

ภาคผนวก I

หน่วย SI ค่าคงที่ และแฟกเตอร์การเปลี่ยน

Système Internationale (SI) units : เป็นหน่วยที่นิยมใช้กันในปัจจุบัน หน่วยต่างๆ ในหนังสือเล่มนี้มีทั้งหน่วย SI และหน่วยอื่นๆ ที่ยังคงนิยมใช้กันอยู่ [ตัวอย่างเช่น ความดันเป็น torr หรือ atmosphere หรืออุณหภูมิเป็นองศาเซลเซียส] หน่วย SI พื้นฐานทั้งหมดได้แก่:

	Name	Symbol
Mass	kilogram	kg
Length	meter	m
Time	second	s
Electric current	ampere	A
Thermodynamic temperature	kelvin	K
Amount of substance	mole	mol
Luminous intensity	candela	cd

หน่วย SI ที่อนุพัทธ์ (derived) และมีความสำคัญสำหรับนักเคมียังมีอีกดังนี้ :

<i>Quantity</i>	<i>Name</i>	<i>Symbol</i>	<i>Expression in Terms of Other Units</i>	<i>Expression in Terms of SI Base Units</i>
Frequency	hertz	Hz		s^{-1}
Force	newton	N		$m \cdot kg \cdot s^{-2}$
Pressure, stress	pascal	Pa	N/m^2	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
Energy, work, quantity of heat	joule	J	$N \cdot m$	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
Power, radiant flux	watt	W	J/s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
Quantity of electricity, electric charge ^a	coulomb	C	$A \cdot s$	$A \cdot s$
Electric potential, potential difference, electromotive force	volt	V	J/c (W/A)	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
Magnetic flux	weber	Wb	$V \cdot s$	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
Magnetic flux density	tesla	T	Vs/m^2	$kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
Celsius temperature	degree Celsius	°C		K
Heat capacity, entropy	joule per kelvin		J/K	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
Specific heat capacity, specific entropy	joule per kilogram kelvin		J/(kg · K)	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
Thermal conductivity	watt per meter kelvin		W/(m · K)	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot K^{-1}$
Energy density	joule per cubic meter		J/m ³	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
Electric field strength	volt per meter		V/m	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
Electric charge density	coulomb per cubic meter		C/m ³	$m^{-3} \cdot s \cdot A$
Electric flux density	coulomb per square meter		C/m ²	$m^{-2} \cdot s \cdot A$
Molar energy	joule per mole		J/mol	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot mol^{-1}$
Molar entropy, molar heat capacity	joule per mole kelvin		J/(mol · K)	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$

หน่วยต่างๆเหล่านี้อาจจะดัดแปลง (modified) ได้โดยคำน้ำหน้า (prefixes) ซึ่งแสดงถึงการคูณโดยบ่งถึงกำลังของ 10 ดังนี้ :

<i>Prefix</i>	<i>Symbol</i>	<i>Multiplier</i>
Pico	p	10^{-12}
Nano	n	10^{-9}
Micro	μ	10^{-6}
Milli	m	10^{-3}
Centi	c	10^{-2}
Kilo	k	10^3
Mega	M	10^6
Giga	G	10^9
Tera	T	10^{12}

ค่าคงที่ทางกายภาพที่ใช้กันมากได้แก่ :

<i>Constant</i>	<i>Value</i>
Mass of a proton	$1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1.007276 \text{ amu}$
Mass of a neutron	$1.6749 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1.008665 \text{ amu}$
Mass of an electron (at rest)	$9.1096 \times 10^{-31} \text{ kg} = 5.485803 \times 10^{-4} \text{ amu}$
Charge of an electron	$1.6022 \times 10^{-19} \text{ C} = 4.8030 \times 10^{-10} \text{ esu}$
Planck's constant	$6.6262 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
Speed of light (vacuum)	$2.9979 \times 10^8 \text{ m/s}$
Avogadro's number	$6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmann's constant	$1.3806 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Permittivity (vacuum)	$8.8542 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{m}\cdot\text{J}$
Gas constant	$8.3143 \text{ J/mol}\cdot\text{K} = 8.2053 \times 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{atm/mol}\cdot\text{K}$
Faraday's constant	$9.6487 \times 10^4 \text{ C/mol}$
Bohr magneton	$9.2741 \times 10^{-21} \text{ erg/G}$

แฟกเตอร์การเปลี่ยนหน่วยต่างๆ เช่น พลังงาน ระยะทาง ฯลฯ สัมพันธ์กันดังนี้ :

Energy

$$1 \text{ eV} = 96.487 \text{ kJ/mol} = 1.6022 \times 10^{-22} \text{ kJ/atom} = 8.0657 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$$

$$1 \text{ kJ/mol} = 1.0364 \times 10^{-2} \text{ eV} = 83.594 \text{ cm}^{-1} = 0.23901 \text{ kcal/mol}$$

$$1 \text{ cm}^{-1} = 1.2398 \times 10^{-4} \text{ eV} = 1.1963 \times 10^{-2} \text{ kJ/mol}$$

$$1 \text{ kcal/mol} = 4.1840 \text{ kJ/mol}$$

Distance

$$1 \text{ angstrom } (\text{\AA}) = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-4} \mu\text{m} = \\ 10^{-1} \text{ nm} = 10^2 \text{ pm}$$

Atomic Mass Units

$$1 \text{ amu} = 1.6606 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$1 \text{ kg} = 6.0221 \times 10^{26} \text{ amu}$$

Temperature

$$\text{K} = 273.16 + {}^\circ\text{C}$$

Pressure

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ torr} = 1.0132 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ torr} = 1.3158 \times 10^{-3} \text{ atm} = 1.3332 \times 10^2 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Pa} = 9.8692 \times 10^{-6} \text{ atm} = 7.5010 \times 10^{-3} \text{ torr}$$

Electric Charge

$$1 \text{ coulomb (C)} = 2.9979 \times 10^9 \text{ esu}$$

$$1 \text{ electrostatic unit (esu)} = 3.3357 \times 10^{-10} \text{ C}$$

Dipole Moment

$$1 \text{ debye (D)} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$$

$$1 \text{ C}\cdot\text{m} = 2.998 \times 10^{29} \text{ D}$$

ภาคผนวก II

โครงแบบอิเล็กตรอนของอะตอม และเทอมสัญลักษณ์

ตามหลักการสร้าง โครงแบบสถานะพื้นของอะตอมที่เป็นกลางจะได้โดยการบรรจุ อิเล็กตรอนเข้าไปในแต่ละออร์บิทัลได้ไม่เกิน 2 ตัว ลำดับของการบรรจุอิเล็กตรอนอาจมี การเปลี่ยนแปลงไปบ้างในธาตุพวกร. d- และ f- บล็อก ทั้งนี้เพื่อจัดเกี่ยวกับผลของอันตร กิริยะระหว่างอิเล็กตรอน ชั้นภายในที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่เต็มครบแล้วจะเจียนแทนด้วยวง เล็บของสัญลักษณ์ของธาตุที่ครบออกเต็มแล้ว ตัวอย่างเช่น $1s^2$ ภายในของ Li จะเจียน [He] ดังนั้นโครงแบบอิเล็กตรอนของ Li จะเจียน [He] $2s^1$ แสดงว่ามีอิเล็กตรอนเดียวอยู่ ในชั้น 2s ภายนอกถัดออกจากชั้นภายในซึ่งเหมือน He ธาตุอื่นๆ ดังมากรใช้หลักการ เดียวกันนี้

เทอมสัญลักษณ์ (term symbols) ที่แสดงในตารางเป็นของสถานะพื้นของอะตอม

Element	Configuration	Term	Element	Configuration	Term
H	$1s^1$	2S	I	[Kr]4d 10 5s 2 5p 5	2P
He	$1s^2$	1S	Xe	[Kr]4d 10 5s 2 5p 6	1S
Li	[He]2s 1	2S	Cs	[Xe]6s 1	2S
Be	[He]2s 2	1S	Ba	[Xe]6s 2	1S
B	[He]2s 2 2p 1	2P	La	[Xe]5d 1 6s 2	2D
C	[He]2s 2 2p 2	3P	Ce	[Xe]4f 1 5d 1 6s 2	3H
N	[He]2s 2 2p 3	4S	Pr	[Xe]4f 3 6s 2	4I
O	[He]2s 2 2p 4	3P	Nd	[Xe]4f 4 6s 2	5I
F	[He]2s 2 2p 5	2P	Pm	[Xe]4f 6 6s 2	6H
Ne	[He]2s 2 2p 6	1S	Sm	[Xe]4f 6 6s 2	7F
Na	[Ne]3s 1	2S	Eu	[Xe]4f 7 6s 2	8S
Mg	[Ne]3s 2	1S	Gd	[Xe]4f 7 5d 1 6s 2	9D
Al	[Ne]3s 2 3p 1	2P	Tb	[Xe]4f 9 6s 2	6H
Si	[Ne]3s 2 3p 2	3P	Dy	[Xe]4f 10 6s 2	5I
P	[Ne]3s 2 3p 3	4S	Ho	[Xe]4f 11 6s 2	4I
S	[Ne]3s 2 3p 4	3P	Er	[Xe]4f 12 6s 2	3H
Cl	[Ne]3s 2 3p 5	2P	Tm	[Xe]4f 13 6s 2	2F
Ar	[Ne]3s 2 3p 6	1S	Yb	[Xe]4f 14 6s 2	1S
K	[Ar]4s 1	2S	Lu	[Xe]4f 14 5d 1 6s 2	2D
Ca	[Ar]4s 2	1S	Hf	[Xe]4f 14 5d 2 6s 2	3F
Sc	[Ar]3d 1 4s 2	2D	Ta	[Xe]4f 14 5d 3 6s 2	4F
Ti	[Ar]3d 2 4s 2	3F	W	[Xe]4f 14 5d 4 6s 2	5D
V	[Ar]3d 3 4s 2	4F	Re	[Xe]4f 14 5d 5 6s 2	6S
Cr	[Ar]3d 5 4s 1	7S	Os	[Xe]4f 14 5d 6 6s 2	5D
Mn	[Ar]3d 5 4s 2	6S	Ir	[Xe]4f 14 5d 7 6s 2	4F
Fe	[Ar]3d 6 4s 2	5D	Pt	[Xe]4f 14 5d 9 6s 1	3D
Co	[Ar]3d 7 4s 2	4F	Au	[Xe]4f 14 5d 10 6s 1	2S
Ni	[Ar]3d 8 4s 2	3F	Hg	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2	1S
Cu	[Ar]3d 10 4s 1	2S	Tl	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 1	2P
Zn	[Ar]3d 10 4s 2	1S	Pb	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 2	3P
Ga	[Ar]3d 10 4s 2 4p 1	2P	Bi	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 3	4S
Ge	[Ar]3d 10 4s 2 4p 2	3P	Po	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 4	3P
As	[Ar]3d 10 4s 2 4p 3	4S	At	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 5	2P
Se	[Ar]3d 10 4s 2 4p 4	3P	Rn	[Xe]4f 14 5d 10 6s 2 6p 6	1S
Br	[Ar]3d 10 4s 2 4p 5	2P	Fr	[Rn]7s 1	2S
Kr	[Ar]3d 10 4s 2 4p 6	1S	Ra	[Rn]7s 2	1S
Rb	[Kr]5s 1	2S	Ac	[Rn]6d 1 7s 2	2D
Sr	[Kr]5s 2	1S	Th	[Rn]6d 2 7s 2	3F
Y	[Kr]4d 1 5s 2	2D	Pa	[Rn]5f 2 6d 1 7s 2	4K
Zr	[Kr]4d 2 5s 2	3F	U	[Rn]5f 3 6d 1 7s 2	5L
Nb	[Kr]4d 4 5s 1	6D	Np	[Rn]5f 4 6d 1 7s 2	6L
Mo	[Kr]4d 5 5s 1	7S	Pu	[Rn]5f 6 7s 2	7F
Tc	[Kr]4d 5 5s 2	6S	Am	[Rn]5f 7 7s 2	8S
Ru	[Kr]4d 7 5s 1	5F	Cm	[Rn]5f 7 6d 1 7s 2	9D
Rh	[Kr]4d 8 5s 1	4F	Bk	[Rn]5f 9 7s 2	6H
Pd	[Kr]4d 10	1S	Cf	[Rn]5f 10 7s 2	5I
Ag	[Kr]4d 10 5s 1	2S	Es	[Rn]5f 11 7s 2	4I
Cd	[Kr]4d 10 5s 2	1S	Fm	[Rn]5f 12 7s 2	3H
In	[Kr]4d 10 5s 2 5p 1	2P	Md	[Rn]5f 13 7s 2	2F
Sn	[Kr]4d 10 5s 2 5p 2	3P	No	[Rn]5f 14 7s 2	1S
Sb	[Kr]4d 10 5s 2 5p 3	4S	Lr	[Rn]5f 14 6d 1 7s 2	2D
Te	[Kr]4d 10 5s 2 5p 4	3P			

ภาคผนวก III

ตารางอัตถักษณ์

Character Tables

Character Tables for Some Important Point Groups

C_1	E
A	1

C_s	E	σ_h		
A'	1	1	x, y, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
A''	1	-1	z, R_x, R_y	yz, xz

C_i	E	i		
A_g	1	1	R_x, R_y, R_z	$x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz$
A_u	1	-1	x, y, z	

C_2	E	C_2		
A	1	1	z, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B	1	-1	x, y, R_x, R_y	yz, xz

C_3	E	C_3	C_3^2		
A	1	1	1	z, R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$		$(x, y), (R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy), (yz, xz)$

$\epsilon = e^{(2\pi i)/3}; \epsilon^* = \epsilon$ with $-i$ replacing i

C_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		$x^2 - y^2, xy$
E	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -1 & i \end{cases}$			$(x, y), (R_x, R_y)$	(yz, xz)

C_5	E	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4		
A	1	1	1	1	1	z, R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E_1	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^2 & \epsilon^{2*} \\ \epsilon^{2*} & \epsilon^2 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^{2*} \\ \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$		$(x, y), (R_x, R_y)$	(yz, xz)
E_2	$\begin{cases} 1 & \epsilon^2 \\ 1 & \epsilon^{2*} \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon^2 \end{cases}$				$(x^2 - y^2, xy)$

$\epsilon = e^{(2\pi i)/5}$

C_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	
A	1	1	1	1	1	1	z, R_z
B	1	-1	1	-1	1	-1	
E_1	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* & -1 \\ -\epsilon & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon & -\epsilon^* \\ -\epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$		$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)
E_2	$\begin{cases} 1 & -\epsilon^* \\ 1 & -\epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon & 1 \\ -\epsilon^* & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -\epsilon^* \\ -\epsilon & -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* \\ -\epsilon \end{cases}$			$(x^2 - y^2, xy)$

$\epsilon = e^{(\pi i)/3}$

C_7	E	C_7	C_7^2	C_7^3	C_7^4	C_7^5	C_7^6	
A	1	1	1	1	1	1	1	z, R_z
E_1	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^2 & \epsilon^3 \\ \epsilon^{2*} & \epsilon^{3*} \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^3 & \epsilon^{3*} \\ \epsilon^2 & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^{3*} & \epsilon^2* \\ \epsilon^2 & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^2* & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$		$(x, y), (R_x, R_y)$
E_2	$\begin{cases} 1 & \epsilon^2 \\ 1 & \epsilon^{2*} \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^3 & \epsilon^* \\ \epsilon^3 & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^2 \\ \epsilon^* & \epsilon^3* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^2 & \epsilon^3 \\ \epsilon^3* & \epsilon^2 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^3 & \epsilon^{2*} \\ \epsilon^{2*} & \epsilon^2 \end{cases}$		(xz, yz)
E_3	$\begin{cases} 1 & \epsilon^3 \\ 1 & \epsilon^{3*} \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* & \epsilon^2 \\ \epsilon & \epsilon^{2*} \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^2 & \epsilon^{2*} \\ \epsilon^{2*} & \epsilon^2 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^{2*} & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^3* \\ \epsilon^* & \epsilon^3 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^3* & \epsilon^3 \\ \epsilon^3 & \epsilon^3 \end{cases}$		$(x^2 - y^2, xy)$

$\epsilon = e^{(2\pi i)/7}$

C_8	E	C_8	C_4	C_2	C_4^3	C_8^3	C_8^5	C_8^7		
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_1	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon \\ \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* \\ -\epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon \\ -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$	$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)
E_2	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$		$(x^2 - y^2, xy)$
E_3	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon \\ -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon \\ \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* \\ -\epsilon \end{cases}$		

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/4}$$

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

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

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

C_{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		$(x^2 - y^2, xy)$

C_{6v}	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		$(x^2 - y^2, xy)$

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B_g	1	-1	1	-1	R_x, R_y	xz, yz
A_u	1	1	-1	-1	z	
B_u	1	-1	-1	1	x, y	

C_{3h}	E	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	S_3^5		
A'	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E'	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon \\ \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon \\ \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$	(x, y)	$(x^2 - y^2, xy)$
A''	1	1	1	-1	-1	-1	z	
E''	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon \\ \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* \\ \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon \\ -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* \\ -\epsilon \end{cases}$	(R_x, R_y)	(xz, yz)

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/3}$$

C_{4h}	E	C_4	C_2	C_4^3	i	S_4^3	σ_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		$x^2 - y^2, xy$
E_g	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	(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	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 \\ -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i \\ i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 \\ 1 \end{cases}$	$\begin{cases} i \\ -i \end{cases}$	(x, y)	

C_{5h}	E	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4	σ_h	S_5	S_5^7	S_5^3	S_5^9		
A'	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E'_1	{1 1}	ϵ ϵ^*	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^{2*} ϵ^2	ϵ^* ϵ	1 1	ϵ ϵ^*	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^{2*} ϵ^2	ϵ^* ϵ	{(x, y)}	
E'_2	{1 1}	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^* ϵ	ϵ ϵ^*	ϵ^{2*} ϵ^2	1 1	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^* ϵ	ϵ ϵ^*	ϵ^{2*} ϵ^2		$(x^2 - y^2, xy)$
A''	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	z	
E''_1	{1 1}	ϵ ϵ^*	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^{2*} ϵ^2	ϵ^* ϵ	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	$-\epsilon^2$ $-\epsilon^{2*}$	$-\epsilon^{2*}$ $-\epsilon^2$	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	{(R_x, R_y)}	(xz, yz)
E''_2	{1 1}	ϵ^2 ϵ^{2*}	ϵ^* ϵ	ϵ ϵ^*	ϵ^{2*} ϵ^2	-1 -1	$-\epsilon^2$ $-\epsilon^{2*}$	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	$-\epsilon^{2*}$ $-\epsilon^2$		

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/5}$$

C_{6h}	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	i	S_3^5	S_6^5	σ_h	S_6	S_3		
A_g	1	1	1	1	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	1	-1	1	-1		
E_{1g}	{1 1}	ϵ ϵ^*	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	ϵ^* ϵ	1 1	ϵ ϵ^*	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	ϵ^* ϵ	{(R_x, R_y)}	(xz, yz)
E_{2g}	{1 1}	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ 1	1 -1	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ 1	1 1	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ 1	1 -1	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ 1		$(x^2 - y^2, xy)$
A_u	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	z	
B_u	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1		
E_{1u}	{1 1}	ϵ ϵ^*	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	ϵ^* ϵ	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	ϵ^* ϵ	1 1	ϵ ϵ^*	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	{(x, y)}	
E_{2u}	{1 1}	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ 1	1 -1	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	$-\epsilon$ -1	-1 -1	ϵ^* ϵ	ϵ -1	-1 -1	ϵ^* ϵ	ϵ 1		

$$\epsilon = e^{(\pi i)/3}$$

D_2	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$		
A	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_1	1	1	-1	-1	z, R_z	xy
B_2	1	-1	1	-1	y, R_y	xz
B_3	1	-1	-1	1	x, R_x	yz

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$		
A_1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	z, R_z	
E	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$

D_4	E	$2C_4$	$C_2 (= C_4^2)$	$2C'_2$	$2C''_2$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1	z, 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)

D_5	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$		
A_1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	z, 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		$(x^2 - y^2, xy)$

D_6	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$		
A_1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	1	-1	-1	z, 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		$(x^2 - y^2, xy)$

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R_z xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R_y xz
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R_x yz
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	z
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	y
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	x
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	
A'_1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	-1	1	1	-1	R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y) $(x^2 - y^2, xy)$
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1	z
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R_x, R_y) (xz, yz)

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R_z	$x^2 - y^2$
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1		xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		(xz, yz)
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1		
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	(x, y)	

D_{5h}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$			
A'_1	1	1	1	1	1	1	1	1			$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	1	-1	1	1	1	-1	R_z		
E'_1	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	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			$(x^2 - y^2, xy)$
A''_1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1			
A''_2	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	z		
E''_1	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	0	-2	$-2 \cos 72^\circ$	$-2 \cos 144^\circ$	0	(R_x, R_y)		(xz, yz)
E''_2	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0	-2	$-2 \cos 144^\circ$	$-2 \cos 72^\circ$	0			

D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	
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	$(x^2 - y^2, xy)$
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z
B_{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
E_{1u}	2	1	-1	-2	0	0	-2	-1	1	2	0	0	(x, y)
E_{2u}	2	-1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0	

D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C'_2$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_2	1	-1	1	-1	1	z	xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)

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

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		$(x^2 - y^2, xy)$
E_3	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

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)	(xz, yz)
E_{2g}	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0		$(x^2 - y^2, xy)$
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	
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)
										(xz, yz)

S_4	E	S_4	C_2	S_4^3		
A	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
B	1	-1	1	-1	z	$x^2 - y^2, xy$
E	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} i & -1 \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -i & 1 \end{cases}$		$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)

S_6	E	C_3	C_3^2	i	S_6^5	S_6		
A_g	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E_g	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ -1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	(R_x, R_y)	$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$
A_u	1	1	1	-1	-1	-1	z	
E_u	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -\epsilon \\ -\epsilon & -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon & -\epsilon^* \\ -\epsilon^* & -\epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{cases}$	(x, y)	

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/3}$$

S_8	E	S_8	C_4	S_8^3	C_2	S_8^5	C_4^3	S_8^7		
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	$\begin{cases} 1 & \epsilon \\ 1 & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & i \\ \epsilon^* & -i \end{cases}$	$\begin{cases} i & -\epsilon^* \\ -i & -\epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* & -1 \\ -\epsilon & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -\epsilon \\ -\epsilon & -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon & -i \\ -i & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -i & \epsilon^* \\ \epsilon^* & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & y \\ y & x \end{cases}$	$(x, y), (R_x, R_y)$	
E_2	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} i & -1 \\ -i & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ 1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} -i & 1 \\ i & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -i \\ -i & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} i & -1 \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & i \\ i & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -i & -1 \\ -1 & i \end{cases}$		$(x^2 - y^2, xy)$
E_3	$\begin{cases} 1 & -\epsilon^* \\ 1 & -\epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon^* & -i \\ -\epsilon & i \end{cases}$	$\begin{cases} -i & \epsilon \\ i & \epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon & -1 \\ \epsilon^* & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & \epsilon^* \\ -1 & \epsilon \end{cases}$	$\begin{cases} \epsilon^* & i \\ i & -i \end{cases}$	$\begin{cases} i & -\epsilon \\ -\epsilon & -\epsilon^* \end{cases}$	$\begin{cases} -\epsilon & -i \\ -i & -\epsilon^* \end{cases}$		(xz, yz)

$$\epsilon = e^{(\pi i)/4}$$

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

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

T	E	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$		
A	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
E	{1 1}	ϵ ϵ^*	ϵ^* ϵ	1 1		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
T	3	0	0	-1	$(R_x, R_y, R_z), (x, y, z)$	(xy, xz, yz)

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/3}$$

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		
E	2	-1	2	0	0		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
T_1	3	0	-1	1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_2	3	0	-1	-1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

T_h	E	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	i	$4S_6$	$4S_6^5$	$3\sigma_h$		
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
E_g	{1 1}	ϵ ϵ^*	ϵ^* ϵ	1 1	1 1	ϵ ϵ^*	ϵ^* ϵ	1 1		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
E_u	{1 1}	ϵ ϵ^*	ϵ^* ϵ	1 1	-1 -1	$-\epsilon$ $-\epsilon^*$	$-\epsilon^*$ $-\epsilon$	-1 -1		
T_g	3	0	0	-1	3	0	0	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_u	3	0	0	-1	-3	0	0	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

$$\epsilon = e^{(2\pi i)/3}$$

O	E	$6C_4$	$3C_2 (= C_4^2)$	$8C_3$	$6C_2$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	-1	1	1	-1		
E	2	0	2	-1	0		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
T_1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z), (x, y, z)$	
T_2	3	-1	-1	0	1		(xy, xz, yz)

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

I	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$			
A	1	1	1	1	1			$x^2 + y^2 + z^2$
T_1	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	$(x, y, z), (R_x, R_y, R_z)$		
T_2	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1			
G	4	-1	-1	1	0			
H	5	0	0	-1	1			$(xy, xz, yz, x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2)$

I_h	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ		
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
T_{1g}	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_{2g}	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1		
G_g	4	-1	-1	1	0	4	-1	-1	1	0		
H_u	5	0	0	-1	1	5	0	0	-1	1		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2, xy, xz, yz)$
A_u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
T_{1u}	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	-3	$-\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	1	(x, y, z)	
T_{2u}	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	-3	$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	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		

ภาคผนวก IV

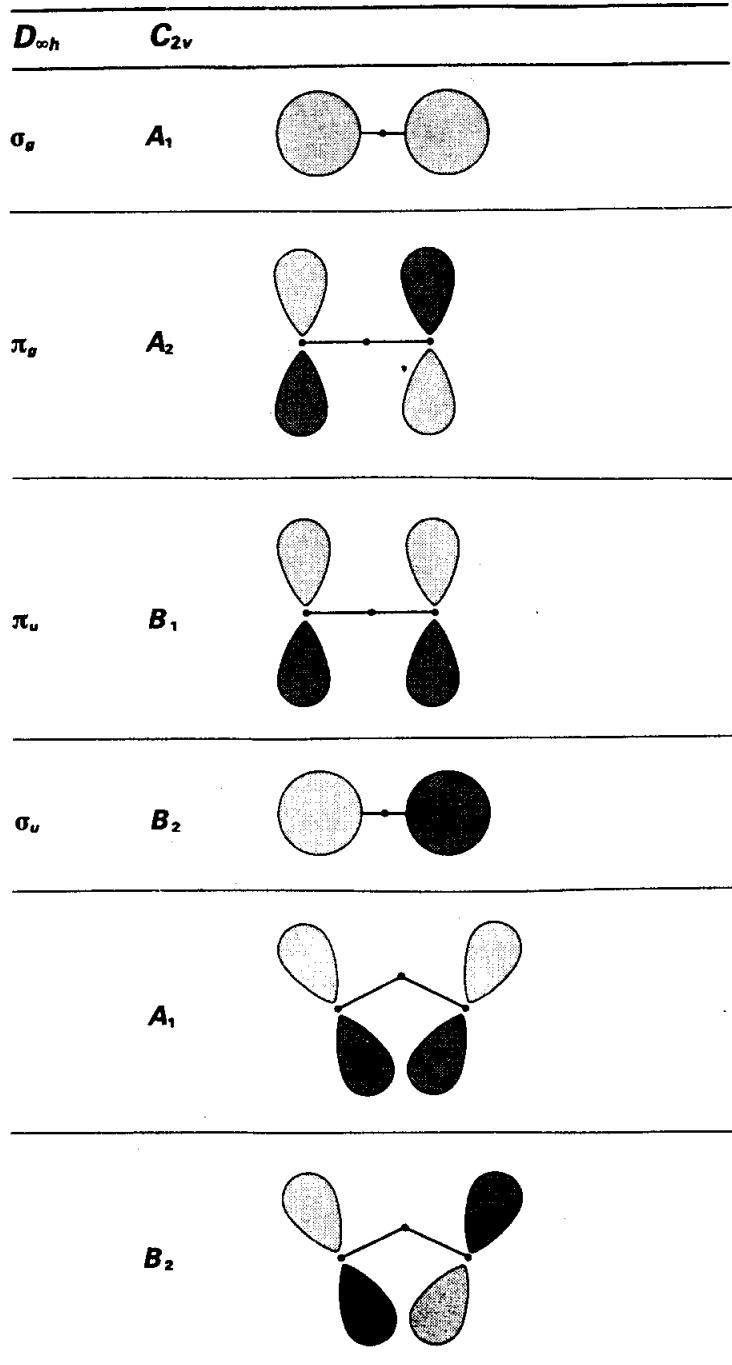
ออร์บิทัลที่ปรับสมมาตร Symmetry-adapted Orbitals

ตารางข้างล่างนี้เป็นการจัดประเกทสมมาตรของ s-, p- และ d- ออร์บิทัลของอะตอม กลางของโมเลกุล AB_n ที่บ่งพื้อยท์กรูป ในทุกกรณีให้ถือว่าแกน z เป็นแกนหลักของโมเลกุล ใน C_{2v} แกน x จะตั้งฉากกับระนาบของโมเลกุล

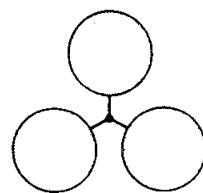
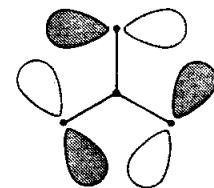
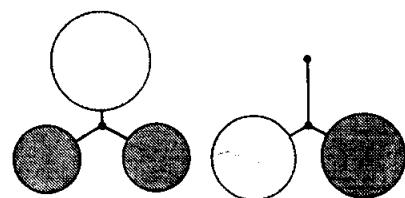
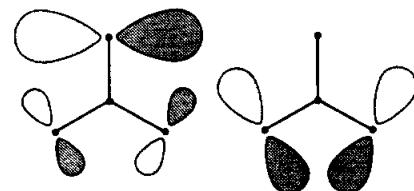
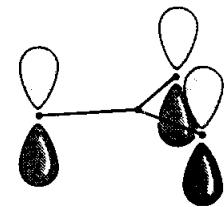
แผนภาพออร์บิทัลแสดงการรวมเชิงเส้นของอะตอมมิคออร์บิทัลของอะตอมต่างๆ ของโมเลกุล AB_n ที่บ่งพื้อยท์กรูป จากภาพที่มองด้านบน ฉุด จะแทนอะตอมกลางซึ่งอาจจะอยู่ในระนาบของกระดาษ (สำหรับกลุ่ม D) หรืออยู่เหนือระนาบ (สำหรับกลุ่ม C ที่สอดคล้องกัน) วัฏจักร (phase) ที่แตกต่างกันของอะตอมมิคออร์บิทัล (แอมเพลจูด + หรือ -) แสดงโดยสีที่เข้มต่างกัน ถ้าขนาดของประสิทธิภาพของออร์บิทัลต่างกันมาก จะแสดงโดยอะตอมมิคออร์บิทัลที่ใหญ่หรือเล็กแทนการมีส่วนร่วมสัมพัทธ์ในการรวมเชิงเส้น ในกรณีที่การรวมมีดีเจนเนอเรชี (E หรือ T) คู่ดีเจนเนอเรชีจะมีการรวมเหมือนกัน

โมเลกุลาร์ออร์บิทัลเกิดจากการรวมของออร์บิทัลของอะตอมกลาง (ตารางข้างล่างนี้) กับการรวมเชิงเส้นที่มีสมมาตรเหมือนกัน

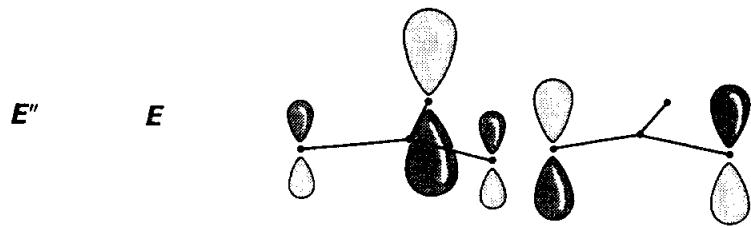
	$D_{\infty h}$	D_{2v}	D_{3h}	C_{3v}	D_{4h}	C_{4v}	D_{5h}	C_{5v}	D_{6h}	C_{6v}	T_d	O_h
s	σ	A_1	A'_1	A_1	A_{1g}	A_1	A'_1	A_1	A_{1g}	A_1	A_1	A_{1g}
p_x	π	B_1	E'	E	E_u	E	E'_1	E_1	E_{1u}	E_1	T_2	T_{1u}
p_y	π	B_2	E'	E	E_u	E	E'_1	E_1	E_{1u}	E_1	T_2	T_{1u}
p_z	σ	A_1	A''_2	A_1	A_{2u}	A_1	A''_2	A_1	A_{2u}	A_1	T_2	T_{1u}
d_{z^2}	σ	A_1	A'_1	A_1	A_{1g}	A_1	A'_1	A_1	A_{1g}	A_1	E	E_g
$d_{x^2-y^2}$	δ	A_1	E'	E	B_{1g}	B_1	E'_2	E_2	E_{2g}	E_2	E	E_g
d_{xy}	δ	A_2	E'	E	B_{2g}	B_2	E'_2	E_2	E_{2g}	E_2	T_2	T_{2g}
d_{yz}	π	B_2	E''	E	E_g	E	E''_1	E_1	E_{1g}	E_1	T_2	T_{2g}
d_{zx}	π	B_1	E''	E	E_g	E	E'_1	E_1	E_{1g}	E_1	T_2	T_{2g}

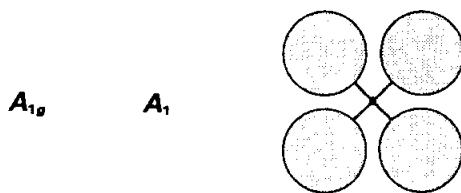
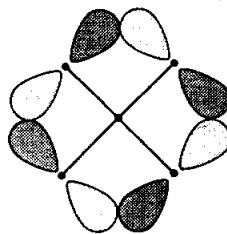
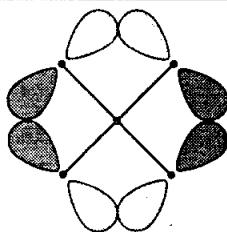
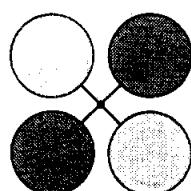


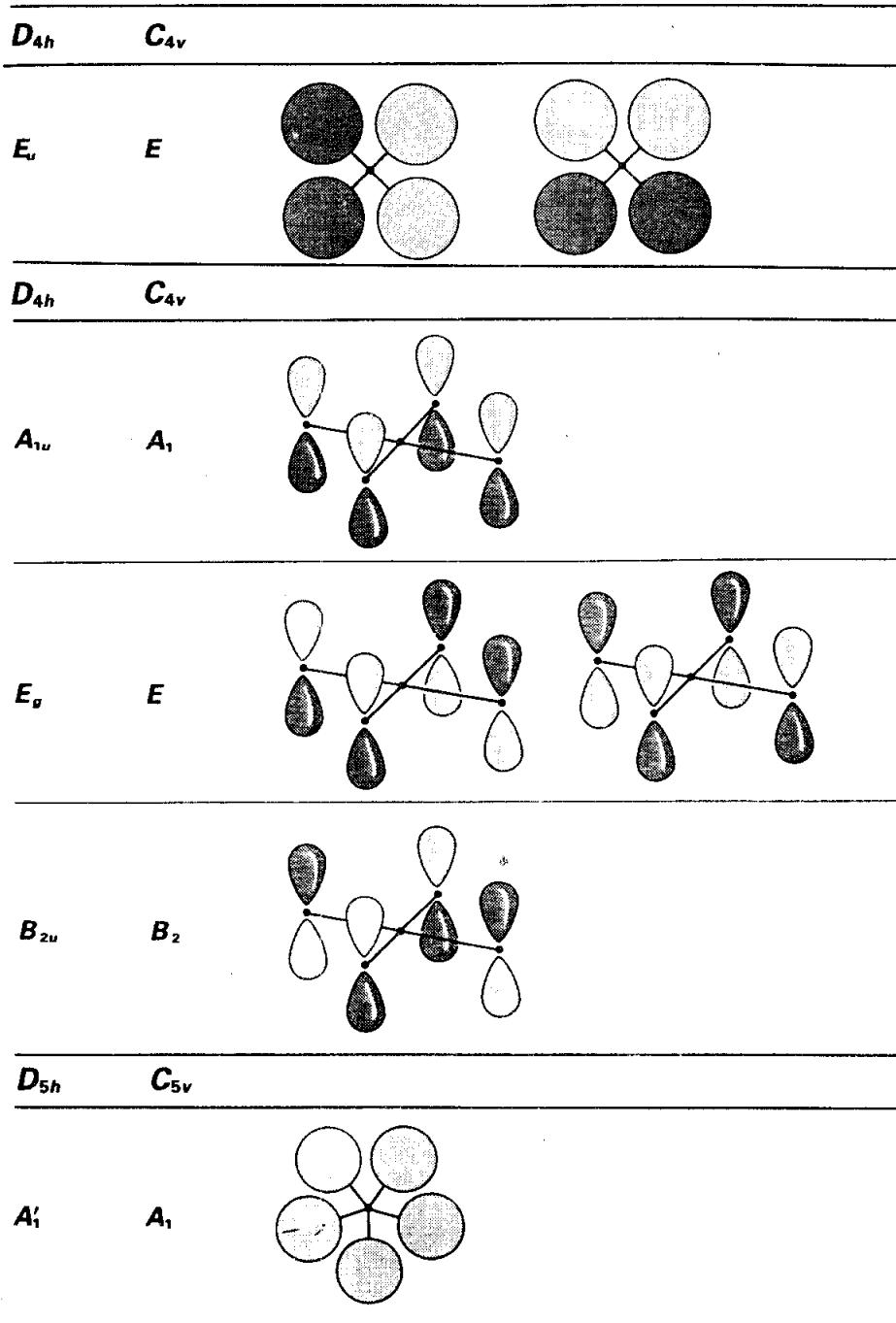
 D_{3h} C_{3v}

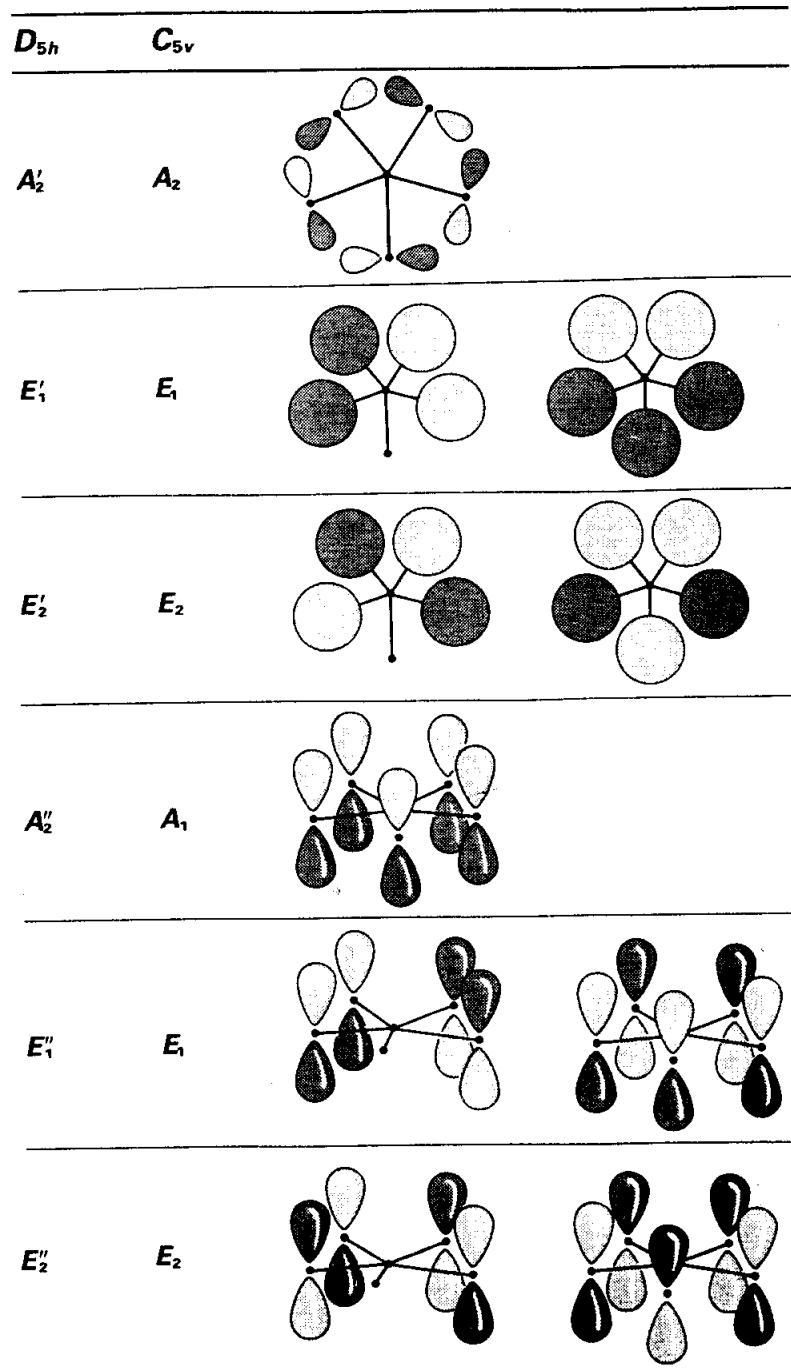
 A'_1 A_1  A'_2 A_2  E' E  E' E  A''_1 A_1 

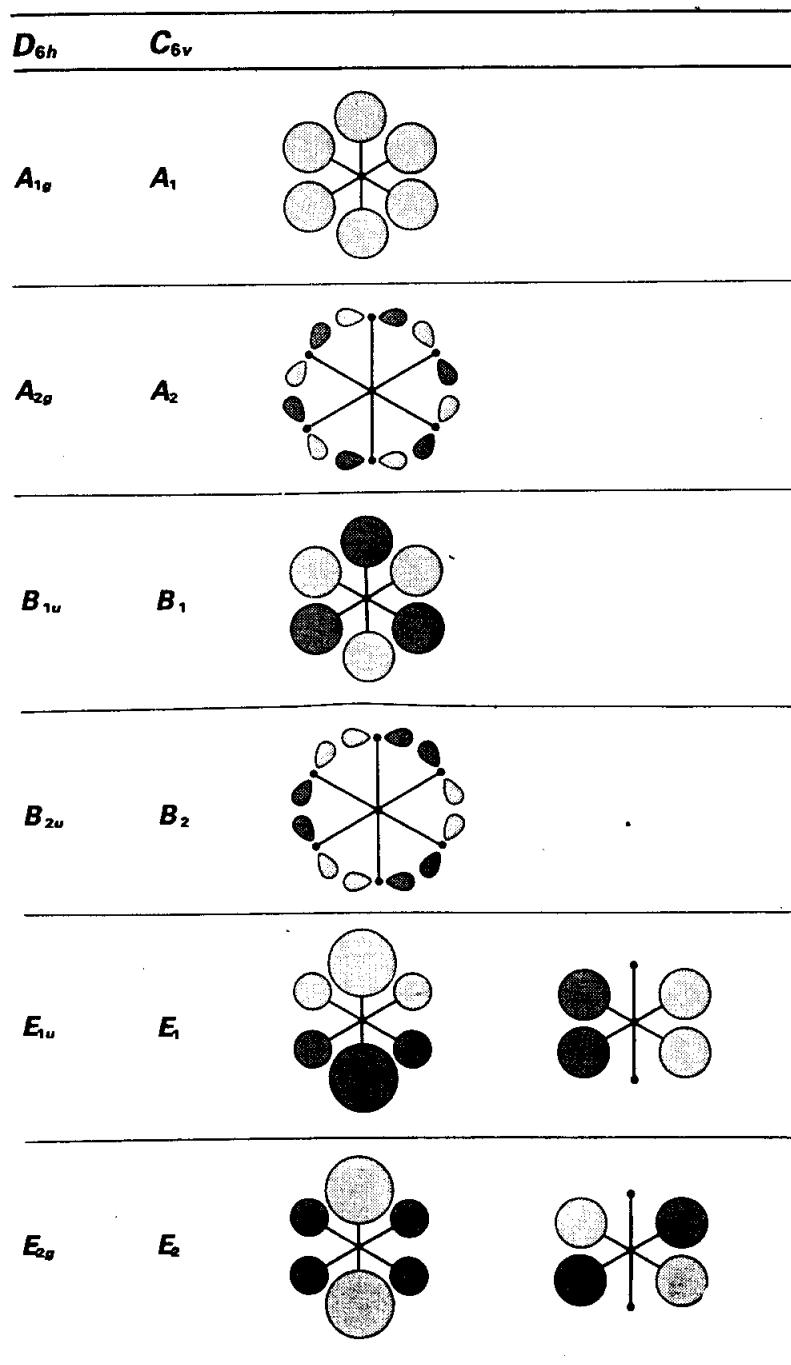
 D_{3h} C_{3v}

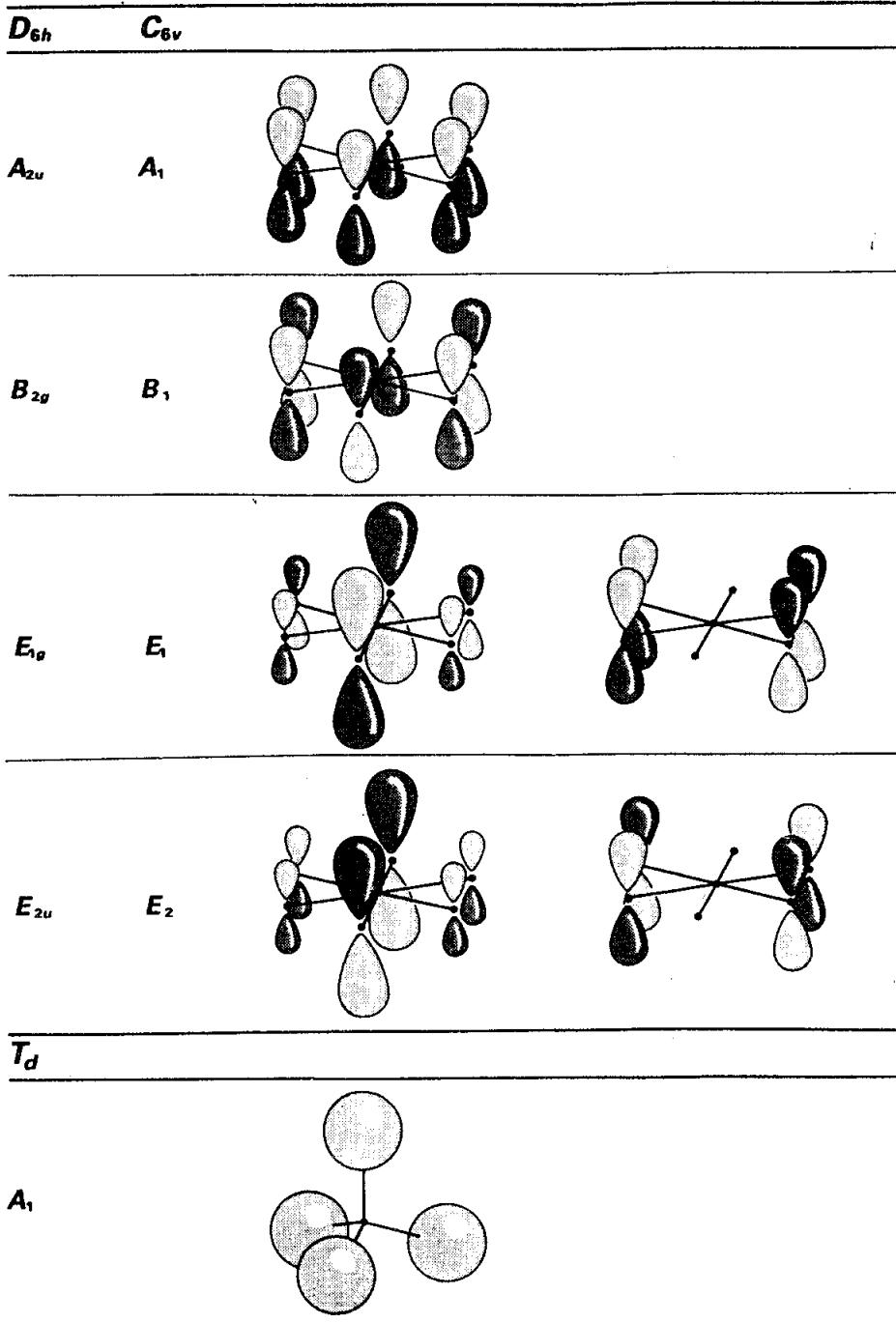
 D_{4h} C_{4v}

 A_{2g} A_2  B_{1g} B_1  B_{2g} B_2 

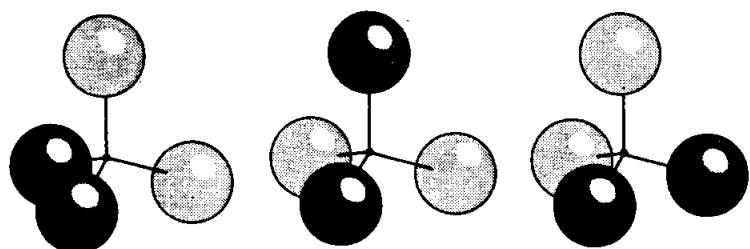




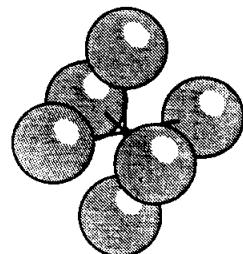
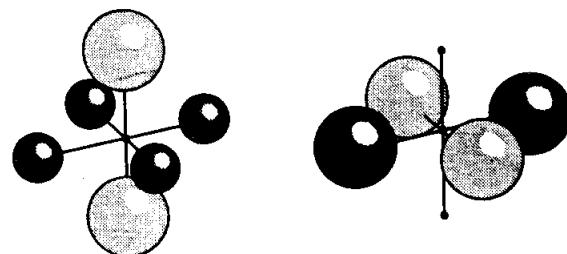
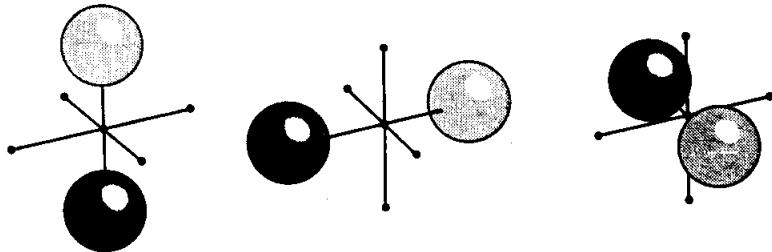


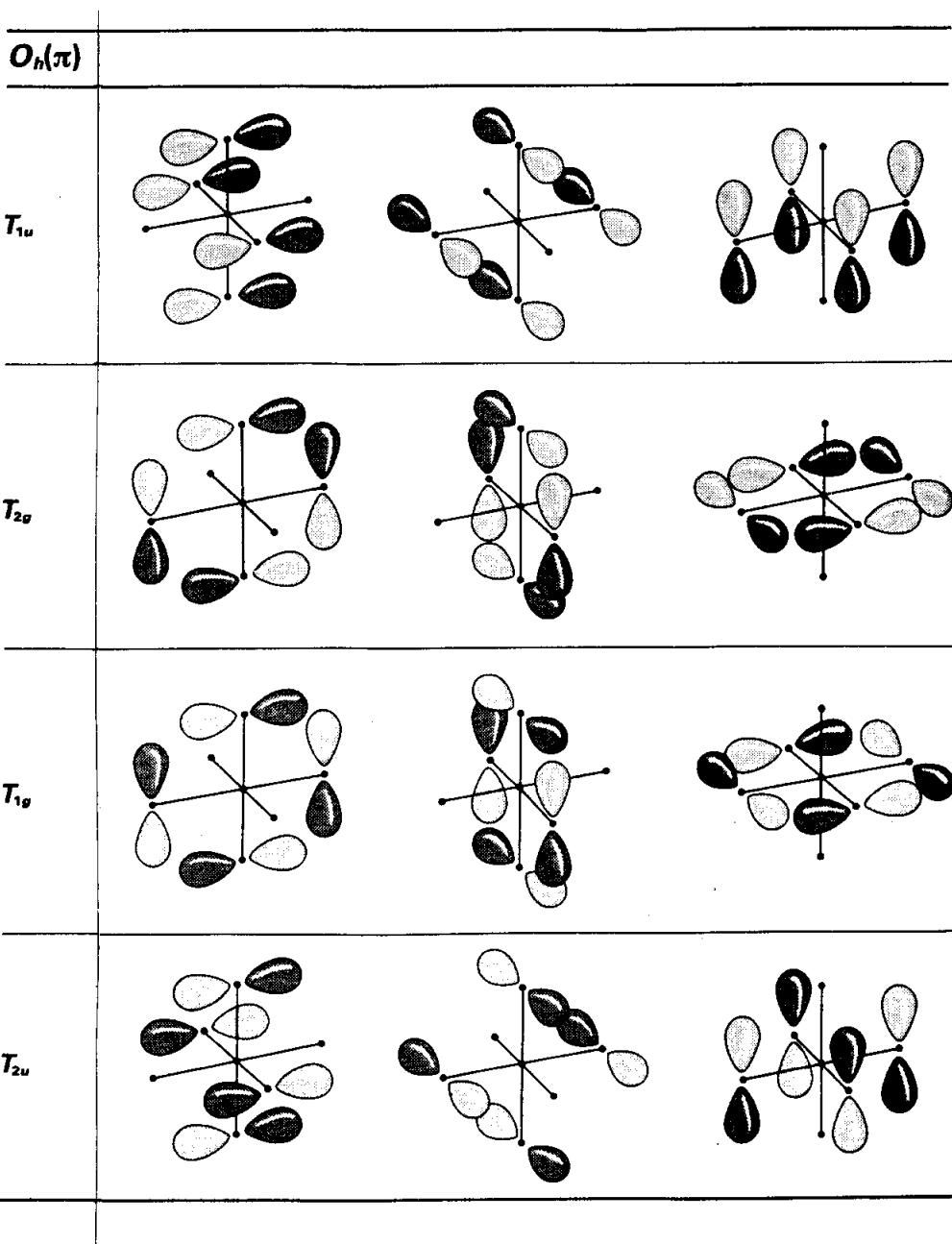


 T_d

 T_2 

 $O_h(\sigma)$

 A_{1g}  E_g  T_{1u} 



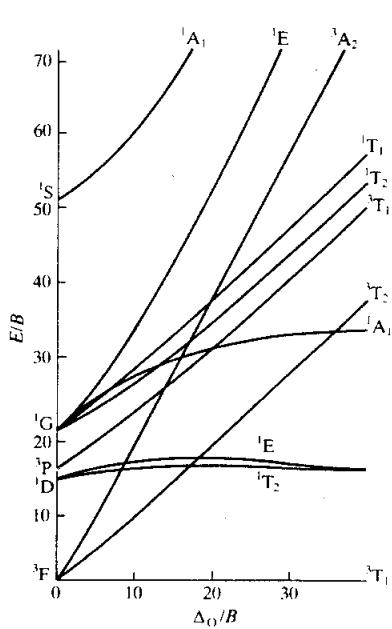
ภาคผนวก V

แผนภาพทานาเบ-สูกากะ^{โน} Tanabe- Sugano Diagrams

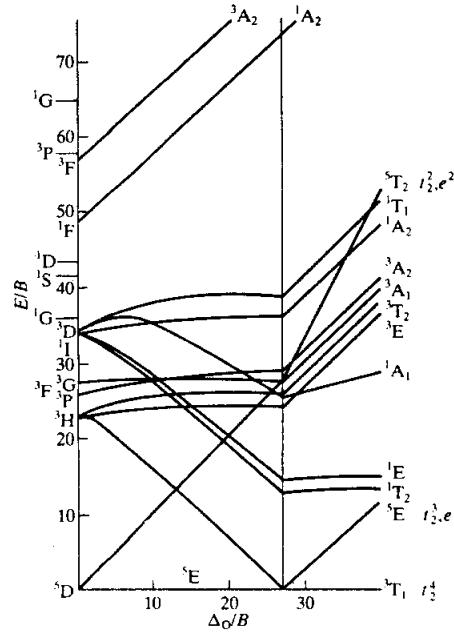
ภาคผนวกนี้รวมแผนภาพทานาเบ-สูกากะในสำหรับออกตะอีครัลคอมเพล็กซ์ซึ่งมีโครงแบบอิเล็กตรอน $d^2 - d^9$ แผนภาพแสดงว่าพลังงานของเหอนต่างๆขึ้นกับความแรงของสนามลิเกนด์ พลังงาน E แสดงในรูปของอัตราส่วน E/B เมื่อ B เป็นแรง electromotive และในทำนองเดียวกันสนามลิเกนด์ Δ_u ก็เช่นในเหอนของ Δ_u/B เหอนซึ่งมีมัลติพลิชิตต์ ต่างกันได้แสดงไว้ในแผนภาพเดียวกันด้วย โดยการเลือกค่าแรง electromotive C ที่เหมาะสมสำหรับแต่ละแผนภาพ พลังงานของเหอนวัดจากสถานะพื้น ดังนั้นจึงมีความไม่ต่อเนื่องของความชันเมื่อเหอนสปินต่ำแทนที่สปิน-สูงที่สนามลิเกนด์แรงมากสำหรับ d^4-d^8 เหอนต่างๆที่ใช้เป็นของกลุ่ม O_h

แผนภาพเหล่านี้นำเสนอครั้งแรกโดย Y.Tanabe และ S.Sugano ตั้งแต่ปี 1954 สามารถใช้หาพารามิเตอร์ Δ_u และ B โดยอัตราส่วนของพลังงานของทราบซึ่งนำไปยังเส้นต่างๆ อิกวิธิหนึ่งถ้าทราบพารามิเตอร์ของสนามลิเกนด์ก็อาจทำนายสเปกตร้าได้ เช่นกัน

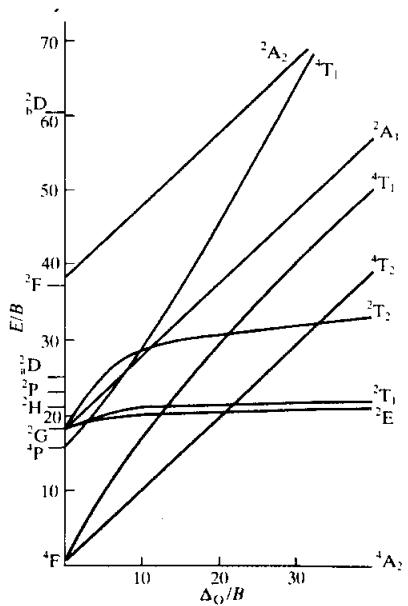
1. d^2 with $C = 4.42B$



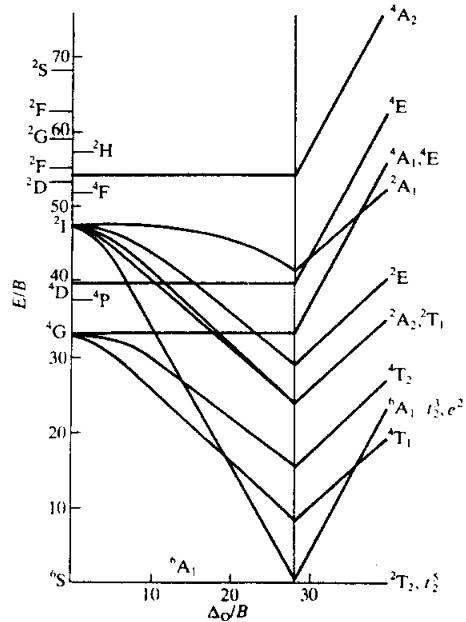
3. d^4 with $C = 4.61B$



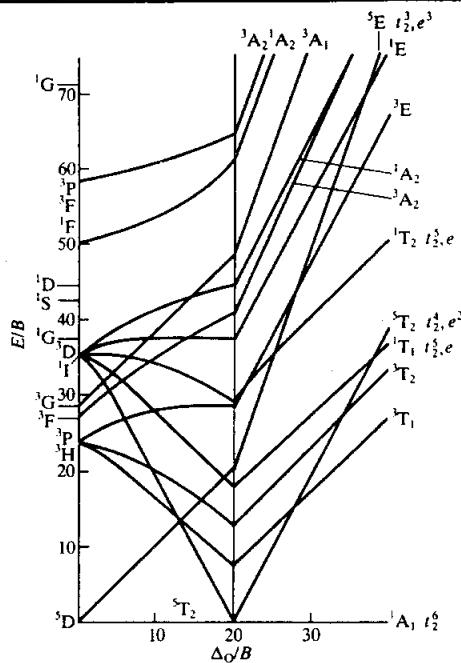
2. d^3 with $C = 4.5B$



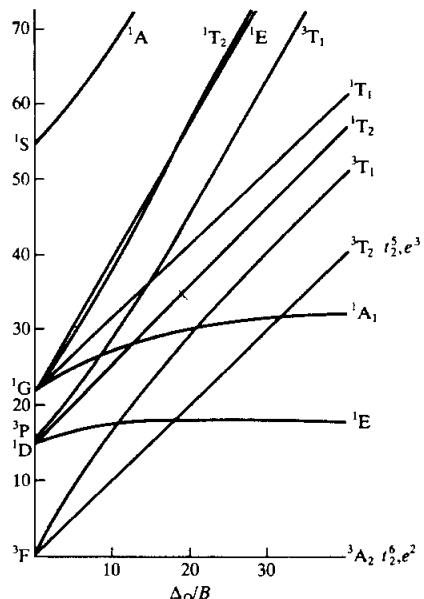
4. d^6 with $C = 4.477B$



5. d^6 with $C = 4.8B$



7. d^6 with $C = 4.709B$



6. d^7 with $C = 4.633B$

