

**Scuola Normale Superiore, ammissione al IV anno del corso ordinario**  
**Prova scritta di Analisi Matematica**  
**24 Agosto 2023**

**Esercizio 1.** Sia  $F : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$  una funzione di classe  $C^2$  con derivate prime e seconde limitate. Si consideri la mappa di flusso  $X(t, x)$  associata al sistema autonomo di equazioni differenziali relativa al campo  $\nabla F$ , vale a dire

$$\frac{d}{dt}X(t, x) = \nabla F(X(t, x)), \quad X(0, x) = x.$$

Si mostri che:

- (a) per ogni  $t \in \mathbf{R}$  la funzione  $X(t, \cdot)$  è di classe  $C^1$  e il suo gradiente spaziale  $\nabla X(t, x)$  soddisfa l'equazione differenziale

$$\frac{d}{dt}\nabla X(t, x) = \nabla^2 F(X(t, x))\nabla X(t, x);$$

- (b) se le matrici  $\{\nabla^2 F(x)\}_{x \in \mathbf{R}^n}$  commutano, vale

$$\nabla X(t, x) = \exp\left(\int_0^t \nabla^2 F(X(s, x)) ds\right) \quad \forall t \in \mathbf{R};$$

- (c) sotto l'ipotesi (b), esistono funzioni scalari  $g_t$  tali che  $X(t, x) = \nabla g_t(x)$  per ogni  $t \in \mathbf{R}$ . È possibile scegliere  $g_t$  con continuità rispetto al parametro  $t$ ?

**Esercizio 2.** Si consideri la funzione  $h : [-1/2, 1/2] \rightarrow \mathbf{R}$  definita da

$$h(x) = 1 - 4|x|,$$

e si consideri la sua estensione a tutto  $\mathbf{R}$  per 1-periodicità, indicandola con  $H(x)$ . Per  $n \in \mathbb{N}$  si definisca poi

$$H_n(x) = H(nx).$$

Sia  $F : [-1, 1] \rightarrow [-1, 1]$  una funzione continua e definiamo  $K_n(x) : [-1, 1] \rightarrow \mathbf{R}$  come

$$K_n(x) := |H_n(x) - F(x)|.$$

Calcolare il limite debole di  $(K_n)_n$  in  $L^2([-1, 1])$ .

**Esercizio 3.** Si consideri la seguente equazione ordinaria

$$y''(x) = -y(x)^3 + y'(x) + 1.$$

Si mostri che le soluzioni sono globalmente definite sull'asse reale per qualunque scelta dei dati iniziali.

**Esercizio 4.** Si ricorda che la legge esponenziale  $\mathcal{E}(\lambda)$  di parametro  $\lambda > 0$  è la misura sulla retta reale avente per densità, rispetto alla misura di Lebesgue, la funzione  $\lambda \exp(-\lambda x) \chi_{(0, \infty)}(x)$ .

- (a) Date due variabili aleatorie  $U, V$ , indipendenti e ciascuna avente legge  $\mathcal{E}(\lambda)$ ,  $\lambda > 0$ , si mostri che  $\mathbb{P}(\{U > V\}) = 1/2$  e che la variabile aleatoria  $|U - V|$  ha anch'essa legge  $\mathcal{E}(\lambda)$ .
- (b) Data una terna indipendente di variabili aleatorie  $X, Y, Z$ , ciascuna avente legge  $\mathcal{E}(\lambda)$ , si mostri che la probabilità che con tre segmenti di lunghezza rispettivamente  $X, Y$  e  $Z$  si possa formare un triangolo è uguale a  $1/4$ .

**Esercizio 5.** Sia  $D = \{(x, y) \in \mathbf{R}^2 : x^2 + y^2 < 1\}$  e  $\bar{D}$  il corrispondente disco chiuso. Si consideri lo spazio vettoriale  $C(\bar{D}, \mathbf{R}^2)$  delle mappe continue  $F : \bar{D} \rightarrow \mathbf{R}^2$ , dotato della norma del max

$$\|F\| = \max_{(x, y) \in \bar{D}} |F(x, y)|,$$

dove  $|\cdot|$  denota la usuale norma euclidea in  $\mathbf{R}^2$ .

Sia  $S$  il sottoinsieme di  $C(\bar{D}, \mathbf{R}^2)$  costituito dalle mappe  $F : \bar{D} \rightarrow \mathbf{R}^2$ , la cui restrizione a  $D$  è di classe  $C^1$  ed ha determinante della matrice Jacobiana identicamente uguale a 1.

Si mostri che le mappe costanti appartengono alla chiusura di  $S$  rispetto alla norma precedente.

SCUOLA NORMALE SUPERIORE  
AMMISSIONE AL IV ANNO DEL CORSO ORDINARIO

PROVA DI ALGEBRA E GEOMETRIA  
25 AGOSTO 2023

**Esercizio 1.** Se  $p$  è un primo, denotiamo come al solito con  $\mathbb{F}_p$  il campo con  $p$  elementi. Decidete per quali valori di  $p$  il gruppo  $\mathrm{PGL}_2(\mathbb{F}_p) = \mathrm{GL}_2(\mathbb{F}_p)/\mathbb{F}_p^*$  è isomorfo a un gruppo simmetrico  $S_n$  per qualche valore di  $n$ . Stessa questione per  $\mathrm{SL}_2(\mathbb{F}_p)$ .

*Nota:* L'esistenza di uno degli isomorfismi in questione è difficile da dimostrare, sentitevi liberi di lasciare un caso indeterminato.

**Esercizio 2.** Sia  $R$  un dominio a ideali principali con campo dei quozienti  $K$ . Fate vedere che ogni sottogruppo finito di  $\mathrm{GL}_n(K)$  è coniugato a un sottogruppo di  $\mathrm{GL}_n(R)$ .

**Esercizio 3.** Sia  $p \in \mathbb{C}[x_{ij}]$  un polinomio nelle  $n^2$  variabili  $x_{ij}$ , con  $1 \leq i \leq n$  e  $1 \leq j \leq n$ ; possiamo pensare a  $p$  come una funzione  $: M_n \rightarrow \mathbb{C}$ , dove  $M_n$  è lo spazio delle matrici complesse  $n \times n$ , mandando una matrice  $A = (x_{ij})$  in  $p(x_{ij})$ .

Definiamo  $n$  polinomi  $\sigma_1, \dots, \sigma_n$  nelle variabili  $x_{ij}$ , scrivendo

$$\det(tI_n + A) = t^n + \sigma_1(x_{ij})t^{n-1} + \sigma_2(x_{ij})t^{n-2} + \dots + \sigma_{n-1}(x_{ij})t + \sigma_n(x_{ij})$$

se  $A = (x_{ij})$ .

I  $\sigma_i$  sono, a meno del segno, i coefficienti del polinomio caratteristico;  $\sigma_1$  è la traccia,  $\sigma_n$  il determinante.

Sia  $p$  un polinomio come sopra, tale che la funzione polinomiale corrispondente  $p: M_n \rightarrow \mathbb{C}$  sia invariante per coniugio (in altre parole: se  $A$  e  $B$  sono matrici simili, allora  $p(A) = p(B)$ ). Fate vedere che esiste un polinomio  $q \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$  tale che  $p(x_{ij}) = q(\sigma_1(x_{ij}), \dots, \sigma_n(x_{ij}))$ .

**Esercizio 4.** Ricordo che un sottoinsieme  $S \subseteq \mathbb{R}^N$  è una *sottovarietà di codimensione  $c$*  se per ogni  $p \in S$  esiste un intorno  $U$  di  $p$  in  $\mathbb{R}^N$  e una funzione  $F: U \rightarrow \mathbb{R}^c$  tale che

- 1)  $S \cap U = F^{-1}(0)$ , e
- 2) il differenziale  $d_p F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^c$  è suriettivo.

Sia  $M_{m,n} = \mathbb{R}^{mn}$  lo spazio euclideo delle matrici reali  $m \times n$ , e per ogni intero  $r$  con  $0 \leq r \leq \min(m, n)$  chiamiamo  $S_r \subseteq M_{m,n}$  il sottoinsieme delle matrici di rango  $r$ . Fate vedere che  $S_r$  è una sottovarietà di  $M_{m,n}$  di codimensione  $(m-r)(n-r)$ .

Continua sulla pagina successiva

**Esercizio 5.** Sia  $S$  lo spazio topologico delle matrici reali simmetriche  $3 \times 3$  di rango 2.

Trovate le componenti connesse di  $S$ , e calcolate l'ordine del gruppo fondamentale della componente contenente la matrice

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

**Esercizio 6.** Sia  $f: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  una funzione di classe  $C^2$  tale che

- 1)  $f(-1) = f(1) = 0$ ,
- 2)  $f'(-1) = a > 0$  e  $f'(1) = b < 0$ , e
- 3)  $f(z) > 0$  se  $z \in (-1, 1)$ .

Consideriamo la superficie  $\Sigma \subseteq \mathbb{R}^3$  ottenuta ruotando intorno all'asse  $z$  la curva nel piano  $yz$

$$\{(0, f(z), z) \mid z \in (-1, 1)\}.$$

Indicando con  $K_\Sigma$  la curvatura gaussiana di  $\Sigma$ , calcolate l'integrale

$$\int_{\Sigma} K_\Sigma d\sigma$$

dove con  $d\sigma$  indichiamo la misura di superficie.

**Problema 1.** Consideriamo un polinomio quadratico reale  $x^2 + px + q$ , con  $q \neq 0$ , che ha due radici reali  $x_1$  e  $x_2$ . Si trovi un altro polinomio quadratico reale nella forma  $x^2 + p'x + q'$ , dove  $p'$  e  $q'$  dipendono da  $p$  e  $q$ , che ha come radici  $x_1/x_2$  e  $x_2/x_1$ .

**Problema 2.** Abbiamo un insieme  $S$  che consiste di tre interi distinti. Si faccia vedere che  $S$  contiene due elementi  $x$  ed  $y$  tali che  $x^3y - xy^3$  è divisibile per 10.

**Problema 3.** Si calcoli il numero di soluzioni in  $x$  dell'equazione

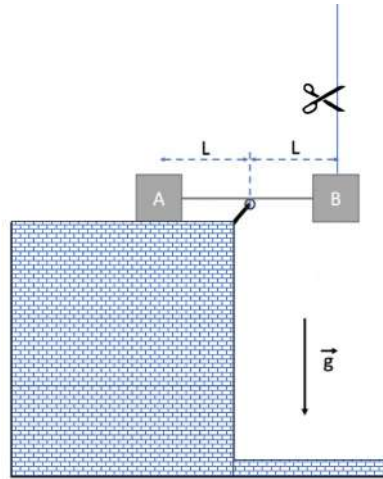
$$\sin(10(\sin x + \cos^2 x)) = 0$$

con  $0 \leq x \leq \pi/2$ .

(altri problemi sul retro)

**Problema 4.** Si consideri il sistema illustrato in figura, ove  $\vec{g}$  indica l'accelerazione di gravità e i due cubi identici  $A$  e  $B$  sono collegati da una fune inestensibile di lunghezza  $2L$ .

La fune, perfettamente flessibile e di massa trascurabile, scorre su una carrucola di dimensioni e massa trascurabili, e si trascurano altresì tutti gli attriti. Inizialmente, come in figura, la fune è disposta orizzontalmente, i cubi sono ad eguale distanza dalla carrucola e il cubo  $B$  è sospeso al soffitto tramite un filo verticale. Si noti che la figura non è in scala: lunghezze confrontabili a quella dello spigolo dei cubi sono trascurabili rispetto a  $L$ . Ad un dato istante, il filo verticale viene tagliato lasciando il sistema libero di muoversi. Si determini se il cubo  $A$  raggiunge la carrucola prima o dopo che il cubo  $B$  urti la parete verticale.



**Problema 5.** Considerare un contenitore cilindrico chiuso, con l'asse in verticale. Il suo interno è diviso in due sezioni da un disco sottile di massa  $M$  e superficie  $A$  uguale alla sezione interna del contenitore; tale disco può scorrere liberamente senza attrito mantenendosi orizzontale e bloccando lo scambio di particelle fra le due parti. Il contenitore è di un materiale buon conduttore di calore.

Nella sezione inferiore c'è azoto gassoso (da considerare un gas perfetto biatomico) inizialmente in equilibrio a temperatura  $T$  maggiore di  $0^\circ\text{C}$  e con il disco ad altezza  $h_0$  dal fondo del contenitore; nella sezione superiore non c'è nulla (c'è il vuoto).

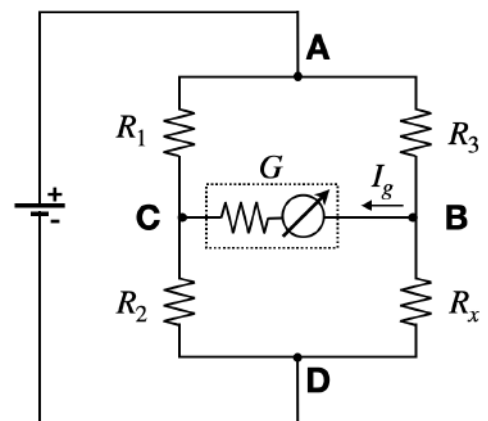
Il contenitore viene immerso (senza cambiarne l'orientamento) in una vasca contenente una miscela di acqua e ghiaccio a pressione atmosferica. Raggiunta la situazione di equilibrio, e assumendo che non tutto il ghiaccio si scioglie, qual è la quantità di ghiaccio che si è sciolta?

Considerare conosciuto il calore latente del ghiaccio  $\lambda$  e trascurare le capacità termiche di contenitore e disco.

**Problema 6.** Un metodo classico per la misura di resistenze è il Ponte di Wheatstone, ovvero un circuito elettrico come quello in figura, formato da tre resistenze note ( $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_3$ ) e una resistenza incognita ( $R_x$ ) connesse in modo da realizzare una maglia con quattro lati e quattro vertici (A, B, C, D). Tra i due vertici opposti A e D viene collegata una batteria in corrente continua mentre tra gli altri due (B, C) viene inserito un galvanometro per misurare la corrente ( $I_g$ ). Si precisa che il galvanometro è uno strumento in grado di misurare la direzione e l'intensità della corrente elettrica e che la sua resistenza interna è piccola rispetto alle altre resistenze nel circuito.

- Assumendo che  $R_1$  e  $R_2$  siano noti e che  $R_3$  sia regolabile a piacere in modo da azzerare la corrente  $I_g$ , spiegare come misurare  $R_x$  attraverso l'ausilio del galvanometro.
- Preso atto che in un esperimento reale potrebbe non essere possibile azzerare la corrente  $I_g$  dato che il valore della resistenza  $R_3$  non può variare con continuità, bensì con passo di  $1\ \Omega$ , determinare in modo approssimato il valore della resistenza  $R_x$  sapendo che  $R_1 = R_2 = 500\ \Omega$  e avendo effettuato le seguenti due misure:

- misura I  $I_g^I = +10\ \mu\text{A}$  con  $R_3^I = 150\ \Omega$
- misura II  $I_g^{II} = -30\ \mu\text{A}$  con  $R_3^{II} = 151\ \Omega$



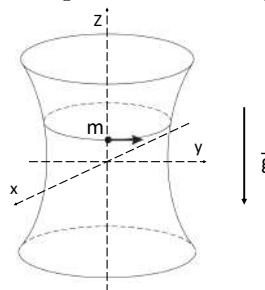
Prova di Metodi matematici per la fisica, Meccanica classica ed Elettromagnetismo

**Problema 1.** Si consideri la regione di spazio definita in coordinate cilindriche da  $0 < \phi < \alpha$  (con  $\rho > 0$  e  $-\infty < z < +\infty$ ) ove  $0 < \alpha < \pi/2$ , priva di cariche e con condizioni al bordo per il potenziale elettrostatico date da  $V = 0$  sul semipiano  $\phi = 0$  ( $\rho > 0$  e  $-\infty < z < +\infty$ ) e  $V = V_0 > 0$  sul semipiano  $\phi = \alpha$  ( $\rho > 0$  e  $-\infty < z < +\infty$ ). Sapendo che il potenziale non dipende da  $z$  e che per  $\rho \rightarrow \infty$  si mantiene limitato, si determini il potenziale in tale regione, e si discuta in che senso la soluzione trovata possa considerarsi unica o meno.

Si ricorda che il laplaciano in coordinate cilindriche è dato da

$$\nabla^2 f(\rho, z, \phi) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} .$$

**Problema 2.** Un punto materiale di massa  $m$  scorre senza attrito in presenza della gravità sulla superficie interna di un vaso (vedi figura) la cui forma è un iperboloide di rotazione con asse verticale dato in coordinate cilindriche da  $\rho^2 - z^2 = R^2$ . Si caratterizzino le orbite circolari giacenti sui piani  $z = h > 0$  e se ne discuta, in particolare, la stabilità in funzione di  $h$ .



**Problema 3.** Un punto materiale P di massa  $m$  si muove in un campo centrale

$$\vec{F} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2 = -\frac{GMm}{r^2} \hat{r} - \frac{3GML^2}{mc^2 r^4} \hat{r}$$

dove  $M$  è la massa di un punto materiale con  $M \gg m$ ,  $L$  è il modulo del momento angolare di P,  $G$  è la costante gravitazionale e  $c$  è la velocità della luce.

- Scrivere il potenziale efficace e spiegarne le differenze rispetto al potenziale Newtoniano classico.
- Determinare la condizione su  $L$  tale per cui P potrebbe percorrere un'orbita limitata e periodica.
- Si assuma che in assenza del termine  $\vec{F}_2$  P si muova in un'orbita circolare con raggio  $r_0$  e che il termine aggiuntivo non Newtoniano sia  $|\vec{F}_2| \ll |\vec{F}_1|$  in un intorno di  $r_0$ . Determinare l'angolo di precessione del punto di minima distanza dal centro dell'orbita perturbata al primo ordine perturbativo.

**Problema 4.** Nella regione di spazio  $x > 0$ , priva di cariche e correnti, è presente il seguente campo magnetico:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = B_0 \hat{z} e^{-i\omega t} e^{iky} e^{-qx} .$$

Si indichi quale relazione lega le grandezze reali e positive  $\omega$ ,  $k$  e  $q$ . Si determinino il campo elettrico associato e la media temporale del vettore di Poynting. Quale velocità si può associare al trasporto di energia mediato nel tempo?

**Problema 5.** Si consideri un ipotetico mezzo materiale omogeneo ed isotropo che, in una data banda di frequenze, ha una costante dielettrica  $\epsilon$  ed una permeabilità magnetica  $\mu$  entrambe reali e negative. Si discutano le caratteristiche delle onde elettromagnetiche piane in tale sistema. Si determini con che angolo si rifrange un raggio ben collimato (schematizzabile come un'onda piana) ad un'interfaccia piana tra il vuoto e tale mezzo, specificando le notazioni usate con un disegno e discutendo eventuali anomalie rispetto al caso usuale con  $\epsilon$  e  $\mu$  entrambe positive.

Prova di Termodinamica, Meccanica statistica e Meccanica quantistica

**Problema 1.** Un filo di gomma viene descritto come un sistema termodinamico in termini della sua energia  $U$ , della sua lunghezza  $L$  e del numero  $N$  di molecole che lo compongono. Si considerino le due espressioni seguenti per la sua entropia  $S(U, L, N)$ :

$$a) \quad S(U, L, N) = \alpha N l_0 \left( e^{-(\theta U/l_0)} - \frac{N l_0}{L} - \frac{L^2}{2 N^2 l_0^2} + \frac{3}{2} \right),$$

$$b) \quad S(U, L, N) = \alpha N l_0 \left( \phi \frac{U^{1/2}}{N^{1/2}} - \frac{N l_0}{L} - \frac{L^2}{2 N^2 l_0^2} + \frac{3}{2} \right),$$

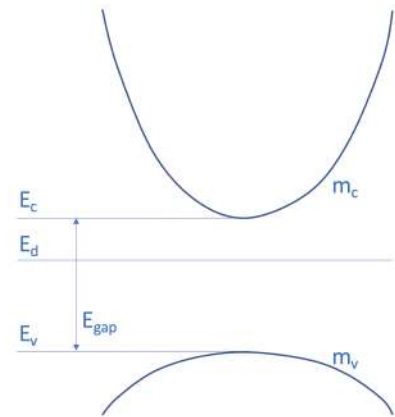
ove  $l_0$ ,  $\alpha$ ,  $\theta$  e  $\phi$  sono opportune costanti positive. Si dica perché una delle due espressioni non può essere corretta e si utilizzi l'altra per determinare la costante elastica del filo in regime lineare ( $|l_0 - L/N| \ll l_0$ ) in funzione della temperatura.

**Problema 2.** Sia dato il più semplice modello possibile di semiconduttore cristallino, costituito da una banda di valenza con massa efficace  $m_v$  e una banda di conduzione con massa efficace  $m_c$ , separate dal gap di energia  $E_g = E_c - E_v$  (come in figura).

Gli elettroni in banda di conduzione e in banda di valenza sono considerati particelle non interagenti di spin 1/2 aventi energie date rispettivamente da

$$\epsilon_c(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_c} \quad \text{e} \quad \epsilon_v(\vec{k}) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_v},$$

ove il vettore d'onda  $\vec{k}$  ha tre, due o una componente a seconda della dimensionalità del sistema (3D, 2D, 1D).



- (a) Si calcolino la densità degli stati in banda di conduzione  $\rho_c(\epsilon_c)$  e in banda di valenza  $\rho_v(\epsilon_v)$  per un semiconduttore unidimensionale, bidimensionale e tridimensionale.
- (b) A temperatura zero, in un semiconduttore privo di impurezze e in condizioni di neutralità, gli stati in banda di valenza sono tutti occupati e quelli in banda di conduzione tutti vuoti. Supponiamo ora che  $|E_v - \mu| \gg kT$ ,  $|E_c - \mu| \gg kT$ . Si dimostri che la dipendenza del potenziale chimico dalla temperatura è

$$\mu(T) = \frac{1}{2}(E_v + E_c) + C_D kT \ln \left( \frac{m_v}{m_c} \right)$$

e si valuti la costante  $C_D$  in funzione della dimensionalità.

- (c) Si introducano adesso impurezze sostituendo alcuni degli atomi del cristallo con i loro successivi nella tavola periodica: ogni impurezza ha così un elettrone in sovrannumero che può eventualmente "donare" alla banda di conduzione ionizzandosi. Si assuma che l'unico effetto delle impurezze sulla struttura elettronica sia quello di introdurre degli stati elettronici localizzati aventi energia  $E_d$  all'interno del gap con  $E_c - E_d \ll E_d - E_v$ . Ciascuno di questi livelli di impurezza può contenere un elettrone con spin up oppure uno con spin down oppure nessuno (in quest'ultimo caso l'impurezza è ionizzata e il suo elettrone è passato in banda di conduzione). Si discuta la variazione di  $\mu$  in funzione di  $T$  e della densità di impurezze  $N_d$ , nel limite di basse temperature  $k_B T \ll E_c - E_d$ , per il caso tridimensionale.

(altri problemi sul retro)



**Problema 3.** Due particelle quantistiche identiche di massa  $m$ , non interagenti, sono confinate lungo un asse 1D dove agisce un potenziale armonico con frequenza  $\omega$ . Si desidera calcolare la funzione di partizione del sistema per una distribuzione termica a temperatura  $T > 0$ , confrontando il caso in cui si applica la statistica bosonica con il caso in cui si applica la statistica fermionica. In entrambe le configurazioni, si calcoli anche il valore medio del centro di massa delle due particelle e, nel caso in cui  $T = 0$ , la varianza dello stesso. (Nel risolvere il problema si trascurino eventuali gradi di libertà di spin).

**Problema 4.** Una particella quantistica di massa  $m$  si muove lungo  $x$  sotto l'azione di un potenziale armonico e per  $t \rightarrow -\infty$  si trova nello stato fondamentale dell'Hamiltoniana  $H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2$ , la cui funzione d'onda normalizzata è  $\phi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha x^2/2)$  ove  $\alpha = m\Omega/\hbar$ . Viene quindi urtata da una particella di massa molto grande che si muove lungo  $x$  con velocità  $v$ . Si assuma di poter descrivere gli effetti dell'urto sulla particella di massa  $m$  tramite la seguente perturbazione dipendente dal tempo  $H_1(t) = \beta \delta(x - vt)$ . Si determini, al più basso ordine perturbativo in  $\beta$ , la probabilità che dopo l'urto, per  $t \rightarrow +\infty$ , la particella si trovi nel primo stato eccitato di  $H_0$ , la cui funzione d'onda normalizzata è  $\phi_1(x) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} x \exp(-\alpha x^2/2)$ .

**Problema 5.** Uno degli stati quantistici di un punto materiale di massa  $M$  sulla retta  $x$ , è descritto dalla funzione d'onda  $\Psi(x)$  che sull'intervallo  $[-L/2, L/2]$  assume valore  $(-|x| + L/2)/\sqrt{N}$  essendo nulla altrove ( $N$  è un opportuna costante di normalizzazione). Si determini la forma del potenziale  $V(x)$  che rende tale stato stazionario rispetto all'equazione di Schroedinger non relativistica. Per l'associata Hamiltoniana si determinino autovalori ed autostati.

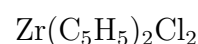
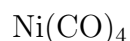
# Ammissione al IV anno - Corso ordinario, Chimica. Anno Accademico 2023/24

Prova Scritta di Chimica Generale

24/08/2023

## Esercizio 1

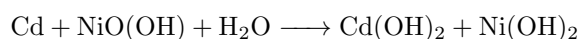
Per i seguenti composti



- si disegnino le strutture molecolari di tutti gli eventuali isomeri;
- si indichi il gruppo puntuale di simmetria;
- si valuti quali strutture hanno momento di dipolo diverso da zero;
- si valuti quali strutture sono chirali.

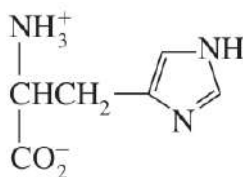
## Esercizio 2

Una batteria ricaricabile al nichel-cadmio contiene 15.0 g di cadmio, 5.0 g di NiO(OH), un elettrolita e acqua in eccesso rispetto alla quantità stechiometrica. Si calcoli l'intensità di corrente erogata in 1 ora, tempo in cui la batteria si scarica. Il rendimento del processo è del 90 %. La reazione di scarica (da bilanciare) è la seguente:



## Esercizio 3

Dato l'amminoacido istidina nella sua forma HHis neutra:

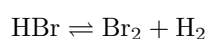


- Si scrivano le reazioni (e le strutture dei reagenti e dei prodotti) che si verificano quando l'istidina è titolata con acido cloridrico.
- Si considerino 25.0 mL di una soluzione 0.0500 M di istidina. Questa viene titolata con una soluzione 0.0500 M di acido cloridrico. Si calcoli il pH dopo l'aggiunta dei seguenti volumi: 0, 4.0, 8.0, 12.5, 25.0, 26.0, 35.0, 50.0 mL.

Si considerino i seguenti valori di pKa:  $\text{pK}_{\text{a}1} = 1.6$ ;  $\text{pK}_{\text{a}2} = 5.97$ ;  $\text{pK}_{\text{a}3} = 9.28$ .

## Esercizio 4

- Si determini la costante di equilibrio della seguente reazione (non bilanciata) di decomposizione a 1000 K:



b. Si calcoli la percentuale di HBr dissociato a 1000 K, assumendo che sia l'unica specie presente inizialmente.

Le energie libere di formazione valgono:  $-53.0 \text{ kJ mol}^{-1}$  (HBr);  $3.0 \text{ kJ mol}^{-1}$  ( $\text{Br}_2$ ).

Le entalpie standard di formazione valgono:  $-36.0 \text{ kJ mol}^{-1}$  (HBr) e  $31.0 \text{ kJ mol}^{-1}$  ( $\text{Br}_2$ ).

Si assuma comportamento ideale della miscela.

### Esercizio 5

Il punto di congelamento di una soluzione che contiene 1.00 g di un composto Y in 10.0 g di benzene (B) vale  $2.07 \text{ }^\circ\text{C}$ . La temperatura di congelamento del benzene è  $5.48 \text{ }^\circ\text{C}$ , e la costante crioscopica  $k_c$  vale  $5.12 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$ .

a. Si calcoli il peso molecolare di Y.

b. Sapendo che Y è composto per il 49 % da carbonio, per il 2.7 % da idrogeno e per il 47.3 % da cloro, si determini la formula bruta della molecola e il suo peso molecolare.

### Esercizio 6

*Dissertazione:* Si discutano l'origine e le implicazioni della chiralità in chimica, anche attraverso esempi illustrativi.

# Ammissione al IV anno - Corso Ordinario, Chimica. Anno Accademico 2023/24

Prova Scritta di Chimica Fisica

25/08/2023

## Esercizio 1

*Dissertazione:* Si discutano i fondamenti teorici alla base dei processi molecolari foto-indotti radiativi e non radiativi.

## Esercizio 2

- Data  $\Psi(r, 0)$  la funzione d'onda al tempo  $t = 0$ , si scriva la formula generale della funzione d'onda al tempo  $t > 0$ .
- Si determini il fattore di normalizzazione  $N$  per la seguente funzione d'onda al tempo  $t = 0$  (che descrive il cosiddetto pacchetto d'onda gaussiano):

$$\Psi(r, 0) = N \exp - \left( \frac{r}{2\sigma} \right)^2 \exp (i kr)$$

- Per la funzione d'onda al punto b, si scriva la funzione d'onda al tempo  $t > 0$ , e la densità di probabilità. Si commenti il risultato ottenuto prestando particolare attenzione alla forma funzionale ottenuta e all'evoluzione del centroide della gaussiana.
- Si dimostri la validità del principio di indeterminazione al tempo  $t$ . Si commentino i risultati ottenuti.

## Esercizio 3

Il primo stato eccitato di un oscillatore armonico tridimensionale, di frequenza angolare  $\omega$  e massa  $m$ , è triplamente degenere. Mediante l'utilizzo della teoria perturbativa, si calcoli lo splitting (al primo ordine) di questo stato in seguito all'applicazione di una perturbazione  $\mathcal{H}' = \beta xy$  dove  $\beta$  è una costante. Si calcolino anche le funzioni d'onda al primo ordine associate ai livelli splittati ricordando che, per un oscillatore armonico monodimensionale, vale la seguente relazione:

$$\langle n|x|n+1\rangle = \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}}$$

## Esercizio 4

Un materiale viene portato da una temperatura iniziale  $T_i$  ad una temperatura finale  $T_f$  venendo messo in contatto sequenzialmente con una serie di serbatoi a temperatura  $T_i + \Delta T$ ,  $T_i + 2\Delta T$ , ...,  $T_i + N\Delta T = T_f$ . Nell'ipotesi che la capacità termica del materiale  $C$  sia indipendente dalla temperatura, si calcoli la variazione di entropia  $\Delta S$  del sistema totale composto sia dal materiale che da tutti i serbatoi. Si calcoli inoltre  $\Delta S$  nel limite  $N \rightarrow \infty$  per un dato valore di  $T_f - T_i$  fissato.

## Esercizio 5

Si consideri un gas reale che segue l'equazione di Van der Waals.

- Si discuta l'origine fisica dei parametri inseriti nell'equazione, con particolare riferimento alla relazione di proporzionalità inversa tra  $p$  e  $V^2$ .
- Il gas viene sottoposto ad una espansione isoterma, portando il volume da  $V_1$  a  $V_2$ . Si calcoli la variazione di energia libera di Helmholtz.
- Si valuti se a partire dalle informazioni in possesso sia possibile calcolare la variazione di energia interna  $\Delta U$ . In caso positivo, si calcoli esplicitamente  $\Delta U$ .

### **Esercizio 6**

Si consideri la molecola di fluoro-metano.

- a. Specificare il numero di modi normali di vibrazione.
- b. Individuare gli elementi di simmetria della molecola, e specificare il gruppo di simmetria puntuale di appartenenza.
- c. Determinare la forma dei modi normali di vibrazione.
- d. Individuare quali di essi sono attivi in spettroscopia infrarossa e in spettroscopia Raman.

# Tables for Group Theory

By P. W. ATKINS, M. S. CHILD, and C. S. G. PHILLIPS

This provides the essential tables (character tables, direct products, descent in symmetry and subgroups) required for those using group theory, together with general formulae, examples, and other relevant information.

## Character Tables:

|    |  |    |
|----|--|----|
| 1  | The Groups $C_1, C_s, C_i$                     | 3  |
| 2  | The Groups $C_n (n = 2, 3, \dots, 8)$          | 4  |
| 3  | The Groups $D_n (n = 2, 3, 4, 5, 6)$           | 6  |
| 4  | The Groups $C_{nv} (n = 2, 3, 4, 5, 6)$        | 7  |
| 5  | The Groups $C_{nh} (n = 2, 3, 4, 5, 6)$        | 8  |
| 6  | The Groups $D_{nh} (n = 2, 3, 4, 5, 6)$        | 10 |
| 7  | The Groups $D_{nd} (n = 2, 3, 4, 5, 6)$        | 12 |
| 8  | The Groups $S_n (n = 4, 6, 8)$                 | 14 |
| 9  | The Cubic Groups:<br>$T, T_d, T_h$<br>$O, O_h$ | 15 |
| 10 | The Groups $I, I_h$                            | 17 |
| 11 | The Groups $C_{\infty v}$ and $D_{\infty h}$   | 18 |
| 12 | The Full Rotation Group ( $SU_2$ and $R_3$ )   | 19 |

## Direct Products:

|    |  |    |
|----|--|----|
| 1  | General Rules  | 20 |
| 2  | $C_2, C_3, C_6, D_3, D_6, C_{2v}, C_{3v}, C_{6v}, C_{2h}, C_{3h}, C_{6h}, D_{3h}, D_{6h}, D_{3d}, S_6$ | 20 |
| 3  | $D_2, D_{2h}$  | 20 |
| 4  | $C_4, D_4, C_{4v}, C_{4h}, D_{4h}, D_{2d}, S_4$  | 20 |
| 5  | $C_5, D_5, C_{5v}, C_{5h}, D_{5h}, D_{5d}$   | 21 |
| 6  | $D_{4d}, S_8$  | 21 |
| 7  | $T, O, T_h, O_h, T_d$  | 21 |
| 8  | $D_{6d}$   | 22 |
| 9  | $I, I_h$   | 22 |
| 10 | $C_{\infty v}, D_{\infty h}$   | 22 |
| 11 | The Full Rotation Group ( $SU_2$ and $R_3$ )   | 23 |

|  |    |
|--|----|
| The extended rotation groups (double groups):<br>character tables and direct product table | 24 |
| Descent in symmetry and subgroups  | 26 |

## Notes and Illustrations:

|  |    |
|--|----|
| General formulae                           | 29 |
| Worked examples                            | 31 |
| Examples of bases for some representations | 35 |
| Illustrative examples of point groups:     |    |
| I Shapes                                   | 37 |
| II Molecules                               | 39 |

**Character Tables****Notes:**

(1) Schönflies symbols are given for all point groups. Hermann–Mauguin symbols are given for the 32 crystallographic point groups.

(2) In the groups containing the operation  $C_5$  the following relations are useful:

$$\eta^+ = \frac{1}{2}(1 + 5^{\frac{1}{2}}) = 1.61803L = -2 \cos 144^\circ$$

$$\eta^- = \frac{1}{2}(1 - 5^{\frac{1}{2}}) = -0.61803L = -2 \cos 72^\circ$$

$$\eta^+ \eta^+ = 1 + \eta^+ \quad \eta^- \eta^- = 1 + \eta^- \quad \eta^+ \eta^- = -1$$

$$\eta^+ + \eta^- = 1 \quad 2 \cos 72^\circ + 2 \cos 144^\circ = -1$$

**1. The Groups  $C_1$ ,  $C_s$ ,  $C_i$** 

|              |     |
|--------------|-----|
| $C_1$<br>(1) | $E$ |
| A            | 1   |

|                      |     |            |               |                     |
|----------------------|-----|------------|---------------|---------------------|
| $C_s=C_h$<br>( $m$ ) | $E$ | $\sigma_h$ |               |                     |
| $A'$                 | 1   | 1          | $x, y, R_z$   | $x^2, y^2, z^2, xy$ |
| $A''$                | 1   | -1         | $z, R_x, R_y$ | $yz, xz$            |

|                    |     |     |                 |                                  |
|--------------------|-----|-----|-----------------|----------------------------------|
| $C_i = S_2$<br>(1) | $E$ | $i$ |                 |                                  |
| $A_g$              | 1   | 1   | $R_x, R_y, R_z$ | $x^2, y^2, z^2,$<br>$xy, xz, yz$ |
| $A_u$              | 1   | -1  | $x, y, z$       |                                  |



**2. The Groups  $C_n$  ( $n = 2, 3, \dots, 8$ )**

|              |  |                  |                  |                     |                    |                                |                                  |
|--------------|--|------------------|------------------|---------------------|--------------------|--------------------------------|----------------------------------|
| $C_2$<br>(2) | $E$  | $C_2$            |                  |                     |                    |                                |                                  |
| A            | 1  | 1                | $z, R_z$         | $x^2, y^2, z^2, xy$ |                    |                                |                                  |
| B            | 1  | -1               | $x, y, R_x, R_y$ | $yz, xz$            |                    |                                |                                  |
| $C_3$<br>(3) | $E$  | $C_3$            | $C_3^2$          |                     |                    | $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$ |                                  |
| A            | 1  | 1                | 1                | $z, R_z$            | $x^2 + y^2, z^2$   |                                |                                  |
| E            | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$   | $\varepsilon$    | $\varepsilon^*$  | $\varepsilon$       | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(x^2 - y^2, 2xy)(yz, xz)$     |                                  |
| $C_4$<br>(4) | $E$  | $C_4$            | $C_2$            | $C_4^3$             |                    |                                |                                  |
| A            | 1  | 1                | 1                | 1                   | $z, R_z$           | $x^2 + y^2, z^2$               |                                  |
| B            | 1  | -1               | 1                | -1                  |                    | $x^2 - y^2, 2xy$               |                                  |
| E            | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -i & -1 & i \end{Bmatrix}$   | $i$              | $-i$             | $i$                 | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(yz, xz)$                     |                                  |
| $C_5$        | $E$  | $C_5$            | $C_5^2$          | $C_5^3$             | $C_5^4$            |                                | $\varepsilon = \exp(2\pi i/5)$   |
| A            | 1  | 1                | 1                | 1                   | 1                  | $z, R_z$                       | $x^2 + y^2, z^2$                 |
| $E_1$        | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^2 & \varepsilon \end{Bmatrix}$       | $\varepsilon$    | $\varepsilon^2$  | $\varepsilon^{*2}$  | $\varepsilon^*$    | $(x, y)(R_x, R_y)$             | $(yz, xz)$                       |
| $E_2$        | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon^2 & \varepsilon^* & \varepsilon & \varepsilon^{*2} \\ 1 & \varepsilon^{*2} & \varepsilon & \varepsilon^* & \varepsilon^2 \end{Bmatrix}$       | $\varepsilon^2$  | $\varepsilon^*$  | $\varepsilon$       | $\varepsilon^{*2}$ |                                | $(x^2 - y^2, 2xy)$               |
| $C_6$<br>(6) | $E$  | $C_6$            | $C_3$            | $C_2$               | $C_3^2$            | $C_6^5$                        | $\varepsilon = \exp(2\pi i/6)$   |
| A            | 1  | 1                | 1                | 1                   | 1                  | 1                              | $z, R_z$                         |
| B            | 1  | -1               | 1                | -1                  | 1                  | -1                             | $x^2 + y^2, z^2$                 |
| $E_1$        | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & -\varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & -\varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$   | $\varepsilon$    | $-\varepsilon^*$ | $-1$                | $-\varepsilon$     | $\varepsilon^*$                | $(x, y)$<br>$(R_x, R_y)$         |
| $E_2$        | $\begin{Bmatrix} 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \\ 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \end{Bmatrix}$ | $-\varepsilon^*$ | $-\varepsilon$   | $1$                 | $-\varepsilon^*$   | $-\varepsilon$                 | $(xy, yz)$<br>$(x^2 - y^2, 2xy)$ |

**2. The Groups  $C_n$  ( $n = 2, 3, \dots, 8$ ) (cont..)**

| $C_7$          | $E$  | $C_7$ | $C_7^2$ | $C_7^3$ | $C_7^4$ | $C_7^5$ | $C_7^6$ |                          | $\varepsilon = \exp(2\pi i/7)$ |
|----------------|--|-------|---------|---------|---------|---------|---------|--------------------------|--------------------------------|
| A              | 1  | 1     | 1       | 1       | 1       | 1       | 1       | $z, R_z$                 | $x^2 + y^2, z^2$               |
| E <sub>1</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \varepsilon^3 & \varepsilon^{*3} & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^{*3} & \varepsilon^3 & \varepsilon^2 & \varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |         |         |         |         |         | $(x, y)$<br>$(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$                     |
| E <sub>2</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon^2 & \varepsilon^{*3} & \varepsilon^* & \varepsilon & \varepsilon^3 & \varepsilon^{*2} \\ 1 & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^3 & \varepsilon & \varepsilon^* & \varepsilon^{*3} & \varepsilon^2 \end{Bmatrix}$ |       |         |         |         |         |         |                          | $(x^2 - y^2, 2xy)$             |
| E <sub>3</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon^3 & \varepsilon^* & \varepsilon^2 & \varepsilon^{*2} & \varepsilon & \varepsilon^{*3} \\ 1 & \varepsilon^{*3} & \varepsilon & \varepsilon^{*2} & \varepsilon^2 & \varepsilon^* & \varepsilon^3 \end{Bmatrix}$ |       |         |         |         |         |         |                          |                                |

| $C_8$          | $E$  | $C_8$ | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ | $C_8^3$ | $C_8^5$ | $C_8^7$ |                          | $\varepsilon = \exp(2\pi i/8)$ |
|----------------|--|-------|-------|-------|---------|---------|---------|---------|--------------------------|--------------------------------|
| A              | 1  | 1     | 1     | 1     | 1       | 1       | 1       | 1       | $z, R_z$                 | $x^2 + y^2, z^2$               |
| B              | 1  | -1    | 1     | 1     | 1       | -1      | -1      | -1      |                          |                                |
| E <sub>1</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & i & -1 & -i & -\varepsilon^* & -\varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & -i & -1 & i & -\varepsilon & -\varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |       |       |         |         |         |         | $(x, y)$<br>$(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$                     |
| E <sub>2</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & 1 & -1 & -i & i & -i \\ 1 & -i & -1 & 1 & -1 & i & -i & i \end{Bmatrix}$   |       |       |       |         |         |         |         |                          | $(x^2 - y^2, 2xy)$             |
| E <sub>3</sub> | $\begin{Bmatrix} 1 & -\varepsilon & i & -1 & -i & \varepsilon^* & \varepsilon & -\varepsilon^* \\ 1 & -\varepsilon^* & -i & -1 & i & \varepsilon & \varepsilon^* & -\varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |       |       |         |         |         |         |                          |                                |

**3. The Groups  $D_n$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )**

| $D_2$<br>(222) | $E$ | $C_2(z)$ | $C_2(y)$ | $C_2(x)$ |          |                 |
|----------------|-----|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| A              | 1   | 1        | 1        | 1        |          | $x^2, y^2, z^2$ |
| B <sub>1</sub> | 1   | 1        | -1       | -1       | $z, R_z$ | $xy$            |
| B <sub>2</sub> | 1   | -1       | 1        | -1       | $y, R_y$ | $xz$            |
| B <sub>3</sub> | 1   | -1       | -1       | 1        | $x, R_x$ | $yz$            |

| $D_3$<br>(32)  | $E$ | $2C_3$ | $3C_2$ |                    |                    |                  |
|----------------|-----|--------|--------|--------------------|--------------------|------------------|
| A <sub>1</sub> | 1   | 1      | 1      |                    |                    | $x^2 + y^2, z^2$ |
| A <sub>2</sub> | 1   | 1      | -1     | $z, R_z$           |                    |                  |
| E              | 2   | -1     | 0      | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(x^2 - y^2, 2xy)$ | $(xz, yz)$       |

| $D_4$<br>(422) | $E$ | $2C_4$ | $C_2(=C_4^2)$ | $2C_2'$ | $2C_2''$ |                    |                  |
|----------------|-----|--------|---------------|---------|----------|--------------------|------------------|
| A <sub>1</sub> | 1   | 1      | 1             | 1       | 1        |                    | $x^2 + y^2, z^2$ |
| A <sub>2</sub> | 1   | 1      | 1             | -1      | -1       | $z, R_z$           |                  |
| B <sub>1</sub> | 1   | -1     | 1             | 1       | -1       |                    | $x^2 - y^2$      |
| B <sub>2</sub> | 1   | -1     | 1             | -1      | 1        |                    | $xy$             |
| E              | 2   | 0      | -2            | 0       | 0        | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$       |

| $D_5$          | $E$ | $2C_5$             | $2C_5^2$           | $5C_2$ |                    |                    |
|----------------|-----|--------------------|--------------------|--------|--------------------|--------------------|
| A <sub>1</sub> | 1   | 1                  | 1                  | 1      |                    | $x^2 + y^2, z^2$   |
| A <sub>2</sub> | 1   | 1                  | 1                  | -1     | $z, R_z$           |                    |
| E <sub>1</sub> | 2   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0      | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| E <sub>2</sub> | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0      |                    | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |

| $D_6$<br>(622) | $E$ | $2C_6$ | $2C_3$ | $C_2$ | $3C_2'$ | $3C_2''$ |                    |                    |
|----------------|-----|--------|--------|-------|---------|----------|--------------------|--------------------|
| A <sub>1</sub> | 1   | 1      | 1      | 1     | 1       | 1        |                    | $x^2 + y^2, z^2$   |
| A <sub>2</sub> | 1   | 1      | 1      | 1     | -1      | -1       | $z, R_z$           |                    |
| B <sub>1</sub> | 1   | -1     | 1      | -1    | 1       | -1       |                    |                    |
| B <sub>2</sub> | 1   | -1     | 1      | -1    | -1      | 1        |                    |                    |
| E <sub>1</sub> | 2   | 1      | -1     | -2    | 0       | 0        | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| E <sub>2</sub> | 2   | -1     | -1     | 2     | 0       | 0        |                    | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |

**4. The Groups  $C_{nv}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )**

| $C_{2v}$<br>( $2mm$ ) | $E$ | $C_2$ | $\sigma_v(xz)$ | $\sigma'_v(yz)$ |          |                 |
|-----------------------|-----|-------|----------------|-----------------|----------|-----------------|
| $A_1$                 | 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               | $y, R_x$ | $yz$            |

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

| $C_{4v}$<br>( $4mm$ ) | $E$ | $2C_4$ | $C_2$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ |                    |                  |
|-----------------------|-----|--------|-------|-------------|-------------|--------------------|------------------|
| $A_1$                 | 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           | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$       |

| $C_{5v}$ | $E$ | $2C_5$             | $2C_5^2$           | $5\sigma_v$ |                    |                    |
|----------|-----|--------------------|--------------------|-------------|--------------------|--------------------|
| $A_1$    | 1   | 1                  | 1                  | 1           | $z$                | $x^2 + y^2, z^2$   |
| $A_2$    | 1   | 1                  | 1                  | -1          | $R_z$              |                    |
| $E_1$    | 2   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0           | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| $E_2$    | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0           |                    | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |

| $C_{6v}$<br>( $6mm$ ) | $E$ | $2C_6$ | $2C_3$ | $C_2$ | $3\sigma_v$ | $3\sigma_d$ |                    |                    |
|-----------------------|-----|--------|--------|-------|-------------|-------------|--------------------|--------------------|
| $A_1$                 | 1   | 1      | 1      | 1     | 1           | 1           | $z$                | $x^2 + y^2, z^2$   |
| $A_2$                 | 1   | 1      | 1      | 1     | -1          | -1          | $R_z$              |                    |
| $B_1$                 | 1   | -1     | 1      | -1    | 1           | -1          |                    |                    |
| $B_2$                 | 1   | -1     | 1      | -1    | -1          | 1           |                    |                    |
| $E_1$                 | 2   | 1      | -1     | -2    | 0           | 0           | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| $E_2$                 | 2   | -1     | -1     | 2     | 0           | 0           |                    | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |

**5. The Groups  $C_{nh}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )**

| $C_{2h}$<br>( $2/m$ ) | $E$ | $C_2$ | $I$ | $\sigma_h$ |            |                     |
|-----------------------|-----|-------|-----|------------|------------|---------------------|
| $A_g$                 | 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          | $x, y$     |                     |

| $C_{3h}$<br>( $\bar{6}$ ) | $E$  | $C_3$ | $C_3^2$ | $\sigma_h$ | $S_3$ | $S_3^5$ |              | $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$ |
|---------------------------|--|-------|---------|------------|-------|---------|--------------|--------------------------------|
| $A'$                      | 1  | 1     | 1       | 1          | 1     | 1       | $R_z$        | $x^2 + y^2, z^2$               |
| $E'$                      | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$       |       |         |            |       |         | $(x, y)$     | $(x^2 - y^2, 2xy)$             |
| $A''$                     | 1  | 1     | 1       | -1         | -1    | -1      | $z$          |                                |
| $E''$                     | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |         |            |       |         | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$                     |

| $C_{4h}$<br>( $4/m$ ) | $E$  | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ | $i$ | $S_4^3$ | $\sigma_h$ | $S_4$ |              |                    |
|-----------------------|--|-------|-------|---------|-----|---------|------------|-------|--------------|--------------------|
| $A_g$                 | 1  | 1     | 1     | 1       | 1   | 1       | 1          | 1     | $R_z$        | $x^2 + y^2, z^2$   |
| $B_g$                 | 1  | -1    | 1     | -1      | 1   | -1      | 1          | -1    |              | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $E_g$                 | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & -i & 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -i & -1 & i & 1 & -i & -1 & i \end{Bmatrix}$ |       |       |         |     |         |            |       | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| $A_u$                 | 1  | 1     | 1     | 1       | -1  | -1      | -1         | -1    | $z$          |                    |
| $B_u$                 | 1  | -1    | 1     | -1      | -1  | 1       | -1         | 1     |              |                    |
| $E_u$                 | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & -i & -1 & -i & 1 & i \\ 1 & -i & -1 & i & -1 & i & 1 & -i \end{Bmatrix}$ |       |       |         |     |         |            |       | $(x, y)$     |                    |



**6. The Groups  $D_{nh}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )**

| $D_{2h}$<br>( $mmm$ ) | $E$ | $C_2(z)$ | $C_2(y)$ | $C_2(x)$ | $i$ | $\sigma(xy)$ | $\sigma(xz)$ | $\sigma(yz)$ |                 |      |
|-----------------------|-----|----------|----------|----------|-----|--------------|--------------|--------------|-----------------|------|
| $A_g$                 | 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           | $x$             |      |

| $D_{3h}$<br>( $\bar{6}$ ) $m2$ | $E$ | $2C_3$ | $3C_2$ | $\sigma_h$ | $2S_3$ | $3\sigma_v$ |              |  |                    |
|--------------------------------|-----|--------|--------|------------|--------|-------------|--------------|--|--------------------|
| $A'_1$                         | 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           | $(x, y)$     |  | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $A''_1$                        | 1   | 1      | 1      | -1         | -1     | -1          |              |  |                    |
| $A''_2$                        | 1   | 1      | -1     | -1         | -1     | 1           | $z$          |  |                    |
| $E''$                          | 2   | -1     | 0      | -2         | 1      | 0           | $(R_x, R_y)$ |  | $(xy, yz)$         |

| $D_{4h}$<br>( $4/mmm$ ) | $E$ | $2C_4$ | $C_2$ | $2C'_2$ | $2C''_2$ | $i$ | $2S_4$ | $\sigma_h$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ |                  |             |
|-------------------------|-----|--------|-------|---------|----------|-----|--------|------------|-------------|-------------|------------------|-------------|
| $A_{1g}$                | 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           | $(x, y)$         |             |

**6. The Groups  $D_{nh}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ ) (cont...)**

| $D_{5h}$ | $E$ | $2C_5$             | $2C_5^2$           | $5C_2$ | $\sigma_h$ | $2S_5$              | $2S_5^3$            | $5\sigma_v$ |                    |
|----------|-----|--------------------|--------------------|--------|------------|---------------------|---------------------|-------------|--------------------|
| $A_1'$   | 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   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0      | 2          | $2 \cos 72^\circ$   | $2 \cos 144^\circ$  | 0           | $(x, y)$           |
| $E_2'$   | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0      | 2          | $2 \cos 144^\circ$  | $2 \cos 72^\circ$   | 0           | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $A_1''$  | 1   | 1                  | 1                  | 1      | -1         | -1                  | -1                  | -1          |                    |
| $A_2''$  | 1   | 1                  | 1                  | -1     | -1         | -1                  | -1                  | 1           | $z$                |
| $E_1''$  | 2   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0      | -2         | $-2 \cos 72^\circ$  | $-2 \cos 144^\circ$ | 0           | $(R_x, R_y)$       |
| $E_2''$  | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0      | -2         | $-2 \cos 144^\circ$ | $-2 \cos 72^\circ$  | 0           | $(xy, yz)$         |

| $D_{6h}$<br>( $6/mmm$ ) | $E$ | $2C_6$ | $2C_3$ | $C_2$ | $3C_2'$ | $3C_2''$ | $i$ | $2S_3$ | $2S_6$ | $\sigma_h$ | $3\sigma_d$ | $3\sigma_v$ |                                  |
|-------------------------|-----|--------|--------|-------|---------|----------|-----|--------|--------|------------|-------------|-------------|----------------------------------|
| $A_{1g}$                | 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          |                                  |
| $B_{2g}$                | 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           | $(R_x - R_y)$                    |
| $E_{2g}$                | 2   | -1     | -1     | 2     | 0       | 0        | 2   | -1     | -1     | 2          | 0           | 0           | $(xz, yz)$<br>$(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $A_{1u}$                | 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           |                                  |



**7. The Groups  $D_{nd}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )**

| $D_{2d} = V_d$<br>$(\overline{42})_m$ | $E$ | $2S_4$ | $C_2$ | $2C'_2$ | $2\sigma_d$ |                          |                  |
|---------------------------------------|-----|--------|-------|---------|-------------|--------------------------|------------------|
| $A_1$                                 | 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           | $(x, y)$<br>$(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$       |

| $D_{3d}$<br>$(\overline{3})_m$ | $E$ | $2C_3$ | $3C_2$ | $i$ | $2S_6$ | $3\sigma_d$ |  |
|--------------------------------|-----|--------|--------|-----|--------|-------------|--|
| $A_{1g}$                       | 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           | $(R_x, R_y)$<br>$(x^2 - y^2, 2xy)$<br>$(xz, yz)$ |
| $A_{1u}$                       | 1   | 1      | 1      | -1  | -1     | -1          |  |
| $A_{2u}$                       | 1   | 1      | -1     | -1  | -1     | 1           | $z$  |
| $E_u$                          | 2   | -1     | 0      | -2  | 1      | 0           | $(x, y)$   |

| $D_{4d}$ | $E$ | $2S_8$      | $2C_4$ | $2S_8^3$    | $C_2$ | $4C'_2$ | $4\sigma_d$ |                            |
|----------|-----|-------------|--------|-------------|-------|---------|-------------|----------------------------|
| $A_1$    | 1   | 1           | 1      | 1           | 1     | 1       | 1           | $x^2 + y^2, z^2$           |
| $A_2$    | 1   | 1           | 1      | 1           | 1     | -1      | -1          | $R_z$                      |
| $B_1$    | 1   | -1          | 1      | -1          | 1     | 1       | -1          |                            |
| $B_2$    | 1   | -1          | 1      | -1          | 1     | -1      | 1           | $z$                        |
| $E_1$    | 2   | $\sqrt{2}$  | 0      | $-\sqrt{2}$ | -2    | 0       | 0           | $(x, y)$                   |
| $E_2$    | 2   | 0           | -2     | 0           | 2     | 0       | 0           | $(x^2 - y^2, 2xy)$         |
| $E_3$    | 2   | $-\sqrt{2}$ | 0      | $\sqrt{2}$  | -2    | 0       | 0           | $(R_x, R_y)$<br>$(xz, yz)$ |

**7. The Groups  $D_{nd}$  ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ ) (cont..)**

| $D_{5d}$ | $E$ | $2C_5$             | $2C_5^2$           | $5C_2$ | $i$ | $2S_{10}^3$         | $2S_{10}$           | $5\sigma_d$ |                    |
|----------|-----|--------------------|--------------------|--------|-----|---------------------|---------------------|-------------|--------------------|
| $A_{1g}$ | 1   | 1                  | 1                  | 1      | 1   | 1                   | 1                   | 1           | $x^2 + y^2, z^2$   |
| $A_{2g}$ | 1   | 1                  | 1                  | -1     | 1   | 1                   | 1                   | -1          | $R_z$              |
| $E_{1g}$ | 2   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0      | 2   | $2 \cos 72^\circ$   | $2 \cos 144^\circ$  | 0           | $(R_x, R_y)$       |
| $E_{2g}$ | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0      | 2   | $2 \cos 144^\circ$  | $2 \cos 72^\circ$   | 0           | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $A_{1u}$ | 1   | 1                  | 1                  | 1      | -1  | -1                  | -1                  | -1          |                    |
| $A_{2u}$ | 1   | 1                  | 1                  | -1     | -1  | -1                  | -1                  | 1           | $z$                |
| $E_{1u}$ | 2   | $2 \cos 72^\circ$  | $2 \cos 144^\circ$ | 0      | -2  | $-2 \cos 72^\circ$  | $-2 \cos 144^\circ$ | 0           | $(x, y)$           |
| $E_{2u}$ | 2   | $2 \cos 144^\circ$ | $2 \cos 72^\circ$  | 0      | -2  | $-2 \cos 144^\circ$ | $-2 \cos 72^\circ$  | 0           |                    |

| $D_{6d}$ | $E$ | $2S_{12}$   | $2C_6$ | $2S_4$ | $2C_3$ | $2S_{12}^5$ | $C_2$ | $6C'_2$ | $6\sigma_d$ |                         |
|----------|-----|-------------|--------|--------|--------|-------------|-------|---------|-------------|-------------------------|
| $A_1$    | 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      | -1          | $R_z$                   |
| $B_1$    | 1   | -1          | 1      | -1     | 1      | -1          | 1     | 1       | -1          |                         |
| $B_2$    | 1   | -1          | 1      | -1     | 1      | -1          | 1     | -1      | 1           | $z$                     |
| $E_1$    | 2   | $\sqrt{3}$  | 1      | 0      | -1     | $-\sqrt{3}$ | -2    | 0       | 0           | $(x, y)$                |
| $E_2$    | 2   | 1           | -1     | -2     | -1     | 1           | 2     | 0       | 0           | $(x^2 - y^2, 2xy)$      |
| $E_3$    | 2   | 0           | -2     | 0      | 2      | 0           | -2    | 0       | 0           |                         |
| $E_4$    | 2   | -1          | -1     | 2      | -1     | -1          | 2     | 0       | 0           |                         |
| $E_5$    | 2   | $-\sqrt{3}$ | 1      | 0      | -1     | $\sqrt{3}$  | -2    | 0       | 0           | $(R_x, R_y)$ $(xy, yz)$ |

**8. The Groups  $S_n$  ( $n = 4, 6, 8$ )**

| $S_4$<br>(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      | $z$      | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |            |
| E            | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -i & -1 & i \end{Bmatrix}$ |       |       |         | $(x, y)$ | $(R_x, R_y)$       | $(xz, yz)$ |

| $S_6$<br>(3) | $E$  | $C_3$ | $C_3^2$ | $i$ | $S_6^5$ | $S_6$ |              | $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$ |            |
|--------------|--|-------|---------|-----|---------|-------|--------------|--------------------------------|------------|
| $A_g$        | 1  | 1     | 1       | 1   | 1       | 1     | $R_z$        | $x^2 + y^2, z^2$               |            |
| $E_g$        | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |         |     |         |       | $(R_x, R_y)$ | $(x^2 - y^2, 2xy)$             | $(xy, yz)$ |
| $A_u$        | 1  | 1     | 1       | -1  | -1      | -1    | $z$          |                                |            |
| $E_u$        | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |         |     |         |       | $(x, y)$     |                                |            |

| $S_8$ | $E$  | $S_8$ | $C_4$ | $S_8^3$ | $C_2$ | $S_8^5$ | $C_4^3$ | $S_8^7$ |              | $\varepsilon = \exp(2\pi i/8)$ |
|-------|--|-------|-------|---------|-------|---------|---------|---------|--------------|--------------------------------|
| A     | 1  | 1     | 1     | 1       | 1     | 1       | 1       | 1       | $R_z$        | $x^2 + y^2, z^2$               |
| B     | 1  | -1    | 1     | -1      | 1     | -1      | 1       | -1      | $z$          |                                |
| $E_1$ | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & i & -\varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & -i & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & -i & -\varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & i & \varepsilon \end{Bmatrix}$ |       |       |         |       |         |         |         | $(x, y)$     |                                |
| $E_2$ | $\begin{Bmatrix} 1 & i & -1 & -i & 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -i & -1 & i & 1 & -i & -1 & i \end{Bmatrix}$   |       |       |         |       |         |         |         |              | $(x^2 - y^2, 2xy)$             |
| $E_3$ | $\begin{Bmatrix} 1 & -\varepsilon^* & -i & \varepsilon & -1 & \varepsilon^* & i & -\varepsilon \\ 1 & -\varepsilon & i & \varepsilon^* & -1 & \varepsilon & -i & -\varepsilon^* \end{Bmatrix}$ |       |       |         |       |         |         |         | $(R_x, R_y)$ | $(xy, yz)$                     |

**9. The Cubic Groups**

| $T$<br>(23) | $E$  | $4C_3$ | $4C_3^2$ | $3C_2$ |                                  | $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$          |
|-------------|--|--------|----------|--------|----------------------------------|---|
| A           | 1  | 1      | 1        | 1      |                                  | $x^2 + y^2 + z^2$                       |
| E           | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 \end{Bmatrix}$ |        |          |        |                                  | $(\sqrt{3}(x^2 - y^2)2z^2 - x^2 - y^2)$ |
| T           | 3  | 0      | 0        | -1     | $(x, y, z)$<br>$(R_x, R_y, R_z)$ | $(xy, xz, yz)$                          |

| $T_d$<br>( $\bar{4}3m$ ) | $E$ | $8C_3$ | $3C_2$ | $6S_4$ | $6\sigma_d$ |   |
|--------------------------|-----|--------|--------|--------|-------------|---|
| A <sub>1</sub>           | 1   | 1      | 1      | 1      | 1           | $x^2 + y^2 + z^2$                         |
| A <sub>2</sub>           | 1   | 1      | 1      | -1     | -1          |   |
| E                        | 2   | -1     | 2      | 0      | 0           | $(2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2))$ |
| T <sub>1</sub>           | 3   | 0      | -1     | 1      | -1          | $(R_x, R_y, R_z)$                         |
| T <sub>2</sub>           | 3   | 0      | -1     | -1     | 1           | $(x, y, z)$ $(xy, xz, yz)$                |

| $T_h$<br>( $m\bar{3}$ ) | $E$  | $4C_3$ | $4C_3^2$ | $3C_2$ | $i$ | $4S_6$ | $4S_6^2$ | $3\sigma_d$ | $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$            |
|-------------------------|--|--------|----------|--------|-----|--------|----------|-------------|---|
| A <sub>g</sub>          | 1  | 1      | 1        | 1      | 1   | 1      | 1        | 1           | $x^2 + y^2 + z^2$                         |
| E <sub>g</sub>          | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 \end{Bmatrix}$         |        |          |        |     |        |          |             | $(2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2))$ |
| T <sub>g</sub>          | 3  | 0      | 0        | -1     | 3   | 0      | 0        | -1          | $(R_x, R_y, R_z)$ $(xy, yz, xz)$          |
| A <sub>u</sub>          | 1  | 1      | 1        | 1      | -1  | -1     | -1       | -1          |   |
| E <sub>u</sub>          | $\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & -1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & -1 \end{Bmatrix}$ |        |          |        |     |        |          |             |   |
| T <sub>u</sub>          | 3  | 0      | 0        | -1     | -3  | 0      | 0        | 1           | $(x, y, z)$                               |

| $O$<br>(432)   | $E$ | $8C_3$ | $3C_2$ | $6C_4$ | $6C_2'$ |   |
|----------------|-----|--------|--------|--------|---------|---|
| A <sub>1</sub> | 1   | 1      | 1      | 1      | 1       | $x^2 + y^2 + z^2$                         |
| A <sub>2</sub> | 1   | 1      | 1      | -1     | -1      |   |
| E              | 2   | -1     | 2      | 0      | 0       | $(2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2))$ |
| T <sub>1</sub> | 3   | 0      | -1     | 1      | -1      | $(x, y, z)$<br>$(R_x, R_y, R_z)$          |
| T <sub>2</sub> | 3   | 0      | -1     | -1     | 1       | $(xy, xz, yz)$                            |

## 9. The Cubic Groups (cont...)

| $O_h$<br>( $m\bar{3}m$ ) | $E$ | $8C_3$ | $6C_2$ | $6C_4$ | $3C_2$<br>( $=C_4^2$ ) | $i$ | $6S_4$ | $8S_6$ | $3\sigma_h$ | $6\sigma_d$ |  |
|--------------------------|-----|--------|--------|--------|------------------------|-----|--------|--------|-------------|-------------|--|
| $A_{1g}$                 | 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           | $(2z^2 - x^2 - y^2,$<br>$\sqrt{3}(x^2 - y^2))$ |
| $T_{1g}$                 | 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          |  |

**10. The Groups  $I, I_h$** 

| $I$   | $E$ | $12C_5$  | $12C_5^2$ | $20C_3$ | $15C_2$ |                                  | $\eta^\pm = \frac{1}{2} \left( 1 \pm 5^{\frac{1}{2}} \right)$    |
|-------|-----|----------|-----------|---------|---------|----------------------------------|--|
| A     | 1   | 1        | 1         | 1       | 1       |                                  | $x^2 + y^2 + z^2$  |
| $T_1$ | 3   | $\eta^+$ | $\eta^-$  | 0       | -1      | $(x, y, z)$<br>$(R_x, R_y, R_z)$ |  |
| $T_2$ | 3   | $\eta^-$ | $\eta^+$  | 0       | -1      |                                  |  |
| G     | 4   | -1       | -1        | 1       | 0       |                                  |  |
| H     | 5   | 0        | 0         | -1      | 1       |                                  | $(2z^2 - x^2 - y^2,$<br>$\sqrt{3} (x^2 - y^2))$<br>$xy, yz, zx)$ |

| $I_h$    | $E$ | $12C_5$  | $12C_5^2$ | $20C_3$ | $15C_2$ | $i$ | $12S_{10}$ | $12S_{10}^3$ | $20S_6$ | $15\sigma$ |                   | $\eta^\pm = \frac{1}{2} \left( 1 \pm 5^{\frac{1}{2}} \right)$     |
|----------|-----|----------|-----------|---------|---------|-----|------------|--------------|---------|------------|-------------------|---|
| $A_g$    | 1   | 1        | 1         | 1       | 1       | 1   | 1          | 1            | 1       | 1          |                   | $x^2 + y^2 + z^2$   |
| $T_{1g}$ | 3   | $\eta^+$ | $\eta^-$  | 0       | -1      | 3   | $\eta^-$   | $\eta^+$     | -1      | -1         | $(R_x, R_y, R_z)$ |   |
| $T_{2g}$ | 3   | $\eta^-$ | $\eta^+$  | 0       | -1      | 3   | $\eta^+$   | $\eta^-$     | 0       | -1         |                   |   |
| $G_g$    | 4   | -1       | -1        | 1       | 0       | 4   | -1         | -1           | 1       | 0          |                   |   |
| $H_g$    | 5   | 0        | 0         | -1      | 1       | 5   | 0          | 0            | -1      | 1          |                   | $(2z^2 - x^2 - y^2,$<br>$\sqrt{3} (x^2 - y^2))$<br>$(xy, yz, zx)$ |
| $A_u$    | 1   | 1        | 1         | 1       | 1       | -1  | -1         | -1           | -1      | -1         |                   |   |
| $T_{1u}$ | 3   | $\eta^+$ | $\eta^-$  | 0       | -1      | -3  | $\eta^-$   | $\eta^+$     | 0       | 1          | $(x, y, z)$       |   |
| $T_{2u}$ | 3   | $\eta^-$ | $\eta^+$  | 0       | -1      | -3  | $\eta^+$   | $\eta^-$     | 0       | 1          |                   |   |
| $G_u$    | 4   | -1       | -1        | 1       | 0       | -4  | 1          | 1            | -1      | 0          |                   |   |
| $H_u$    | 5   | 0        | 0         | -1      | 1       | -5  | 0          | 0            | 1       | -1         |                   |   |

**11. The Groups  $C_{\infty v}$  and  $D_{\infty h}$** 

| $C_{\infty v}$        | $E$ | $C_2$ | $2C_{\infty}^{\phi}$ | ... | $\infty\sigma_v$ |                     |                    |
|-----------------------|-----|-------|----------------------|-----|------------------|---------------------|--------------------|
| $A_1 \equiv \Sigma^+$ | 1   | 1     | 1                    | ... | 1                | $z$                 | $x^2 + y^2, z^2$   |
| $A_2 \equiv \Sigma^-$ | 1   | 1     | 1                    | ... | -1               | $R_z$               |                    |
| $E_1 \equiv \Pi$      | 2   | -2    | $2 \cos \phi$        | ... | 0                | $(x, y) (R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |
| $E_2 \equiv \Delta$   | 2   | 2     | $2 \cos 2\phi$       | ... | 0                |                     | $(x^2 - y^2, 2xy)$ |
| $E_3 \equiv \Phi$     | 2   | -2    | $2 \cos 3\phi$       | ... | 0                |                     |                    |
| ...                   | ... | ...   | ...                  | ... | ...              |                     |                    |
| ...                   | ... | ...   | ...                  | ... | ...              |                     |                    |

| $D_{\infty h}$ | $E$ | $2C_{\infty}^{\phi}$ | ... | $\infty\sigma_v$ | $i$ | $2S_{\infty}^{\phi}$ | ... | $\infty C_2$ |                       |
|----------------|-----|----------------------|-----|------------------|-----|----------------------|-----|--------------|-----------------------|
| $\Sigma_g^+$   | 1   | 1                    | ... | 1                | 1   | 1                    | ... | 1            | $x^2 + y^2, z^2$      |
| $\Sigma_g^-$   | 1   | 1                    | ... | -1               | 1   | 1                    | ... | -1           | $R_z$                 |
| $\Pi_g$        | 2   | $2 \cos \phi$        | ... | 0                | 2   | $-2 \cos \phi$       | ... | 0            | $(R_x, R_y) (xz, yz)$ |
| $\Delta_g$     | 2   | $2 \cos 2\phi$       | ... | 0                | 2   | $2 \cos 2\phi$       | ... | 0            | $(x^2 - y^2, 2xy)$    |
| ...            | ... | ...                  | ... | ...              | ... | ...                  | ... | ...          |                       |
| $\Sigma_u^+$   | 1   | 1                    | ... | 1                | -1  | -1                   | ... | -1           | $z$                   |
| $\Sigma_u^-$   | 1   | 1                    | ... | -1               | -1  | -1                   | ... | 1            |                       |
| $\Pi_u$        | 2   | $2 \cos \phi$        | ... | 0                | -2  | $2 \cos \phi$        | ... | 0            | $(x, y)$              |
| $\Delta_u$     | 2   | $2 \cos 2\phi$       | ... | 0                | -2  | $-2 \cos 2\phi$      | ... | 0            |                       |
| ...            | ... | ...                  | ... | ...              | ... | ...                  | ... | ...          |                       |

**12. The Full Rotation Group (SU<sub>2</sub> and R<sub>3</sub>)**

$$\chi^{(j)}(\phi) = \begin{cases} \frac{\sin\left(j + \frac{1}{2}\right)\phi}{\sin\frac{1}{2}\phi} & \phi \neq 0 \\ 2j + 1 & \phi = 0 \end{cases}$$

Notation : Representation labelled  $\Gamma^{(j)}$  with  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots, \infty$ , for  $R_3$   $j$  is confined to integral values (and written  $l$  or  $L$ ) and the labels  $S \equiv \Gamma^{(0)}$ ,  $P \equiv \Gamma^{(1)}$ ,  $D \equiv \Gamma^{(2)}$ , etc. are used.



**Direct Products**

**1. General rules**

(a) For point groups in the lists below that have representations  $A, B, E, T$  without subscripts, read  $A_1 = A_2 = A$ , etc.

(b)

|   |   |   |  |   |   |
|---|---|---|--|---|---|
|   | g | u |  | ' | " |
| g | g | u |  | ' | " |
| u |   | g |  | " | ' |

(c) Square brackets [ ] are used to indicate the representation spanned by the antisymmetrized product of a degenerate representation with itself.

**Examples**

For  $D_{3h}$   $E' \times E'' = A_1'' + A_2'' + E$

For  $D_{6h}$   $E_{1g} \times E_{2g} = 2B_g + E_{1g}$ .

**2. For  $C_2, C_3, C_6, D_3, D_6, C_{2v}, C_{3v}, C_{6v}, C_{2h}, C_{3h}, C_{6h}, D_{3h}, D_{6h}, D_{3d}, S_6$**

|       |       |       |       |       |                     |                     |
|-------|-------|-------|-------|-------|---------------------|---------------------|
|       | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$               |
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$               |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E_1$               | $E_2$               |
| $B_1$ |       |       | $A_1$ | $A_2$ | $E_2$               | $E_1$               |
| $B_2$ |       |       |       | $A_1$ | $E_2$               | $E_1$               |
| $E_1$ |       |       |       |       | $A_1 + [A_2] + E_2$ | $B_1 + B_2 + E_1$   |
| $E_2$ |       |       |       |       |                     | $A_1 + [A_2] + E_2$ |

**3. For  $D_2, D_{2h}$**

|       |   |       |       |       |
|-------|---|-------|-------|-------|
|       | A | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ |
| A     | A | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ |
| $B_1$ |   | A     | $B_3$ | $B_2$ |
| $B_2$ |   |       | A     | $B_1$ |
| $B_3$ |   |       |       | A     |

**4. For  $C_4$ ,  $D_4$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{4h}$ ,  $D_{4h}$ ,  $D_{2d}$ ,  $S_4$** 

|       | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E$                       |
|-------|-------|-------|-------|-------|---------------------------|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E$                       |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E$                       |
| $B_1$ |       |       | $A_1$ | $A_2$ | $E$                       |
| $B_2$ |       |       |       | $A_1$ | $E$                       |
| $E$   |       |       |       |       | $A_1 + [A_2] + B_1 + B_2$ |

**5. For  $C_5$ ,  $D_5$ ,  $C_{5v}$ ,  $C_{5h}$ ,  $D_{5h}$ ,  $D_{5d}$** 

|       | $A_1$ | $A_2$ | $E_1$               | $E_2$               |
|-------|-------|-------|---------------------|---------------------|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $E_1$               | $E_2$               |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $E_1$               | $E_2$               |
| $E_1$ |       |       | $A_1 + [A_2] + E_2$ | $E_1 + E_2$         |
| $E_2$ |       |       |                     | $A_1 + [A_2] + E_1$ |

**6. For  $D_{4d}$ ,  $S_8$** 

|       | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$                     | $E_3$               |
|-------|-------|-------|-------|-------|---------------------|---------------------------|---------------------|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$                     | $E_3$               |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E_1$               | $E_2$                     | $E_3$               |
| $B_1$ |       |       | $A_1$ | $A_2$ | $E_3$               | $E_2$                     | $E_1$               |
| $B_2$ |       |       |       | $A_1$ | $E_3$               | $E_2$                     | $E_1$               |
| $E_1$ |       |       |       |       | $A_1 + [A_2] + E_2$ | $E_1 + E_2$               | $B_1 + B_2 + E_2$   |
| $E_2$ |       |       |       |       |                     | $A_1 + [A_2] + B_1 + B_2$ | $E_1 + E_3$         |
| $E_3$ |       |       |       |       |                     |                           | $A_1 + [A_2] + E_2$ |

**7. For  $T$ ,  $O$ ,  $T_h$ ,  $O_h$ ,  $T_d$** 

|       | $A_1$ | $A_2$ | $E$               | $T_1$                   | $T_2$                   |
|-------|-------|-------|-------------------|-------------------------|-------------------------|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $E$               | $T_1$                   | $T_2$                   |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $E$               | $T_2$                   | $T_1$                   |
| $E$   |       |       | $A_1 + [A_2] + E$ | $T_1 + T_2$             | $T_1 + T_2$             |
| $T_1$ |       |       |                   | $A_1 + E + [T_1] + T_2$ | $A_2 + E + T_1 + T_2$   |
| $T_2$ |       |       |                   |                         | $A_1 + E + [T_1] + T_2$ |

**8. For  $D_{6d}$** 

|       | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$               | $E_3$                     | $E_4$               | $E_5$               |
|-------|-------|-------|-------|-------|---------------------|---------------------|---------------------------|---------------------|---------------------|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$               | $E_2$               | $E_3$                     | $E_4$               | $E_5$               |
| $A_2$ |       | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E_1$               | $E_2$               | $E_3$                     | $E_4$               | $E_5$               |
| $B_1$ |       |       | $A_1$ | $A_2$ | $E_5$               | $E_4$               | $E_3$                     | $E_2$               | $E_1$               |
| $B_2$ |       |       |       | $A_1$ | $E_5$               | $E_4$               | $E_3$                     | $E_2$               | $E_1$               |
| $E_1$ |       |       |       |       | $A_1 + [A_2] + E_2$ | $E_1 + E_3$         | $E_2 + E_4$               | $E_3 + E_5$         | $B_1 + B_2 + E_4$   |
| $E_2$ |       |       |       |       |                     | $A_1 + [A_2] + E_4$ | $E_1 + E_5$               | $B_1 + B_2 + E_2$   | $E_3 + E_5$         |
| $E_3$ |       |       |       |       |                     |                     | $A_1 + [A_2] + B_1 + B_2$ | $E_1 + E_5$         | $E_2 + E_4$         |
| $E_4$ |       |       |       |       |                     |                     |                           | $A_1 + [A_2] + E_4$ | $E_1 + E_3$         |
| $E_5$ |       |       |       |       |                     |                     |                           |                     | $A_1 + [A_2] + E_2$ |

**9. For  $I, I_h$** 

|       | A | $T_1$           | $T_2$           | G                         | H                                |
|-------|---|-----------------|-----------------|---------------------------|----------------------------------|
| A     | A | $T_1$           | $T_2$           | G                         | H                                |
| $T_1$ |   | $A + [T_1] + H$ | G + H           | $T_2 + G + H$             | $T_1 + T_2 + G + H$              |
| $T_2$ |   |                 | $A + [T_2] + H$ | $T_1 + G + H$             | $T_1 + T_2 + G + H$              |
| G     |   |                 |                 | $A + [T_1 + T_2] + G + H$ | $T_1 + T_2 + G + 2H$             |
| H     |   |                 |                 |                           | $A_1 + [T_1 + T_2 + G] + G + 2H$ |

**10. For  $C_{\infty v}, D_{\infty h}$** 

|            | $\Sigma^+$ | $\Sigma^-$ | $\Pi$                            | $\Delta$                         |
|------------|------------|------------|----------------------------------|----------------------------------|
| $\Sigma^+$ | $\Sigma^+$ | $\Sigma^-$ | $\Pi$                            | $\Delta$                         |
| $\Sigma^-$ |            | $\Sigma^+$ | $\Pi$                            | $\Delta$                         |
| $\Pi$      |            |            | $\Sigma^+ + [\Sigma^-] + \Delta$ | $\Pi + \Phi$                     |
| $\Delta$   |            |            |                                  | $\Sigma^+ + [\Sigma^-] + \Gamma$ |
| :          |            |            |                                  |                                  |

**Notation**

|               |       |          |        |          |     |
|---------------|-------|----------|--------|----------|-----|
| $\Sigma$      | $\Pi$ | $\Delta$ | $\Phi$ | $\Gamma$ | ... |
| $\Lambda = 0$ | 1     | 2        | 3      | 4        | ... |

$$\Lambda_1 \times \Lambda_2 = |\Lambda_1 - \Lambda_2| + (\Lambda_1 + \Lambda_2)$$

$$\Lambda \times \Lambda = \Sigma^+ + [\Sigma^-] + (2\Lambda).$$

**11. The Full Rotation Group ( $SU_2$  and  $R_3$ )**

$$\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(j')} = \Gamma^{(j+j')} + \Gamma^{(j+j'-1)} + \dots + \Gamma^{(|j-j'|)}$$

$$\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(j)} = \Gamma^{(2j)} + \Gamma^{(2j-2)} + \dots + \Gamma^{(0)} + [\Gamma^{(2j-1)} + \dots + \Gamma^{(1)}]$$

**Extended rotation groups (double groups):**
*Character tables and direct product tables*

| $D_2^*$   | $E$ | $R$ | $2C_2(z)$ | $2C_2(y)$ | $2C_2(x)$ |
|-----------|-----|-----|-----------|-----------|-----------|
| $E_{1/2}$ | 2   | -2  | 0         | 0         | 0         |

| $D_3^*$   | $E$   | $R$   | $2C_3$  | $2C_3R$   | $3C_2$   | $3C_2R$  |
|-----------|---|---|---|---|--|--|
| $E_{1/2}$ | 2   | -2  | 1   | -1  | 0  | 0  |
| $E_{3/2}$ | $\left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ -1 \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ -1 \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} i \\ -i \end{array} \right.$ | $\left\{ \begin{array}{l} -i \\ i \end{array} \right.$ |

| $D_4$     | $E$ | $R$ | $2C_4$      | $2C_4R$     | $2C_2$ | $4C_2'$ | $4C_2''$ |
|-----------|-----|-----|-------------|-------------|--------|---------|----------|
| $E_{1/2}$ | 2   | -2  | $\sqrt{2}$  | $-\sqrt{2}$ | 0      | 0       | 0        |
| $E_{3/2}$ | 2   | -2  | $-\sqrt{2}$ | $\sqrt{2}$  | 0      | 0       | 0        |

| $D_6^*$   | $E$ | $R$ | $2C_6$      | $2C_6R$     | $2C_3$ | $2C_3R$ | $2C_2$ | $6C_2'$ | $6C_2''$ |
|-----------|-----|-----|-------------|-------------|--------|---------|--------|---------|----------|
| $E_{1/2}$ | 2   | -2  | $\sqrt{3}$  | $-\sqrt{3}$ | 1      | -1      | 0      | 0       | 0        |
| $E_{3/2}$ | 2   | -2  | $-\sqrt{3}$ | $\sqrt{3}$  | -1     | 1       | 0      | 0       | 0        |
| $E_{5/2}$ | 2   | -2  | 0           | 0           | -2     | 2       | 0      | 0       | 0        |

| $T_d^*$   | $E$ | $R$ | $8C_3$ | $8C_3R$ | $6C_2$ | $6S_4$      | $6S_4R$     | $12\sigma_d$ |
|-----------|-----|-----|--------|---------|--------|-------------|-------------|--------------|
| $O^*$     | $E$ | $R$ | $8C_3$ | $8C_3R$ | $6C_2$ | $6C_4$      | $6S_4R$     | $12C_2'$     |
| $E_{1/2}$ | 2   | -2  | 1      | -1      | 0      | $\sqrt{2}$  | $-\sqrt{2}$ | 0            |
| $E_{5/2}$ | 2   | -2  | 1      | -1      | 0      | $-\sqrt{2}$ | $\sqrt{2}$  | 0            |
| $G_{3/2}$ | 4   | -4  | -1     | 1       | 0      | 0           | 0           | 0            |

$$E_{1/2} \times E_{1/2} = [A] + B_1 + B_2 + B_3$$

|           | $E_{1/2}$         | $E_{3/2}$            |
|-----------|-------------------|----------------------|
| $E_{1/2}$ | $[A_1] + A_2 + E$ | 2E                   |
| $E_{3/2}$ |                   | $[A_1] + A_1 + 2A_2$ |

|           | $E_{1/2}$         | $E_{3/2}$         |
|-----------|-------------------|-------------------|
| $E_{1/2}$ | $[A_1] + A_2 + E$ | $B_1 + B_2 + E$   |
| $E_{3/2}$ |                   | $[A_1] + A_2 + E$ |

|           | $E_{1/2}$           | $E_{3/2}$           | $E_{5/2}$                 |
|-----------|---------------------|---------------------|---------------------------|
| $E_{1/2}$ | $[A_1] + A_2 + E_1$ | $B_1 + B_2 + E_2$   | $E_1 + E_2$               |
| $E_{3/2}$ |                     | $[A_1] + A_2 + E_1$ | $E_1 + E_2$               |
| $E_{5/2}$ |                     |                     | $[A_1] + A_2 + B_1 + B_2$ |

|           | $E_{1/2}$     | $E_{5/2}$     | $E_{3/2}$                            |
|-----------|---------------|---------------|--------------------------------------|
| $E_{1/2}$ | $[A_1] + T_1$ | $A_2 + T_2$   | $E + T_1 + T_2$                      |
| $E_{5/2}$ |               | $[A_1] + T_1$ | $E + T_1 + T_2$                      |
| $G_{3/2}$ |               |               | $[A_1 + E + T_2] + A_2 + 2T_1 + T_2$ |

*Direct products of ordinary and extended representations for  $T_d^*$  and  $O^*$*

|           | $A_1$     | $A_2$     | $E$                           | $T_1$                          | $T_2$                          |
|-----------|-----------|-----------|-------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| $E_{1/2}$ | $E_{1/2}$ | $E_{5/2}$ | $G_{3/2}$                     | $E_{1/2} + G_{3/2}$            | $E_{5/2} + G_{3/2}$            |
| $E_{5/2}$ | $E_{5/2}$ | $E_{1/2}$ | $G_{3/2}$                     | $E_{5/2} + G_{3/2}$            | $E_{1/2} + G_{3/2}$            |
| $G_{3/2}$ | $G_{3/2}$ | $G_{3/2}$ | $E_{1/2} + E_{5/2} + G_{3/2}$ | $E_{1/2} + E_{5/2} + 2G_{3/2}$ | $E_{1/2} + E_{5/2} + 2G_{3/2}$ |

**Descent in symmetry and subgroups**

The following tables show the correlation between the irreducible representations of a group and those of some of its subgroups. In a number of cases more than one correlation exists between groups. In  $C_s$  the  $\sigma$  of the heading indicates which of the planes in the parent group becomes the sole plane of  $C_s$ ; in  $C_{2v}$  it becomes must be set by a convention); where there are various possibilities for the correlation of  $C_2$  axes and  $\sigma$  planes in  $D_{4h}$  and  $D_{6h}$  with their subgroups, the column is headed by the symmetry operation of the parent group that is preserved in the descent.

| $C_{2v}$ | $C_2$ | $C_s$<br>$\sigma(zx)$ | $C_s$<br>$\sigma(yz)$ |
|----------|-------|-----------------------|-----------------------|
| $A_1$    | A     | $A'$                  | $A'$                  |
| $A_2$    | A     | $A''$                 | $A''$                 |
| $B_1$    | B     | $A'$                  | $A'$                  |
| $B_2$    | B     | $A''$                 | $A''$                 |

| $C_{3v}$ | $C_3$ | $C_s$      |
|----------|-------|------------|
| $A_1$    | A     | $A'$       |
| $A_2$    | A     | $A''$      |
| E        | E     | $A' + A''$ |

| $C_{4v}$ | $C_{2v}$<br>$\sigma_v$ | $C_{2v}$<br>$\sigma_d$ |
|----------|------------------------|------------------------|
| $A_1$    | $A_1$                  | $A_1$                  |
| $A_2$    | $A_2$                  | $A_2$                  |
| $B_1$    | $A_1$                  | $A_2$                  |
| $B_2$    | $A_2$                  | $A_1$                  |
| E        | $B_1 + B_2$            | $B_1 + B_2$            |

[Other subgroups:  $C_4$ ,  $C_2$ ,  $C_6$ ]

| $D_{3h}$ | $C_{3h}$ | $C_{3v}$ | $C_{2v}$<br>$\sigma_h \rightarrow \sigma_v$ | $C_s$<br>$\sigma_h$ | $C_s$<br>$\sigma_v$ |
|----------|----------|----------|---|---------------------|---------------------|
| $A'_1$   | $A'$     | $A_1$    | $A_1$                                       | $A'$                | $A'$                |
| $A'_2$   | $A'$     | $A_2$    | $B_2$                                       | $A'$                | $A''$               |
| $E'$     | $E'$     | E        | $A_1 + B_2$                                 | $2A'$               | $A' + A''$          |
| $A''_1$  | $A''$    | $A_2$    | $A_2$                                       | $A''$               | $A''$               |
| $A''_2$  | $A''$    | $A_1$    | $B_1$                                       | $A''$               | $A'$                |
| $E''$    | $E''$    | E        | $A_2 + B_1$                                 | $2A''$              | $A' + A''$          |

[Other subgroups:  $D_3$ ,  $C_3$ ,  $C_2$ ]

Atkins, Child, & Phillips: Tables for Group Theory

| $D_{4h}$ | $D_{2d}$                  | $D_{2d}$                    | $D_{2h}$          | $D_{2h}$          | $D_2$       | $D_2$       | $C_{4h}$ | $C_{4v}$ | $C_{2v}$        | $C_{2v}$        |
|----------|---------------------------|-----------------------------|-------------------|-------------------|-------------|-------------|----------|----------|-----------------|-----------------|
|          | $C_2' (\rightarrow C_2')$ | $C_2'' (\rightarrow C_2'')$ | $C_2'$            | $C_2''$           | $C_2'$      | $C_2''$     |          |          | $C_2, \sigma_v$ | $C_2, \sigma_d$ |
| $A_{1g}$ | $A_1$                     | $A_1$                       | $A_g$             | $A_g$             | $A$         | $A$         | $A_g$    | $A_1$    | $A_1$           | $A_1$           |
| $A_{2g}$ | $A_2$                     | $A_2$                       | $B_{1g}$          | $B_{1g}$          | $B_1$       | $B_1$       | $A_g$    | $A_2$    | $A_2$           | $A_2$           |
| $B_{1g}$ | $B_1$                     | $B_2$                       | $A_g$             | $B_{1g}$          | $A$         | $B_1$       | $B_g$    | $B_1$    | $A_1$           | $A_2$           |
| $B_{2g}$ | $B_2$                     | $B_1$                       | $B_{1g}$          | $A_g$             | $B_1$       | $A$         | $B_g$    | $B_2$    | $A_2$           | $A_1$           |
| $E_g$    | $E$                       | $E$                         | $B_{2g} + B_{3g}$ | $B_{2g} + B_{3g}$ | $B_2 + B_3$ | $B_2 + B_3$ | $E_g$    | $E$      | $B_1 + B_2$     | $B_1 + B_2$     |
| $A_{1u}$ | $B_1$                     | $B_1$                       | $A_u$             | $A_u$             | $A$         | $A$         | $A_u$    | $A_2$    | $A_2$           | $A_2$           |
| $A_{2u}$ | $B_2$                     | $B_2$                       | $B_{1u}$          | $B_{1u}$          | $B_1$       | $B_1$       | $A_u$    | $A_1$    | $A_1$           | $A_1$           |
| $B_{1u}$ | $A_1$                     | $A_2$                       | $A_u$             | $B_{1u}$          | $A$         | $B_1$       | $B_u$    | $B_2$    | $A_2$           | $A_1$           |
| $B_{2u}$ | $A_2$                     | $A_1$                       | $B_{1u}$          | $A_u$             | $B_1$       | $A$         | $B_u$    | $B_1$    | $A_1$           | $A_2$           |
| $E_u$    | $E$                       | $E$                         | $B_{2u} + B_{3u}$ | $B_{2u} + B_{3u}$ | $B_2 + B_3$ | $B_2 + B_3$ | $E_u$    | $E$      | $B_1 + B_2$     | $B_1 + B_2$     |

Other subgroups:  $D_4, C_4, S_4, 3C_{2h}, 3C_s, 3C_2, C_i, (2C_{2v})$

| $D_6$    | $D_{3d}C_2''$ | $D_{3d}C_2'$ | $D_{2h}$   | $C_{6v}$ | $C_{3v}$   | $C_{2v}$    | $C_{2v}$    | $C_{2h}$ | $C_{2h}$    | $C_{2h}$    |
|----------|---------------|--------------|--|----------|------------|-------------|-------------|----------|-------------|-------------|
|          |               |              | $\sigma_h \rightarrow \sigma(xy)$<br>$\sigma_v \rightarrow \sigma(yz)$ |          | $\sigma_v$ | $C_2'$      | $C_2''$     | $C_2$    | $C_2'$      | $C_2''$     |
| $A_{1g}$ | $A_{1g}$      | $A_{1g}$     | $A_g$  | $A_1$    | $A_1$      | $A_1$       | $A_1$       | $A_g$    | $A_g$       | $A_g$       |
| $A_{2g}$ | $A_{2g}$      | $A_{2g}$     | $B_{1g}$   | $A_2$    | $A_2$      | $B_1$       | $B_1$       | $A_g$    | $B_g$       | $B_g$       |
| $B_{1g}$ | $A_{2g}$      | $A_{1g}$     | $B_{2g}$   | $B_2$    | $A_2$      | $A_2$       | $B_2$       | $B_g$    | $A_g$       | $B_g$       |
| $B_{2g}$ | $A_{1g}$      | $A_{2g}$     | $B_{3g}$   | $B_1$    | $A_1$      | $B_2$       | $A_2$       | $B_g$    | $B_g$       | $A_g$       |
| $E_{1g}$ | $E_g$         | $E_g$        | $B_{2g} + B_{3g}$  | $E_1$    | $E$        | $A_2 + B_2$ | $A_2 + B_2$ | $2B_g$   | $A_g + B_g$ | $A_g + B_g$ |
| $E_{2g}$ | $E_g$         | $E_g$        | $A_g + B_{1g}$   | $E_2$    | $E$        | $A_1 + B_1$ | $A_1 + B_1$ | $2A_g$   | $A_g + B_g$ | $A_g + B_g$ |
| $A_{1u}$ | $A_{1u}$      | $A_{1g}$     | $A_u$  | $A_2$    | $A_2$      | $A_2$       | $A_2$       | $A_u$    | $A_u$       | $A_u$       |
| $A_{2u}$ | $A_{2u}$      | $A_{2g}$     | $B_{1u}$   | $A_1$    | $A_1$      | $B_2$       | $B_2$       | $A_u$    | $B_u$       | $B_u$       |
| $B_{1u}$ | $A_{2u}$      | $A_{1u}$     | $B_{2u}$   | $B_1$    | $A_1$      | $B_1$       | $B_1$       | $B_u$    | $A_u$       | $B_u$       |
| $B_{2u}$ | $A_{1u}$      | $A_{2u}$     | $B_{3u}$   | $B_2$    | $A_2$      | $A_1$       | $A_1$       | $B_u$    | $B_u$       | $A_u$       |
| $E_{1u}$ | $E_u$         | $E_u$        | $B_{2u} + B_{3u}$  | $E_1$    | $E$        | $A_1 + B_1$ | $A_1 + B_1$ | $2B_u$   | $A_u + B_u$ | $A_u + B_u$ |
| $E_{2u}$ | $E_u$         | $E_u$        | $A_u + B_{1u}$   | $E_2$    | $E$        | $A_2 + B_2$ | $A_2 + B_2$ | $2A_u$   | $A_u + B_u$ | $A_u + B_u$ |

Other subgroups:  $D_6, 2D_{3h}, C_{6h}, C_6, C_{3h}, 2D_3, S_6, D_2, C_3, 3C_2, 3C_g, C_i$

| $T_d$ | $T$ | $D_{2d}$    | $C_{3v}$  | $C_{2v}$          |
|-------|-----|-------------|-----------|-------------------|
| $A_1$ | $A$ | $A_1$       | $A_1$     | $A_1$             |
| $A_2$ | $A$ | $B_1$       | $A_2$     | $A_2$             |
| $E$   | $E$ | $A_1 + B_1$ | $E$       | $A_1 + A_2$       |
| $T_1$ | $T$ | $A_2 + E$   | $A_2 + E$ | $A_2 + B_1 + B_2$ |
| $T_2$ | $T$ | $B_2 + E$   | $A_1 + E$ | $A_1 + B_2 + B_1$ |

Other subgroups:  $S_4, D_2, C_3, C_2, C_s$



| $O_h$    | $O$   | $T_d$ | $T_h$ | $D_{4h}$          | $D_{3d}$       |
|----------|-------|-------|-------|-------------------|----------------|
| $A_{1g}$ | $A_1$ | $A_1$ | $A_g$ | $A_{1g}$          | $A_{1g}$       |
| $A_{2g}$ | $A_2$ | $A_2$ | $A_g$ | $B_{1g}$          | $A_{2g}$       |
| $E_g$    | $E$   | $E$   | $E_g$ | $A_{1g} + B_{1g}$ | $E_g$          |
| $T_{1g}$ | $T_1$ | $T_1$ | $T_g$ | $A_{2g} + E_g$    | $A_{2g} + E_g$ |
| $T_{2g}$ | $T_2$ | $T_2$ | $T_g$ | $B_{2g} + E_g$    | $A_{1g} + E_g$ |
| $A_{1u}$ | $A_1$ | $A_2$ | $A_u$ | $A_{1u}$          | $A_{1u}$       |
| $A_{2u}$ | $A_2$ | $A_1$ | $A_u$ | $B_{1u}$          | $B_{1u}$       |
| $E_u$    | $E$   | $E$   | $E_u$ | $A_{1u} + B_{1u}$ | $E_u$          |
| $T_{1u}$ | $T_1$ | $T_2$ | $T_u$ | $A_{2u} + E_u$    | $A_{2u} + E_u$ |
| $T_{2u}$ | $T_2$ | $T_1$ | $T_u$ | $B_{2u} + E_u$    | $A_{1u} + E_u$ |

Other subgroups:  $T$ ,  $D_4$ ,  $D_{2d}$ ,  $C_{4h}$ ,  $C_{4v}$ ,  $2D_{2h}$ ,  $D_3$ ,  $C_{3v}$ ,  $S_6$ ,  $C_4$ ,  $S_4$ ,  $3C_{2v}$ ,  $2D_2$ ,  $2C_{2h}$ ,  $C_3$ ,  $2C_2$ ,  $S_2$ ,  $C_s$

| $R_3$ | $O$                   | $D_4$                         | $D_3$             |
|-------|-----------------------|-------------------------------|-------------------|
| S     | $A_1$                 | $A_1$                         | $A_1$             |
| P     | $T_1$                 | $A_2 + E$                     | $A_2 + E$         |
| D     | $E + T_2$             | $A_1 + B_1 + B_2 + E$         | $A_1 + 2E$        |
| F     | $A_2 + T_1 + T_2$     | $A_2 + B_1 + B_2 + 2E$        | $A_1 + 2A_2 + 2E$ |
| G     | $A_1 + E + T_1 + T_2$ | $2A_1 + A_2 + B_1 + B_2 + 2E$ | $2A_1 + A_2 + 3E$ |
| H     | $E + 2T_1 + T_2$      | $A_1 + 2A_2 + B_1 + B_2 + 3E$ | $A_1 + 2A_2 + 4E$ |

**Notes and Illustrations**
**General Formulae**
*(a) Notation*

$h$  the *order* (the number of elements) of the group.

$\Gamma^{(i)}$  labels the *irreducible representation*.

$\chi^{(i)}(R)$  the *character* of the operation  $R$  in  $\Gamma^{(i)}$ .

$D_{\mu\nu}^{(i)}(R)$  the  $\mu\nu$  element of the *representative matrix* of the operation  $R$  in the irreducible representation  $\Gamma^{(i)}$ .

$l_i$  the *dimension* of  $\Gamma^{(i)}$  (the number of rows or columns in the matrices  $\mathbf{D}^{(i)}$ )

*(b) Formulae*

(i) *Number of irreducible representations of a group = number of classes.*

$$(ii) \quad \sum_i l_i^2 = h$$

$$(iii) \quad \chi^{(i)}(R) = \sum_{\mu} D_{\mu\mu}^{(i)}(R)$$

(iv) Orthogonality of representations:

$$\sum D_{\mu\nu}^{(i)}(R)^* D_{\mu'\nu'}^{(j)}(R) = (h/l_i) \delta_{ii'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}$$

$$(\delta_{ij}=1 \text{ if } i=j \text{ and } \delta_{ij}=0 \text{ if } i \neq j)$$

(v) Orthogonality of characters:

$$\sum_R \chi^{(i)}(R)^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{ij}$$

(vi) Decomposition of a direct product, reduction of a representation: If

$$\Gamma = \sum_i a_i \Gamma^{(i)}$$

and the character of the operation  $R$  in the reducible representation is  $\chi(R)$ , then the coefficients  $a_i$  are given by

$$a_i = (l/h) \sum_R \chi^{(i)}(R)^* \chi(R).$$

(vii) Projection operators:

The projection operator

$$P^{(i)} = (l_i / h) \sum_R \chi^{(i)}(R)^* R$$

when applied to a function  $f$ , generates a sum of functions that constitute a component of a basis for the representation  $\Gamma^{(i)}$ ; in order to generate the complete basis  $P^{(i)}$  must be applied to  $l_i$  distinct functions  $f$ . The resulting functions may be made mutually orthogonal. When  $l_i = 1$  the function generated is a basis for  $\Gamma^{(i)}$  without ambiguity:

$$P^{(i)} f = f^{(i)}$$

(viii) Selection rules:

If  $f^{(i)}$  is a member of the basis set for the irreducible representation  $\Gamma^{(i)}$ ,  $f^{(k)}$  a member of that for  $\Gamma^{(k)}$ , and  $\hat{\Omega}^{(j)}$  an operator that is a basis for  $\Gamma^{(j)}$ , then the integral

$$\int d\tau f^{(i)*} \hat{\Omega}^{(j)} f^{(k)}$$

is zero unless  $\Gamma^{(i)}$  occurs in the decomposition of the direct product  $\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(k)}$

(ix) The *symmetrized* direct product is written  $\Gamma^{(i)} \times^s \Gamma^{(i)}$ , and its characters are given by

$$\chi^{(i)}(R) \times^s \chi^{(i)}(R) = \frac{1}{2} \chi^{(i)}(R)^2 + \frac{1}{2} \chi^{(i)}(R^2)$$

The *antisymmetrized* direct product is written  $\Gamma^{(i)} \times^a \Gamma^{(i)}$  and its characters are given by

$$\chi^{(i)}(R) \times^a \chi^{(i)}(R) = \frac{1}{2} \chi^{(i)}(R)^2 - \frac{1}{2} \chi^{(i)}(R^2)$$

**Worked examples**

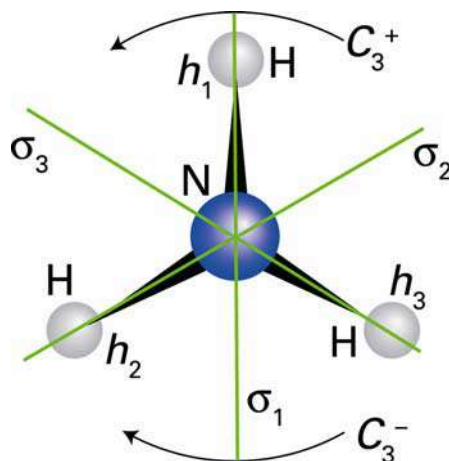
1. To show that the representation  $\Gamma$  based on the hydrogen 1s-orbitals in  $\text{NH}_3$  ( $C_{3v}$ ) contains  $A_1$  and  $E$ , and to generate appropriate symmetry adapted combinations.

A table in which symmetry elements in the same class are distinguished will be employed:

| $C_{3v}$ | E   | $C_3^+$   | $C_3^-$   | $\sigma_1$  | $\sigma_2$  | $\sigma_3$  |
|----------|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$    | 1   | 1   | 1   | 1   | 1   | 1   |
| $A_2$    | 1   | 1   | 1   | -1  | -1  | -1  |
| E        | 2   | -1  | -1  | 0   | 0   | 0   |
| $D(R)$   | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ |
| $x(R)$   | 3   | 0   | 0   | 1   | 1   | 1   |
| $Rh_1$   | $h_1$   | $h_2$   | $h_3$   | $h_1$   | $h_3$   | $h_2$   |
| $Rh_2$   | $h_2$   | $h_3$   | $h_1$   | $h_3$   | $h_2$   | $h_1$   |

The representative matrices are derived from the effect of the operation  $R$  on the basis ( $h_1, h_2, h_3$ ); see the figure below. For example

$$C_3^+(h_1, h_2, h_3) = (h_2, h_3, h_1) = (h_1, h_2, h_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



According to the general formula (b)(iii) the character  $\chi(R)$  is the sum of the diagonal elements of  $\mathbf{D}(R)$ . For example,  $\chi(\sigma_2) = 0 + 1 + 0 = 1$ . The decomposition of  $\Gamma$  follows from the formula (b)(vi):

$$\Gamma = a_1 A_1 + a_2 A_2 + a_E E$$

where

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{6} \{1 \times 3 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times 1\} = 1 \\ a_2 &= \frac{1}{6} \{1 \times 3 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times (-1)\} = 0 \\ a_E &= \frac{1}{6} \{2 \times 3 + 2 \times (-1) \times 0 + 3 \times 0 \times 1\} = 1 \end{aligned}$$

Therefore

$$\Gamma = A_1 + E$$

*Symmetry adapted* combinations are generated by the projection operator in (b)(vii). Using the last two rows of the table,

$$\begin{aligned} \phi(A_1) &= \varphi^{(A_1)} h_1 = \frac{1}{6}(1 \times h_1 + 1 \times h_2 + 1 \times h_3 + 1 \times h_1 \\ &\quad + 1 \times h_3 + 1 \times h_2) = \frac{1}{3}(h_1 + h_2 + h_3) \\ \left\{ \begin{aligned} \phi(E) &= \varphi^{(E)} h_1 = \frac{2}{6}(2 \times h_1 - 1 \times h_2 - 1 \times h_3 + 0 \times h_1 \\ &\quad + 0 \times h_3 + 0 \times h_2) = \frac{1}{3}(2h_1 - h_2 - h_3) \\ \phi'(E) &= \varphi^{(E)} h_2 = \frac{2}{6}(2 \times h_2 - 1 \times h_3 - 1 \times h_1 + 0 \times h_3 \\ &\quad + 0 \times h_2 + 0 \times h_1) = \frac{1}{3}(-h_1 + 2h_2 - h_3) \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

$\phi(E)$  and  $\phi'(E)$  provide a valid basis for the  $E$  representation, but the orthogonal combinations

$$\begin{aligned} \phi_a(E) &= (1/6)^{\frac{1}{2}}(2h_1 - h_2 - h_3) = (3/2)^{\frac{1}{2}}\phi(E) \\ \phi_b(E) &= (1/2)^{\frac{1}{2}}(h_2 - h_3) = (1/2)^{\frac{1}{2}}\{\phi(E) + 2\phi'(E)\} \end{aligned}$$

would be a more useful basis in most applications.

2. To determine the symmetries of the states arising from the electronic configurations  $e^2$  and  $e^1t_2^1$  for a tetrahedral complex ( $T_d$ ), and to determine the group theoretical selection rules for electric dipole transitions between them.

The spatial symmetries of the required states are given by the direct products in Table 7.

$$E \times E = A_1 + [A_2] + E \qquad E \times T_2 = T_1 + T_2$$

Combination of the electron spins yields both singlet and triplet states, but for the  $e^2$  configuration some possibilities are excluded. Since the total (spin and orbital) state must be antisymmetric under electron interchange, the antisymmetrized spatial combination  $[A_2]$  must be a triplet, and the symmetrized combinations  $A_1$  and  $E$  are singlets. For the  $e^1t_2^1$  configuration there are no exclusions. The required terms are therefore

$$\begin{aligned} e^2 &\rightarrow {}^1A_1 + {}^3A_2 + {}^1E \\ e^1t_2^1 &\rightarrow {}^1T_1 + {}^1T_2 + {}^3T_1 + {}^3T_2 \end{aligned}$$

The selection rules are obtained from formula (b)(viii). For electric dipole transitions the operator  $\Omega^{(j)}$  has the symmetry of a vector  $(x, y, z)$ , which from the character table for  $T_d$  transforms as  $T_2$ . From the table of direct products, Table 7,

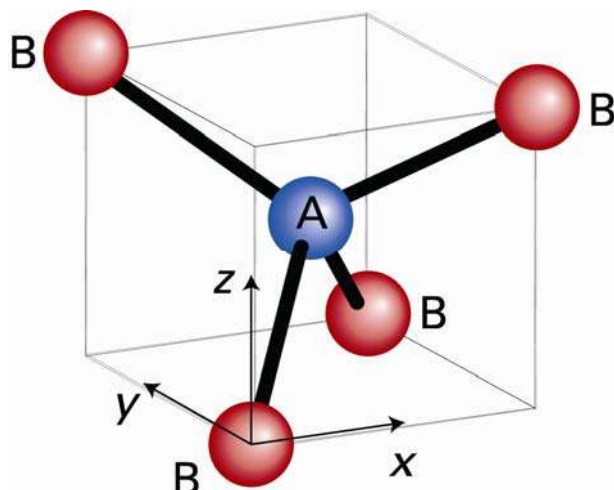
$$A_1 \times T_2 = T_2 \qquad A_2 \times T_1 = T_2 \qquad E \times T_2 = E \times T_1 = T_1 + T_2$$

Assuming the spin selection rule  $\Delta S = 0$ , the allowed transitions are

$$e^2 {}^1A_1 \leftrightarrow e^1t_2^1 {}^1T_2 \qquad e^2 {}^3A_2 \leftrightarrow e^1t_2^1 {}^3T_1 \qquad e^2 {}^1E \leftrightarrow e^1t_2^1 {}^1T_1, {}^1T_2$$

3. To determine the symmetries of the vibrations of a tetrahedral molecule  $AB_4$ , and to predict the appearance of its infrared and Raman spectra.

The molecule is depicted in the figure below and the character table for the point group  $T_d$  is given on page 15.



The representations spanned by the vibrational coordinates are based on the  $5 \times 3$  cartesian displacements less the representations  $T_1$  and  $T_2$ , which are accounted for by the rotations ( $R_x, R_y, R_z$ ) and the translations ( $x, y, z$ ). The stretching vibrations are the subset based on the 4 bonds of the molecule. For a particular symmetry operation, only atoms (or bonds) that remain invariant can contribute to the character of the cartesian displacement representation,  $\Gamma^{(all)}$  (or the stretching representation,  $\Gamma^{(stretch)}$ ).

$$C_3: \quad \begin{array}{l} \text{Two atoms invariant, } x, y, z, \text{ interchanged} \\ \text{One bond invariant} \end{array} \quad \begin{array}{l} \chi^{(all)}(C_3) = 0 \\ \chi^{(stretch)}(C_3) = 1 \end{array}$$

$$C_2(z): \quad \begin{array}{l} \text{Central atom invariant; } x, y, \text{ sign reversed, } z \text{ invariant} \\ \text{No bonds invariant} \end{array} \quad \begin{array}{l} \chi^{(all)}(C_2) = 0 \\ \chi^{(stretch)}(C_2) = 0 \end{array}$$

$$S_4(z): \quad \begin{array}{l} \text{Central atom invariant; } x, y, \text{ interchanged, } z \text{ sign reversed} \\ \text{No bonds invariant} \end{array} \quad \begin{array}{l} \chi^{(all)}(S_4) = -1 \\ \chi^{(stretch)}(S_4) = 0 \end{array}$$

$$\sigma_d(z): \quad \begin{array}{l} \text{Three atoms invariant; } x, y, \text{ interchanged, } z \text{ invariant} \\ \text{Two bonds invariant} \end{array} \quad \begin{array}{l} \chi^{(all)}(\sigma_d) = 3 \\ \chi^{(stretch)}(\sigma_d) = 2 \end{array}$$

The characters of the representations  $\Gamma^{(all)}$  and  $\Gamma^{(stretch)}$  are therefore

|                      | $E$ | $8C_3$ | $3C_2$ | $6S_4$ | $6\sigma_d$ |                          |
|----------------------|-----|--------|--------|--------|-------------|--------------------------|
| $\Gamma^{(all)}$     | 15  | 0      | -1     | -1     | 3           | $= A_1 + E + T_1 + 3T_2$ |
| $\Gamma^{(stretch)}$ | 4   | 1      | 0      | 0      | 2           | $= A_1 + T_2$            |

$\Gamma^{(all)}$  and  $\Gamma^{(stretch)}$  have been decomposed with the help of formula (b)(vi) (compare Example 1). Allowing for the rotations and translations contained in  $\Gamma^{(all)}$  there are therefore four fundamental vibrations, conventionally labelled  $\nu_1(A_1)$ ,  $\nu_2(E)$ ,  $\nu_3(T_2)$ , and  $\nu_4(T_2)$ .  $\nu_1$  and  $\nu_2$  are stretching and bending vibrations respectively,  $\nu_3$  and  $\nu_4$  involve both stretching and bending motions.

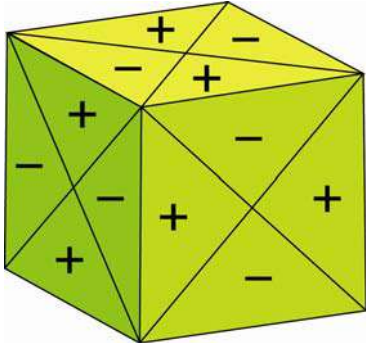
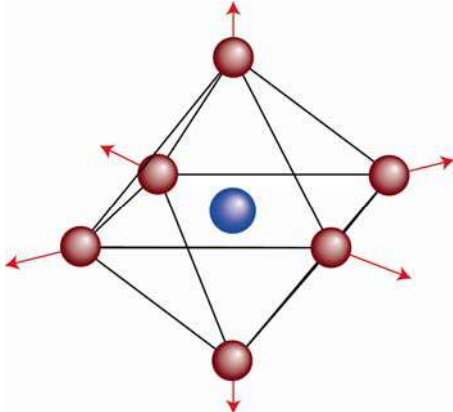
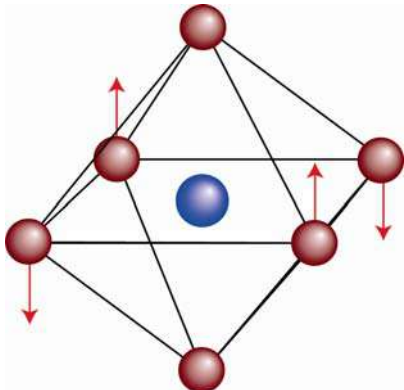
The selection rule (b)(viii) gives the spectroscopic properties of the vibrations. Infrared activity is induced by the dipole moment (a vector with symmetry  $T_2$ , according to the character table for  $T_d$ ) as the operator  $\hat{\Omega}^{(j)}$ . In the case of the Raman effect,  $\hat{\Omega}^{(j)}$  is the component of the polarizability tensor ( $A_1 + E + T_2$ ).  $f^{(i)}$  is the ground vibrational state ( $A_1$ ), and  $f^{(k)}$  is the excited state (with the same symmetry as the vibration in the case of the fundamental; as the direct product of the appropriate representations in the case of an overtone or a combination band).  $\nu_1(A_1)$  and  $\nu_2(E)$  are therefore Raman active and  $\nu_3(T_2)$  and  $\nu_4(T_2)$  are infrared and Raman active. The following overtone and combination bands are allowed in the infrared spectrum:

$$\nu_1 + \nu_3, \nu_1 + \nu_4, \nu_2 + \nu_3, \nu_2 + \nu_4, 2\nu_3, \nu_3 + \nu_4, 2\nu_4$$

**Examples of bases for some representations**

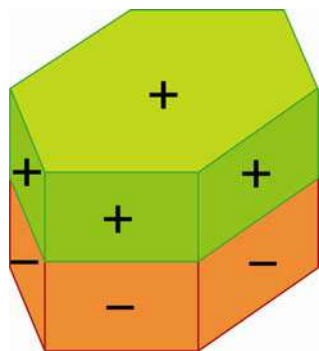
The customary bases—polar vector (e.g. translation  $x$ ), axial vector (e.g. rotation  $R_x$ ), and tensor (e.g.  $xy$ )—are given in the character tables.

It may be of some assistance to consider other types of bases and a few examples are given here.

|   | <b>Base</b>   | <b>Irreducible Representation</b> |
|---|---|-----------------------------------|
| 1 |    | $A_2$ in $T_d$                    |
| 2 | $x(1)y(2) - x(2)y(1)$   | $A_2$ in $C_{4v}$                 |
| 3 | The normal vibration of an octahedral molecule represented by<br>                                    | $A_{1g}$ in $O_h$                 |
| 4 | The three equivalent normal vibrations of an octahedral molecule, one of which is represented by<br> | $T_{2u}$ in $O_h$                 |

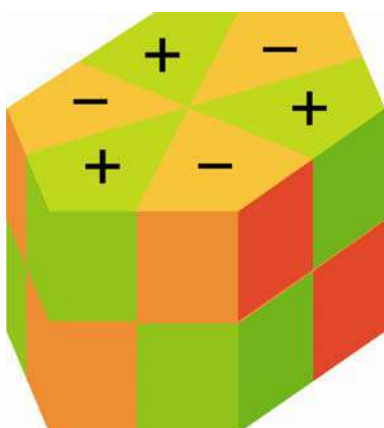


5 The  $\pi$ -orbital of the benzene molecule represented by



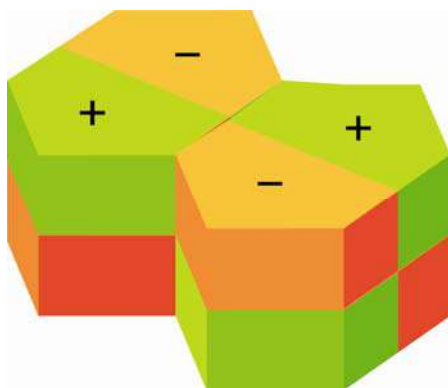
$A_{2u}$  in  $D_{6h}$

6 The  $\pi$ -orbital of the benzene molecule represented by

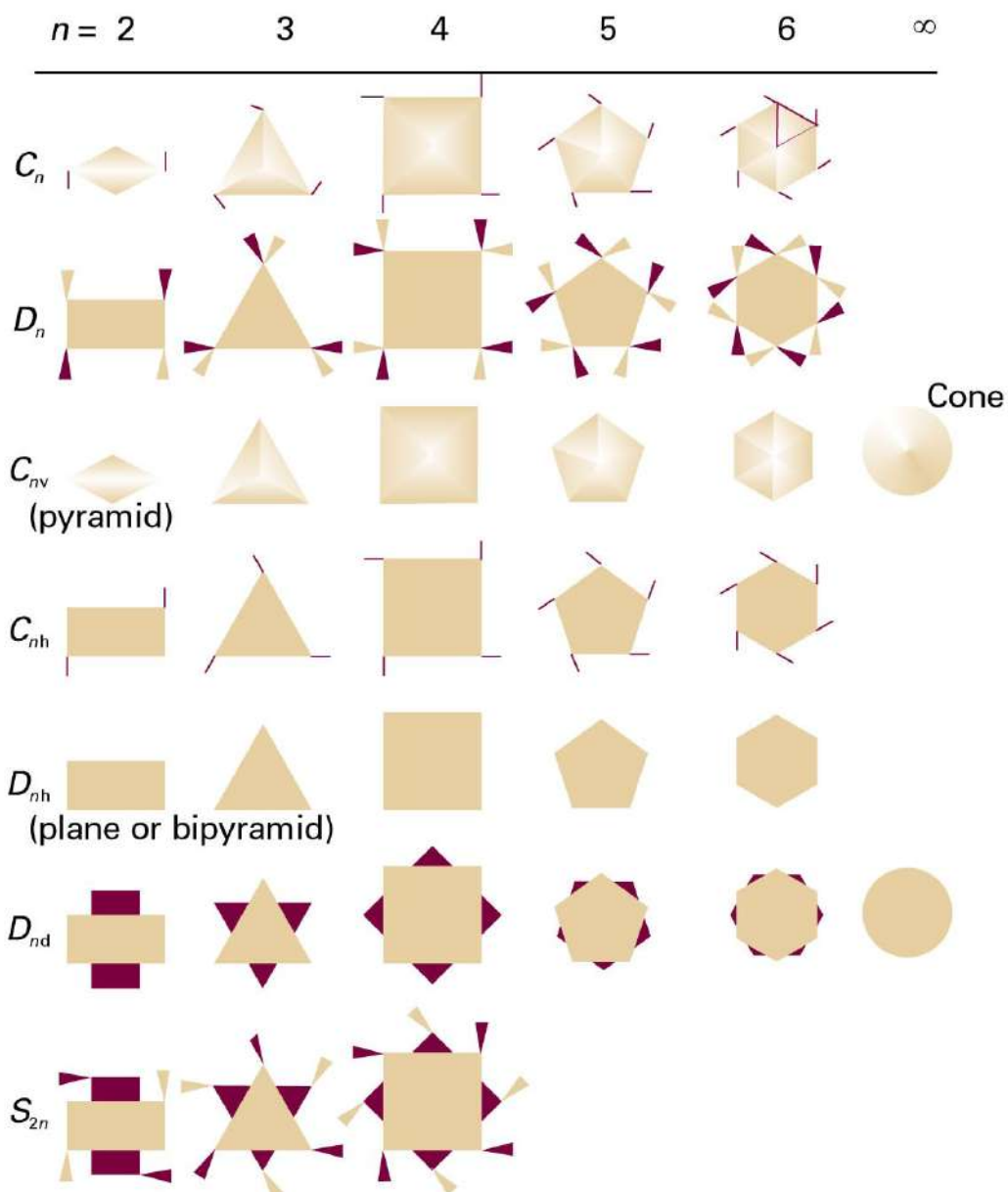


$B_{2g}$  in  $D_{6h}$

7 The  $\pi$ -orbital of the naphthalene molecule represented by

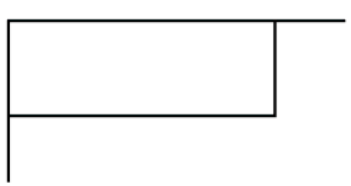


$A_u$  in  $D_{2h}$

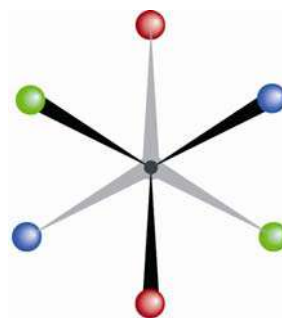
**Illustrative Examples of Point Groups**
**I Shapes**


The character tables for (a),  $C_n$ , are on page 4; for (b),  $D_n$ , on page 6; for (c),  $C_{nv}$ , on page 7; for (d),  $C_{nh}$ , on page 8; for (e),  $D_{nh}$ , on page 10; for (f),  $D_{nd}$ , on page 12; and for (g),  $S_{2n}$ , on page 14.

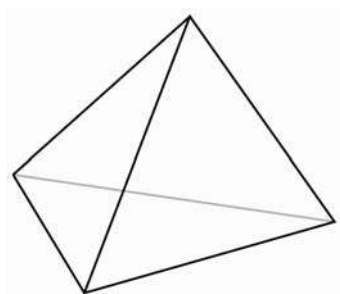
$C_s$



$C_i$

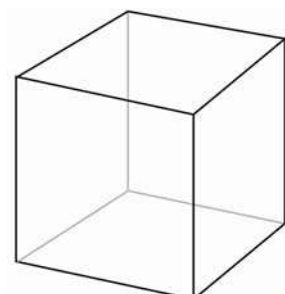


$T_d$



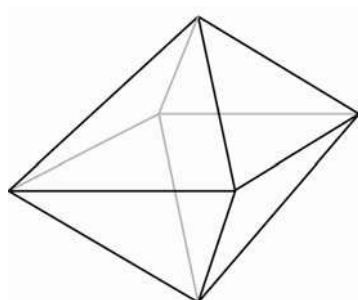
tetrahedron

$O_h$



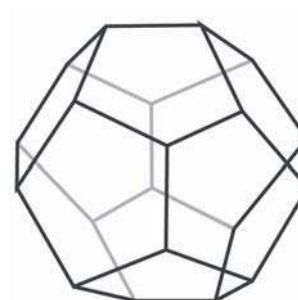
cube

$O_h$



octahedron

$I_h$



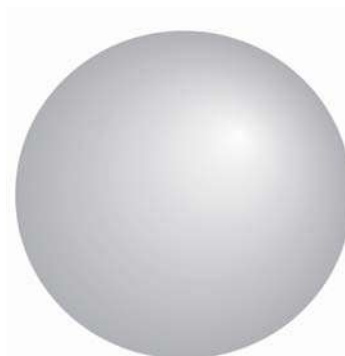
dodecahedron

$I_h$



icosahedron

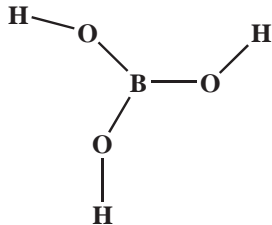
$R_3$



sphere

The character table for  $C_s$  is on page 3, for  $C_i$  on page 3, for  $T_d$  on page 15, for  $O_h$  on page 16, for  $I_h$  on page 17, and for  $R_3$  on page 19.

**II Molecules**

| Point group    | Example  | Page number for character table |
|----------------|--|---------------------------------|
| $C_1$          | CHFCIBr  | 3                               |
| $C_s$          | BFCIBr (planar), quinoline   | 3                               |
| $C_i$          | meso-tartaric acid   | 3                               |
| $C_2$          | $H_2O_2$ , $S_2Cl_2$ (skew)  | 4                               |
| $C_{2v}$       | $H_2O$ , HCHO, $C_6H_5Cl$  | 7                               |
| $C_{3v}$       | $NH_3$ (pyramidal), $POCl_3$   | 7                               |
| $C_{4v}$       | $SF_5Cl$ , $XeOF_4$  | 7                               |
| $C_{2h}$       | <i>trans</i> -dichloroethylene   | 8                               |
| $C_{3h}$       | <br>(in planar configuration) | 8                               |
| $D_{2h}$       | <i>trans</i> - $PtX_2Y_2$ , $C_2H_4$   | 10                              |
| $D_{3h}$       | $BF_3$ (planar), $PCl_5$ (trigonal bipyramid), 1:3:5-trichlorobenzene  | 10                              |
| $D_{4h}$       | $AuCl_4^-$ (square plane)  | 10                              |
| $D_{5h}$       | ruthenocene (pentagonal prism), $IF_7$ (pentagonal bipyramid)  | 11                              |
| $D_{6h}$       | benzene  | 11                              |
| $D_{2d}$       | $CH_2=C=CH_2$  | 12                              |
| $D_{4d}$       | $S_8$ (puckered ring)  | 12                              |
| $D_{5d}$       | ferrocene (pentagonal antiprism)   | 13                              |
| $S_4$          | tetraphenylmethane   | 14                              |
| $T_d$          | $CCl_4$  | 15                              |
| $O_h$          | $SF_6$ , $FeF_6^{3-}$  | 16                              |
| $I_h$          | $B_{12}H_{12}^{2-}$  | 17                              |
| $C_{\infty v}$ | HCN, COS   | 18                              |
| $D_{\infty h}$ | $CO_2$ , $C_2H_2$  | 18                              |
| $R_3$          | any atom (sphere)  | 19                              |

**Quesito 1**

Gli analoghi degli emidesmosomi sono i siti focali di contatto, che sono anche siti in cui la cellula si attacca alla matrice extracellulare. Queste giunzioni sono prevalenti nei fibroblasti ma in gran parte assenti nelle cellule epiteliali. D'altra parte, gli emidesmosomi sono prevalenti nelle cellule epiteliali ma assenti nei fibroblasti. Nei siti di contatto focale, le connessioni intracellulari sono fatte da filamenti di actina, mentre negli emidesmosomi le connessioni sono fatte da filamenti intermedi. Perché supponi che questi due diversi tipi di cellule si attacchino in modo diverso alla matrice extracellulare?

**Quesito 2**

Perché supponi che le cellule abbiano sviluppato una fase G<sub>0</sub> speciale per uscire dal ciclo cellulare, invece di fermarsi semplicemente in G<sub>1</sub> e non passare alla fase S?

**Quesito 3**

I meccanismi di segnalazione utilizzati da un recettore nucleare di tipo ormone steroideo e da un recettore accoppiato a canale ionico sono relativamente semplici in quanto hanno pochi componenti. Possono portare ad un'amplificazione del segnale iniziale e, in caso affermativo, come?

**Quesito 4**

Sei interessato alla funzione di uno specifico gene del genoma del topo. Hai sequenziato il gene, definito la porzione codificante il prodotto proteico e ricercato in database specifici (es. Entrez o Uniprot); purtroppo, nè il gene nè la proteina codificata assomigliano ad alcunchè depositato. Che tipo di informazioni circa il gene o la proteina vorresti conoscere al fine di individuare le possibili funzioni, e perché? Suggerimento: concentrarsi su che tipo di informazione vorresti, piuttosto che su come ottenerla.

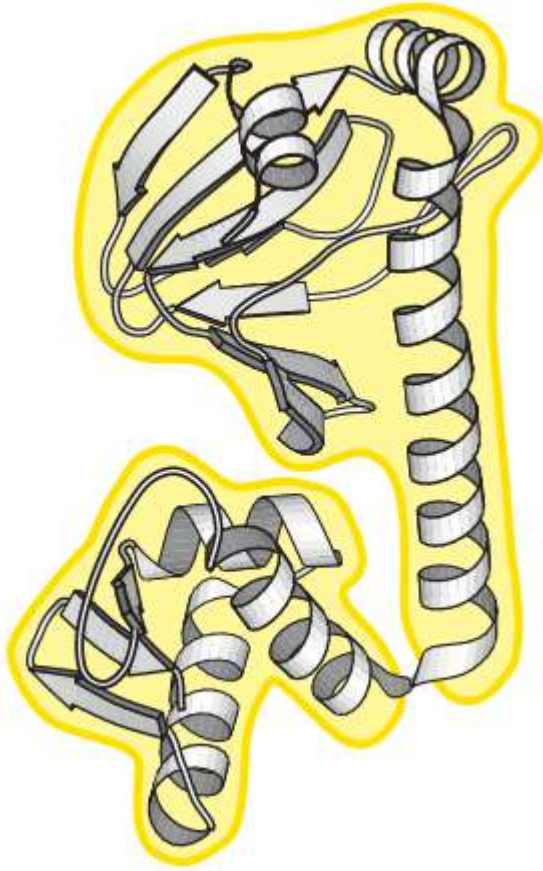
**Quesito 5**

Spesso la parte cruciale della determinazione strutturale di una proteina attraverso la cristallografia a raggi X è l'ottenimento di un buon cristallo. Nei casi difficili, ci sono due approcci che vengono

tipicamente usati per ottenere cristalli: i. usare frammenti della proteina; ii. provare con proteine omologhe da specie differenti.

a) Esamina la proteina nella figura. Dove taglieresti questa proteina per ottenere frammenti che ripiegano correttamente e che forse potrebbero formare un cristallo? Indica il punto sull'immagine della struttura ed argomenta la scelta.

b). Perché pensi che proteine omologhe da specie differenti potrebbero differire nella loro capacità di formare cristalli?



## Prova di Neurobiologia ammissione IV anno

### Quesito 1

In figura 1 è rappresentato un neurone piramidale corticale con 3 delle sue afferenze in rosso (input A, B, C).

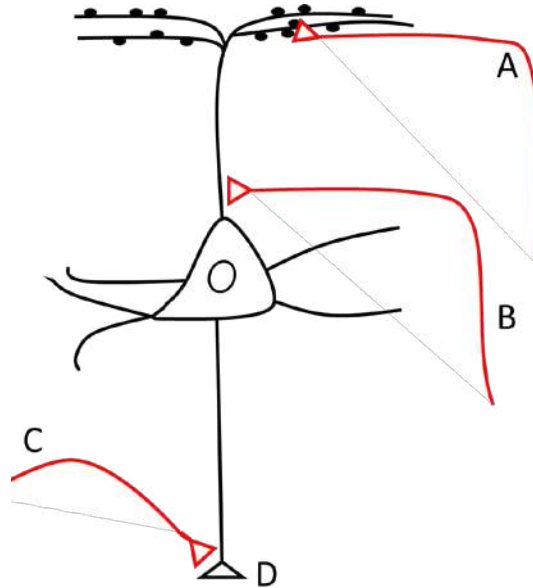


Figura 1

- a) Discutere la probabilità di avere rilascio di neurotrasmettitore dal terminale presinaptico D in seguito ad una singola stimolazione di A, di B o di C.
- b) Discutere la probabilità di avere rilascio del neurotrasmettitore dal terminale presinaptico D se A, B e C si attivano con ciascuno dei pattern temporali descritti in Figura 2, tenendo conto anche della natura eccitatoria (blu) o inibitoria (verde) degli inputs mostrati.

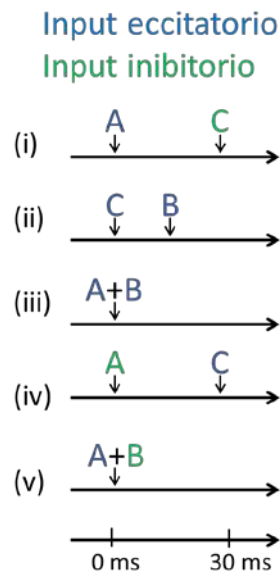


Figura 2

## Quesito 2

Un gruppo di ricercatori sta studiando in un modello animale se una mutazione relativa ad un recettore per un particolare neurotrasmettitore determini l'insorgenza di un comportamento di ansia in età adulta.

- a) Fai un esempio di una o più strategie genetiche attraverso cui i suddetti ricercatori possano studiare il ruolo di un'alterazione di tale recettore che avvenga selettivamente nell'età adulta?
- b) Supponendo che la ricerca di cui al punto a) non abbia riportato anomalie nel comportamento ansioso nonostante il recettore fosse stato alterato solo nei soggetti adulti, è possibile concludere che la mutazione del recettore oggetto di studio non contribuisce in alcun modo all'insorgere di un disturbo ansioso?
- c) In caso di risposta negativa alla domanda b), quali possibili meccanismi biologici potrebbero comunque spiegare il ruolo del recettore mutato nell'insorgenza di un fenotipo ansioso in età adulta? Rispondi provando a fornire una possibile strategia sperimentale per verificare la tua risposta

## Quesito 3

- a) Discuti e descrivi quali fattori determinano il potenziale di membrana di una cellula.
- b) Quale è il potenziale di membrana di un neurone a riposo? Descrivi cosa succede al potenziale di membrana nel momento in cui aumentano ioni potassio nel mezzo extracellulare e perché.
- c) I neuroni hanno la caratteristica di essere eccitabili e produrre potenziali di azione quando il potenziale di membrana viene ad assumere valori più positivi al di sopra di una certa soglia. Questa caratteristica è uniforme in tutti i compartimenti del neurone? Quali caratteristiche molecolari conferiscono alle cellule neuronali l'eccitabilità? Queste caratteristiche sono presenti in modo uniforme in tutto il neurone?

## Quesito 4

Il sistema nervoso è fortemente interconnesso con altri apparati dell'organismo.

- a) Sapresti citare alcuni esempi di tali interconnessioni?
- b) Negli ultimi anni si sta sviluppando una branca della ricerca che studia le interazioni tra plasticità cerebrale e composizione del microbiota intestinale. Quali ipotesi potrebbero essere fatte sui meccanismi e le vie di modulazione attraverso cui il microbiota intestinale può influenzare la plasticità cerebrale?
- c) Quali manipolazioni sperimentali potrebbero essere utilizzate dai ricercatori per studiare tali meccanismi?

## Quesito 5

- a) Il potenziamento sinaptico prevede una prima fase di "induzione" e una seconda fase di "espressione" del potenziamento o della depressione sinaptica, quali meccanismi potrebbero caratterizzare queste due fasi?
- b) Quale fattore nell'attività elettrica di due neuroni è determinante affinché la sinapsi che li mette in comunicazione venga potenziata o depotenziata?
- c) Se si volessero studiare le basi neuronali dell'apprendimento quali metodologie e strategie sperimentali potrebbero essere utilizzate?

## Quesito 6



In un esperimento i ricercatori osservano che ponendo uno stimolo visivo nel punto A del campo visivo si ha un'attivazione solo nei neuroni posti nel punto A della corteccia visiva.

a) Se i ricercatori pongono uno stimolo visivo nel punto B del campo visivo immediatamente adiacente al punto A, dove ti aspetti che si trovino i neuroni attivati dallo stimolo visivo?

b) Se sposto lo stimolo visivo posto nel punto B del campo visivo avvicinandolo ad A avrò che per un certo valore della distanza A-B i neuroni attivati diventeranno gli stessi. Pensi che il valore della distanza A-B per cui ciò avviene sia la stessa in tutto il campo visivo? Se vi fossero differenze, a cosa potrebbero essere dovute?

c) Se ho una lesione in un punto specifico della retina, quali alterazioni funzionali si potrebbero osservare a livello della corteccia visiva? Ti aspetti che queste alterazioni rimangano immutate nel tempo o potrebbero evolvere? Attraverso quali meccanismi?

Materials and Nanotechnology

Test of Classical Physics

**Problem 1.** A hollow cylinder of mass  $m$  subject to gravity  $g$ , rolls without slipping down the incline surface of a triangular wedge of mass  $M$ . The bottom surface of this wedge slides without friction on a horizontal table. The upper surface of the wedge is inclined at an angle  $\alpha$  to the horizontal. The radius of the cylinder is  $R$ .

a) Find the acceleration of the wedge.

b) If the cylinder starts from rest on the wedge at height  $h$  above the table, what is the velocity of the wedge after the cylinder has reached the table?

(The problem can be solved within different formalisms. Finding the solution with more than one approach will lead to a higher mark.)

**Problem 2.** A particle of mass  $m$  moves in the  $xy$  plane under the action of the following force field:

$$\vec{F}(x, y) = \frac{\beta}{(x^2 + y^2)^{5/2}} (3yx \hat{x} + (2y^2 - x^2) \hat{y})$$

The particle starts from rest at the position  $(x, y) = (-a, 0)$ . Determine whether or not the subsequent motion of the particle is oscillatory along a semicircular trajectory of radius  $a$ .

**Problem 3.** A room contains air at atmospheric pressure which can be regarded as an ideal gas. The room is initially in equilibrium at the temperature  $T_0 = -10^\circ\text{C}$ , then the heating is turned on and the room reaches a new condition of equilibrium at the temperature  $T_f = 25^\circ\text{C}$ , again at atmospheric pressure. Explaining each assumption made, describe the corresponding changes in the thermodynamic quantities that describe the air inside the room, determining in particular whether the energy  $U$  and the entropy  $S$  respectively increase or decrease.

**Problem 4.** Consider the space between two flat metal grids perpendicular to the  $\hat{x}$  axis respectively at  $x = 0$  and  $x = L > 0$ , the first one kept at the potential  $V = V_o > 0$  and the second one at the potential  $V = 0$ . Particles of mass  $m$  and charge  $Q > 0$  enter this region through the grid at  $x = 0$  with negligible initial velocity and create a constant and uniform current density  $J$  along  $x$  between one grid and the next, finally exiting through the grid at  $x = L$ .

a) Indicating with  $v(x)$  the velocity of the particles along  $x$  and with  $\rho(x)$  their charge density, write the Poisson equation for the potential  $V(x)$  for  $0 < x < L$ .

b) Solve it and obtain  $J$  as a function of  $m$ ,  $Q$ ,  $L$ ,  $V_o$ , in the hypothesis that the electric field goes to zero as  $x \rightarrow 0^+$ , i.e. at the injection grid.

**Problem 5.** In a region of space devoid of charges and currents, the following magnetic field exists:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = B_o \hat{y} e^{-i\omega t} e^{ikx} e^{-qz} \quad .$$

Indicate the relationship between the real and positive quantities  $\omega$ ,  $k$ ,  $q$ . Determine the associated electric field and the time average of the Poynting vector.

Admission to Materials and Nanotechnologies, General Chemistry written exam

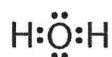
**Exercise 1**

For each of the following compounds:

- a.  $(\text{CH}_3)_2\text{O}$    b.  $\text{C}_2\text{H}_4$    c.  $\text{Cu}(\text{Cl})_4^{2-}$    d.  $\text{SO}_4^{2-}$    e.  $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$    f.  $\text{C}(\text{CH}_3)_3^+$    g.  $\text{C}_6\text{Cl}_6$    h.  $\text{O}_3$

1. Define the molecular structure (Lewis structure).

*Example:* for a water molecule, the Lewis structure is the following:



2. Determine the molecular geometry according to VSEPR theory and the symmetry point group.

*Example:* for a water molecule, the VSEPR geometry is “angular shape derived from a tetrahedral shape”. The symmetry point group is the  $\text{C}_{2v}$  one.

3. Report the formal charge and the oxidation number of each atom.

4. State if they have a non-zero electric dipole moment.

5. State whether they are chiral.

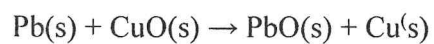
**Exercise 2**

Balance the following redox reactions occurring in aqueous solution (eventually, include species  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$  and  $\text{H}_2\text{O}$ , if needed):

- a.  $\text{Ti}^{3+} + \text{Fe}(\text{CN})_6^{3-} \rightarrow \text{TiO}^{2+} + \text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$   
b.  $\text{HPO}_3^{2-} + \text{MnO}_4^- + \text{OH}^- \rightarrow \text{PO}_4^{3-} + \text{MnO}_4^{2-}$   
c.  $\text{V}^{2+} + \text{V}(\text{OH})_4^+ \rightarrow \text{VO}^{2+}$

### Exercise 3

Compute the Gibbs free energy change of the following reaction at room temperature, discuss whether it is exergonic or exothermic and if the reaction becomes more favorable at higher temperature.



|       |       |       |       |                             |
|-------|-------|-------|-------|-----------------------------|
| 0     | -157  | -217  | 0     | $\Delta H_f^\circ$ (kJ/mol) |
| 0.065 | 0.043 | 0.069 | 0.033 | $\Delta S^\circ$ (kJ/mol·K) |

### Exercise 4

Evaluate the pH of

- 0.05M  $\text{H}_2\text{SO}_3$  solution, considering that  $K_a = 1.54 \times 10^{-2}$
- 0.3M acetic acid solution, considering that  $\text{p}K_a = 4.7$

### Exercise 5

*Dissertation:* Describe and discuss in some detail the water pressure-temperature phase diagram and its peculiarities.