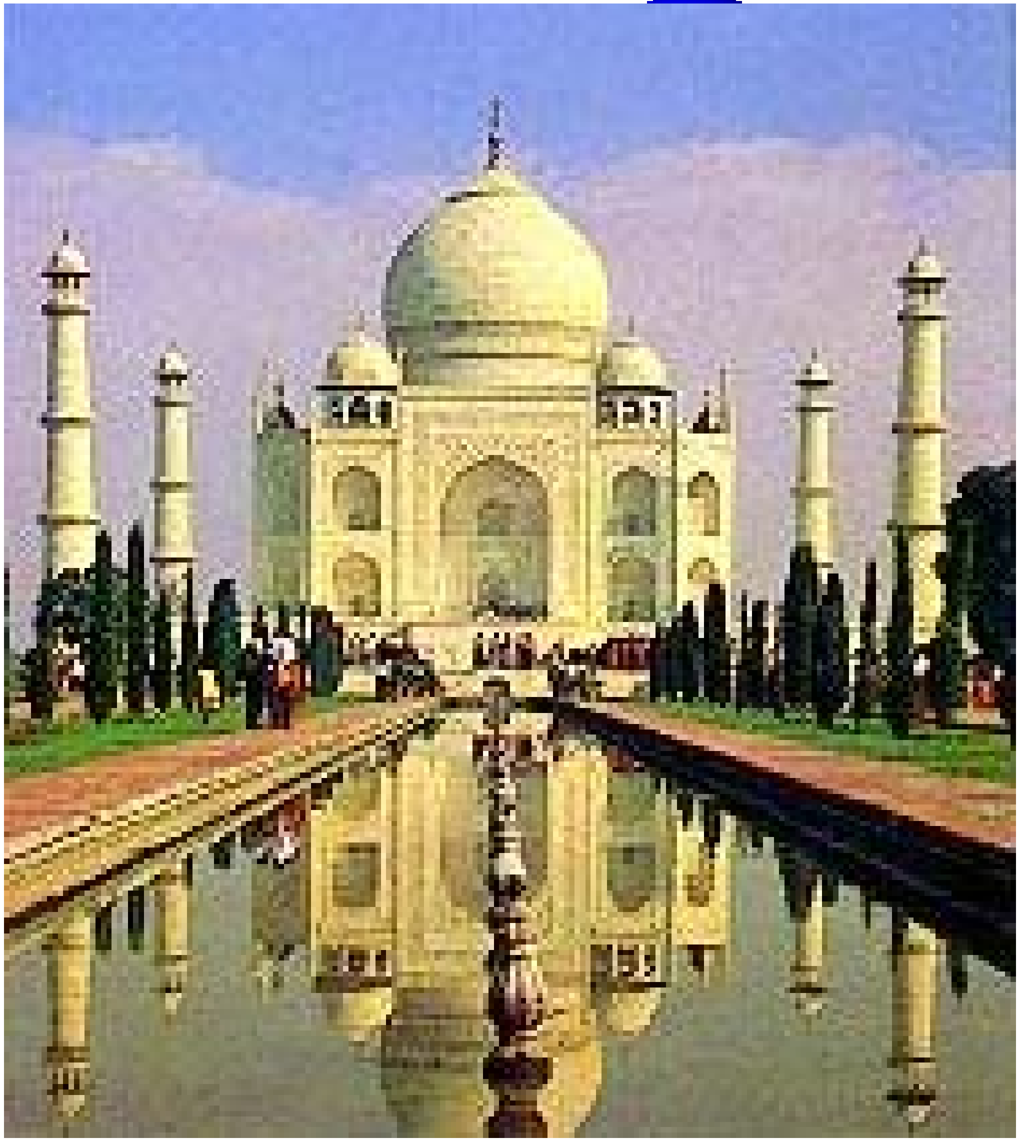
Teoría de Grupos



Teoría de grupos

Algunos conceptos importantes:

Orden del grupo: ($h(\mathcal{G})$ ó h) número de operaciones de simetría que pertenecen al grupo. Existen grupos de orden finito y también de orden infinito.

Tabla de multiplicar: (también tabla de Cayley o producto cartesiano) cuadro $h \times h$ que contiene todos los productos de cada elemento del grupo por todos los demás:

$$\begin{array}{c|cccc|} & \hat{a} & \hat{b} & \hat{c} & \ldots \\ \hline \hat{a} & \hat{a}\hat{a} & \hat{a}\hat{b} & \hat{a}\hat{c} & \ldots \\ \hat{b} & \hat{b}\hat{a} & \hat{b}\hat{b} & \hat{b}\hat{c} & \ldots \\ \hat{c} & \hat{c}\hat{a} & \hat{c}\hat{b} & \hat{c}\hat{c} & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \hline \end{array} . \tag{15}$$

Grupos isomorfos: Dos grupos son isomórficos cuando existe una correspondencia biunívoca entre ambos de tal modo que al sustituir las operaciones de un grupo por las correspondientes en el otro grupo las tablas de multiplicar de ambos son idénticas.

Subgrupos: Un grupo $\mathcal{H}$ se dice *subgrupo* de otro $\mathcal{G}$, $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$, si todos los elementos de $\mathcal{H}$ están contenidos en $\mathcal{G}$ y $\mathcal{H}$ cumple las propiedades de grupo. El teorema de Cayley establece que un subconjunto $\mathcal{H}$ del grupo $\mathcal{G}$ es un subgrupo si: (a) $\mathcal{H}$ es cerrado; y (b) $\mathcal{H}$ contiene el inverso de todos sus elementos.

Teoría de grupos

Transformación de semejanza de $\hat{A}$ debida a $\hat{C}$: una operación de la forma $\hat{C}^{-1}\hat{A}\hat{C}$.

Operaciones equivalentes: Dos operaciones $\hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{G}$ son *equivalentes* si existe $\hat{C} \in \mathcal{G}$ tal que convierte $\hat{A}$ en $\hat{B}$ mediante la transformación de semejanza $\hat{C}^{-1}\hat{A}\hat{C} = \hat{B}$. Se trata de una verdadera relación de equivalencia, ya que cumple las propiedades reflexiva, simétrica y transitiva.

Clases de equivalencia: El subconjunto de las operaciones de un grupo que son equivalentes entre sí forma una clase de equivalencia. Cada operación del grupo pertenece a una y sólo una clase de equivalencia. La identidad $\hat{E}$ forma siempre una clase por sí sóla. La partición de un grupo en clases es única.

Orden de una clase de equivalencia: Número de operaciones que contiene.

Generadores del grupo: El producto sucesivo de unas pocas operaciones, llamadas generadores, es capaz de reproducir el grupo entero.

Simetría y teoría de grupos

- ❖ Operaciones de Simetría obedecen las reglas de la teoría de grupos.

- ❖ Una operación de simetría puede representarse por una matriz, sobre una base de funciones moleculares.

- ❖ Se pueden escoger diferentes conjuntos de frunciones bases, éstos se relacionan mediante *transformaciones similares*

- ❖ Las matrices para diferentes conjuntos bases son diferentes, sin embargo su *caracter* (traza) es la misma!

Simetría y teoría de grupos

❖ La representación matricial de operaciones de simetría puede *diagonalizarse en bloques* mediante transformaciones similares. Propósito: encontrar la *representación irreducible*, que no es posible seguir reduciendo.

❖ Operaciones del mismo ”tipo” (rotaciones, reflecciones etc.) pertenecen a la misma *clase*. Esto es, R y R' pertenecen a la misma clase si existe una operación de simetría S tal que $R'=S^{-1}RS$. La operaciones de simetría de la misma clase tienen el mismo caracter.

Matrices de Bloque

$$\begin{bmatrix} A' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{C'} \\ 0 & 0 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A'' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B'' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{C''} \\ 0 & 0 & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{C} \\ 0 & 0 & & \end{bmatrix}$$

A’A’’=A

B’B’’=B

C’C’’=C

Matrices de Bloque

Si una matriz que representa una operación de simtería es diagonalizada en bloques, entonces cada bloque es también una representacíón de la operación (obedecen las mismas leyes de multiplicación).

El número de representaciones reducibles es infinito pero sólo hay un pequeño número de *representaciones irreducibles*.

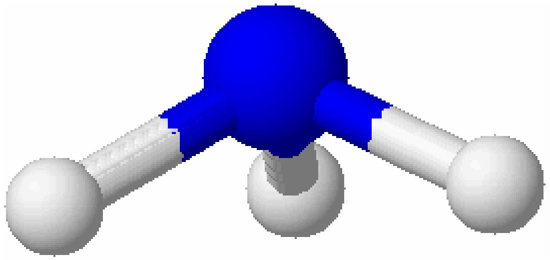
El número de *representaciones* irreducibles (irreps) es siempre igual al número de clases del grupo.

Todas las representaciones de un operación de simetría tienen el mismo caracter. Los caracteres de las diferentes irreps están en las *tablas de caracteres*.

Tablas de Caracteres

Tabla de caracteres del grupo C_{3v}

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ''_v
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_3	2	-1	-1	0	0	0



Irreps

Orden *h* es 6

Hay 3 clases

Tablas de Caracteres

Las operaciones de una misma clase tienen el mismo caracter, luego:

Clases

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1
Γ_3	2	-1	0

Representaciones Irreducibles
(*especies de simmetría*)

Tablas de Caracteres

Grupo puntual

Clases de simetría

Funciones base de la simetría del Irrep

Representación totalmente simétrica

Índices de Mulliken para cada irrep

C_{4v}	E	$2C_4\ (z)$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$			
$\boxed{A_1}$	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2	z^3, $z(x^2+y^2)$
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	-	-
B_1	1	-1	1	1	-1	-	x^2-y^2	$z(x^2-y^2)$
B_2	1	-1	1	-1	1	-	xy	xyz
E	2	0	-2	0	0	(x, y) (R_x, R_y)	(xz, yz)	(xz^2, yz^2) (xy^2, x^2y) (x^3, y^3)

Caracteres de los Irreps del grupo

Funciones cúbicas

Funciones cuadráticas

Funciones lineales translaciones y R, rotación alrededor de un eje

Simetrías de los orbitales s, p, d, y f

Tablas de Caracteres

Etiqueta	Significado	Más información
A	1-dimensional (no degenerada), simétrica c/r rotación alrededor del eje principal	
B	1-dimensional (no degenerada), antisimétrica c/r rotación alrededor del eje principal	
E	bi-dimensional (doblemente degenerada)	Sólo posible cuando hay un C_n de n=3 o mayor en el grupo
T	Tri-dimensional (triplemente degenerada)	
1	Simétrica c/r rotación alrededor de $C_2 \perp$ a C_n	Sólo usada si hay más de un irrep con esa etiqueta (A, B, etc.)
2	Antisimétrica c/r rotación alrededor de $C_2 \perp$ a C_n	
g	Simétrica c/r inversión	Sólo usada si hay centro de inversión
u	Antisimétrica c/r inversión	
‘	Simétric c/r reflección σ_h	Sólo usada si hay más de un irrep con esa etiqueta
“	Antisimétric c/r reflección σ_h	

Teorema de Gran Ortogonalidad

”Considerar un grupo de orden *h,* y sea $\mathbf{D}^{(l)}(R)$ la representación de la operación *R* en una representación irreducible d_l – dimensional de especies de simtería $\Gamma^{(l)}$ del grupo. Entonces

$$\sum_R D_{ij}^{(l)}(R)^* D_{i'j'}^{(l')}(R) = \frac{h}{d_l}\delta_{ll'}\delta_{ii'}\delta_{jj'}$$ ”

Teorema de Ortogonalidad ”pequeño”

$$\sum_{R} \chi^{(l)}(R)^{*} \chi^{(l)}(R) = h\delta_{ll'}$$

donde $\chi^{(l)}$*(R)* es el caracter de la operación *(R)*.
O más simple aún, si el número de operaciones de simetría en una clase *c* es *g(c)*, entonces

$$\sum_{c} g(c)\chi^{(l)}(c)^{*} \chi^{(l)}(c) = h\delta_{ll'}$$

Ya que todas las operaciones de la misma clase tienen el mismo caracter.

Propiedades de la Tablas de Caracteres

1. La suma de los cuadrados de las dimensiones de todos los irreps es igual al orden del grupo
2. La suma de los cuadrados del valor absoluto de cualquier irrep es igual al orden del grupo.
3. La suma de los productos de los correspondientes caracteres de cualquieras dos irreps del mismo grupo es cero.
4. Los caracters de todas las matrices de las operaciones de la misma clase son idénticos en un irrep dado.
5. El número de irreps en un grupo es igual al número clases en el grupo.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1
Γ_3	2	-1	0

Representaciones Irreducibles

Cada irrep de un grupo tiene una etiqueta llamada *especie de simetría,* generalmente denominada Γ. A cada irrep se le asigna una etiqueta simbólica o *Símbolo de Mulliken*

Irreps 1-dimensional se denominan *A* o *B*.

Irreps 2-dimensional se denominan *E*.

Irreps 3-dimensional se denominan *T* *(F)*.

Las funciones base de un irrep se dice que *span* el irrep.

Representaciones Irreducibles

La diferencia entre *A* y *B* está en el caracter para el eje de de rotación de mayor orden C_n : 1 para *A* y -1 para *B*.

Subscriptos *g* y *u* significan gerade y ungerade, o simetrico o antisimetrico con respecto a la inversion.

Superscriptos ’ and ’’ denotan simetría o antisimetría con respecto a la to reflección a través de un plano horizontal.

Tablas de Caracteres

- Una tabla de caracteres contiene, de una forma altamente simbólica, información sobre como algo que nos interese (un orbital, un enlace,...) se ve afectado por las operaciones de un grupo puntual determinado.
- Cada grupo puntual viene descrito por una única tabla de caracteres que tiene forma de matriz.

Símbolo del grupo puntual

Clases y operaciones de simetría

Bases para las representaciones

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	Funciones lineales, rotaciones	Funciones cuadráticas
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)

Símbolos Mulliken

Caracteres de las representaciones irreducibles

Tablas de Caracteres

Ejemplo: Grupo C_{4v}

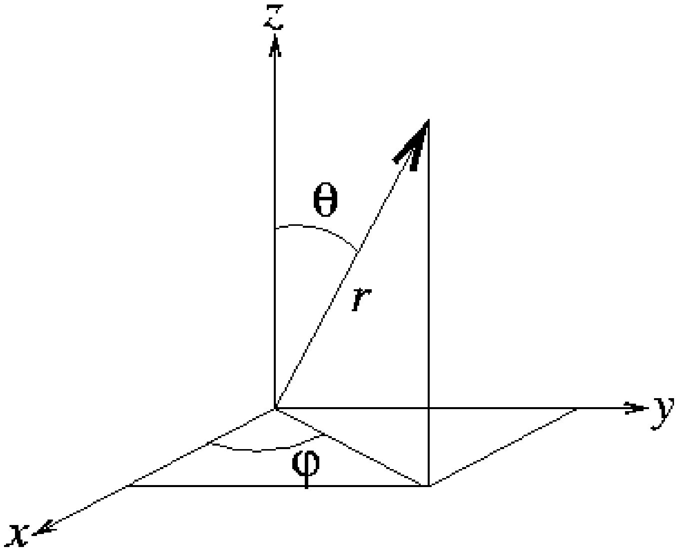
C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$			
A_1	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2	z^2
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z		
B_1	1	-1	1	1	-1		x^2-y^2	$z(x^2-y^2)$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy	xyz
E	2	0	-2	0	0	$(x,y),(R_x,R_y)$	(xz,yz)	$(xz^2,yz^2),[x(x^2-3y^2),y(3x^2-y^2)]$

Estas son funciones bases para representaciones irreducibles. Tienen las mismas propiedades de simetría de los orbitales atómicos (del mismo nombre).

Tablas de Caracteres

Ejemplo: Grupo C_{4v}

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

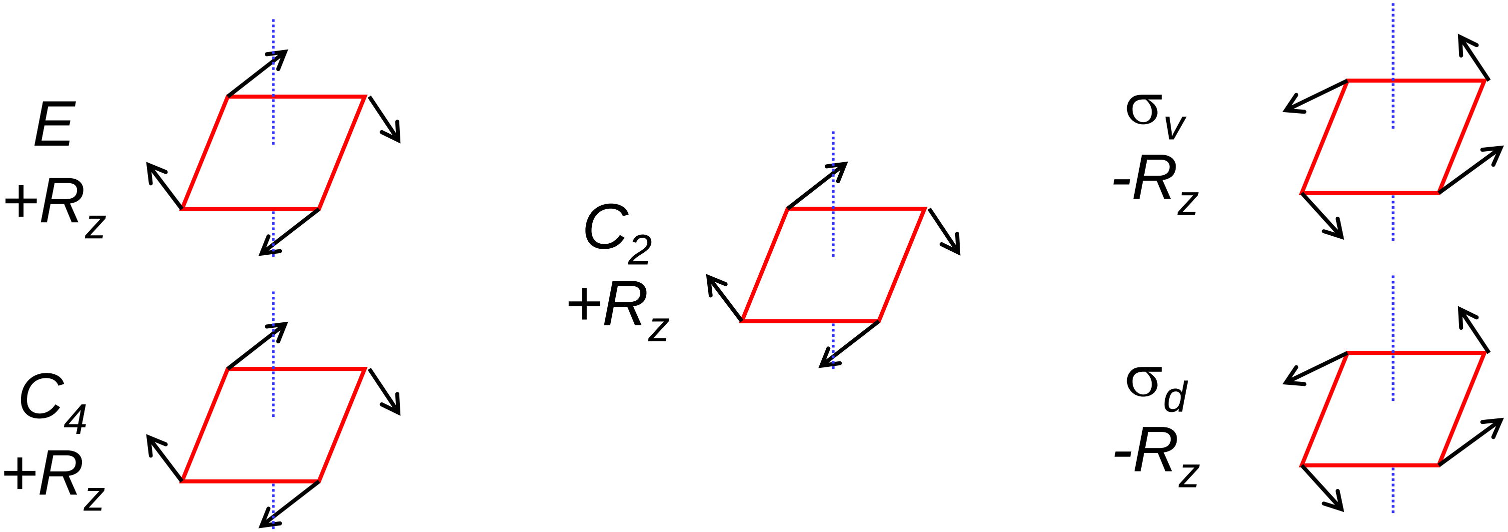


z transforma como A_1 .

Tablas de Characteres

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$			
A_1	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2	z^2
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z		
B_1	1	-1	1	1	-1		x^2-y^2	$z(x^2-y^2)$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy	xyz
E	2	0	-2	0	0	$(x,y),(R_x,R_y)$	(xz, yz)	$(xz^2, yz^2),[x(x^2-3y^2), y(3x^2-y^2)]$

la rotación alrededor *z* transforma como A_2.



Reducción de representaciones

Problema:
Dada una representación matricial *D(R)* en una base general de funciones que describe una molécula, encontrar las especies de simetría o o irreps contenidoa en ella y las funciones base de esas representaciones irtreducibles

$$D(R) = D^{(\Gamma_1)}(R) \oplus D^{(\Gamma_2)}(R) \oplus \ldots$$

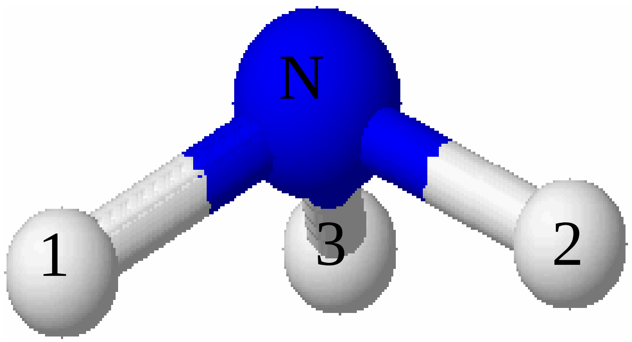
R = una operación de simetría

Reducción de representaciones

Ejemplo:

Amoníaco: Grupo C_{3v}

Base: orbitales (S_n, S_1, S_2, S_3)



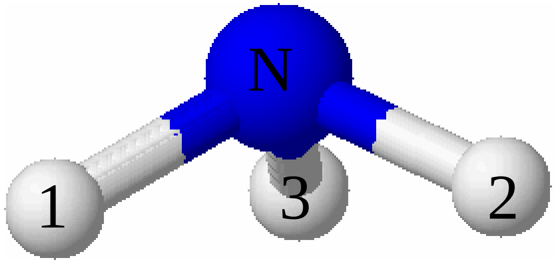
Encontrar los caracteres: ver que elementos se transforman en ± sí mismos luego de la operación de simetría.

E: $\chi=4$ C_3: $\chi=1$ σ_v: $\chi=2$

Reducción de representaciones

Así:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_{red}	4	1	2



Cuya Tabla de caracteres y de irreps es:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_{red}	4	1	2
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Por inspección

$\Gamma_{red}=2A_1+E$

Reducción de representaciones

Si la descomposición por inspección no resulta, usar los teoremas *gran (GOT) y pequeña (LOT) ortogonalidad* (si el grupo es finito).
A partir de LOT:

$$a_i = \frac{1}{h}\sum_R g(c)\chi_{red}{}^{(R)}(c)^* \chi_i^{(R)}(c)$$

a_i = Nº veces que el irrep Γ_i aparece en Γ_{red},
h = orden del grupo; *R* = operación de simetría
g(c) = Nº operaciones de simetría en la clase.
χ_{red} = caracter de la operación *R*
χ_i = caracter of *R* en el irtrep *i.*

Reducción de representaciones

$$a_i = \frac{1}{h}\sum_R g(c)\chi_{red}^{(R)}(c)^* \chi_i^{(R)}(c)$$

Luego, en el ejemplo anterior:

$$a_{A_1} = \frac{1}{6}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 1\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot 1\right) = 2$$

$$a_{A_2} = \frac{1}{6}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 1\cdot 1 - 3\cdot 2\cdot 1\right) = 0$$

$$a_E = \frac{1}{6}\left(1\cdot 4\cdot 2 - 2\cdot 1\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot 0\right) = 1$$

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_{red}	4	1	2
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Se encuentra $\Gamma_{red} = 2A_1 + E$

Operadores de Proyección

Bases Adaptadas por Simetría

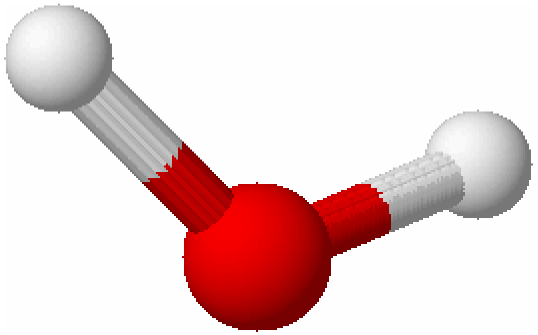
El *operador de proyección* toma la base arbitraria de una representación y la proyecta en una ”nueva dirección” tal que funciones base no-adaptadas por simetría de una representación ahora pertenecen a un irrep específico del grupo

$$\hat{P}^{j} = \frac{1}{h}\sum_{R}\chi^{(j)}(R)\cdot\hat{R}$$

donde $\hat{P}^{j}$ es el operador de proyección del irrep *j*,
$\chi^{(j)}$ es the caracter de la operación *R* en el irrep *j* y
$\hat{R}^{j}$ es el operador (aplicación) de *R* al componente de la base.

Vibraciones Moleculares

Agua
Las vibraciones moleculares se pueden descomponer en los *modos normales*.

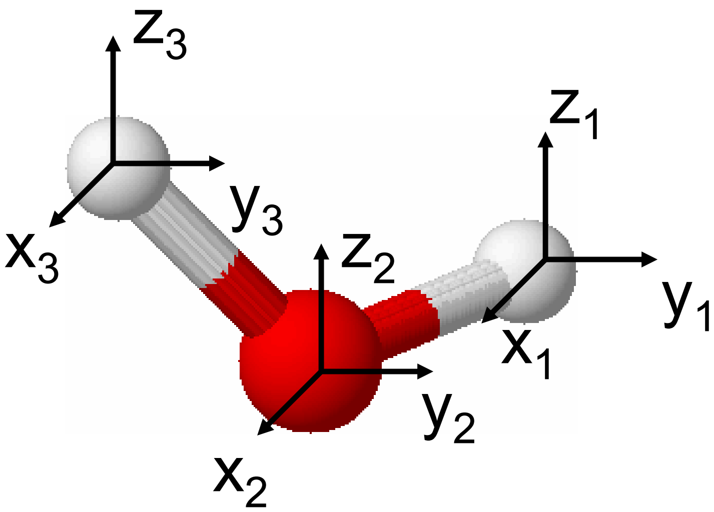


Agua tiene 9 modos normales de los cuales 3 son traslacionales, 3 rotacionales y 3 vibracionales.

Cada modo normal forma una base para ura representación irreducible de la molécula.

Vibraciones Moleculares

1) Conjunto de funciones bases: Coordenadas cartesianas de cada átomo.



2) El agua pertenece al grupo C_{2v} cuyas operaciones son E, C_2, $\sigma_v(xz)$ and $\sigma_v'(yz)$.

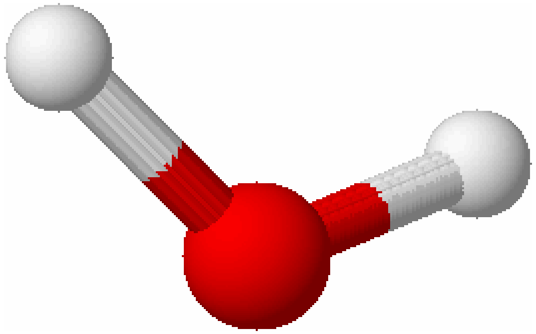
La representación reducible es:

	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$
Γ_{red}	9	-1	1	3

Vibraciones Moleculares

Tabla de Caracteres de C_{2v}.

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
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_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$
Γ_{red}	9	-1	1	3

Reducir Γ_{red}

Vibraciones Moleculares

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
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

La representación se reduce a $\Gamma_{\text{red}}=3A_1+A_2+2B_1+3B_2$

$$\Gamma_{\text{trans}}= A_1+B_1+B_2$$

$$\Gamma_{\text{rot}}=A_2+B_1+B_2$$

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

Modos vibracionales

Vibraciones Moleculares

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
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

Los modos con simetría traslacional sorn acvtivos en el infrarrojo mientras que los modos con simetría x^2, y^2 o z^2 son activos en el Raman.

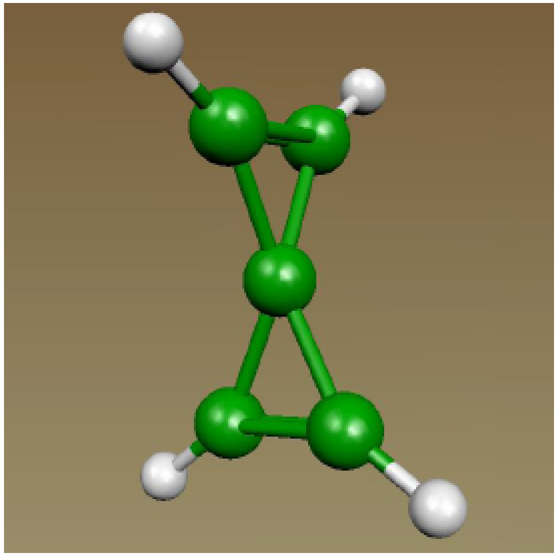
Para agua

$\Gamma_{\text{vib}}=2A_1+B_2$ son activos tanto en IR como en Raman.

Vibraciones Moleculares

Ejemplo: espiropentadieno $\boxed{C_5H_4}$

$\mathcal{D}_{2d}$	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$	
A_1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2; z^2$
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	$z; xy$
E	2	0	-2	0	0	$(x,y); (R_x,R_y); (xz,yz)$
χ^{xyz}	3	-1	-1	-1	1	$= B_2 \oplus E$
$N_{\hat{R}}$	9	1	1	1	5	
$\chi^{(3N)}$	27	-1	-1	-1	5	



CH_4	A_1	A_2	B_1	B_2	E	
Γ^{3N}	4	2	2	5	7	
Trasl.	0	0	0	1	1	
Rot.	0	1	0	0	1	
Vib.	4	1	2	4	5	Modos Activos
Activo IR	no	no	no	SI	SI	9
Activo Raman	SI	no	SI	SI	SI	15

Frecuencias (ν, cm^{-1})

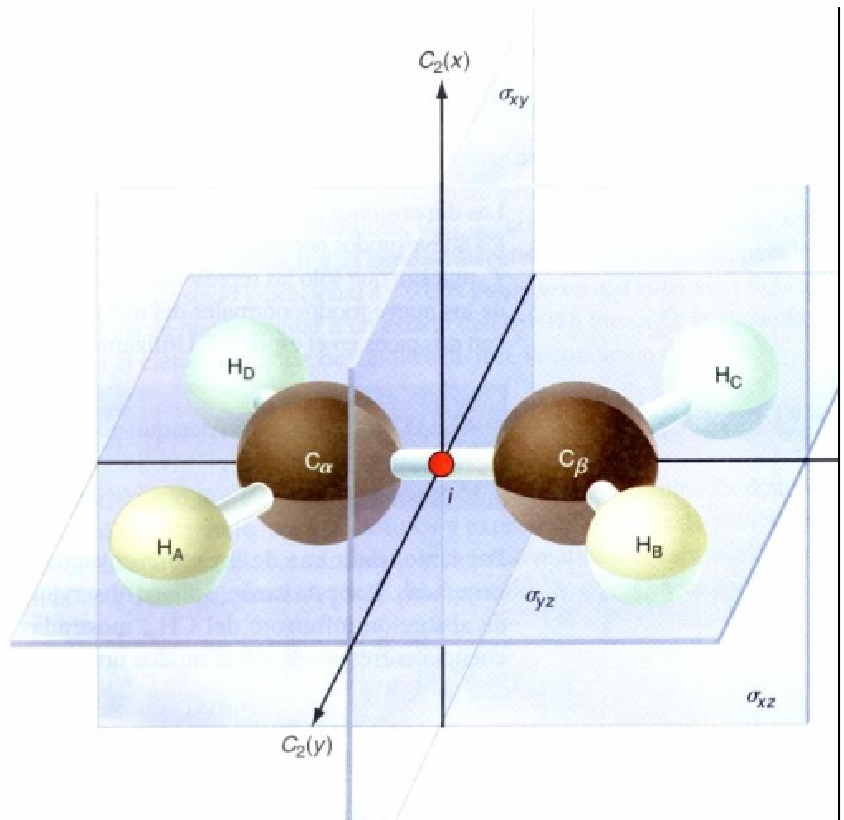
A_1	A_2	B_1	B_2	E
701	1160	444	1030	398
1130		1056	1547	728
1758			1765	885
3491			3495	1227
				3444

La tabla de caracteres para el grupo puntual D_{2h}

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$		
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	

Ejercicio:

Construir los orbitales moleculares de simetría de Etileno (C_2H_4)



Integrales

Otro ejemplo:
Las integrales de productos de funciones aparecen a menudo en mecánica cuántica y un análisis de simetría es sumamente útil.

$$\left\langle f_i \,|\hat{O}|\, f_k \right\rangle$$

Una integral será diferente de cero sólo si el integrando pertenece a la representación irreducible ”totalmente simétrica” del grupo puntual molecular.

$$\Gamma_{f_i}\Gamma_{f_k} \subset \Gamma_{\hat{O}}$$

Producto Directo de representaciones

Sean Γ^f y Γ^g dos representaciones del grupo $\mathcal{G}$, de dimensión d_f y d_g, respectivamente. La representación *producto directo* o *cartesiano* de ambas, $\Gamma^{f\otimes g} = \Gamma^f \otimes \Gamma^g$, es la representación de dimensión $d_f \times d_g$ formada por las matrices de elementos dados por

$$\forall \hat{R} \in \mathcal{G} \qquad \left(\underline{\underline{\mathsf{D}}}^{f\otimes g}(\hat{R})\right)_{(ik),(jl)} = D^f_{ij}(\hat{R}) D^g_{kl}(\hat{R}) \tag{40}$$

para $i, j = 1 \ldots d_f$ y $k, l = 1 \ldots d_g$. En esta ecuación (ik) designa un único índice que va desde 1 hasta $d_f d_g$, y lo mismo ocurre con el índice (jl).

El producto directo da lugar a una nueva representación reducible. Se cumple:

$$\chi^{f\otimes g}(\hat{R}) = \chi^f(\hat{R})\,\chi^g(\hat{R}). \tag{41}$$

Suma y producto directos originan un álgebra que cumple las propiedades asociativa, conmutativa y distributiva. La representación *totalmente simétrica* Γ^1 es el elemento neutro del producto directo, mientras que la representación *nula* (todas sus matrices son nulas) es el *cero* de la suma directa.

Ej:

$\mathcal{C}_{4v}$	$\hat{E}$	$2\hat{C}_4$	$\hat{C}_2$	$2\hat{\sigma}_v$	$2\hat{\sigma}_d$	
B_2	1	-1	1	-1	1	
E	2	0	-2	0	0	
$B_2 \otimes B_2$	1	1	1	1	1	$= A_1$
$E \otimes E$	4	0	4	0	0	$= A_1 \oplus A_2 \oplus B_1 \oplus B_2$

Appendix A. Character Tables for selected point groups.

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
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, xy
B_1	1	1	-1	-1	z,Rz	xy
B_2	1	-1	1	-1	y, Ry	xz
B_3	1	-1	-1	1	x,Rx	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	$(x,y);(R_x,R_y)$	(xz,yz); (x^2-y^2,xy)

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$		
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	$2C_3$	$3\sigma_v$		
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	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
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	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$		
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	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A_1'	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_2'	1	1	-1	1	1	-1	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	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
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	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_{5h}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$		
A_1'	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_2'	1	1	1	-1	1	1	1	-1	R_z	
E_1'	2	2cos72°	2cos144°	0	2	2cos72°	2cos144°	0	(x,y)	
E_2'	2	2cos144°	2cos72°	0	2	2cos144°	2cos72°	0		(x^2-y^2, xy)
A_1''	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
A_2''	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	z	
E_1''	2	2cos72°	2cos144°	0	-2	-2cos72°	-2cos144°	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
E_2''	2	2cos144°	2cos72°	0	-2	-2cos144°	-2cos72°	0		

D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$		
A_{1g}	1	1	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	-1	-1	R_z	
B_{1g}	1	-1	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	-1	1		xy
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		
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
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	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		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	z	xy
E	2	0	-2	0	0	(x,y); (R_x,R_y)	(xz,yz)

D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1	R_z	
E_g	2	-1	0	2	-1	0	(R_x,R_y)	(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	R_z	x^2+y^2, z^2
B	1	-1	1	-1	z	x^2-y^2, xy
E	1	±i	-1	-(i)	(x,y); (R_x,R_y)	(xz,yz)

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
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)	(xz,yz.xy)

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		(xz,yz,xy)
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		