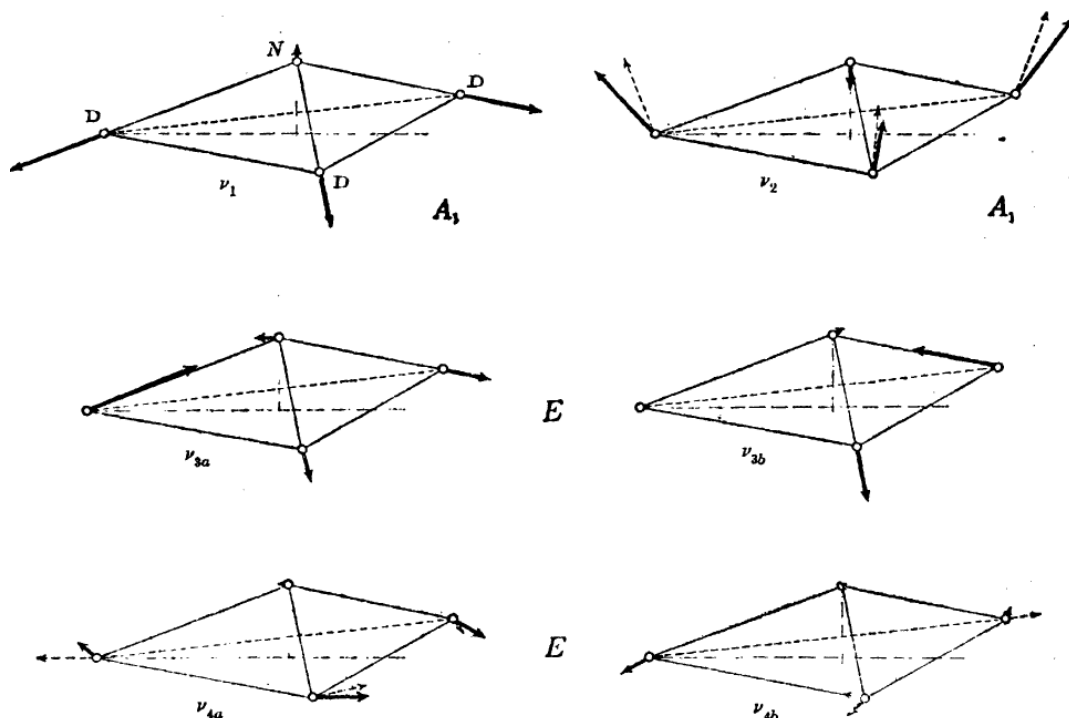


Grupy a symetrie II

- vibrace pyramidy XY_3 (C_{3v})
- pravidelný čtyřstěn: $P(4)$ a bodová grupa T_d
- notace pro bodové grupy (Schoenflies a mezinárodní)
- direktní součin matic a grup
- příklad $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$
- notace pro reprezentace
- operace symetrie na funkcích souřadnic
- bázové funkce

Molekulární vibrace - Herzberg II, pyramidální XY_3 (C_{3v}); normální módy
 $3N-6=6$ vibrací, povolené v IR i Ramanově rozptylu, dvě jsou dvojnásobně
 degenerované

(rozhájit chování v izolované molekule a v molekulárním krystalu)



Molecule	Observed frequencies (cm^{-1})			
	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4
NH_3	3337	950 ⁴⁵	3414	1628
ND_3	2419	749 ⁴⁵	2555	1191
PH_3	2327	991 ⁴⁵	2421	1121
PD_3	1694	730 ⁴⁵	—	806

FIG. 45. Normal vibrations of the ND_3 molecule.—The vibrations are drawn to scale for ND_3 (see p. 177) in oblique projection. (For NH_3 the large mass ratio of N to H would not have allowed the displacement vectors of N to be drawn to the same scale as those of H). Both components of the degenerate vibrations are shown. The broken-line arrows in ν_2 and ν_4 give the symmetry coordinates of Fig. 58 (see p. 155). They are added so that the form of the vibrations can be more clearly visualized. In ν_{3b} there is a very small displacement (too small to show in the scale of the diagram) of the left D nucleus parallel to the line connecting the two other D nuclei (see also the discussion of Fig. 60 on p. 171). It should be noted that ν_{3a} and ν_{4a} are symmetric, ν_{3b} and ν_{4b} antisymmetric with respect to the plane of symmetry through the left D nucleus, that is, the plane of the paper.

Další příklad - T_d

Operace symetrie pravidelného čtyřřtěnu (struktura ZnS):

identita E ,

osm rotací C_3 kolem diagonál (čárkovaně),

tři rotace C_2 kolem x, y, z ,

šest os S_4 kolem x, y, z , odpovídajícím rotacím

$$o \pm\pi/2$$

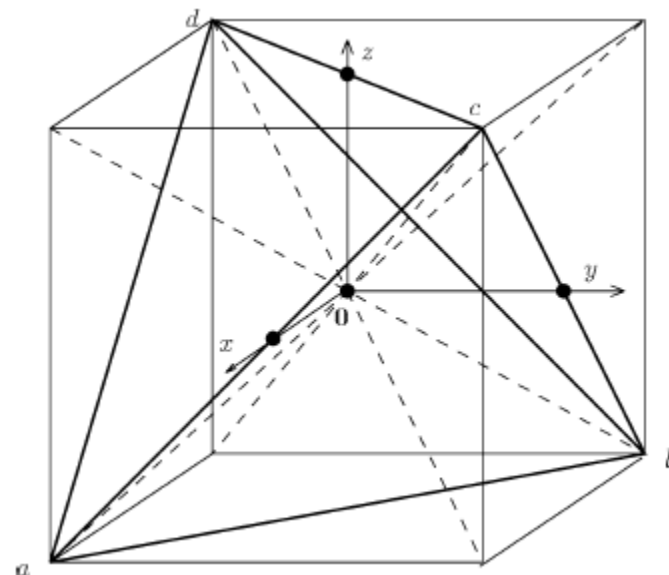
šest zrcadlení σ_d (diagonální roviny)

řád grupy T_d je 24,

je izomorfní s grupou permutací $P(4)$,

5 tříd, tabulka charakterů je matice 5x5

všimneme si ortogonality řádků a sloupců



Příklad - T_d

Tabulky charakterů grupy T_d ($\bar{4}3m$) ze dvou zdrojů:

Inui, Tanabe, Onodera, Group theory and its applications in physics, Springer 1976

T_d		E	$6IC_4$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$8C_3$
A_1	Γ_1	1	1	1	1	1
A_2	Γ_2	1	-1	1	-1	1
E	Γ_3	2	0	2	0	-1
T_1	Γ_4	3	1	-1	-1	0
T_2	Γ_5	3	-1	-1	1	0

M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, Group theory, Applications to the physics of Condensed Matter, Springer 2008

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	-1	1
T_2	3	0	-1	1	-1

Příklad - T_d

Tabulky charakterů pro bodovou grupu T_d a (izomorfní) grupu $P(4)$ z Dress_2008.

Co vede označení tříd grupy $P(4)$, a jaká je souvislost s operacemi symetrie T_d ?
Všimnout si rozdílného značení ireducibilních reprezentací.

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	-1	1
T_2	3	0	-1	1	-1

$P(4)$	(1^4)	$8(3, 1)$	$3(2^2)$	$6(2, 1^2)$	$6(4)$
Γ_1^s	1	1	1	1	1
Γ_1^a	1	1	1	-1	-1
Γ_2	2	-1	2	0	0
Γ_3	3	0	-1	1	-1
$\Gamma_{3'}$	3	0	-1	-1	1

14 Bravaisových mřížek

základ pro 230 prostorových
grup v 3D (73 symorfních,
157 nesymorfních - mají
šroubové osy a skluzové
roviny)

řada příkladů v

Dresselhaus, Dresselhaus &
Jorio

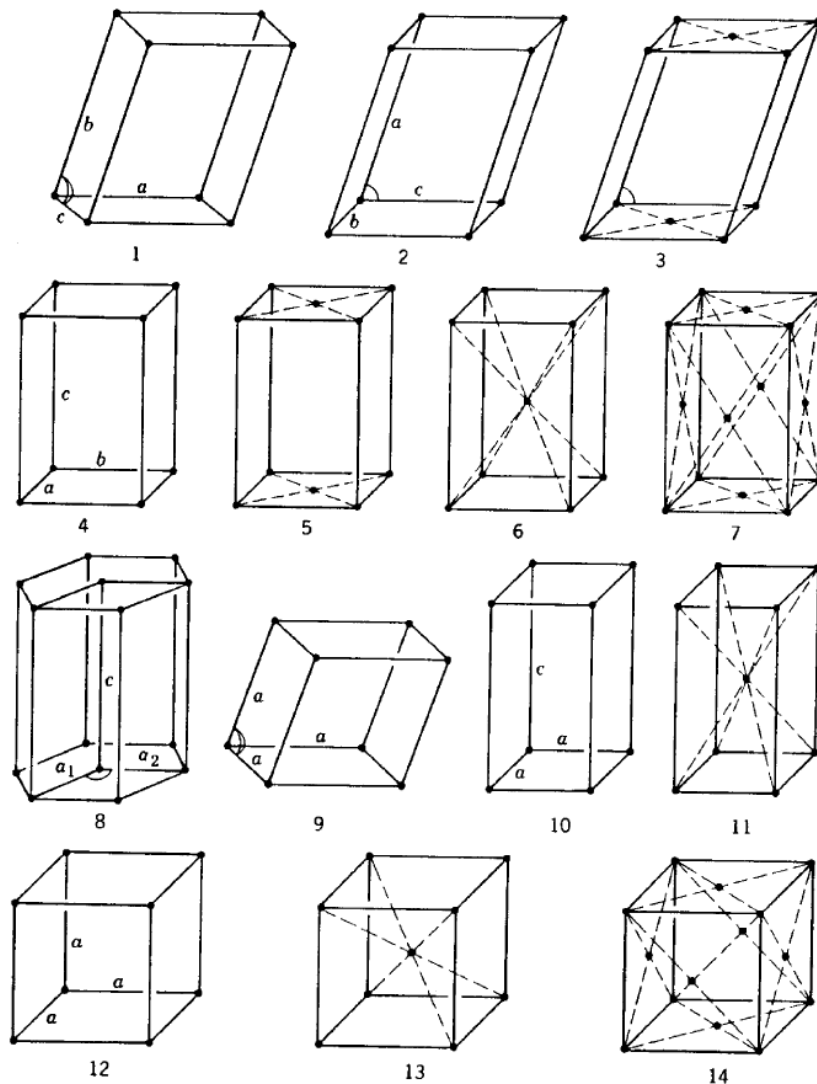
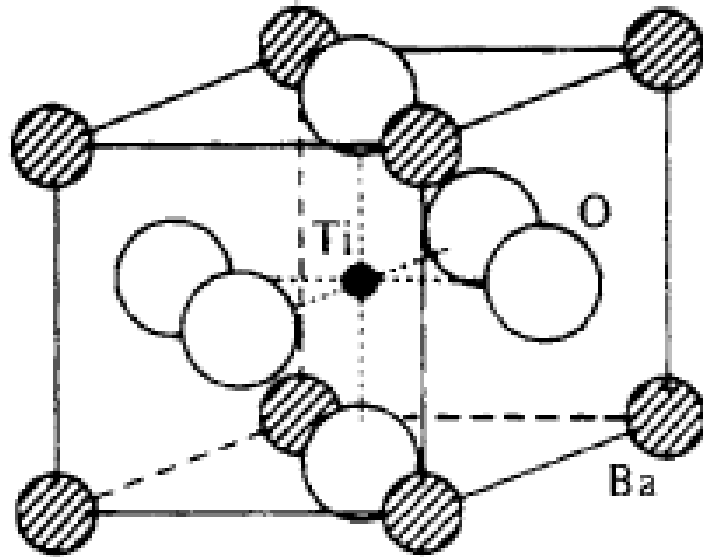


Fig. 9.3. The fourteen Bravais space lattices illustrated by a unit cell of each: (1) triclinic, simple; (2) monoclinic, simple; (3) monoclinic, base centered; (4) orthorhombic, simple; (5) orthorhombic, base centered; (6) orthorhombic, body centered; (7) orthorhombic, face centered; (8) hexagonal; (9) rhombohedral; (10) tetragonal, simple; (11) tetragonal, body centered; (12) cubic, simple; (13) cubic, body centered and (14) cubic, face centered

Perovskitová (CaTiO_3) krystalová struktura - BaTiO_3

O_h^1 ($\text{Pm}3\text{m}$)

Ti v centrální (a) pozici v krychli, Ba v pozici (b), O v pozici (c)
iont Ti v centru krychle je „malý“, ferroelektrický fázový přechod



(Krystalografické) bodové grupy – dvě hlavní konvence pro označování:
Schoenfliesova a „mezinárodní“ (Hermann-Maguin, international)

Translační symetrie omezuje n -násobné rotační osy C_n na $n=1,2,3,4$ a 6 .

Schoenflies	international
C_n	1,2,3,4,6
σ (zrcadlení)	m
S_n (rotačně-inverzní osa)	$\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

Symbol m pro rovinu zrcadlení nerozlišuje mezi vertikální, horizontální a diagonální rovinou; místo toho,

n/m znamená horizontální rovinu kolmou k n -násobné ose,

nm znamená horizontální rovinu obsahující n -násobnou osu.

Bodové grupy – dvě hlavní konvence pro 32 krystalografických bodových grup

Crystal system	Schönflies symbol	International symbol (abbreviated)
Cubic	O_h	$\frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m} (m\bar{3}m)$
	O	432
	T_d	$\bar{4}3m$
	T_h	$\frac{2}{m} \bar{3} (m\bar{3})$
	T	23
Tetragonal	D_{4h}	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} (4/mmm)$
	D_4	422
	D_{2d}	$\bar{4}2m$
	C_{4v}	4mm
	C_{4h}	$\frac{4}{m} (4/m)$
	S_4	$\bar{4}$
	C_4	4
Orthorhombic	D_{2h}	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} (mmm)$
	D_2	222
	C_{2v}	2mm

Bodové grupy – dvě hlavní konvence pro 32 krystalografických bodových grup

Crystal system	Schönflies symbol	International symbol (abbreviated)
Hexagonal	D_{6h}	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (6/mmm)
	D_6	622
	D_{3h}	$\bar{6}m2$
	C_{6v}	6mm
	C_{6h}	$\frac{6}{m}$ (6/m)
	C_{3h}	$\bar{6}$
	C_6	6
Trigonal	D_{3d}	$\bar{3} \frac{2}{m}$ ($\bar{3}m$)
	D_3	32
	C_{3v}	3m
	$C_{3i}(S_6)$	$\bar{3}$
	C_3	3
Monoclinic	C_{2h}	$\frac{2}{m}$ (2/m)
	$C_{1h}(C_s)$	m
Triclinic	C_2	2
	C_i	$\bar{1}$
	C_1	1

Direktní součin matic

Nechť jsou A a B matice s $l_{Ac} l_{Ar}$ a $l_{Bc} l_{Br}$ prvky:

A_{ij} , $i=1, \dots, l_{Ar}$, $j=1, \dots, l_{Ac}$, and B_{km} , $k=1, \dots, l_{Br}$, $m=1, \dots, l_{Bc}$.

Matice $C=A \times B$, označovaná jako **direktní součin**, je tvořena $l_{Ar} l_{Ac} l_{Br} l_{Bc}$ všemi součiny $A_{ij} B_{km} = C_{ik,jm}$. Alternativní symbol je $C=A \otimes B$.

Pro zacházení s maticemi je vhodné pravoúhlé uspořádání prvků.

Pár symbolů ik označuje řádky, pár jm sloupce pravoúhlého pole

$l_{Ar} l_{Br}$ řádků a $l_{Ac} l_{Bc}$ sloupců matice C .

Vodítkem pro definici násobení matic vzniklých direktním součinem je požadavek, aby „transformace“ byly reprezentovány postupným násobením matic:

$A'' = A' A$ reprezentuje operaci A následovanou operací A' ;

podobně $B'' = B' B$ a $C'' = C' C = A' A \times B' B$. Prvky direktního součinu jsou

$$(C' C)_{ik,jm} = \sum_p \sum_q A'_{ip} A_{pj} B'_{kq} B_{qm} = \sum_p \sum_q A'_{ip} B'_{kq} A_{pj} B_{qm} = \sum_p \sum_q C'_{ik,pq} C_{pq,jm},$$

což vyjde s použitím obvyklého pravidla “řádek-krát-sloupec” s maticemi C' a C .

Pravoúhlé uspořádání prvků $A \times B$:

$$A \times B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1l_{Ac}}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2l_{Ac}}B \\ \cdot & & & \\ A_{l_{Ar}1}B & A_{l_{Ar}2}B & \dots & A_{l_{Ar}l_{Ac}}B \end{bmatrix},$$

kde B je pravoúhlý blok

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1l_{Bc}} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2l_{Bc}} \\ \cdot & & & \\ B_{l_{Br}1} & B_{l_{Br}2} & \dots & B_{l_{Br}l_{Bc}} \end{bmatrix}.$$

Direktní součin grup

Dvě grupy,

G_A s prvky $A_i, i=1, \dots, n_A$, a

G_B s prvky $B_j, j=1, \dots, n_B$, takové že $A_i B_j = B_j A_i$ pro všechny jejich prvky,

tvoří grupu - **direktní součin** - $G_A \times G_B$ tvořenou všemi $A_i B_j$.

Všechny čtyři axiomy jsou splněny:

1. $A_i B_j A_k B_l = (A_i A_k)(B_j B_l)$,

2. jednotkový prvek je $E_A E_B$,

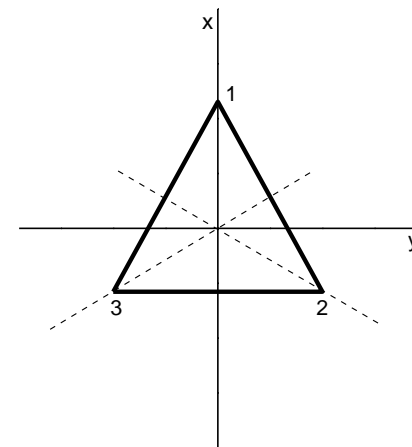
3. inverzní prvek... $A_i^{-1} B_j^{-1}$, neboť $A_i^{-1} B_j^{-1} A_i B_j = E_A E_B$,

4. násobení je asociativní.

Jestliže G_A a G_B nemají žádný společný prvek (jednotku bychom asi mohli považovat za společnou), řád $G_A \times G_B$ je $n_A n_B$.

Direktní součin grup - příklad

Operace symetrie rovnostranného trojúhelníka
(Schoenfliesova notace)



tvoří bodovou grupu $C_{3v} \{E, 3\sigma_v, 2C_3\}$, pokud je horní a dolní strana trojúhelníka odlišitelná (například „pyramidové“ molekuly typu NH_3);

bez této asymetrie přibude další operace symetrie:

σ_h , zrcadlení v horizontální rovině.

Protože $\sigma_h\sigma_h = E$, grupa $C_{1h} \{E, \sigma_h\}$ je cyklickou grupou řádu 2.

Horizontální zrcadlení komutuje se všemi prvky C_{3v} , celková symetrie je tedy popsána grupou $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$ s 12-ti prvky

$\{E, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, C_3, C_3^2, \sigma_h, \sigma_h\sigma_1, \sigma_h\sigma_2, \sigma_h\sigma_3, \sigma_hC_3, \sigma_hC_3^2\}$.

Direktní součin grup – příklad $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$, tabulka násobení

s jednodušší notací $P(3)$: $\sigma_1 \equiv A, \sigma_2 \equiv B, \sigma_3 \equiv C, C_3 \equiv D, C_3^2 \equiv F$; dále $\sigma_h \equiv S$:

vpravo vlevo	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

	E	S
E	E	S
S	S	E

vpravo vlevo	E	A	B	C	D	F	S	SA	SB	SC	SD	SF
E	E	A	B	C	D	F				?		
A	A	E	D	F	B	C						
B	B	F	E	D	C	A		?				
C	C	D	F	E	A	B						
...												

Příklad $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$, třídy, ireducibilní reprezentace

šest tříd:

$$\{E\}, \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}, \{C_3, C_3^2\},$$

$$\{\sigma_h\}, \{\sigma_h\sigma_1, \sigma_h\sigma_2, \sigma_h\sigma_3\}, \{\sigma_h C_3, \sigma_h C_3^2\}$$

hledáme matici 6x6 s charaktery ireducibilních reprezentací direktního součinu

(z Inui, Tanabe, Onodera, Group theory and its applications in physics, Springer 1976)

Table 4.2. Characters of the irreducible representations of the group C_{3v}

Class:	\mathcal{C}_1	\mathcal{C}_2	\mathcal{C}_3
Element:	E	C_3, C_3^{-1}	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Table 4.3. Irreducible representations of the group C_s

	E	σ
A'	1	1
A''	1	-1

Příklad $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$, charaktery ireducibilních reprezentací

matice 3x3 (C_{3v}) je pro D_{3h} 3x zopakovaná, dolní diagonální blok má opačné znamení díky druhé ireducibilní reprezentaci C_{1h} , s charakterem $A''=(1,-1)$

Table 4.4. Characters of the irreducible representations of the group $D_{3h} = C_{3v} \times C_s$

	E	C_3, C_3^{-1}	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	σ_h	$C_3\sigma_h, C_3^{-1}\sigma_h$	U_1, U_2, U_3
$A_1 \times A' = A'_1$	1	1	1	1	1	1
$A_2 \times A' = A'_2$	1	1	-1	1	1	-1
$E \times A' = E'$	2	-1	0	2	-1	0
$A_1 \times A'' = A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_2 \times A'' = A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1
$E \times A'' = E''$	2	-1	0	-2	1	0

Direktní součin grup – příklad $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$, třídy, ireducibilní reprezentace

jiná notace pro některé třídy

(charaktery z M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, Group theory, Applications to the physics of Condensed Matter, Springer 2008)

řádky a sloupce jsou odlišné (ortogonální) → lze najít korespondenci s předchozí verzí tabulky (charaktery jsou stejné)

Table A.14. Character table for group D_{3h} (hexagonal)

$D_{3h} = D_3 \otimes \sigma_h (\bar{6}m2)$			E	σ_h	$2C_3$	$2S_3$	$3C'_2$	$3\sigma_v$
$x^2 + y^2, z^2$	R_z	A'_1	1	1	1	1	1	1
		A'_2	1	1	1	1	-1	-1
	z	A''_1	1	-1	1	-1	1	-1
		A''_2	1	-1	1	-1	-1	1
$(x^2 - y^2, xy)$	(x, y)	E'	2	2	-1	-1	0	0
(xz, yz)	(R_x, R_y)	E''	2	-2	-1	1	0	0

Bodové grupy: označení reprezentací

Chemická notace (Mulliken, 1933) běžná v molekulární fyzice nebo v mřížové dynamice. Používá symboly

A a B pro jednorozměrné reprezentace (B tehdy, je-li lichá při nejmenší rotaci kolem hlavní osy),

E pro dvojrozměrné reprezentace,

T, U, V, W pro reprezentace dimenze 3, 4, 5, 6.

Fyzikální (Bethe, 1929; Koster, Dimmock, Wheeler and Statz, 1963):

$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$; v novější literatuře o kondenzovaných látkách.

Alternativně, občas (Bouckaert, Smoluchowski and Wigner, 1935);

příklad pro T_d :

Mulliken	KDWS	BSW
A_1	Γ_1	Γ_1
A_2	Γ_2	Γ_2
E	Γ_3	Γ_{12}
T_1	Γ_4	Γ_{15}
T_2	Γ_5	Γ_{25}

Bodové grupy: označení reprezentací

Mullikenovo značení má další pravidlo:

jestliže grupa obsahuje inverzi, symbol reprezentace má další index, buď

“g” (gerade) pro sudou paritu při inverzi, nebo

“u” (ungerade) pro lichou paritu.

Příklad ortorombické bodové grupy $D_{2h}=D_2 \times C_I$, $C_I=\{E, I\}$ je cyklická grupa řádu 2.

D_{2h}		Basis	E	C_{2z}	C_{2y}	C_{2x}	I	σ_z	σ_y	σ_x
A_g	Γ_1^+	x^2, y^2, z^2	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	Γ_2^+	xy	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_{2g}	Γ_3^+	xz	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B_{3g}	Γ_4^+	yz	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
A_u	Γ_1^-	xyz	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_{1u}	Γ_2^-	z	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{2u}	Γ_3^-	y	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
B_{3u}	Γ_4^-	x	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Rotace o úhel α v rovině (x,y) :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \cos \alpha - y \sin \alpha \\ x \sin \alpha + y \cos \alpha \end{bmatrix} = R(\alpha) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad R(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}, \quad R^{-1}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}.$$

Tato transformace souřadnic transformuje také jejich funkce, $f(x,y)$, jako jsou například $f_1(x,y)=x$, $f_2(x,y)=x^2+y^2$, $f_3(x,y)=x^2-y^2$, $f_4(x,y)=xy$, $f_5(x,y)=x^3-3xy^2, \dots$

Transformované funkční hodnoty jsou

$$f'(x', y') = f(x, y),$$

transformovaná funkce vychází z originální působením operátoru P_R (působícím na funkce):

$$f' = P_R f, \quad P_R f(x', y') = f(x, y) = f(x' \cos \alpha + y' \sin \alpha, y' \cos \alpha - x' \sin \alpha).$$

Explicitní tvar transformované funkce je tedy

$$P_R f(x, y) = f(x \cos \alpha + y \sin \alpha, y \cos \alpha - x \sin \alpha).$$

Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Rotace R_α transformuje komplexní funkci dvou reálných argumentů $f_{c1}(x,y)=x+iy$ do

$$P_R f_{c1}(x, y) = x \cos \alpha + y \sin \alpha + i(y \cos \alpha - x \sin \alpha) = e^{-i\alpha} f_{c1}(x, y).$$

Pro $f_2(x,y)=x^2+y^2$, $f_3(x,y)=x^2-y^2$, $f_4(x,y)=xy$, dostáváme následující příklady transformací:

$$f_2' = x^2 + y^2 = f_2,$$

$$f_4' = -\cos \alpha \sin \alpha (x^2 - y^2) + (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) xy = -\cos \alpha \sin \alpha f_3 + (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) f_4.$$

Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Pro každou transformaci R třírozměrného vektoru $\mathbf{r}=(x,y,z)$, $\mathbf{r}'=R\mathbf{r}$, dostaneme transformovanou funkci pomocí následujícího pravidla:

$$P_R f(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}'), \text{ i.e.,}$$

$$P_R f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}).$$

Dvě po sobě následující operace R and S transformují libovolnou funkci f následujícím způsobem:

$$P_S P_R f(\mathbf{r}) = P_S [P_R f(\mathbf{r})] = P_S g(\mathbf{r}) = g(S^{-1}\mathbf{r}) = f(R^{-1}S^{-1}\mathbf{r}),$$

kde $g=P_R f$.

Složené působení operace R (provedené prvně) a S je součin SR :

$$P_{SR} f(\mathbf{r}) = f[(SR)^{-1}\mathbf{r}] = f(R^{-1}S^{-1}\mathbf{r}),$$

vedoucí ke stejnému výsledku jako součin $P_S P_R$. Můžeme tedy použít stejný symbol pro operace R a P_R :

$$Rf(\mathbf{r}) \equiv f(R^{-1}\mathbf{r}).$$

Bázové funkce reprezentace

Soubor nezávislých funkcí f_1, f_2, \dots, f_d označíme jako **bázi** d -rozměrné reprezentace, tvořené maticemi s prvky $D_{kl}(A_i)$, je-li

$$A_i f_l = \sum_{k=1}^d D_{kl}(A_i) f_k \quad \text{pro } A_i \in G.$$

To je podmínka pro uzavřenost souboru funkcí pro operace grupy G .

Jednotlivé funkce z tohoto souboru se označují jako bázové funkce, nebo bázové vektory.

l -tý bázový vektor je lineární kombinací s koeficienty z l -tého sloupce matic reprezentace; „přísluší k l -tému sloupci“.

Následující (reducibilní) 3-rozměrná reprezentace $P(3)$ může být použita jako transformace funkcí $f_1=x, f_2=y, f_3=z$ prvky C_{3v} :

$$\begin{array}{ccc}
 E & C_3 & C_3^{-1} \\
 \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} y \\ z \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \\
 \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 \\
 \begin{bmatrix} y \\ x \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} x \\ z \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} z \\ y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}
 \end{array}$$

Její charakter je

$$P_3 = A_1 + E,$$

je ortogonální k A_2

(projekce na A_2

je nulová)

	E	$3\sigma_v$	$2C_3$
P_3	3	1	0
A_1	1	1	1
A_2	1	-1	1
E	2	0	-1

Funkce

$$f_{A_1} = f_1 + f_2 + f_3 = x + y + z$$

je invariantní při všech operacích z C_{3v} ;

tvoří **bázi reprezentace A_1** , nebo, **transformuje se jako A_1** .

Podobně, funkce

$$f_{E_1} = (2x - y - z) / \sqrt{6}, \quad f_{E_2} = (y - z) / \sqrt{2}$$

tvoří bázi ireducibilní reprezentace E .

Bázi reprezentace A_2 dostaneme například z polynomů třetího řádu:

$$f_{A_2} = x(y^2 - z^2) + y(z^2 - x^2) + z(x^2 - y^2).$$