Área Académica de Química

Línea de Investigación: **Estudio de estructura molecular y electrónica de compuestos químicos**

Programa Educativo: **Licenciatura en Química**

Nombre de la Asignatura: **Química de Coordinación**

Unidad de Trabajo: **1. Simetría y constitución de los compuestos de coordinación**

Ciclo: Julio-Diciembre 2021

Profesor: **Dr. José Guadalupe Alvarado Rodríguez**

Fecha de elaboración: Febrero 2021

Subtema: **2.2. Definición de representación**

Objetivo del Subtema: *Determinar el grupo de simetría puntual a un objeto de prueba mediante la presencia de elementos de simetría claves.*

Objetivo del Material Didáctico: *Comprender el concepto de Representaciones reductibles e irreductibles mediante la aplicación de las operaciones de simetría del grupo de simetría puntual* C_{2v} *a un punto P(x, y, z) y su uso en la construcción de una Tabla de caracteres.*

Keywords: *Matrices; Reducible and Irreducible Representation; Character table*.

Palabras Clave: *Matrices; Representaciones reductibles e irreductibles; Tabla de caracteres*

Contenido

1. Introducción

Grupo: Estructura algebraica

Teoría de Grupos, Évariste Galois
(Matemático francés, 1811-1832) *

Conjunto de elementos y su regla de combinación

Debe cumplir con las siguientes propiedades:

1. Cerradura
2. Asociatividad
3. Existencia de un elemento neutro
4. Existencia del elemento inverso

5. Conmutatividad *(grupo abeliano)*

** http://scienceworld.wolfram.com/biography/Galois.html*

Grupo: Estructura algebraica (*cont.*)

EdeS (NH_3) = { (E), (C_3), $({}^1\sigma_v, {}^2\sigma_v, {}^3\sigma_v)$}

OdeS (NH_3) = { (E), (C_3, C_3^2), $({}^1\sigma_v, {}^2\sigma_v, {}^3\sigma_v)$}

FIGURE 4.14 Symmetry Operations for Ammonia. (Top view) NH_3 is of point group C_{3v}, with the symmetry operations E, C_3, C_3^2, σ_v, σ_v', and σ_v'' usually written as E, $2C_3$, *and* $3\sigma_v$ (note that $C_3^3 \equiv E$).

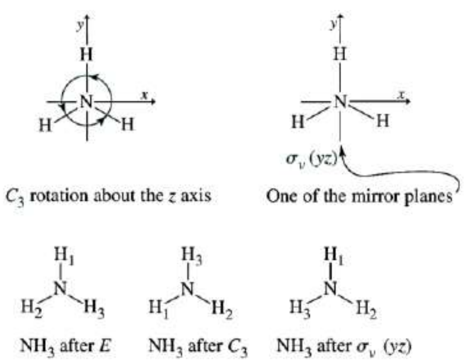
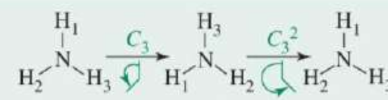
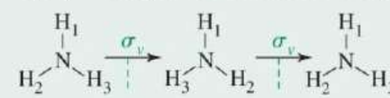
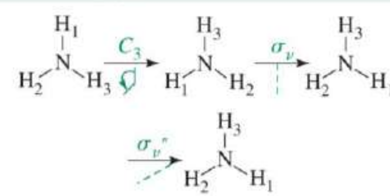


TABLE 4.6 Properties of a Group

Property of Group	Examples from Point Group
1. Each group must contain an **identity** operation that commutes (in other words, $EA = AE$) with all other members of the group and leaves them unchanged ($EA = AE = A$).	C_{3v} molecules (and *all* molecules) contain the identity operation E.
2. Each operation must have an **inverse** that, when combined with the operation, yields the identity operation (sometimes a symmetry operation may be its own inverse). *Note*: By convention, we perform sequential symmetry operations *from right to left* as written.	 $C_3^2C_3 = E$ (C_3 and C_3^2 are inverses of each other)  $\sigma_v\sigma_v = E$ (mirror planes are shown as dashed lines; σ_v is its own inverse)
3. The product of any two group operations must also be a member of the group. This includes the product of any operation with itself.	 σ_vC_3 has the same overall effect as σ_v'', therefore we write $\sigma_vC_3 = \sigma_v''$. It can be shown that the products of any two operations in C_{3v} are also members of C_{3v}.
4. The associative property of combination must hold. In other words, $A(BC) = (AB)C$.	$C_3(\sigma_v\sigma_v') = (C_3\sigma_v)\sigma_v'$

Miessler, G.L. y Tarr, D.A. (2018) Inorganic Chemistry (5a ed.). EUA: Prentice Hall.

Matriz

10. f. Mat. Conjunto de números o símbolos algebraicos colocados en líneas horizontales y verticales y dispuestos en forma de rectángulo. (https://dle.rae.es/matriz)

REPRESENTACIÓN GENERAL DE UNA MATRIZ DE ORDEN m x n

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & & \\ \cdot & \cdot & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}_{m \times n}$$

Donde:

a_{ij} : es el *elemento* o *entrada* general ubicado en la fila "i" , columna j

Ejemplos: $\begin{bmatrix} 3 & 7 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}_{2 \times 2}$ or $\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 3 & 5 \end{bmatrix}_{1 \times 5}$

Traza de una matriz

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{tr}\, A = a_{11} + a_{22} + a_{33} + a_{44} = \chi$$

La traza (o carácter) se define en matrices cuadradas (m×m) y es igual a la suma de los elementos de la diagonal principal

(*In group theory, the character of a group representation is a function on the group that associates to each group element the trace of the corresponding matrix*).

Matriz (*cont.*)

Multiplicación de matrices: Se pueden multiplicar si el número de columnas **n** de la primera es igual al número de filas **m** de la segunda

EXERCISE 4.4 Do the following multiplications:

a. $$\underset{3\times 3}{\begin{bmatrix}5 & 1 & 3\\ 4 & 2 & 2\\ 1 & 2 & 3\end{bmatrix}} \times \underset{3\times 3}{\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 1 & 2 & 3\\ 5 & 4 & 3\end{bmatrix}}$$

b. $$\underset{3\times 3}{\begin{bmatrix}1 & -1 & -2\\ 0 & 1 & -1\\ 1 & 0 & 0\end{bmatrix}} \times \underset{3\times 1}{\begin{bmatrix}2\\ 1\\ 3\end{bmatrix}}$$

c. $$\underset{1\times 3}{[1 \quad 2 \quad 3]} \times \underset{3\times 3}{\begin{bmatrix}1 & -1 & -2\\ 2 & 1 & -1\\ 3 & 2 & 1\end{bmatrix}}$$

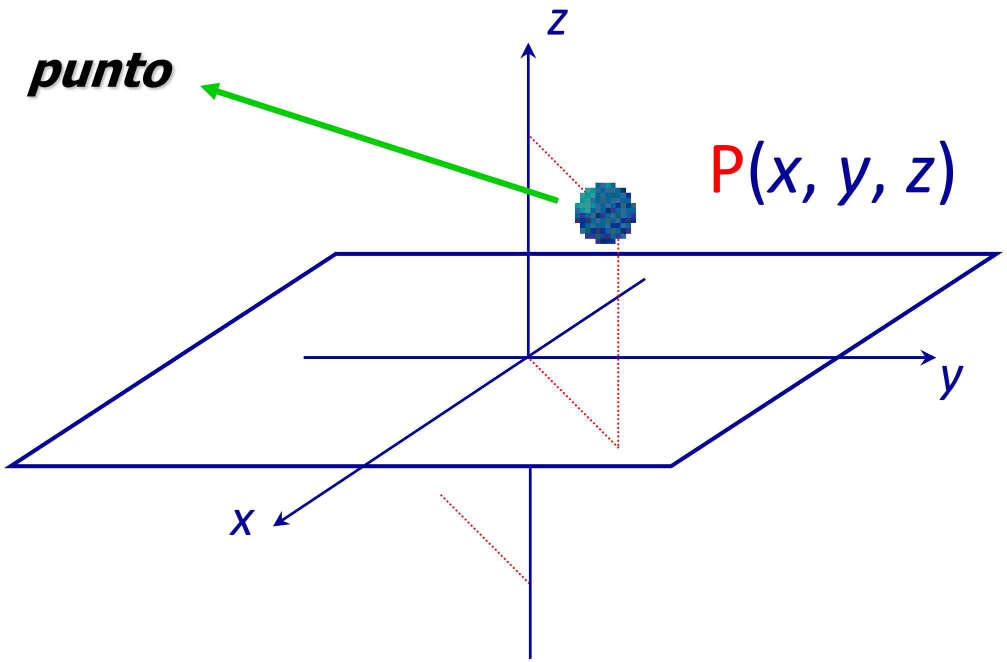
¿Cuáles serían los órdenes de las matrices resultantes?

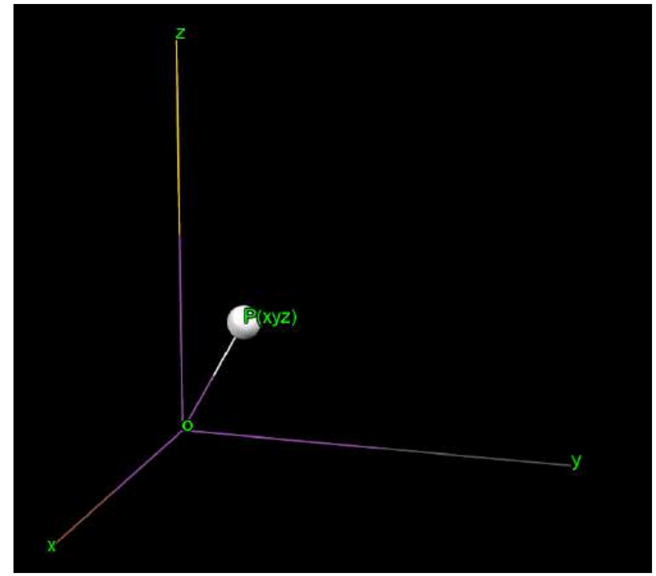
Ejemplo:

$$\begin{array}{cc} & k \\ i & \underset{2\times 2}{\begin{bmatrix}1 & 5\\ 2 & 6\end{bmatrix}} \end{array} \times \begin{array}{cc} j & \\ \underset{2\times 2}{\begin{bmatrix}7 & 3\\ 4 & 8\end{bmatrix}} & k \end{array} = \begin{array}{cc} j & \\ \begin{bmatrix}(1)(7)+(5)(4) & (1)(3)+(5)(8)\\ (2)(7)+(6)(4) & (2)(3)+(6)(8)\end{bmatrix} & i \end{array} = \begin{array}{cc} j & \\ \underset{2\times 2}{\begin{bmatrix}27 & 43\\ 38 & 54\end{bmatrix}} & i \end{array}$$

2. Aplicación de las Operaciones de Simetría a un punto P(x, y, z)

Sea P(x,y,z) un punto en el espacio (ejes cartesianos)





¿Cómo se transforma un punto P(x,y,z) al aplicarle las OdeS del GSP C_{2v}?

C_{2v}

EdeS (H_2O) = $\{ E, {}^{z}C_2, {}^{xz}\sigma_v, {}^{yz}\sigma_v \}$

OdeS (H_2O) = $\{ E, {}^{z}C_2, {}^{xz}\sigma_v, {}^{yz}\sigma_v \}$

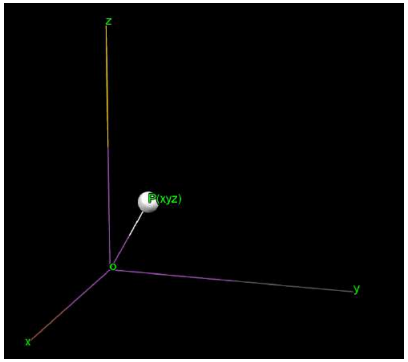
Las coordenadas pasan a una posición "nueva"

$x \xrightarrow{\text{OdeS}} x'$

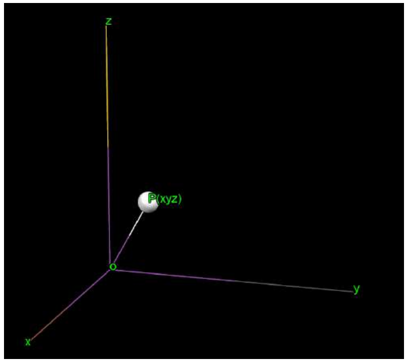
$y \xrightarrow{\text{OdeS}} y'$

$z \xrightarrow{\text{OdeS}} z'$

Aplicación de la operación E “no hacer nada” al punto P(x,y,z)



$\xrightarrow{\textbf{E}}$



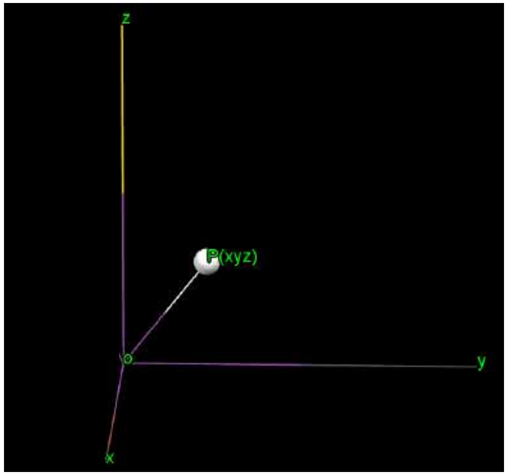
¡Queda en su lugar!

En forma (representación) matricial:

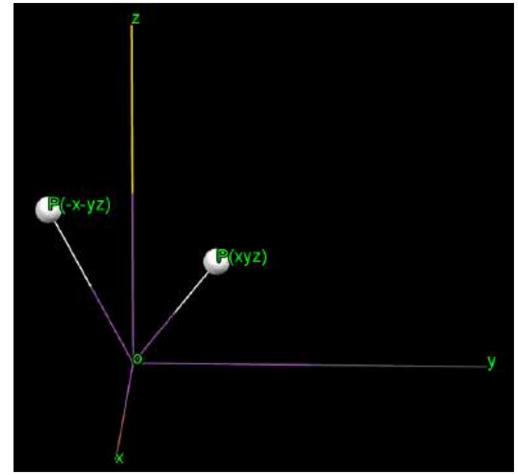
P (x, y, z) $\xrightarrow{\text{O. de S.}}$ P’(x’, y’, z’) P (x, y, z) $\xrightarrow{\text{E}}$ P’(x , y , z)

$$\underset{\mathbf{3\times 1}}{\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}} = \underset{\mathbf{3\times 3}}{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}} \underset{\mathbf{3\times 1}}{\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}} = \underset{\mathbf{3\times 1}}{\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}}$$

Aplicación de la operación ${}^{z}C_2$ "girar 180° alrededor del eje z en contra de las manecillas del reloj " al punto P(x,y,z)



$$\xrightarrow{{}^{z}C_2}$$

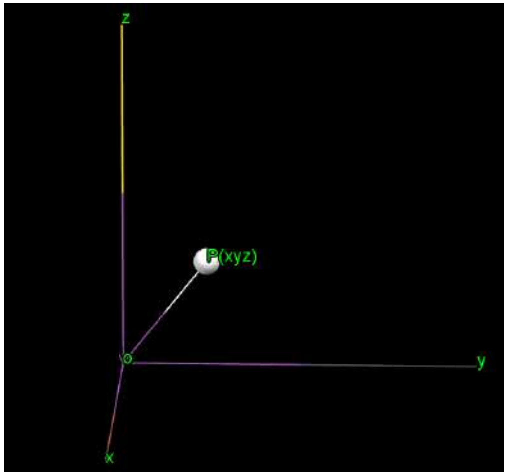


En forma (representación) matricial:

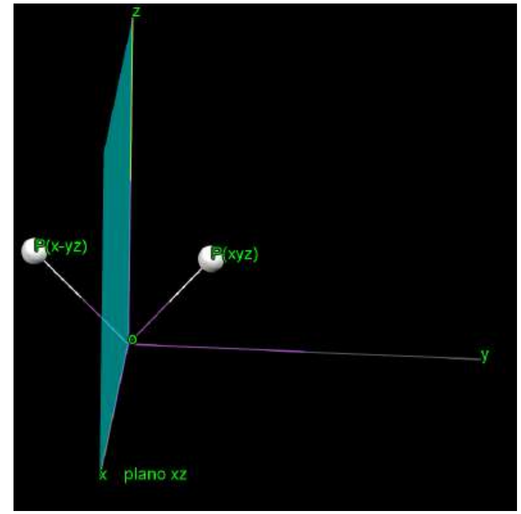
$$P\,(x, y, z) \xrightarrow{\text{O. de S.}} P'(x', y', z') \qquad P\,(x, y, z) \xrightarrow{{}^{z}C_2} P(-x\,, -y\,, z)$$

$$\underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}} = \underset{3\times 3}{\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}} \underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}} = \underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}}$$

Aplicación de la operación ${}^{xz}\sigma_V$ "reflejar en un plano vertical que contiene a los ejes x-z" al punto P(x,y,z)



$\xrightarrow{{}^{xz}\sigma_V}$

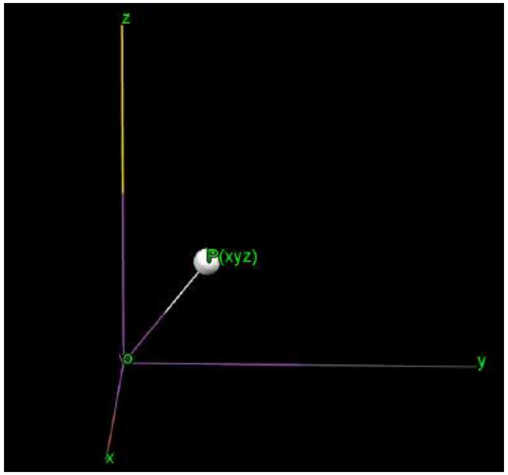


En forma (representación) matricial:

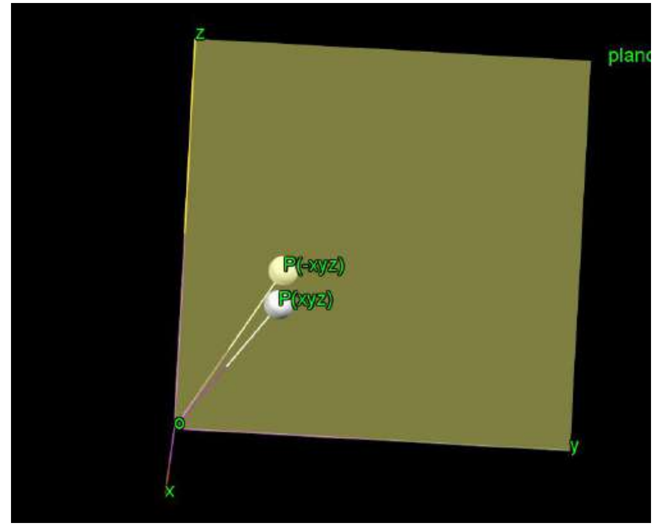
$$P\,(x,\,y,\,z) \xrightarrow{\text{O. de S.}} P'(x',\,y',\,z') \qquad\qquad P\,(x,\,y,\,z) \xrightarrow{{}^{xz}\sigma_V} P(x\,,\,-y\,,\,z)$$

$$\underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}} = \underset{3\times 3}{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}} \underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}} = \underset{3\times 1}{\begin{bmatrix} x \\ -y \\ z \end{bmatrix}}$$

Aplicación de la operación ${}^{yz}\sigma_V$ “reflejar en un plano vertical que contiene a los ejes x-z” al punto P(x,y,z)



$$\xrightarrow{\;{}^{yz}\sigma_V\;}$$



En forma (representación) matricial:

$$P\,(x, y, z) \xrightarrow{\text{O. de S.}} P'(x', y', z') \qquad\qquad P\,(x, y, z) \xrightarrow{{}^{yz}\sigma_V} P(-x\,,\, y\,,\, z)$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

3×1 $\qquad$ 3×3 $\qquad$ 3×1 $\qquad$ 3×1

3. Concepto de Representación

¡Las matrices de transformación cumplen también con las propiedades de Grupo!

Por ejemplo…

$$^{z}C_2 \quad {}^{z}C_2 \quad \equiv \quad E$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$^{z}C_2 \quad {}^{yz}\sigma_v \quad \equiv \quad {}^{xz}\sigma_v$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$
E	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$
$^{z}C_2$	$^{z}C_2$	E	$^{yz}\sigma_v$	$^{xz}\sigma_v$
$^{xz}\sigma_v$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	E	$^{z}C_2$
$^{yz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	$^{xz}\sigma_v$	$^{z}C_2$	E

C_{2v}	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Representación (Γ):

Conjuntos de matrices (o caracteres) que se comportan de forma análoga a las OdeS de un Grupo y satisfacen su propiedades (Cerradura, existencia de un elemento neutro, etc.)

E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_V$	$^{yz}\sigma_V$
$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\chi = 3$	$\chi = -1$	$\chi = 1$	$\chi = 1$

E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$
3	-1	1	1

¡Importante! Bajo la operación "no hacer nada" (E) las trazas o caracteres siempre tomarán valores enteros positivos ya que provienen de matrices identidad

$[1]$ **1 × 1** $\chi = 1$

$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ **2 × 2** $\chi = 2$

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ **3 × 3** $\chi = 3$

Representación reductible (Γ):

Conjuntos de matrices que se comportan de forma análoga a las OdeS de un Grupo y satisfacen su propiedades (Cerradura, existencia de un elemento neutro, etc.) y que pueden ser reducidas a órdenes menores (**diagonalización por bloques**)

Al aplicarle las OdeS del GSP C_{2v} al punto P(x,y,z) solo ocurre lo siguiente:

$$x \xrightarrow{\text{OdeS}} \begin{cases} x \\ -x \end{cases}$$

$$y \xrightarrow{\text{OdeS}} \begin{cases} y \\ -y \end{cases}$$

$$z \xrightarrow{\text{OdeS}} \begin{cases} z \end{cases}$$

$$E: \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad C_2: \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \sigma_v(xz): \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \sigma_v'(yz): \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix}$$

Representación irreductible (Γ):

Conjuntos de matrices que se comportan de forma análoga a las OdeS de un Grupo y satisfacen su propiedades (Cerradura, existencia de un elemento neutro, etc.) y que no pueden ser reducidas a órdenes menores

$$E: \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad C_2: \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \sigma_v(xz): \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \sigma_v'(yz): \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array}$$

Si se extraen las trazas (caracteres) de las matrices anteriores diagonalizadas por bloques de orden 1× 1 se obtiene la siguiente **tabla de caracteres**:

C_{2v}	E	$^zC_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z

4. Tabla de caracteres y propiedades

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama **orden** (**h**).
   Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.
2. Las operaciones de simetría se ordenan en **clases** de simetría.
   Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.
3. El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que **la tabla de caracteres es cuadrada**.
4. La suma de los cuadrados de las **dimensiones** (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$$
5. Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \bullet n_R$$
6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
   La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.
   $$\sum_R \chi_i(R)\chi_j(R) \bullet n_R = 0 \quad i \neq j$$
7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
   Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

J M Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2004

1. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se encontraron cuatro OdeS; por tanto el orden del grupo es h = 4

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama **orden** (**h**).
   Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.
2. Las operaciones de simetría se ordenan en **clases** de simetría.
   Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.
3. El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que **la tabla de caracteres es cuadrada**.
4. La suma de los cuadrados de las **dimensiones** (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$$
5. Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \bullet n_R$$
6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
   La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.
   $$\sum_R \chi_i(R)\chi_j(R) \bullet n_R = 0 \qquad i \neq j$$
7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
   Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

J M Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2004

2. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se encontró que los cuatro EdeS y, por tanto, las cuatro OdeS generadas por ellos se describen de forma diferente y existen cuatro clases (cada columna es una clase).

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z
Γ_4	a	b	c	d	

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama **orden** (**h**).
   Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.
2. Las operaciones de simetría se ordenan en **clases** de simetría.
   Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.
3. El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que **la tabla de caracteres es cuadrada**.
4. La suma de los cuadrados de las **dimensiones** (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$$
5. Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo.
   $$h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \bullet n_R$$
6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
   La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.
   $$\sum_R \chi_i(R)\chi_j(R) \bullet n_R = 0 \quad i \neq j$$
7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
   Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

J M Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2004

3. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se encontraron cuatro clases de OdeS y, por tanto, hay cuatro representaciones irreductibles: Γ_1, Γ_2, Γ_3 y $\mathbf{\Gamma_4}$

¡Esto significa que nos faltan cuatro caracteres desconocidos que podemos llamarles a, b, c, y d!

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	${}^{z}C_2$	${}^{xz}\sigma_v$	${}^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z
Γ_4	a	b	c	d	

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama **orden** (**h**).
   Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.
2. Las operaciones de simetría se ordenan en **clases** de simetría.
   Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.
3. El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que **la tabla de caracteres es cuadrada**.
4. La suma de los cuadrados de las **dimensiones** (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo. $h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$
5. Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo. $h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \cdot n_R$
6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
   La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero. $\sum_R \chi_i(R)\chi_j(R) \cdot n_R = 0 \quad i \neq j$
7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
   Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

J M Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2004

4. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se tiene que h = 4.

$$\boxed{h = \Sigma[\chi_i(\mathbf{E})]^2} \qquad (1)^2 + (1)^2 + (1)^2 + (a)^2 = h = 4$$

$a^2 = 1$; $a = \pm 1$ El valor correcto es +1 porque es la traza o carácter de una matriz unidad de orden 1×1 (*ver nota importante*)

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z
Γ_4	**1**	**b**	**c**	**d**	

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama **orden** (**h**).
Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.

2. Las operaciones de simetría se ordenan en **clases** de simetría.
Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.

3. El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que **la tabla de caracteres es cuadrada**.

4. La suma de los cuadrados de las **dimensiones** (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo.

$$h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$$

5. Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo.

$$h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \bullet n_R$$

6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.

$$\sum_R \chi_i(R)\chi_j(R) \bullet n_R = 0 \quad i \neq j$$

7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

J M Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2004

5. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se tiene que h = 4.

$h = \Sigma[n\cdot\chi_i(\mathbf{OdeS_i})]^2$; n es el número de OdeS en la clase

Para Γ_2 $1(1)^2 + 1(-1)^2 + 1(-1)^2 + 1(1)^2 = h = 4$

Para Γ_4 $1(1)^2 + 1(b)^2 + 1(c)^2 + 1(d)^2 = h = 4$

Esta propiedad se cumple aunque, al ser cuadrática, da dos posibles valores para las variables (es mejor no considerarla)

Tabla de Caracteres y propiedades

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z
Γ_4	**1**	**b**	**c**	**d**	

Propiedades de las representaciones irreducibles

6. Las representaciones irreducibles son **ortogonales**.
La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.

$$\sum_{\substack{R \\ i \neq j}} \chi_i(R)\chi_j(R) \bullet n_R = 0$$

6. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se tiene que h = 4.

$\boxed{\Sigma[n \cdot \chi_i(\mathbf{OdeS_i}) \cdot \chi_j(\mathbf{OdeS_j})] = \mathbf{0}}$; n es el número de OdeS en la clase

Para Γ_1 y Γ_2 $\quad 1(1)(1) + 1(-1)(-1) + 1(1)(-1) + 1(-1)(1) = 0$

Para Γ_1 y Γ_4 $\quad 1(1)(1) + 1(-1)(\mathbf{b}) + 1(1)(\mathbf{c}) + 1(-1)(\mathbf{d}) = 0$; $\mathbf{-b + c - d = -1}$ **ec. 1**

Para Γ_2 y Γ_4 $\quad 1(1)(1) + 1(-1)(\mathbf{b}) + 1(-1)(\mathbf{c}) + 1(1)(\mathbf{d}) = 0$; $\mathbf{-b - c + d = -1}$ **ec. 2**

Para Γ_3 y Γ_4 $\quad 1(1)(1) + 1(1)(\mathbf{b}) + 1(1)(\mathbf{c}) + 1(1)(\mathbf{d}) = 0$; $\mathbf{b + c + d = -1}$ **ec. 3**

Sumando las ecuaciones lineales 1 y 3: $2\mathbf{c} = -2$; $\mathbf{c} = -1$
Resolviendo para las variables restantes se tiene que $\mathbf{b} = 1$ y $\mathbf{d} = -1$

Tabla de Caracteres y propiedades

Propiedades de las representaciones irreducibles

7. **Una representación totalmente simétrica** aparece en todos los grupos.
Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.

7. Para el grupo $\mathbf{C_{2v}}$ se tiene que la Γ_3 es la totalmente simétrica

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
Γ_1	1	−1	1	−1	x
Γ_2	1	−1	−1	1	y
Γ_3	1	1	1	1	z
Γ_4	1	1	−1	−1	

Pero… aún falta cambiar las gammas por los símbolos de Mulliken

Símbolos Mulliken

- Todas las representaciones monodimensionales se designan por A o B; las bidimensionales por E y las tridimensionales por T (a veces por F).

  A, B: $\chi(E) = 1$ **E: $\chi(E) = 2$** **T: $\chi(E) = 3$**

- Las representaciones monodimensionales que son simétricas con respecto a la rotación $2\pi/n$ alrededor del eje principal C_n [simétrica significa: $\chi(\mathbf{C}_n) = \mathbf{1}$] se designan **A**, mientras que las antisimétricas [$\chi(\mathbf{C}_n) = \mathbf{-1}$] se designan **B**.
- Los subíndices **1** y **2** se emplean generalmente junto con A y B para designar aquellas repesentaciones que son, respectivamente, simétricas o antisimétricas con respecto a un C_2 perpendicular al eje de rotación principal, si faltara tal eje C_2, a un plano vertical de simetría.
- Las primas y dobles primas se unen a todas las letras, cuando convenga, para indicar aquellas que son, respectivamente, simétrica y antisimétrica con respecto a σ_h.
- En los grupos con centro de inversión, el subíndice **g** (del alemán *gerade*) se coloca a las representaciones que son simétricas con respecto a la inversión y el subíndice **u** (del alemán *ungerade*) se coloca a las representaciones antisimétricas con respecto a la inversión.

Asignación de los símbolos de Mulliken a las Γ_i del Grupo C_{2v}

Símbolos Mulliken (2)

Dimensiones de la representación	Caracteres bajo: E	C_n	i	σ_h	$C_2(\perp)$ / σ_v	Símbolos
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1			A_g B_g E_g T_g
			-1			A_u B_u E_u T_u
				1		A' B'
				-1		A" B"
					1	A_1 B_1
					-1	A_2 B_2

C_{2v}	E	$^{z}C_2$	$^{xz}\sigma_v$	$^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
A,B	1	−1	1	−1	x
A,B	1	−1	−1	1	y
A,B	1	1	1	1	z
A,B	1	1	−1	−1	

Por tener un valor de +1 los caracteres bajo la operación "no hacer nada" el símbolo de Mulliken puede ser A o B (*falta otro criterio para decidir cuál es*)

Asignación de los símbolos de Mulliken a las Γ_i del Grupo C_{2v}

Símbolos Mulliken (2)

Dimensiones de la representación	E	Caracteres bajo: C_n	i	σ_h	$C_2(\perp)$ / σ_v	Símbolos
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1			A_g B_g E_g T_g
			-1			A_u B_u E_u T_u
				1		A' B'
				-1		A" B"
					1	A_1 B_1
					-1	A_2 B_2

C_{2v}	E	${}^{z}C_2$	${}^{xz}\sigma_V$	${}^{yz}\sigma_V$	Coorde-nada
B	1	−1	1	−1	x
B	1	−1	−1	1	y
A	1	1	1	1	z
A	1	1	−1	−1	

A los caracteres bajo la operación "girar 180° " que tienen un signo positivo les corresponde un símbolo de Mulliken **A** mientras que a los negativos les corresponde **B** (*aún hay dos "A" y dos "B" y no puede haber repetidos*)

Asignación de los símbolos de Mulliken a las Γ_i del Grupo C_{2v}

Símbolos Mulliken (2)

Dimensiones de la representación	E	C_n	i	σ_h	$C_2(\perp)$ / σ_v	Símbolos
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1			A_g B_g E_g T_g
			-1			A_u B_u E_u T_u
				1		A' B'
				-1		A" B"
					1 $\rightarrow$	A_1 B_1
					-1 $\rightarrow$	A_2 B_2

C_{2v}	E	${}^{z}C_2$	${}^{xz}\sigma_v$	${}^{yz}\sigma_v$	Coorde-nada
B_1	1	−1	1	−1	x
B_2	1	−1	−1	1	y
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	−1	−1	

A los caracteres bajo la operación "reflejar en un plano vertical" que tienen un signo positivo les corresponde un subíndice "1" mientras que a los negativos les corresponde un subíndice "2"

(*¡Terminamos y reacomodemos nuestra Tabla de caracteres!*)

tabla de caracteres del Grupo C_{2v}

C_{2v}	E	${}^{z}C_2$	${}^{xz}\sigma_V$	${}^{yz}\sigma_V$	Coorde-nada
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	−1	−1	
B_1	1	−1	1	−1	x
B_2	1	−1	−1	1	y

Character table for point g

C_{2v}	E	C_2 (z)	σ_v(xz)	σ_v(yz)	linear functions, rotations
A_1	+1	+1	+1	+1	z
A_2	+1	+1	-1	-1	R_z
B_1	+1	-1	+1	-1	x, R_y
B_2	+1	-1	-1	+1	y, R_x

http://symmetry.jacobs-university.de/

6. Comentarios finales

Puntos clave:

- Los elementos de simetría (entes geométricos) generan operaciones de simetría
- Las operaciones de simetría se pueden combinar y cumplen con las propiedades de un Grupo como estructura algebraica
- Las operaciones de simetría pueden ser representadas por matrices que indican cómo cambian los puntos asociados a cada parte del objeto.
- Existen Representaciones reductibles e irreductibles
- Con las Representaciones irreductibles se obtienen las trazas o caracteres de las matrices y se colocan de forma ordenada en una Tabla de Caracteres
- Las Tablas de caracteres poseen información altamente simbólica del comportamiento en simetría de orbitales atómicos, vibraciones moleculares, comportamiento de funciones, etc.

Referencias para consultar:

Atkins, P., Overton, T., Rourke, J., Weller, M. y Armstrong, F. (2010) Shriver & Atkins Química Inorgánica (4a ed.). México: Mc Graw-Hill.

Miessler, G.L. y Tarr, D.A. (2018) Inorganic Chemistry (5a ed.). EUA: Prentice Hall.

Huheey, J.E., Keiter, E.A. y Keiter, R.L. (1997) Química Inorgánica (4a ed). México: Oxford University Press.

Lawrance, G.A. (2010) Introduction to Coordination Chemistry. Reino Unido: John Wiley & Sons.