

Sylabus předmětu Stereochemie

3. semestr navazujícího magisterského studia, rozsah výuky 28 hodin, ukončení zkouškou

Vyučující: prof. Ing. Oldřich Pytela, DrSc.

Literatura:

1. Fišer J.: Úvod do molekulové symetrie: aplikace teorie grup v chemii. SNTL, Praha 1980.
2. Eliel E. S.: Stereochemie uhlíkatých sloučenin. Academia, Praha 1970.
3. Červinka O.: Enantioselektivní reakce v organické chemii. Academia, Praha 1985.
4. Potapov M. V.: Stereochemie. SNTL, Praha 1986.
5. Ramsay O. B.: Stereochemia. Univerzita Komenského, Bratislava 2000.
6. Morris G. D.: Stereochemistry. The Royal Society of Chemistry, Cambridge 2001.

Sylabus přednášek:

1. týden

Úvod. Stereochemie jako nauka o prostorovém uspořádání molekul. Statická a dynamická stereochemie. Tvar molekuly jako důsledek maximálního překryvu orbitalů σ a π vazeb a minimálního překryvu atomů a volných elektronových párů. Trojrozměrné fyzické modely molekul, sestavování modelů. Zobrazení struktury molekul v 3D-projekci, zobrazení struktury molekul ve 2D-projekci, stereochemické vzorce, pravidla pro zobrazení třírozměrné struktury v ploše, vyznačení polohy vodíků a substruktur molekuly vzhledem k nákresně. Vnitřní souřadnice, geometrické veličiny popisující třírozměrnou strukturu molekuly, vazebné délky, vazebné úhly, mimorovinné úhly, dihedrální úhly. Z-matice, Kartézské souřadnice, používané formáty (.mol, .pdb, .xyz). Programy pro vizualizaci a výpočet geometrie molekul (ChemSketch, OPchem, Mercury, ArgusLab, MOPAC, Gaussian). Vzájemný převod Kartézských a vnitřních souřadnic. Symetrické vlastnosti molekul. Prvky symetrie a operace symetrie, symetrické a asymetrické molekuly. Ekvivalentní atomy, ekvivalentní skupiny atomů ve vztahu k dynamice molekul (zprůměrnovaná symetrie, magneticky ekvivalentní jádra). Maticový popis prostorových operací s molekulou. Orientace molekuly v prostoru a vztah k symetrii. Hledání prvků symetrie molekuly se zadanými souřadnicemi atomů. Teorie grup. Pojem bodová grupa, Schönfliesova symbolika, zařazení molekuly do grupy symetrie – rozhodovací pravidla. Přehled důležitých bodových grup. Grupy s nízkou symetrií, C_2 (peroxid vodíku), C_s (fenol, anilin), C_i , S_2 (1,2-dibrom-1,2-difluorethan, *trans*-3,6-dimethyl-2,5-dioxopiperazin), C_{2v} (voda, formaldehyd, fenanthren), C_{2h} ((*E*)-1,2-difluorethan), D_{2h} (ethen, naftalen). Grupy se střední symetrií, C_{3v} (amoniak, chlormethan), C_{3h} (boritá kyselina), D_{2d} (allen), D_{3d} (cyklohexan v židličkové konformaci), D_{3h} (1,3,5-trichlorbenzen), D_{5h} (cyklopentadienylový anion, ferrocen v souhlasné konfiguraci), D_{6h} (benzen). Grupy vyšších symetrií, T_d (methan), O_h (kuban), I_h (dodekahedran). Grupy s operací symetrie C_∞ , $C_{\infty v}$ (kyanovodík), $D_{\infty h}$ (ethyn).

2. týden

Reprezentace grupy, maticová reprezentace bodové grupy symetrie. Báze reprezentace (atomy, vnitřní souřadnice, atomové orbitaly). Osová soustava. Charaktery reprezentace. Mullikenova notace pro označování reprezentací. Direktivní součet a direktivní součin reprezentací. Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací. Projevy symetrie molekuly ve spektrech. UV-VIS spektra. Reprezentace Γ^{AO} , reprezentace molekulárních orbitalů základního a excitovaného stavu, reprezentace operátoru změny dipólového momentu, reprezentace tranzitního momentu a vztah intenzitě pásu. IČ a Ramanova spektra. Reprezentace Γ^{3N} (zařazení molekuly do příslušné grupy symetrie, nalezení počtu neposunutých atomů odpovídajících jednotlivým operacím symetrie grupy, výpočet charakterů reprezentace Γ^{3N}), reprezentace translace, rotace a vibrace. Určení vibračních módů v molekule. Reprezentace operátoru změny dipólového momentu, reprezentace tranzitního momentu a vztah k intenzitě pásu v IČ spektrech. Reprezentace změny polarizace, reprezentace tranzitního momentu a vztah k intenzitě pásu v Ramanových spektrech. Projevy symetrie v NMR spektroskopii. Vztah dipólmomentu k symetrii molekuly. Symetrie v krystalografii, krystalografické soustavy. Krystalová mřížka, elementární buňka. Soustava trojklonná, jednoklonná, kosočtverečná, čtverečná, klencová, šesterečná, krychlová.

3. týden

Rotační isomerie necyklických sloučenin, konformace. Stereochemické vzorce pro popis rotační isomerie (perspektivní, Newmanův), jejich vzájemná transformace, názvosloví (střídavá a zákrytová konformace, $-/+$, syn/anti, klinální/planární), ukázka na molekule dichlorethanu. Termodynamická stabilita konformerů, ukázka na molekulách ethanu a butanu. Vztah mezi energií stavů, rychlostí interkonverze a stabilitou. Konformace lineárních alkanů. Obecná pravidla pro posouzení energií a rotačních bariér konformerů. Konformace alifatických systémů. Obecná pravidla pro posouzení energií a rotačních bariér konformerů. Konformace *s-cis* a *s-trans* u alifatických systémů. Konformace substituovaných aromatických systémů. Konformace aromaticko-aromatických systémů. Atropoisomerie a sterická zábrana resonance. Sterická zábrana přístupu činidla. *cis-trans* Isomerie na dvojně vazbě, podstata a názvosloví (*Z* a *E*). Významné sloučeniny s *cis-trans* isomerií. Stabilita *cis-trans* isomerů. Planarita *trans* isomerů. Stereochemie allenu. Stereochemie cyklických sloučenin. Typy pnutí v cyklických systémech, Bayerovo, vazebné, torzní (Pitzerovo), nevazebné (Prelogovo, transanulární). Stereochemické vzorce pro popis alicyklických sloučenin (perspektivní, Haworthův, Newmanův), názvosloví. Konformace a konfigurace monocyklických uhlovodíků. Konformace a konfigurace cyklopropanu, cyklobutanu, cyklopentanu a cyklohexanu (axiální a ekvatoriální vodíky), počty ekvivalentních uhlíků a vodíků, stabilita konformerů. Konformace cyklických sloučenin s více než šesti atomy v kruhu (makrocikly), jejich stabilita. Stereochemie cyklických sloučenin s dvojnou vazbou v kruhu, *cis-trans* isomerie na dvojně vazbě v kruhu a u makrocyclů. Stereochemie aromatických uhlovodíků. Stereochemie heterocyklů (oxiran, piperidin, thian-1-oxid, 1,4-dioxan, pyrrol, pyridin).

4. týden

Konformace a stabilita monosubstituovaných cyklohexanů, energetický rozdíl ve stabilitě. *cis-trans* Isomerie na kruzích a kruzích s více substituenty. *cis-trans* Isomerie disubstituovaných cyklopropanů a cyklohexanů, jejich stabilita. Hexasubstituované cyklohexany. Anomerní efekt. Konformace cyklických ketonů. Rozlišení 1,2-disubstituovaných derivátů. Bicyklické a vícecyklické sloučeniny, názvosloví. Přítomnost dvojně vazby v kruhu a Bredtovo pravidlo. Kondenzované cyklické sloučeniny. Přemostěné cyklické sloučeniny a jejich substituované deriváty. Propellany. Spirosloučeniny, názvosloví. Fenestry. Další skupiny vícecyklických

sloučenin, crowny, kryptandy, cyklofany, kalixareny, cyklodextriny, cyklaceny, cirkuleny, fullereny, heliceny. Sterická náročnost atomů a typických skupin atomů. Sterické efekty a jejich kvantitativní popis. *ortho*-Efekt a jeho projevy.

5. týden

Chiralita, podmínky chiralit, enantiomery. Rozdělení molekul ve vztahu k chiralitě a symetrii. Chirální symetrické molekuly s rotační osou symetrie (cyklookten, twistan, trifenylamin). Nechirální symetrické molekuly s rotačně reflexní osou symetrie. Sloučeniny s volně otáčivými vazbami nebo elektronovými páry. Stereogenní centrum, stereogenita a lokální symetrie. Typy chiralit (centrální, osová, planární, helikální, topologická). Chiralita disubstituovaných cyklopropanů a cyklohexanů. Typy chiralit v dalších sloučeninách. Centrální (bodová) chiralita, stereogenní centrum, konfigurace. Popis sloučenin s centrální chiralitou stereochemickými vzorci, vzájemný převod stereochemických vzorců. Konvence D, L. Absolutní konfigurace a její určení, Cahnova-Ingoldova-Prelogova notace (*R*, *S*). Sloučeniny s více chirálními centry, enantiomery, diastereoizomery, L'Belovo-van't Hoffovo pravidlo. Relativní a absolutní konfigurace. Pojmy *erythro*, *threo*. Sloučeniny se dvěma shodnými chirálními centry, mesoforma. Epimerizace, epimery. Bodová chiralita disubstituovaných cyklopropanů, cyklohexanů a dalších sloučenin, určení absolutní konfigurace. Bodová chiralita na atomu dusíku, fosforu a síry.

6. týden

Osová chiralita, příklady a názvosloví. Planární chiralita, příklady a názvosloví. Helicita, příklady a názvosloví. Topologická chiralita, příklady. Prostereoizomerie a prochiralita. Klasifikace a nomenklatura ligandů. Homotopické ligandy a strany. Heterotopické ligandy a strany, konstitučně heterotopické. Heterotopické ligandy a strany, stereotopické, enatiotopické. Heterotopické ligandy a strany, stereotopické, diastereotopické. Fyzikální vlastnosti chirálních sloučenin. Vlastnosti rozdílné pro enantiomery. Vlastnosti shodné pro enantiomery, rozdílné pro diastereoizomery. Vlastnosti rozdílné pro enantiomery i diastereoizomery. Optická izomerie chirálních sloučenin, optická otáčivost. Interakce polarizovaného světla s látkou bez absorpce. Interakce polarizovaného světla s látkou a absorpcí. Polarimetrie, optická rotační disperze, cirkulární dichroismus. Polarimetrie. Ukázka ORD a CD UV-VIS spekter. Ukázka vibračních VCD spekter. Enantiomerní směsi, optická čistota, enantiomerní čistota. Mutarotace. Racemát, vznik racemátu, racemizace (přes kationy, aniony, substituce, eliminace/adice, mutarotace). Typy racemátů, závislost teploty tání na složení. Dělení racemátů na enantiomery (krystalizace z nechirálních rozpouštědel, krystalizace z chirálních rozpouštědel, dělení přes diastereoizomery, dělení přes inkluzní sloučeniny, chromatograficky na enantioselektivních kolonách, kineticky), cílené racemizace.

7. týden

Metody studia prostorového uspořádání molekul. Experimentální metody (fyzikálně-chemické metody, chemické metody), výpočetní metody. Časová škála měření. Metody založené na difrakci záření. Monokrystalová rentgenová strukturní analýza. Vyhodnocení difrakčního obrazu. Experimentální zařízení pro RTG difrakci. ORTEP diagram. Určení absolutní konfigurace RTG difrakcí. Proteinová krystalografie. Infračervená a Ramanova spektroskopie (konfirmace, *cis-trans* isomerie). NMR spektroskopie (konformační rovnováhy, chirální derivatizace, enantiomerní směsi, chirální posunová činidla, *cis-trans* isomerie). Chiroptické metody. Měření dipólových momentů. Měření disociačních konstant. Tvorba komplexů. Chemické metody (*cis-trans* isomerie, chemické korelace pro určení absolutní konfigurace). Molekulová mechanika, konformační prohledávání PES metodou molekulové dynamiky. Kvantová chemie, základní pojmy, základní aproximace, princip výpočtu, postup získání orientačního prostorového uspořádání molekuly.

8. týden

Stereochemický průběh chemických reakcí. Stereospecifické a stereoselektivní reakce. Adice na sloučeninách s dvojnou vazbou, *syn*- a *anti*-. Katalytická hydrogenace alkenů, hydrogenace 2,3-difenylbut-2-enů, 2,3-dimethylcyklohexenu. Adice diboranu a následná oxidace 2-methylpropenu. Adice elektrofilů na alkeny, kysele katalyzovaná adice vody na but-1-en, adice bromu na 1-methylcyklohexen, adice bromu na bicyklo[2.2.2]okt-2-en. Adice elektrofilů na alkeny se sterickou zábranou rezonance, acetoxymerkurace α -methylstyrenu a 2-*terc*-butyl- α -methylstyrenu. Adice elektrofilů na další sloučeniny s nepolarizovanou dvojnou vazbou, adice bromu na maleinovou kyselinu a fumarovou kyselinu. Adice radikálů na alkeny, adice bromovodíku za přítomnosti peroxidů na but-2-en. Adice karbenů na alkeny s termickou a fotochemickou iniciací, adice diazomethanu na but-2-en. Oxidace sloučenin s dvojnou vazbou na dvojnou vazbu. Epoxidace, epoxidace stilbenu peroxokyselinami a následná hydrolýza. Oxidace manganistanem draselným maleinové a fumarové kyseliny. Oxidace oxidem osmičelým 1,2-dimethylcyklopent-1-enu a redukce NaHSO₃. Isomerizace na dvojnou vazbu. Fotochemická a katalytická izomerizace, fotochemická azobenzenu, katalytická maleinové kyseliny. Adice na sloučeninách s trojnou vazbou. Adice na alkyny, adice vodíku na 1,2-difenylethyne, diboranu, halogenvodíků a halogenů na but-2-yn.

9. týden

Adice nukleofilů na karbonylovou skupinu. Cramovo pravidlo, reakce enantiomerů 3-fenylbutan-2-onu s ethylmagnesiumbromidem. Redukce cyklických ketonů tetrahydridohlinitanem lithným, redukce enantiomerů 2-methyl-cyklohexanonu. Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce, redukce isohexyl(methyl)ketonu v (2*R*)-butan-2-olu. Wittigova reakce, butanon a ylid vzniklý z benzylchloridu a trifenylfosfinu. Eliminace E1. Vliv konformace (3-fenylbut-2-yl-tosylát) v octové kyselině. Eliminace E2. Debromace 2,3-dibrom-3-methylpentanu zinkem. Dehydroalogenace a vliv konformace na produkty, bázičky katalyzovaná dehydrohalogenace 1-chlor-1,2-difenypropanů. *syn*-Eliminace. Pyrolytické *syn*-eliminace (2-methyl-4-deutero-pent-3-yl)-acetátu a (3-fenyl-butyl-2-yl)-dimethylaminoxidu. Eliminace na cyklických systémech. Bázičká eliminace hexachlorcyklohexanů, bázičká eliminace *cis* a *trans* 2-chlorcyklohexanolu. Kysele katalyzovaná dehydratace *cis* a *trans* 2-fenylcyklohexanolu. Nukleofilní substituce S_N1. Závislost struktury produktu na stabilitě karbeniového iontu, částečná inverze 2-bromoktanu vs úplná racemizace 1-brom-1-fenylethanu při hydrolýze. Reakce 3-chlor-3-methyl-but-1-enu s iodidovým iontem. Nukleofilní substituce S_N2. Sterické efekty způsobené α a β větvením na substrátu. Sterické efekty na činidle, reakce 1-brompropanu s fenolátem a 2,6-dimethylfenolátem. Waldenův obrat, ztráta optické otáčivosti enantiomerního 1-deuterio-1-jodpropanu po přidavku jodidu draselného. Reakce enantiomerního 1-fenylethanolu s thionylchloridem. Reakce 1-fenylpropan-2-olu s 1. tosylchloridem, 2. acetátovým anionem, 3. hydroxidovým iontem. Nukleofilní substituce na sloučeninách s dvojnou vazbou. Hydrolýza 1-chlorpropenu a 3-chlorpropenu. Reakce 1-chlor-3-methylbut-2-enu s hydroxidovým iontem.

10. týden

Nukleofilní substituce na cyklických systémech. Možnost vzniku karbokationtu, hydrolýza 1-chlor-7,7-dimethylbicyklo[2.2.1]heptanu. Role dvojnou vazby, acetolýza *syn* a *anti*-norbornen-7-yl-tosylátů. Reaktivita skupin v axiálních a ekvatoriálních polohách, hydrolýza *cis* a *trans* 1-chlor-4-*terc*-butyl-cyklohexanu). Otevírání epoxidového kruhu, reakce methyloxiranu s amoniakem. Reakce s účastí sousedních skupin. Účast sousedních skupin, hydrolýza *trans*-2-chlorcyklohexyl-fenylsulfidu a *cis*-2-chlorcyklohexyl-fenylsulfidu. Zachování absolutní konfigurace při hydrolýze enantiomerního natrium 2-brompropanoátu. Stereochemický průběh přesmyků. Beckmanův přesmyk, (*Z*)- a (*E*)-butanonoximy, (*E*)-3-

ethyl-heptan-2-onoxim. Benzidinový přesmyk, hydrazobenzen. Benzilový přesmyk, 1-(methoxyfenyl)-2-fenylethan-1,2-dion. Pinakolonový přesmyk 1-fenyl-2-methyl-cyklohexan-1,2-diol. Wagnerův-Meerweinův přesmyk, borneol na kamfen. Acidobázické rovnováhy. Bazicita *ortho-N*-substituovaných anilinů, kyselost 2-fenylmalonátů, možnost tvorby anionu při disociaci 2,6,7-trithiabicyclo[2.2.2]oktan-2,2,6,6,7,7-hexaoxidu, nitrace acetanilidů.

11. týden

Pericyklické reakce. Dovolené a zakázané pericyklické reakce. Elektrocyklické reakce. Elektrocyklické reakce, buta-1,3-dien v základním stavu. Cyklizace buta-1,3-dienu termicky. Elektrocyklické reakce, buta-1,3-dien v excitovaném stavu. Cyklizace buta-1,3-dienu fotochemicky. Průběh reakce v závislosti na počtu π -elektronů a typu iniciace. Příklady. Cykloadiční reakce. [4+2] cykloadice ethenu s buta-1,3-dienem, příklady. Průběh reakce v závislosti na počtu π -elektronů a typu iniciace. Termická [4+2] cykloadice, stereochemie. [2+2] Cykloadice, stereochemie. *endo* Selektivita cykloadičních reakcí. 1,3-Dipolární cykloadicí. Enové cykloadice. Sigmatropní reakce (přesmyky). Průběh reakce v závislosti na počtu π -elektronů a typu iniciace, příklady. Syntéza vitamínu D₂.

12. týden

Organická syntéza chirálních sloučenin. Asymetrická indukce a závislost selektivity na teplotě. Nelineární efekty v enantioselektivních syntézách. Asymetrická autokatalýza. Aktivace racemických katalyzátorů. Enantioselektivní (asymetrické) syntézy. Syntézy v chirálním prostředí, použití fyzikálních vlivů. Syntézy v chirálním prostředí, použití chirálních rozpouštědel. Reakce chirálních substrátů s achirálními činidly. Reakce chirálních substrátů s achirálními činidly. Syntéza s chirálními katalyzátory. „Privilegované“ a další používané chirální katalyzátory. Přírodní chirální organokatalyzátory. Syntetické chirální organokatalyzátory. Katalytická enantioselektivní hydrogenace. Katalytická enantioselektivní hydrosilylace. Katalytická enantioselektivní redukce. Sharplessova oxidace. Enantioselektivní epoxidace. Katalytické enantioselektivní otevírání epoxidového kruhu. Katalytická enantioselektivní allylová oxidace. Katalytická enantioselektivní benzylová oxidace. Katalytická enantioselektivní allylová substituce. Katalytická enantioselektivní cyklopropanace. Katalytická enantioselektivní aldolová kondenzace. Katalytická enantioselektivní aldolová kondenzace. Katalytická enantioselektivní reakce s enoláty. Katalytická enantioselektivní Henryho reakce. Enantioselektivní Wittigova syntéza. Enantioselektivní cykloadice. Výroba L-DOPA Monsanto. Výroba vitamínu E, redukce vodíkem pro výrobu prekursoru. Enzymatická katalýza. Enzymatická katalýza, racemické substráty. Enzymatická katalýza, prochirální substráty. Kinetická resoluce epichlorhydrinu.

13. týden

Biologická aktivita jako projev prostorového uspořádání molekul. Chuťové a čichové vnímání. Biologická aktivita chirálních léčiv. Stereochemie vybraných biomolekul. Stereochemie sacharidů, peptidů, bílkovin a nukleových kyselin. Stereochemie sacharidů. Stereochemie peptidů a bílkovin. Stereochemie nukleových kyselin. Stereochemie vybraných organizovaných struktur. Stereochemie nanostruktur (nanočástic, nanomateriálů), nanodráty, nanotrubky a nanospirály, fullereny, katenany a rotoxany. Dendrimery, dendrony. Stereochemie struktur typu host – hostitel. Ion jako host – crowny, spherandy, kalixareny. Molekula jako host – supramolekuly. Typy nekovalentních interakcí v supramolekulárních systémech. Supramolekulární samoskladba, samovolná organizace. Molekula jako host – cyklodextriny, fullerén v kalixarenu. Vícečásticové systémy – samoskladba karboxylových kyselin, diazabicyklooktandionu, micel, kapalných krystalů.

Tabulky charakterů bodových grup

R	I	i	σ	C_2	C_3	C_4	C_6	S_3	S_4	S_6
$\chi^0(\text{R})$	3	-3	1	-1	0	1	2	-2	-1	0

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

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

C_{2v}	I	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	xy R_z
B_1	1	-1	1	-1	x, xz R_y
B_2	1	-1	-1	1	y, yz R_x

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

C_{3v}	I	$2C_3$	$3\sigma_v$	
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), (xz, yz), (x^2-y^2, xy) (R_x, R_y)

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

D _{6h}	I	C ₂	2C ₃	2C ₆	3C _{2'}	3C _{2''}	i	σ _h	2S ₆	2S ₃	3 σ _d	3 σ _v		
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	z ² , x ² +y ²	
A _{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		
A _{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1		R _z
A _{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B _{1g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
B _{1u}	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		
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1		
E _{1g}	2	-2	-1	1	0	0	2	-2	-1	1	0	0	(xz, yz)	(R _x , R _y)
E _{1u}	2	-2	-1	1	0	0	-2	2	1	-1	0	0	(x, y)	
E _{2g}	2	2	-1	-1	0	0	2	2	-1	-1	0	0	(x ² -y ² , xy)	
E _{2u}	2	2	-1	-1	0	0	-2	-2	1	1	0	0		

