

CAPÍTULO 12

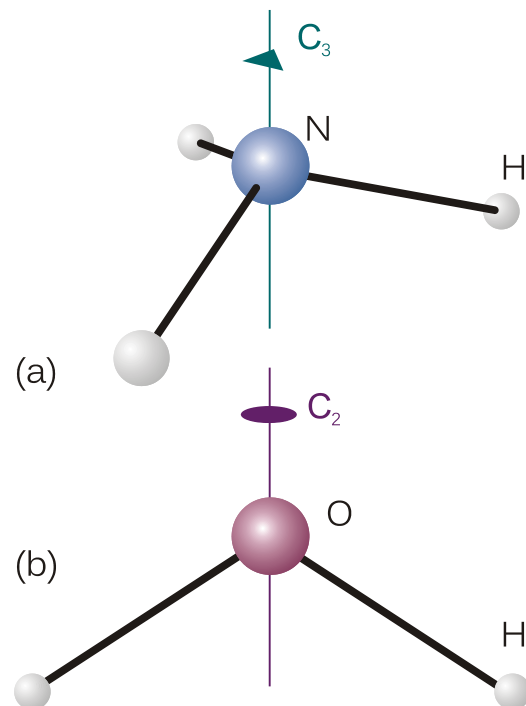
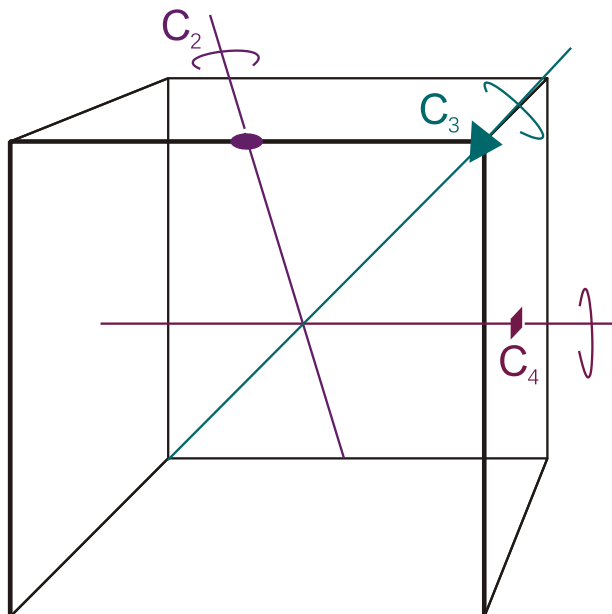
SIMETRIA MOLECULAR



1

1. Os elementos de simetria dos objetos

- **operação de simetria:** uma operação que não altera a aparência de um objeto.
 - rotação
 - reflexão
 - inversão
 - identidade
- **elemento de simetria:** Um ente geométrico por onde uma operação de simetria é realizada.
 - eixo de simetria (reta)
 - plano de reflexão
 - centro de inversão (ponto)

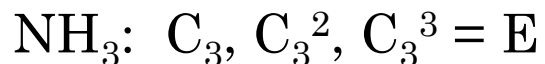


1.1 – Elementos e operações de simetria

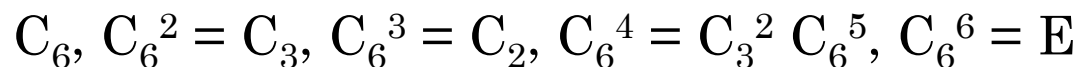
Table of Elements and Operations

Element	Operation	Symbol
http:// www.reciprocalnet .org/edumodules/ symmetry/ operations/ identity.html	<u>Identity</u>	E
<u>Symmetry plane</u>	Reflection in the plane	σ
<u>Inversion center</u>	Inversion of a point x,y,z to -x,-y,-z	i
<u>Proper axis</u>	Rotation by $(360/n)^\circ$	C_n
<u>Improper axis</u>	1. Rotation by $(360/n)^\circ$ 2. Reflection in plane perpendicular to rotation axis	S_n

- **rotação de ordem** em torno de um **eixo de rotação de ordem n**, C_n

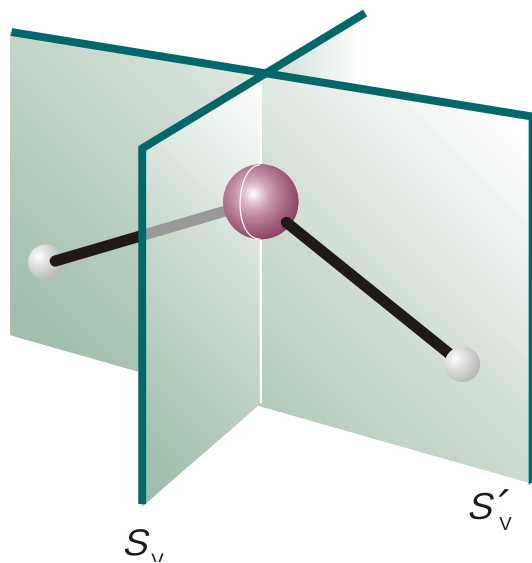


benzeno: C_6 será o **eixo principal de simetria**.



(<http://symmetry.otterbein.edu/tutorial/benzene.html>)

- **reflexão** em torno de um **plano de simetria**, σ
 - paralelo ao eixo principal: vertical, σ_v ,

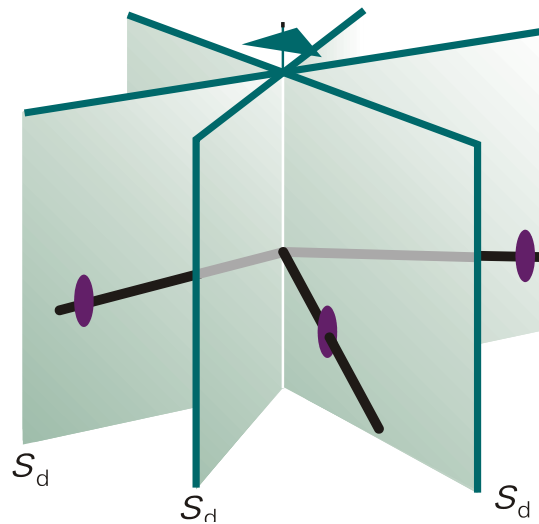


(<http://symmetry.otterbein.edu/tutorial/benzene.html>)

- perpendicular ao eixo principal: vertical, σ_h ,

(<http://symmetry.otterbein.edu/tutorial/benzene.html>)

- plano que bisecta dois eixos C_2 , σ_d ,

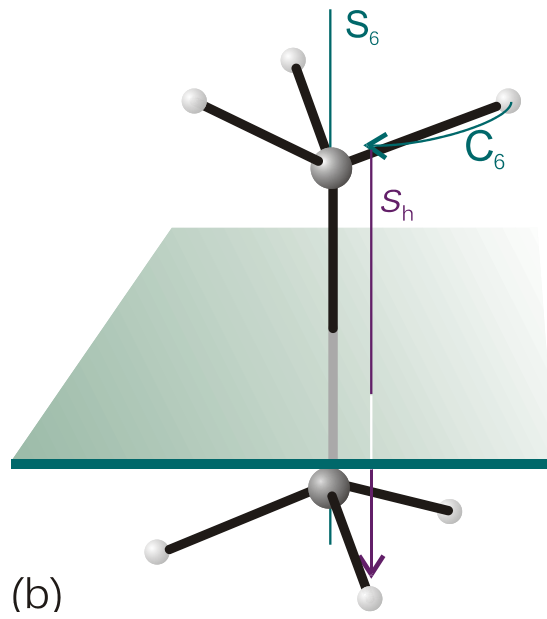
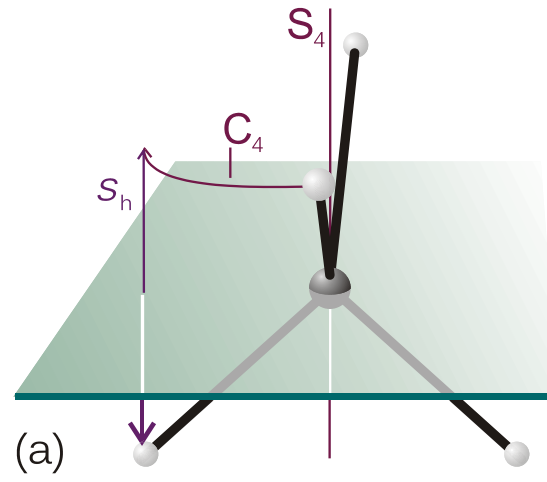


- **inversão *por um centro de simetria*, i ,**

<http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/operations/inversion.html>).

- **rotação imprópria de ordem n em torno de um eixo de rotação imprópria de ordem n , C_n**

<http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/operations/improper.html>).



1.2 – A classificação de simetria das moléculas

A classificação dos objetos segundo os elementos de simetria que correspondem às operações que deixam pelo menos um ponto fixo leva aos **grupos de ponto**.

Todas as moléculas com mesmas propriedades de simetria pertencerão ao mesmo **grupo de ponto**.

Dois sistemas de classificação:

Schoenflies: usado para a classificação de moléculas.

Hermann-Maunguin ou **internacional**: usado para cristais.

Non-rotational Groups

C_1	E	CHFCIBr	
C_s	E, σ_h	H₂CClBr	•low order •only E or E+ 1 other symmetry
C_i	E, i	HClBrC-CHClBr	

Single axis groups

C_n	E, C_n	H₂O₂	
C_{nv}	E, C_n , $n\sigma_v$	H₂O , 9-BBN	
C_{nh}	E, C_n , σ_h , S_n	Boric acid [B(OH)₃]	•only one rotational
S_{2n}	E, S_{2n}	1,3,5,7-tetrafluoracyclooctatetrate	
$C_{\infty v}$	E, C_{∞} , $\infty\sigma_v$	HCl	

Dihedral groups

D_n	E, C_n , nC_2	CoN ₆	
D_{nd}	E, C_n , nC_2 , S_{2n}	S₈ (crown sulfur)	
D_{nh}	E, C_n , nC_2 , σ_h , $n\sigma_v$	BF₃ , naphthalene(C₁₀H₁₀)	•has nC_2 axes perp. to principal axis
$D_{\infty h}$	E, i , C_{∞} , $\infty\sigma_v$	CO₂	

Cubic groups

T_d	E, C_3 , C_2 , S_4 , σ_d	CCl₄	
O_h	E, C_3 , C_2 , C_4 , i , S_4 , S_6 , σ_d , σ_h	SF₆	•7 groups but 3 common •high order ($T_d=24$, $O_h=48$, $I=120$)
I_h	E, C_3 , C_2 , C_5 , i , S_{10} , S_6 , σ	[B₁₂H₁₂] ²⁻	

Non-rotational Groups

C_1	E	http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ CHFC1Br.html	
C_s	E, σ_h	http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ H2C2BrCl.html	<ul style="list-style-type: none">•low order•only E or E+ 1 other symmetry
C_i	E, i	http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ CH2Br2Cl2.html	

Single axis groups

C_n E, C_n [http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/symmetry/
examples/h202.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/h202.html)

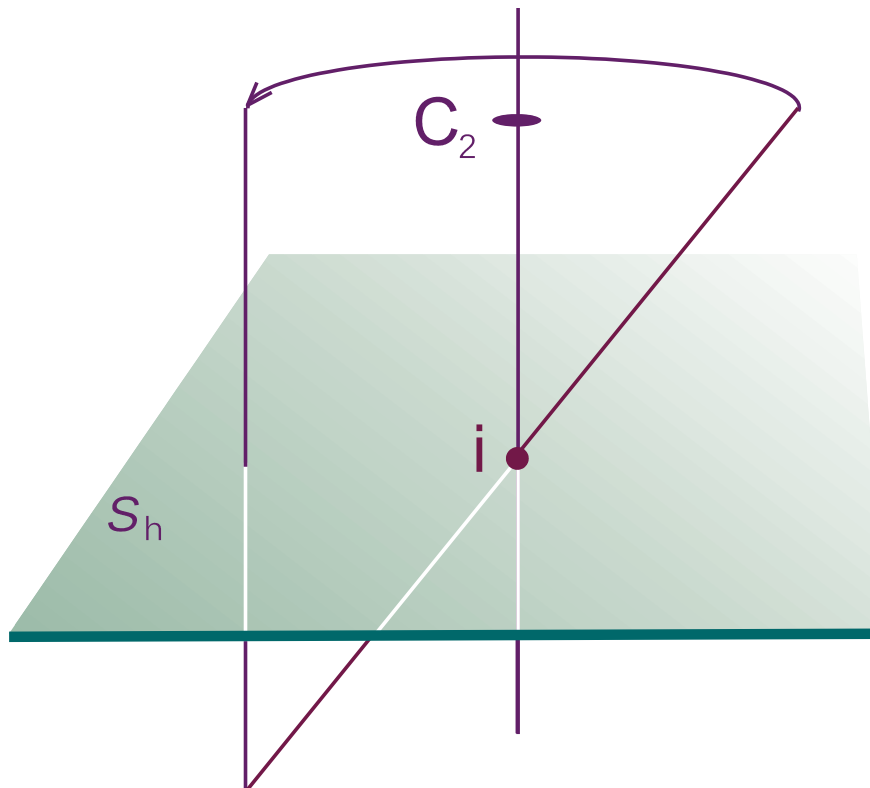
C_{nv} $E, C_n, n \sigma_v$ [H₂O,
http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/symmetry/
examples/9bbn.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/9bbn.html)

C_{nh} $E, C_n, i, \sigma_h,$
 S_n Boric acid
[http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/symmetry/
examples/BOH3.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/BOH3.html)

S_{2n} E, S_{2n} [http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/symmetry/
examples/
tetrafluoracyclo.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/tetrafluoracyclo.html)

$C_{\infty v}$ $E, C_{\infty}, \infty \sigma_v$ HCl

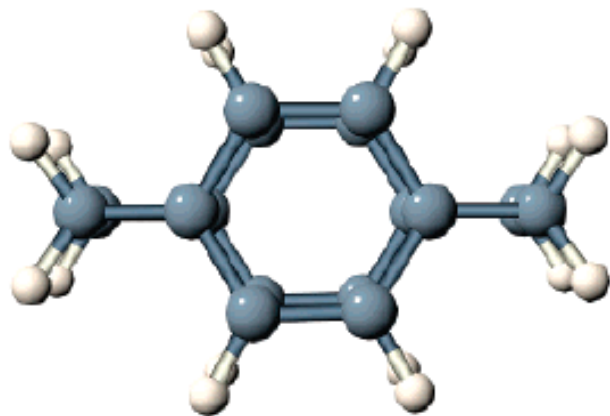
•only one rotational



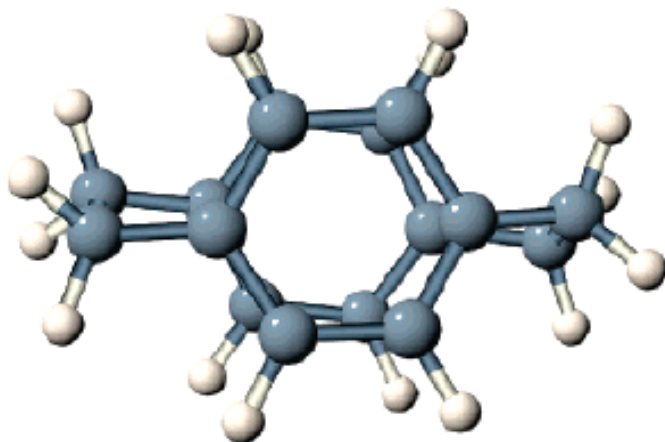
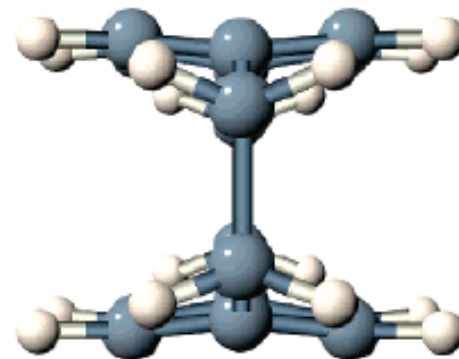
Dihedral groups

D_n	E, C_n, nC_2	[2,2]para-ciclofano http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ S8.html (crown sulfur)
D_{nd}	$E, C_n, nC_2,$ $n\sigma_d, S_{2n}$	http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ bf3.html , eteno, naphthalene(C₁₀H₁₀)
D_{nh}	$E, C_n,$ $nC_2, \sigma_h, n\sigma_v$	eteno, naphthalene(C₁₀H₁₀)
$D_{\infty h}$	$E, i, C_{\infty v}, \infty \sigma_v$	http:// www.reciprocalnet.or g/edumodules/ symmetry/examples/ CO2.html

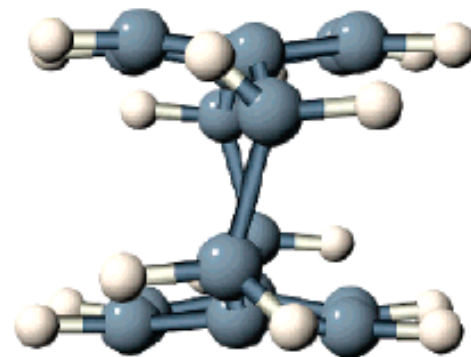
•has nC_2 axes perp. to principal axis



(a) - Symmetry D_{2h} – eclipsed geometry



(b) - Symmetry D_2 – distorted geometry



Cubic groups

T_d $E, C_3, C_2, S_4, \sigma_d$

[http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/
symmetry/
examples/
ccl4.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/ccl4.html)

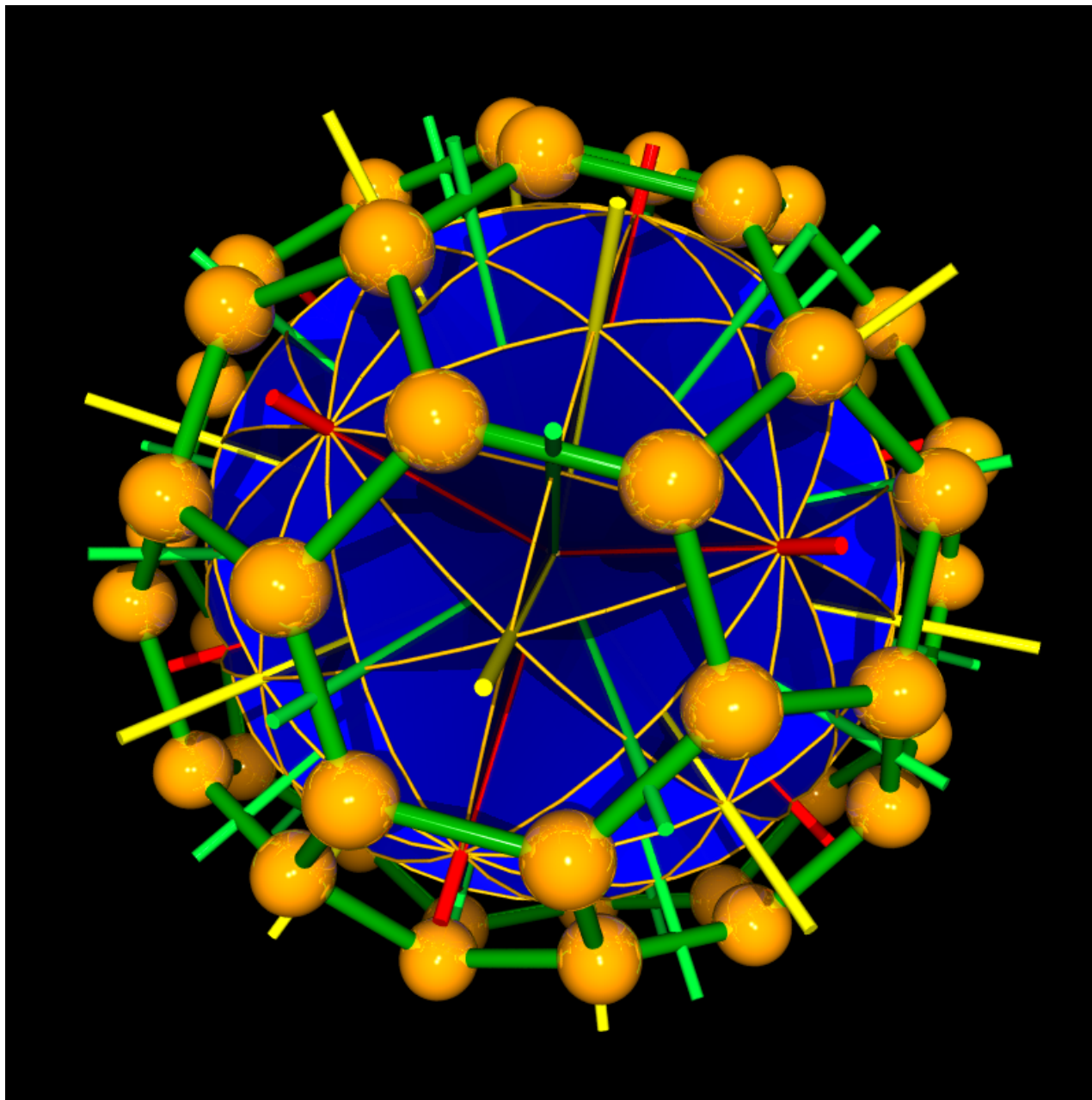
O_h $E, C_3, C_2, C_4, i, S_4,$
 S_6, σ_d, σ_h

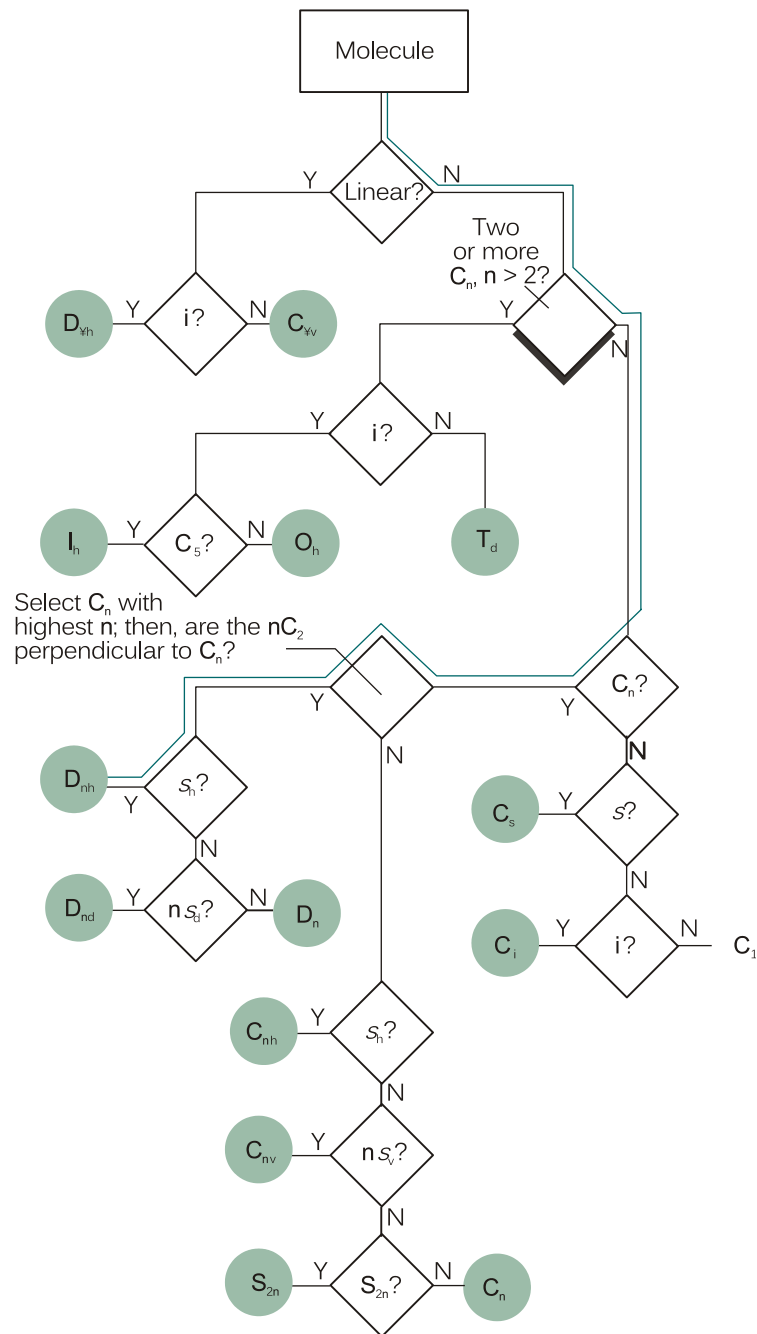
[http://
www.reciprocalnet.org/
edumodules/
symmetry/
examples/
sf6.html](http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/examples/sf6.html)

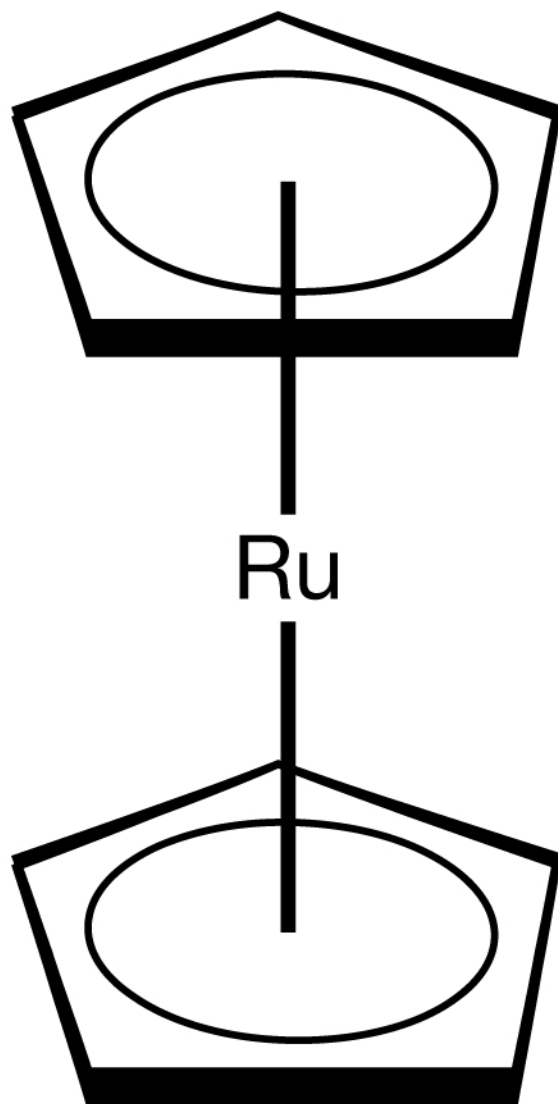
- 7 groups but 3 common
- high order ($T_d=24$, $O_h=48$, $I=120$)

I_h $E, C_3, C_2, C_5, i, S_{10}, S_6, \sigma$

$C_{60},$
 $[B_{12}H_{12}]^{-2}$

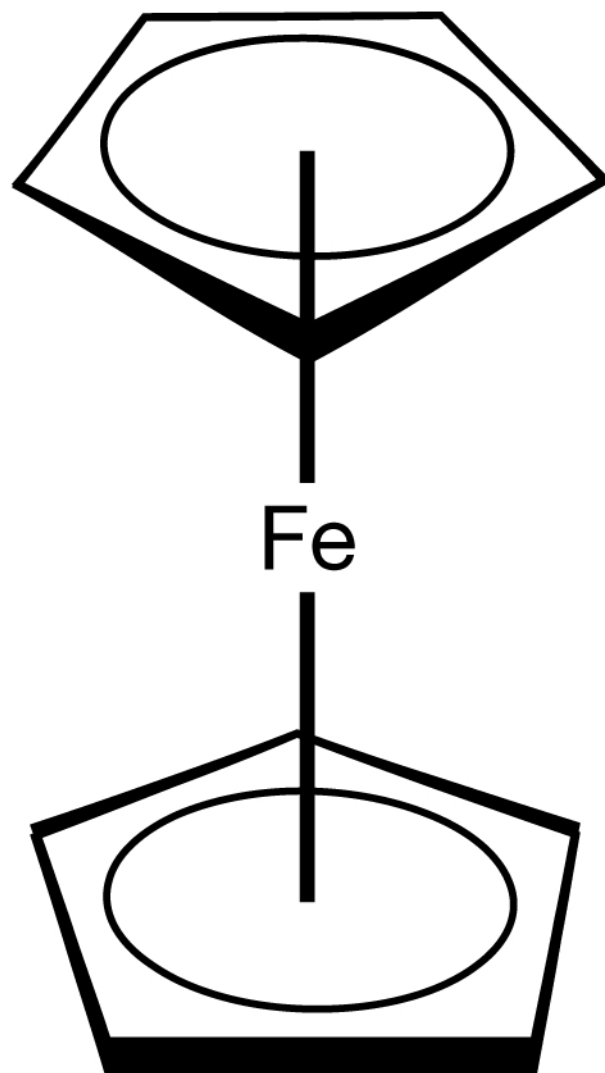






16 Ruthenocene, $\text{Ru}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$





17 Excited ferrocene, $\text{Fe}(\text{C}_6\text{H}_5)_2^*$



1.3 – Algumas consequências imediatas da simetria

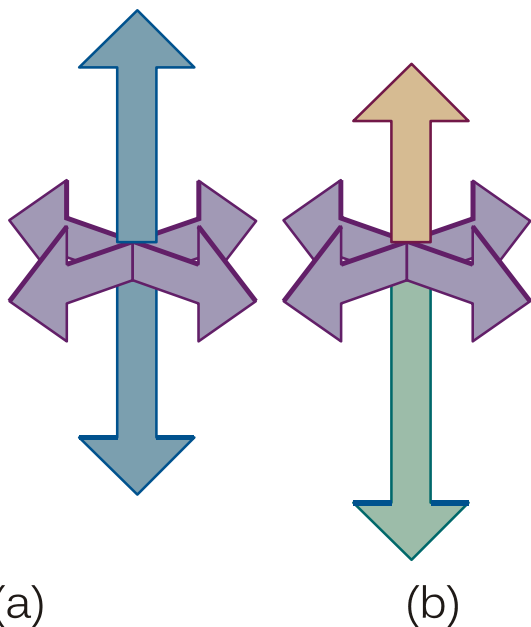
1.3.1 – Polaridade

Molécula polar: aquela que apresenta momento de dipolo permanente (CH_3Cl , HF , O_3).

Se a molécula possuir um C_n , $n > 1$, o vetor momento de dipolo será coincidente com o eixo de simetria.

Se a molécula possuir mais de um C_n ou um centro de inversão, ela será apolar.

Apenas moléculas dos C_n , C_{nv} e C_s serão polares.



1.3.2 – Quiralidade

Molécula quiral: aquela não pode ser superposta a sua imagem especular.

Toda molécula quiral é **oticamente ativa**.

Uma molécula será quiral, e oticamente ativa, apenas se não possuir um eixo de rotação imprópria, ou de rotação-reflexão, S_n .

O S_n poderá estar presente na molécula, implícito por outros elementos de simetria.

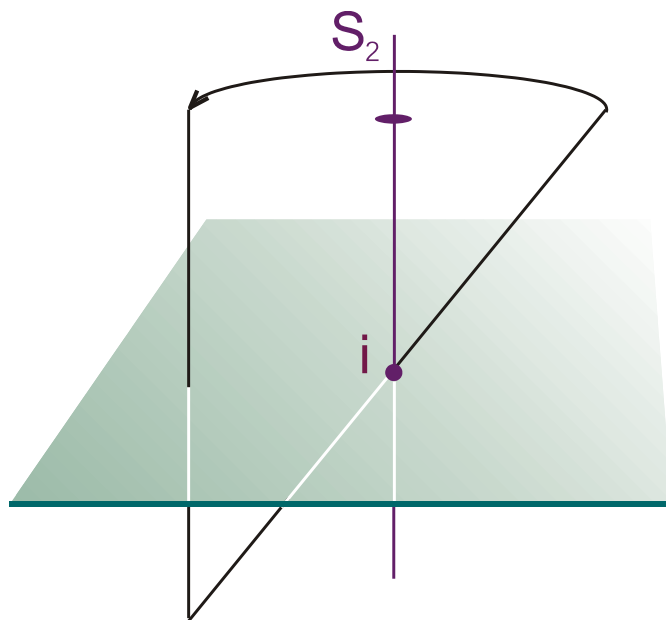
i implica em S_2 .

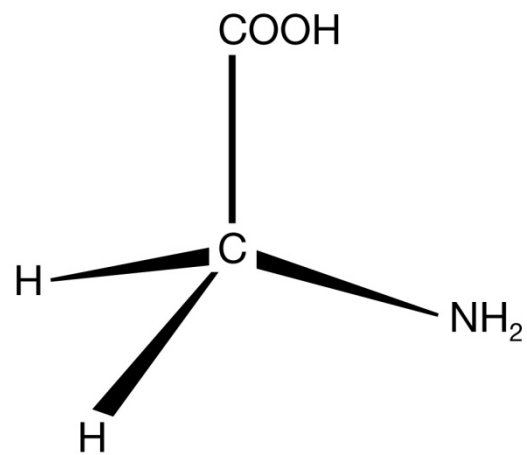
moléculas do C_{nh} possuem um S_n ,

já que $\sigma_h C_n = S_n$

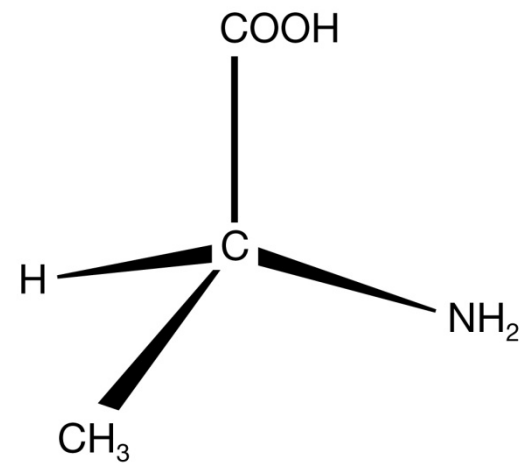
$S_1 = \sigma$

quiralidade: ausência de i ou σ .



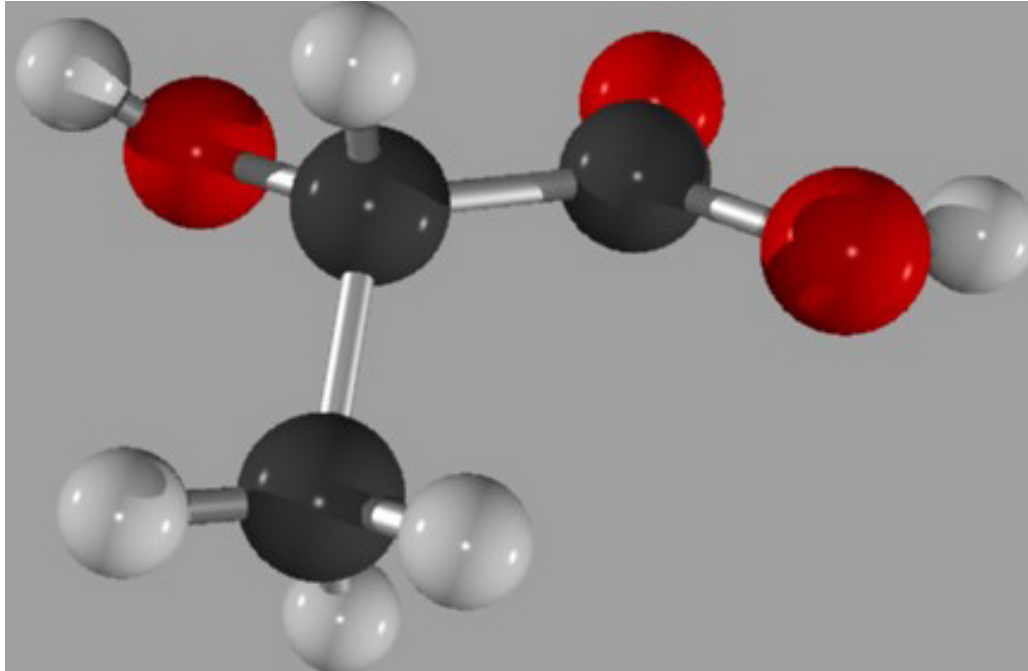


19 Glycine, $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$

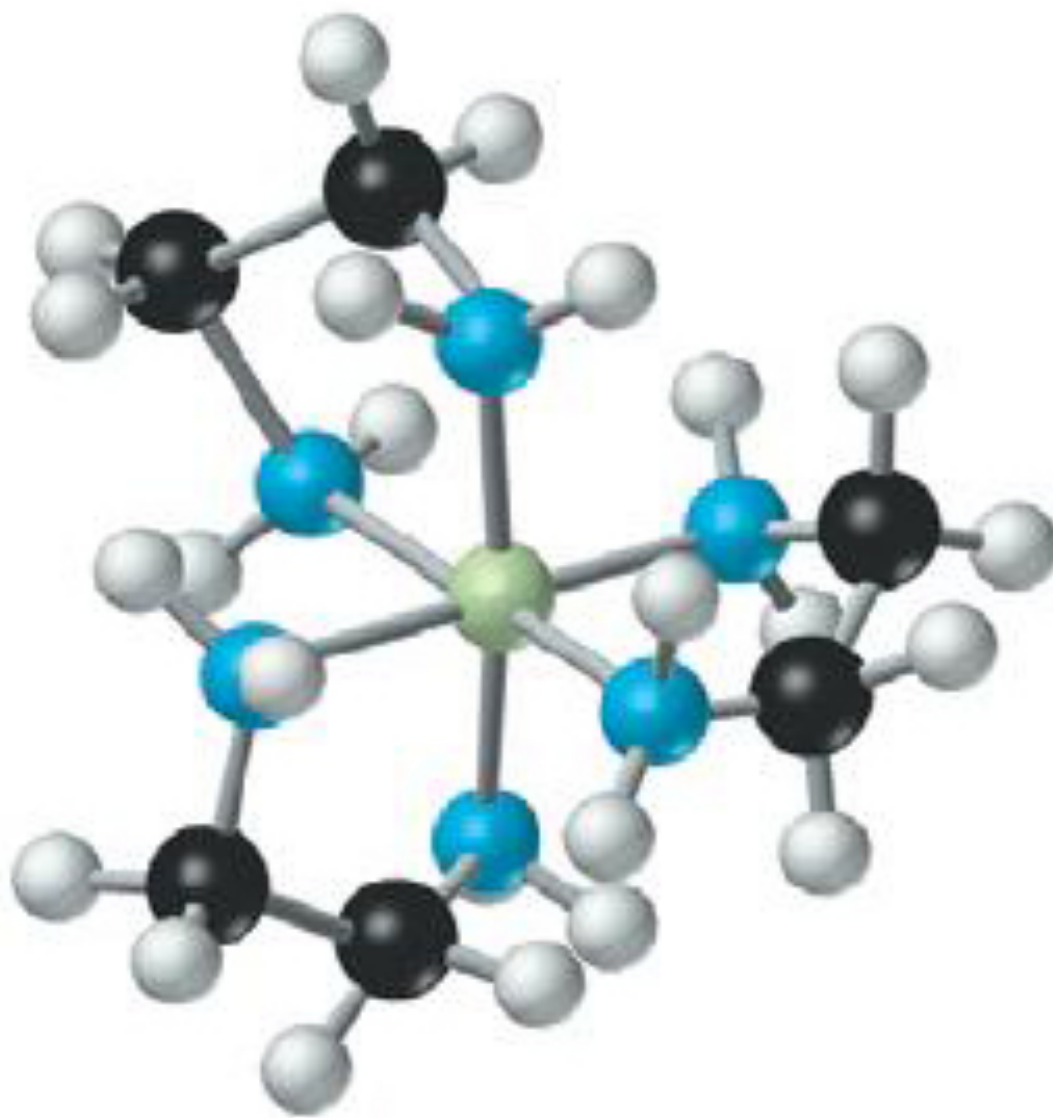


18 L-Alanine, $\text{NH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{COOH}$

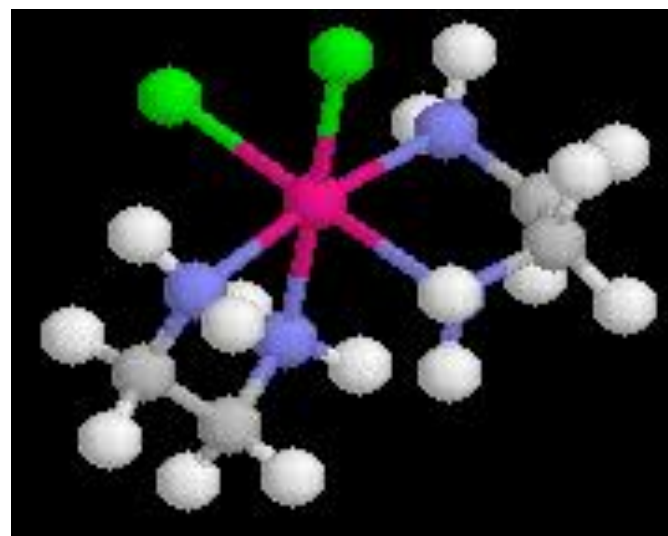
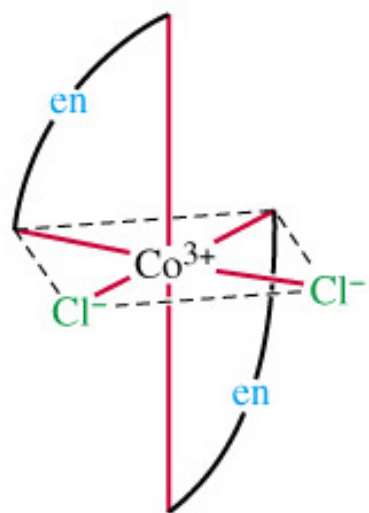




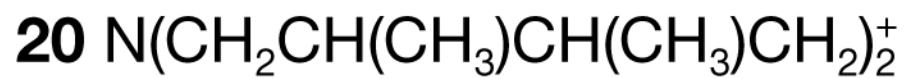
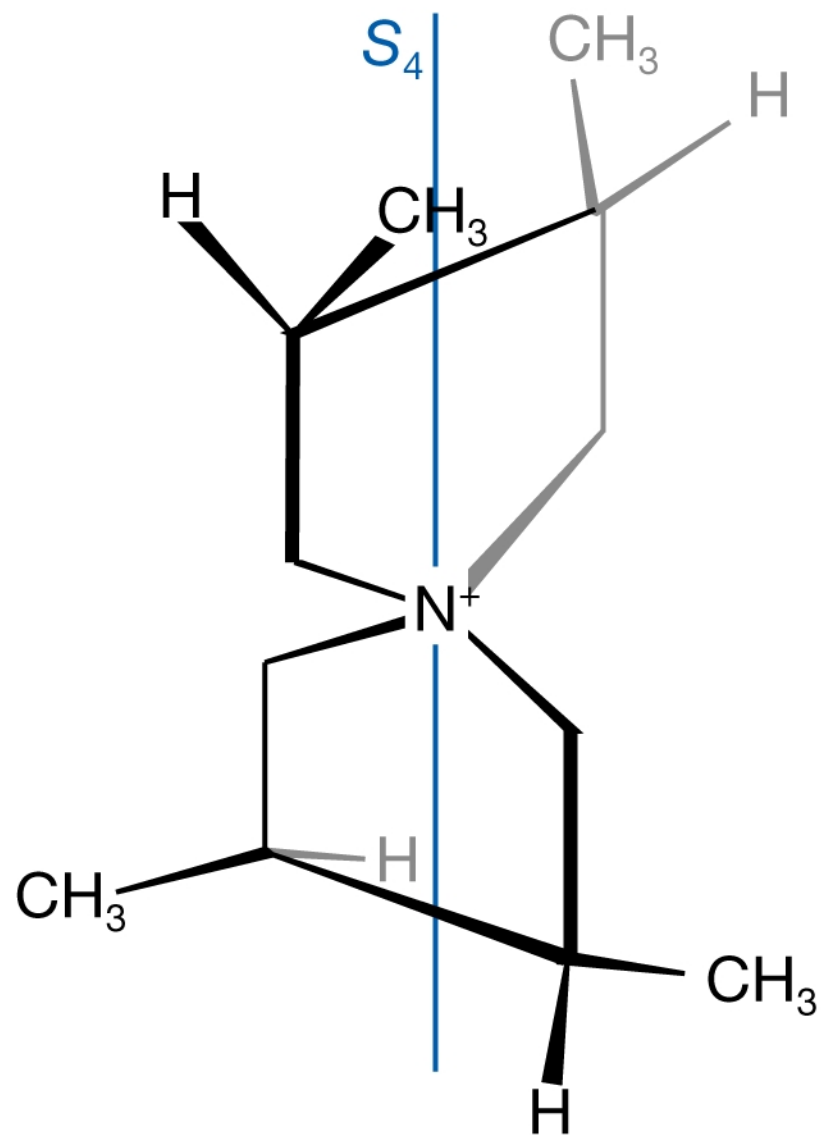
L-(+) ácido láctico



$[\text{Co}(\text{ethylenediamine})_3]^{3+}$, C_3



cis-dichlorobis(ethylenediamine)cobalt(III) ion, C_2

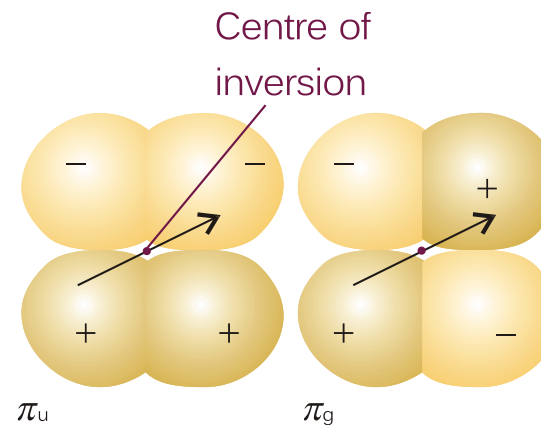
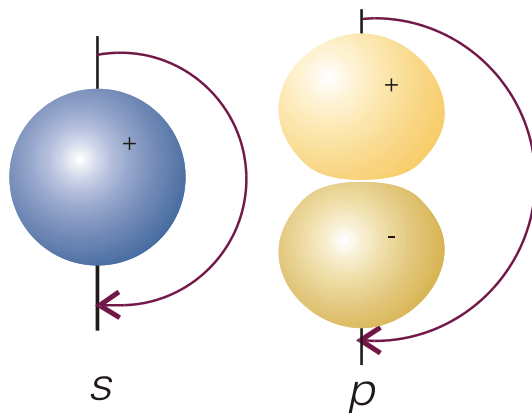


2. Aplicações à teoria de orbitais moleculares e à espectroscopia

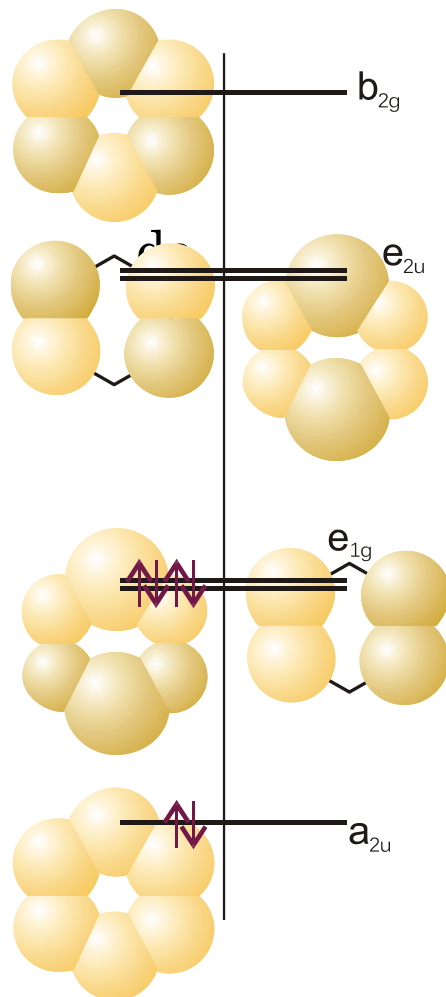
2.1 – Tabelas de caracteres e rótulos de simetria

Rótulos para orbitais em moléculas diatômicas homonucleares:

$\sigma_g, \sigma_u, \pi_g, \pi_u$



2.1.1 – Representações e caracteres

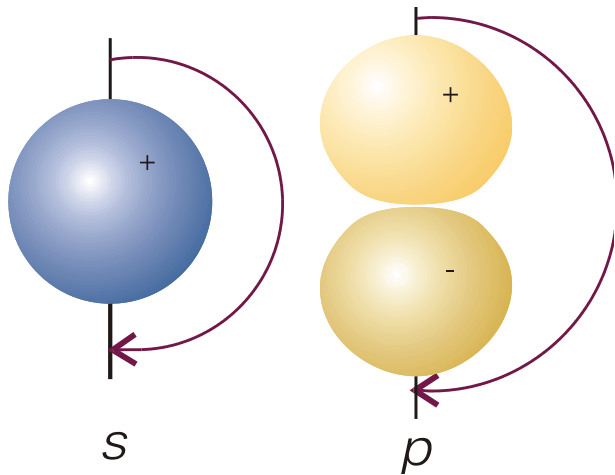


rótulos indicam o comportamento dos orbitais (e das vibrações) frente às operações simetria.

rótulo: **representação irreduzível**

O comportamento de um rótulo frente às diferentes operações de simetria pode ser obtidos nas **tabelas de caracteres**.

Caracter, χ : número que indica o comportamento de um orbital frente à uma operação de simetria.



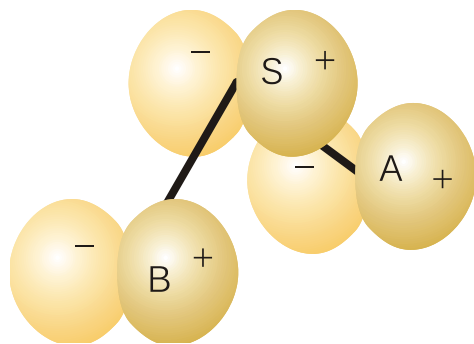
	C_2
s	+1
p	-1

Como se obtém os caracteres?

Considere os orbitais p_π da molécula de SO_2 , C_{2v} (p_S, p_A, p_B):

Após a operação pelo σ_v perpendicular ao plano da molécula:

$$(p_S, p_B, p_A) \leftarrow (p_S, p_A, p_B)$$



$$(p_S \quad p_B \quad p_A) = (p_S \quad p_A \quad p_B) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(p_S \quad p_B \quad p_A) = (p_S \quad p_A \quad p_B) \mathbf{D}(\sigma_v)$$

$\mathbf{D}(\sigma_v)$ é a **representativa** da operação σ_v na **base**

(p_S, p_A, p_B)

$$C_2 : (-p_S, -p_B, -p_A) \leftarrow (p_S, p_A, p_B)$$

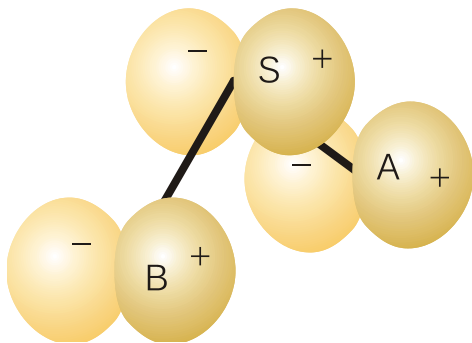
$$\sigma_V' : (-p_S, -p_A, -p_B) \leftarrow (p_S, p_A, p_B) \quad (\text{plano da molécula})$$

$$E : (p_S, p_A, p_B) \leftarrow (p_S, p_A, p_B)$$

$$D(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D(\sigma_V') = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



O conjunto de representativas de um grupo é chamado de **representação matricial**, Γ .

Representação em três dimensões: $\Gamma^{(3)}$

Character de uma operação em uma dada representativa é obtido através do **traço** dessa matriz.

Caracteres de $\Gamma^{(3)}$:

D(E)	D(C ₂)	D(σ_v)	D(σ_v')
3	-1	-1	-3

Todas as três representativas são **bloqueadas**.

$$D(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ou seja, nenhuma operação de simetria vai transformar p_s nas outras duas funções.

Pode-se separar os orbitais em duas partes: p_S e (p_A, p_B)

Os caracteres das representativas para p_S é:

D(E)	D(C ₂)	D(σ _v)	D(σ _v ')
1	-1	1	-1

Os dois outros orbitais, (p_A, p_B) , formam uma representação bidimensional, $\Gamma^{(2)}$

$$D(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D(C_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D(\sigma_V) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

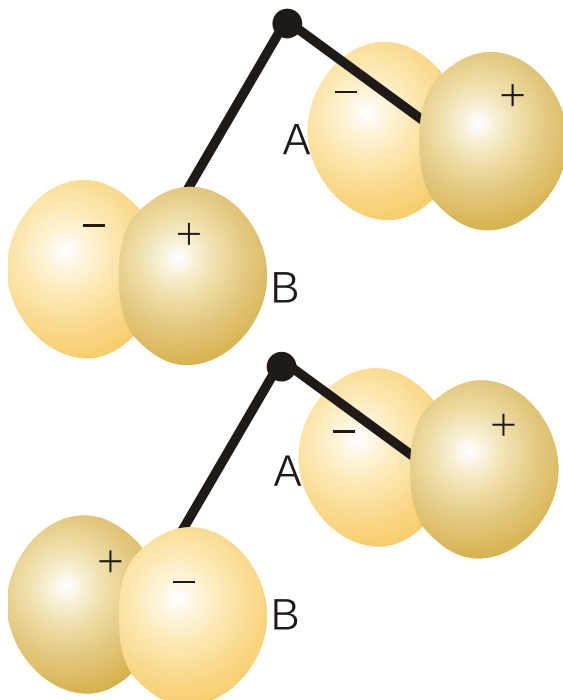
$$D(\sigma_V') = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A representação tridimensional foi **reduzida** pela **soma direta** de $\Gamma^{(1)}$ que contém p_S e $\Gamma^{(2)}$ que contém (p_A, p_B) .

$$\Gamma^{(3)} = \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(1)}$$

$\Gamma^{(1)}$: **representação irredutível** do grupo (irrep)

$\Gamma^{(2)}$ pode ser reduzida utilizando-se as combinações lineares:



$$p_1 = p_A + p_B$$

$$p_2 = p_A - p_B$$

Nessa base as novas representativas são:

$$\mathbf{D}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(\sigma_V) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(\sigma_V') = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Essas representações podem ser reduzidas:

$$\Gamma^{(2)} = \Gamma^{(1)'} + \Gamma^{(1)''}$$

$\Gamma^{(1)'}$, que contém p_1 , abrange:

D(E)	D(C ₂)	D(σ_v)	D(σ_v')
1	-1	1	-1

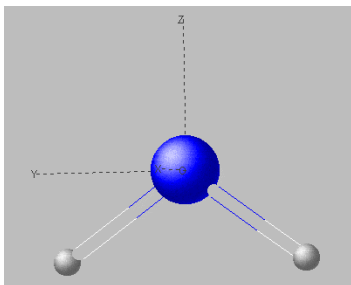
ou $\Gamma^{(1)' = \Gamma^{(1)}$

$\Gamma^{(1)''}$, que contém p_2 , abrange:

D(E)	D(C ₂)	D(σ_v)	D(σ_v')
1	1	-1	-1

Estas são duas das representações irreduzíveis do grupo de ponto C_{2v}

C_{2v}	E	C_2	σ_v (xz)	σ'_v (yz)	$h = 4$	
A_1	1	1	1	1	z, z^2, x^2, y^2	
A_2	1	1	-1	-1	xy	R_z
B_1	1	-1	1	-1	x, xz	R_y
B_2	1	-1	-1	1	y, yz	R_x



$$\Gamma^{(1)} = B_1$$

$$\Gamma^{(1)''} = A_2$$

irrep

	<i>op. simetria</i>				<i>ordem do grupo</i>	
C_{2v}	E	C_2	σ_v (xz)	σ'_v (yz)	$h = 4$	
A_1	1	1	1	1	z, z^2, x^2, y^2	
A_2	1	1	-1	-1	xy	R_z
B_1	1	-1	1	-1	x, xz	R_y
B_2	1	-1	-1	1	y, yz	R_x

caracteres *efeito de operações*

A, B: representações unidimensionais.

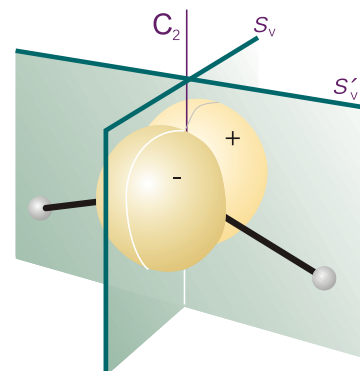
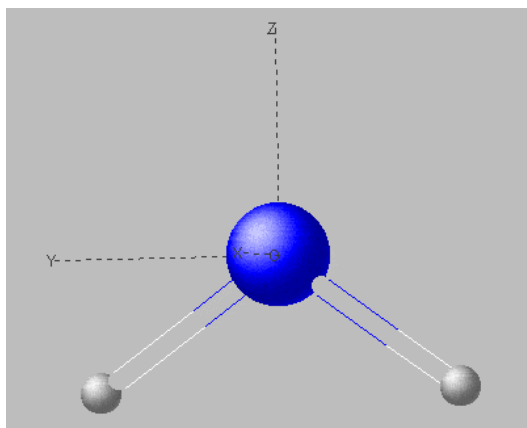
E, T: representação bidimensional e tridimensional, respectivamente.

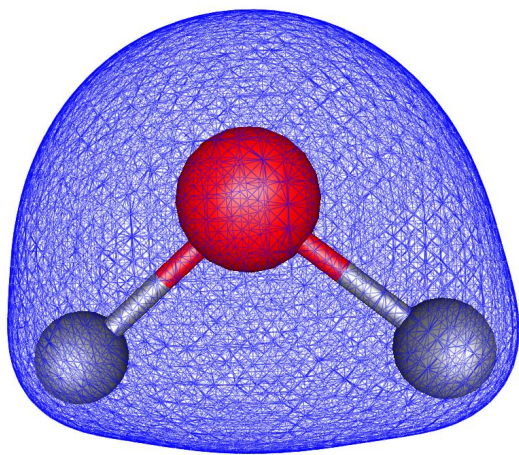
A, B: simétrica e antissimétrica com relação ao eixo principal

A_1, A_2 : simétrica e antissimétrica com relação ao σ_v .

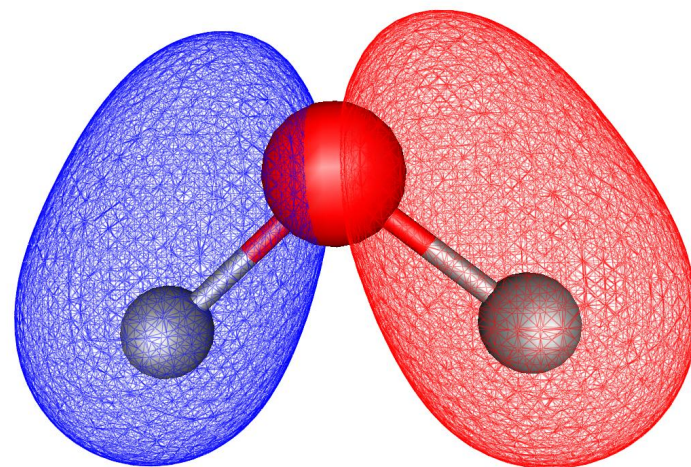
2.1.2 – Os orbitais moleculares da água

C_{2v}	E	$C_2(z)$	σ_v (xz)	σ'_v (yz)	$h = 4$
A_1	1	1	1	1	z, z^2, x^2, y^2
A_2	1	1	-1	-1	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, xz
B_2	1	-1	-1	1	y, yz



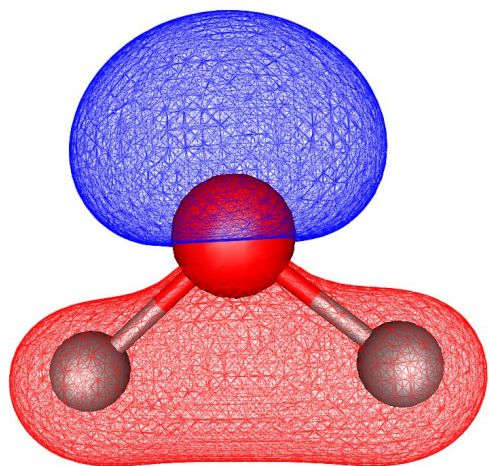


$1a_1$

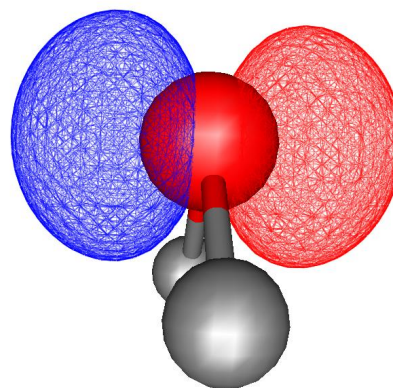


$1b_2$



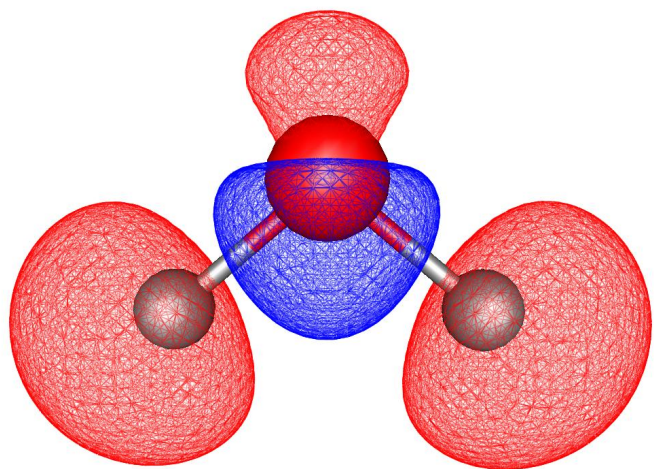


$2a_1$

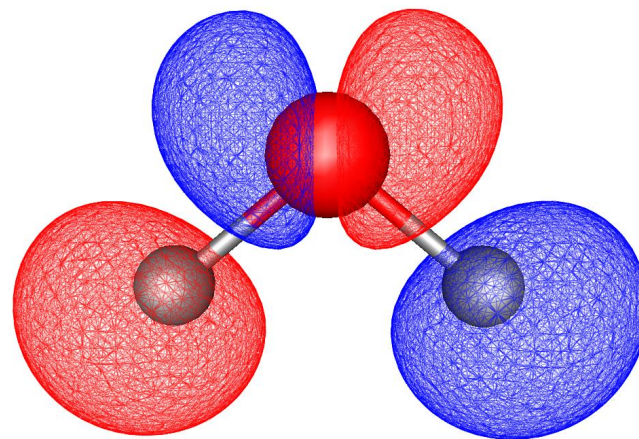


$1b_1$



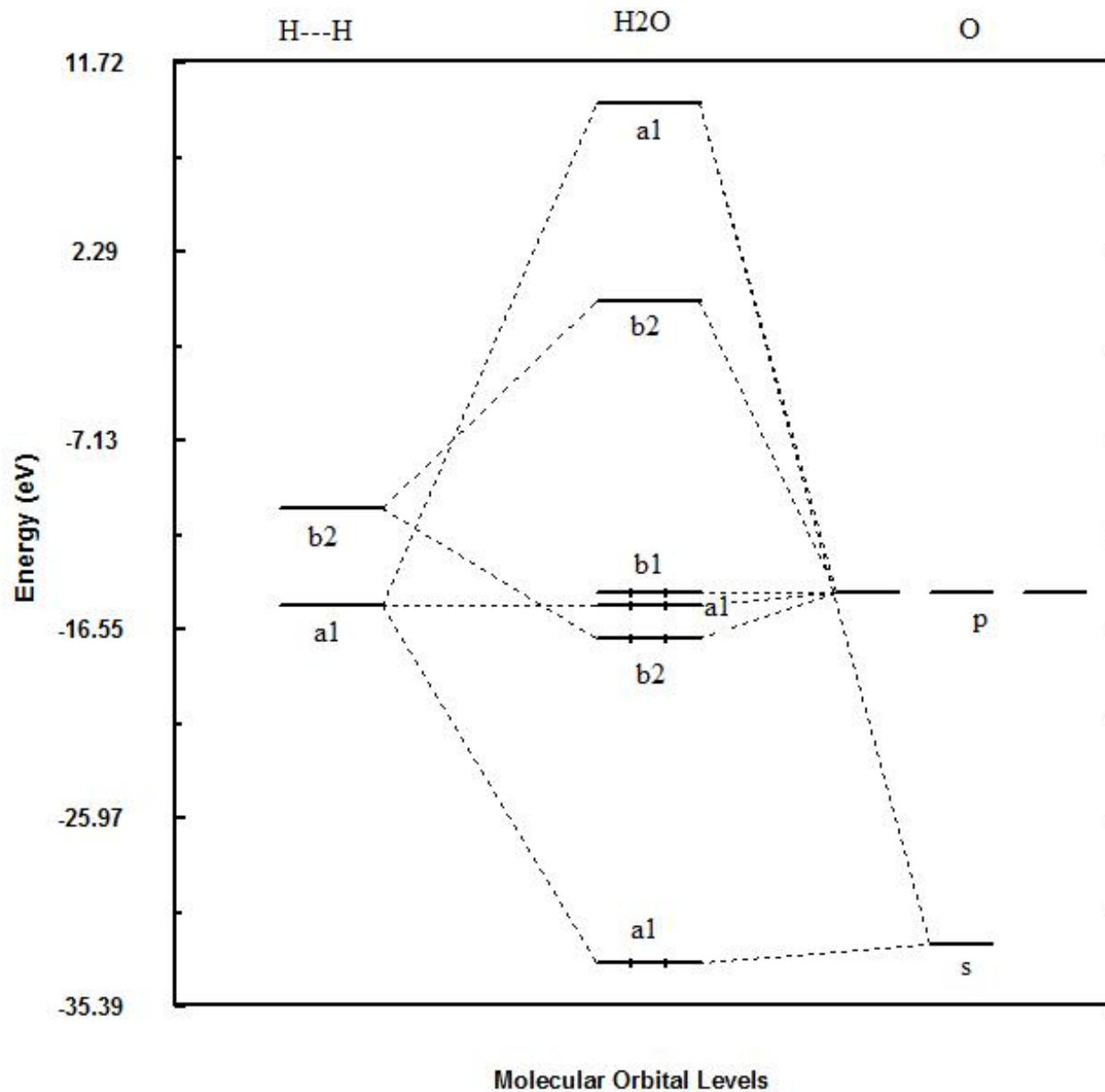


$3a_1$



$2b_2$

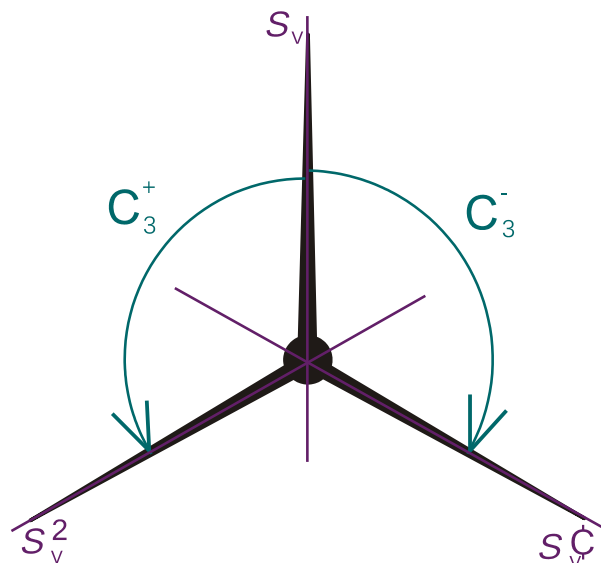




2.1.3 – A estrutura das tabelas de caracteres

	classes			
C_{3v}	E	$2 C_3$	$3 \sigma_v$	$h = 6$
A_1	1	1	1	z, z^2, x^2+y^2
A_2	1	1	-1	R_z
E	2	-1	0	$(x,y),$ $(xy,x^2y^2),$ (xz,yz) (R_x,R_y)

número de **espécies de simetria** (irreps) = número de classes



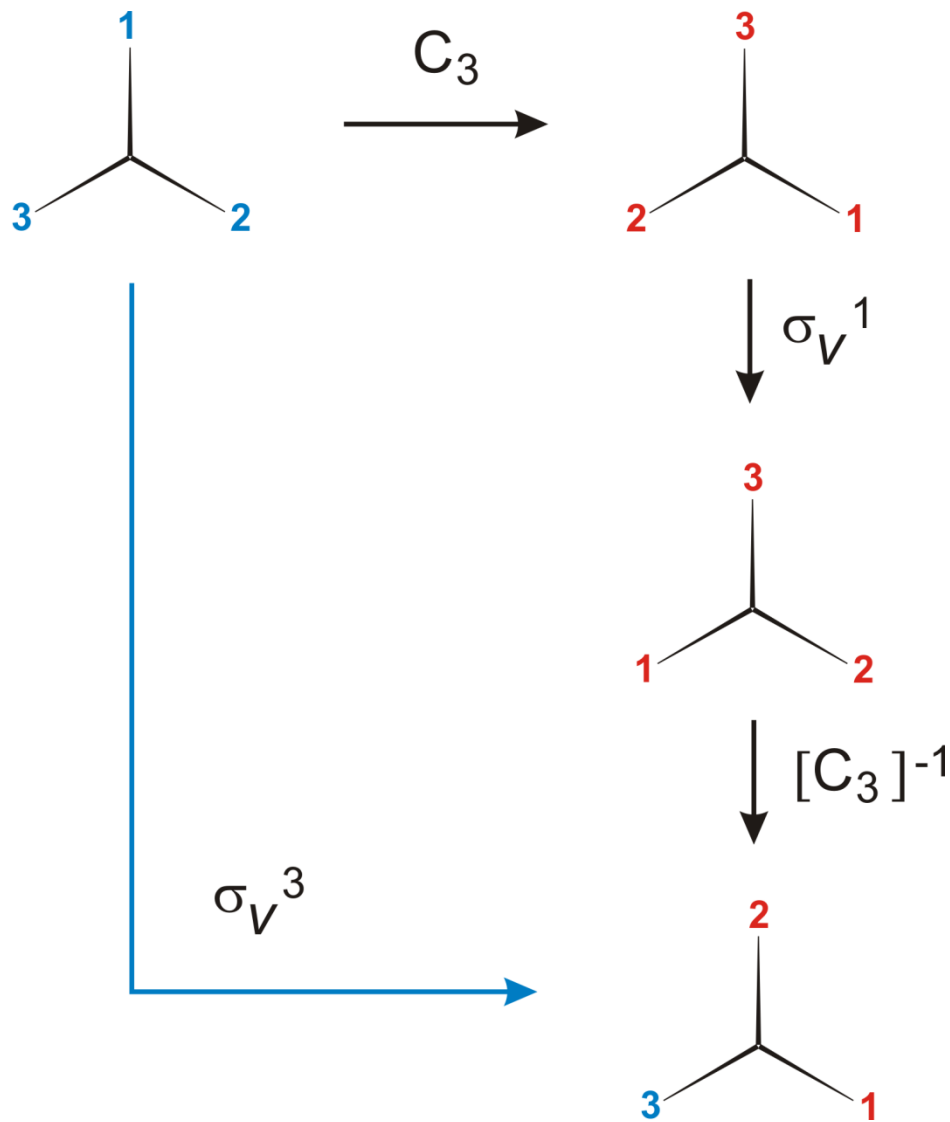
Operações de simetria pertencerão à mesma classe se uma puder ser transformada na outra por qualquer operação de simetria do grupo de ponto.

Operações de simetria de uma mesma classe estarão relacionadas por uma operação de similaridade:

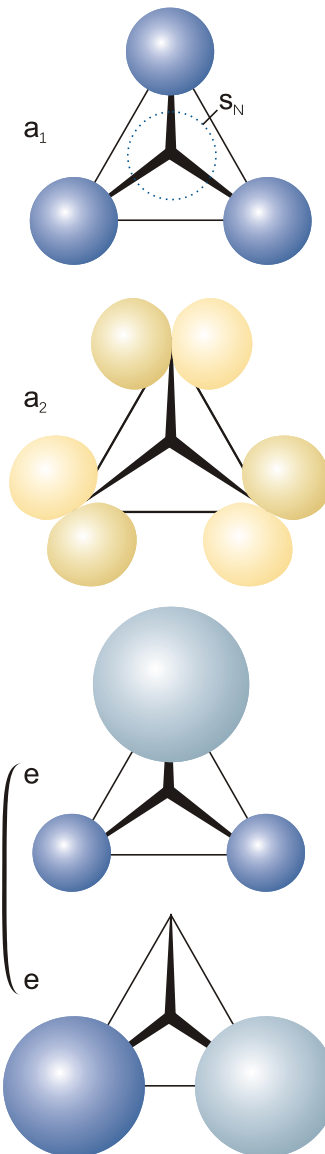
$$\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$$

\mathbf{X} , \mathbf{A} e \mathbf{B} pertencem ao grupo.

$$C_3 \sigma_v^1 [C_3]^{-1} = \sigma_v^3$$



2.1.4 – Tabela de caracteres e a degenerescência dos orbitais



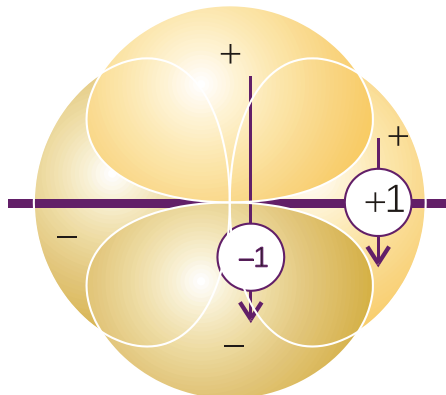
2.1.5 –Caracteres e operações de simetria

Para irreps unidimensionais (A ou B):

+1: orbital não se alterou após a operação

-1: sinal do orbital se inverteu com a operação.

Para E: caracter é a soma do resultado do comportamento dos orbitais individuais.

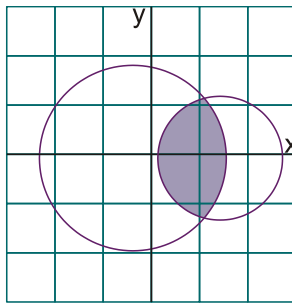


$$\chi = 1 - 1 = 0$$

2.2 – Integrais que se anulam e o recobrimento de orbitais

$$I = \int f_1 f_2 d\tau$$

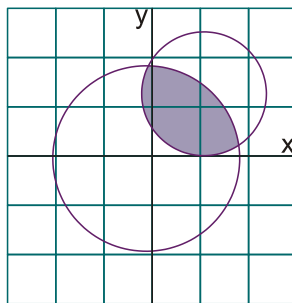
2.2.1 – O critério para que as integrais se anulem



(a)

I deve ser independente da orientação ou,

I tem de ser invariante sob qualquer operação de simetria.



(b)

O integrando $f_1 f_2$ deve pertencer à irrep **totalmente simétrica** (todos $\chi = +1$)

Métodos para se decidir se $f_1 f_2$ é diferente de zero.

- *Escreva os χ das representações de simetria das funções f_1 e f_2 em duas linhas.*
- *Multiplique os números das linhas e os escreva em uma outra linha.*
- *Verifique se a irrep do produto é a totalmente simétrica ou se contém esta irrep.*

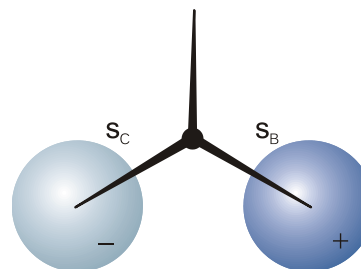
□ *Uso da tabela do **produto direto***

C_{2v} :

	A_1	A_2	B_1	B_2
A_1	A_1	A_2	B_1	B_2
A_2	A_2	A_1	B_2	B_1
B_1	B_1	B_2	A_1	A_2
B_2	B_2	B_1	A_2	A_1

$$f_1 = s_N \quad (a_1)$$

$$f_2 = s_C + s_B \quad (e)$$



f_1	1	1	1
f_2	2	-1	0
$f_1 f_2$	2	-1	0

$$f_1 f_2 \quad (e); \quad I = 0$$

f_1 $\textcircled{A_1}$
 A_2
 E

A_1
 A_1
 A_2
 E

A_2
 A_2
 A_1
 E

f_2
 \textcircled{E}
 $\textcircled{E} \quad f_1 f_2$
 E
 $A_1 + A_2 + E$

Pode ser que se chegue a uma **representação redutível**.

No C_{2v}

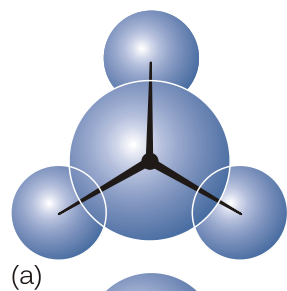
	E	C_2	σ_V	σ_V'
Γ	8	-2	-6	4
a_1	1	1	1	1
Γa_1	8	-2	-6	4

$$n(\text{irrep}) = \frac{\sum \chi_i}{h}$$

$$n(a_1) = 1; n(a_2) = 2; n(b_1) = 0; n(b_2) = 5$$

$$\Gamma \text{ abrange: } A_1 + 2A_2 + 5B_2$$

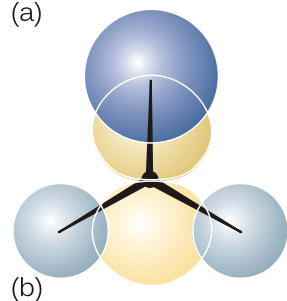
2.2.2 – Orbitais com recobrimento diferente de zero



a_1

$$(s_N, s_1)$$

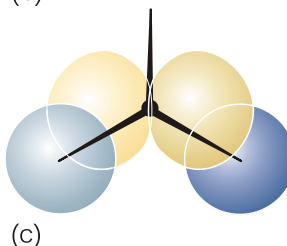
$$(s_1 = s_A + s_B + s_C)$$



e

$$(2p_{x,N}, s_2)$$

$$(s_2 = 2s_A - s_B - s_C)$$



e

$$(2p_{y,N}, s_3)$$

$$(s_3 = s_B - s_C)$$

C_{3v}	E	$2 C_3$	$3 \sigma_v$	$h = 6$	
A_1	1	1	1	z, z^2, x^2+y^2	
A_2	1	1	-1		R_z
E	2	-1	0	$(x,y),$ $(xy,x^2y^2),$ (xz,yz)	(R_x,R_y)

2.2.2 – Combinações lineares adaptadas por simetria (SALC)

A partir de um conjunto de orbitais atômicos, ou **base**, é possível se obter SALCs:

1. Construa uma tabela mostrando o efeito de cada operação em cada orbital da base original.

Ex: para (s_N, s_A, s_B, s_C)

	Original basis			
	s_N	s_A	s_B	s_C
Under E	s_N	s_A	s_B	s_C
C_3^+	s_N	s_B	s_C	s_A
C_3^-	s_N	s_C	s_A	s_B
σ_v	s_N	s_A	s_C	s_B
σ'_v	s_N	s_B	s_A	s_C
σ''_v	s_N	s_C	s_B	s_A

2. Para se obter a combinação de uma dada espécie de simetria, tome cada coluna e:

(i) Multiplique cada membro da coluna pelo caracter da operação correspondente.

Para se gerar A_1 ,

da primeira coluna: $(s_N, s_N, s_N, s_N, s_N, s_N)$

da segunda coluna: $(s_A, s_B, s_C, s_A, s_B, s_C)$

(ii) Some os orbitais multiplicados pelos fatores determinados acima

$$\psi_{A_1} \propto 6s_N$$

$$\psi_{A_1} \propto 2(s_A + s_B + s_C)$$

(iii) Divida a soma pela ordem do grupo

$$\psi_{A1} \propto s_N$$

$$\psi_{A1} \propto (s_A + s_B + s_C)/3$$

$$\psi_{A1} = c_N s_N + c_1 (s_A + s_B + s_C) = c_N s_N + c_1 s_1$$

2.2.3 – Integrais que se anulam e regras de seleção

$$I = \int f_1 f_2 f_3 d\tau$$

Para que I seja diferente de zero, o produto $f_1 f_2 f_3$ deve pertencer à representação totalmente simétrica ou conter um componente que pertença à essa representação

Uma integral importante é o **momento de dipolo de transição**, $\mu_{f,i}$

$$\mu_{f,i} = \int \psi_f \mu \psi_i d\tau = -e \int \psi_f (x + y + z) \psi_i d\tau$$

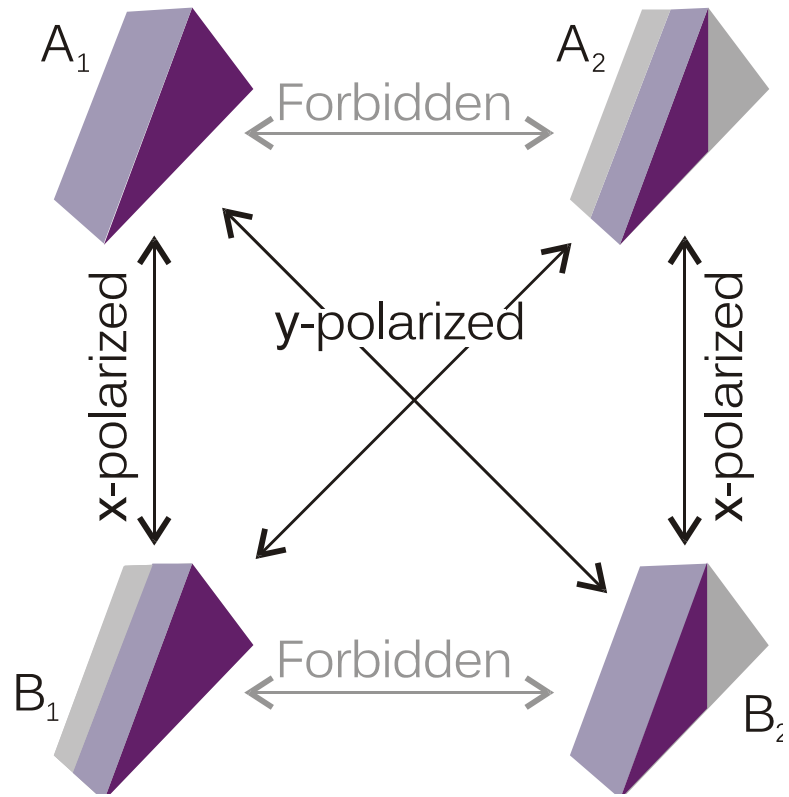
ψ_f e ψ_i são as funções de onda dos estados final e inicial.

$\mu_{f,i}$ está relacionada com a intensidade das bandas nos espectros vibracional, rotacional ou eletrônico.

Qual será a polarização da transição de um orbital com representação de simetria a_1 para b_1 ($b_1 \leftarrow a_1$) na água?

	x-component				y-component				z-component			
	E	C_2	σ_v	σ'_v	E	C_2	σ_v	σ'_v	E	C_2	σ_v	σ'_v
f_3	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	$-1B_1$
f_2	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	1
f_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$1A_1$
$f_1f_2f_3$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1

representação irreduzível de x : B_1 ,
de y : B_2 ,
de z : A_1



T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	linear, rotations	quadratic
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)