

既約表現の記号

分子軌道が対称種で表記されているので対称性の知識が役立つ。

Mulliken の命名

1. 一次元既約表現は、A または B で表す
主軸の回転に対して対称 の場合 A (指標が 1)
主軸の回転に対して反対称の場合 B (指標が -1)

主軸に垂直な C_2 軸 (D 対称) や主軸に平行な σ 面をもつとき、

対称 = 下付 1

反対称 = 下付 2

2. 二次元既約表現は、E で表す
三次元既約表現は、T で表す

下付数字は数学的に決めるが複雑なので、任意と考えてよい

3. アポストロフィは、主軸に垂直な σ_h 面に対して、
対称 = '
反対称 = "

4. ゲラーデ、ウンゲラーデは、反転 i に対して、
対称 = 下付 g
反対称 = 下付 u