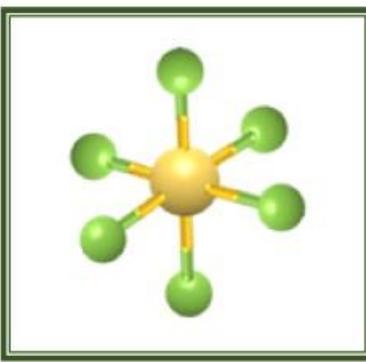




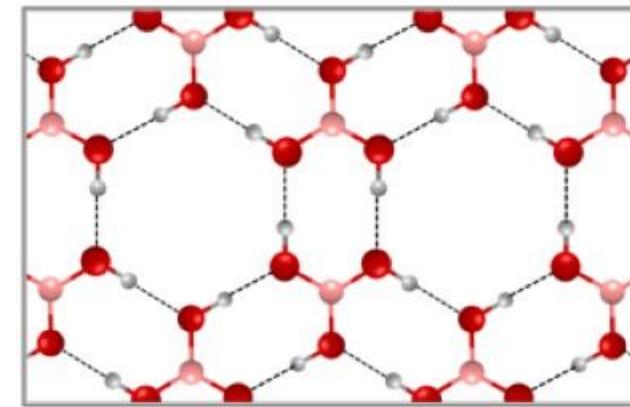
Teoria de grupos aplicada a moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



*Lucy V. C. Assali*

Instituto de Física  
Universidade de São Paulo





# Representações de Produto Direto



Produto direto de dois grupos  $\mathbb{G}_a$  e  $\mathbb{G}_b$ : definido em termos do produto direto de duas matrizes.

Produto direto de duas representações irreduutíveis dos grupos  $\mathbb{G}_a$  e  $\mathbb{G}_b$ : produz uma representação irreduutível do grupo de produto direto  $\Rightarrow$  todas as representações irreduutíveis do grupo de produto direto podem ser geradas a partir das representações irreduutíveis dos grupos componentes.

Produto direto entre duas representações do mesmo grupo: é também uma representação desse grupo e, em geral, redutível. Se  $\Gamma^\alpha(R)$  e  $\Gamma^\beta(R)$  são duas representações irreduutíveis do mesmo grupo, então o caracter da representação de produto direto  $\Gamma(R) = \Gamma^\alpha(R) \otimes \Gamma^\beta(R)$  é

$$\chi^\Gamma(R) = \chi^{\Gamma^\alpha}(R) \chi^{\Gamma^\beta}(R)$$

Se  $\Gamma(R)$  for redutível, o caracter da representação de produto direto pode ser escrito como uma combinação linear dos caracteres das representações irreduutíveis do grupo:

$$\chi^\Gamma(R) = \chi^{\Gamma^\alpha}(R) \chi^{\Gamma^\beta}(R) = \sum_{\kappa} a_{\alpha\beta\kappa} \chi^{\Gamma^\kappa}(R)$$

$$a_{\alpha\beta\kappa} = \frac{1}{h} \sum_R \chi^{\Gamma^\alpha}(R) \chi^{\Gamma^\beta}(R) [\chi^{\Gamma^\kappa}(R)]^* = \frac{1}{h} \sum_{\mu} N_{\mu} \chi^{\Gamma^\alpha}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{\Gamma^\beta}(\mathcal{C}_{\mu}) [\chi^{\Gamma^\kappa}(\mathcal{C}_{\mu})]^*$$

Esta maneira de decompor uma representação de produto direto será aplicada na determinação de regras de seleção.



# Construção das Tabelas de Caracteres



1. O número de representações irreduutíveis é igual ao número de classes do grupo.
2. Se  $h$  e  $p$  são, respectivamente, a ordem e o número de classes de um grupo, e  $d_\alpha$  as dimensões das representações irreduutíveis:  $\sum_\alpha d_\alpha^2 = h \Rightarrow$  classe E é representada pela matriz **I**, então sua coluna é determinada por  $\chi^\alpha(E) = d_\alpha$ .

$D_3$	E	$2C_3$	$3C_2$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
E	2	-1	0

$\longrightarrow d_{A_1}^2 + d_{A_2}^2 + d_E^2 = 6 \longrightarrow$

Somente os valores 1,1,2 satisfazem a equação para a classe E, definindo a dimensionalidade das representações irreduutíveis do grupo

3. Sempre existe uma representação irreduutível unidimensional, dita totalmente simétrica, onde todos os caracteres são iguais a 1  $\Rightarrow$  a primeira linha  $\Rightarrow \chi^1(C_\mu) = 1, \mu = 1, \dots, p$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



4. Ortogonalidade entre linhas da tabela de caracteres:  $\Rightarrow \sum_{\mu} \chi^{*\alpha}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{\beta}(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = h \delta_{\alpha\beta}$

$D_3$	E	$2C_3$	$3C_2$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$E$	2	-1	0

$$\sum_{\mu} \chi^{A_1}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{A_1}(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = \sum_{\mu} \chi^{A_2}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{A_2}(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = 1^2(1) + 1^2(2) + (\pm 1)^2(3) = 6$$

$$\sum_{\mu} \chi^E(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^E(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = 2^2(1) + (-1)^2(2) + 0(3) = 6$$

$$\sum_{\mu} \chi^{A_1}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{A_2}(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = (1)(1)1 + (1)(1)2 + (1)(-1)3 = 0$$

$$\sum_{\mu} \chi^{A_1}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^E(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = \sum_{\mu} \chi^{A_2}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^E(\mathcal{C}_{\mu}) N_{\mu} = (1)(2)1 + (1)(-1)2 + (\pm 1)(0)3 = 0$$

5. Ortogonalidade entre colunas da tabela de caracteres:  $\Rightarrow \sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(\mathcal{C}_{\mu}) \chi^{\alpha}(\mathcal{C}_{\nu}) = \frac{h}{N_{\mu}} \delta_{\mu\nu}$

$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(E) \chi^{\alpha}(E) = 1 + 1 + 4 = 6 = \frac{6}{1}$$

$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(E) \chi^{\alpha}(C_2) = 1 - 1 + 0 = 0$$

$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(C_3) \chi^{\alpha}(C_3) = 1 + 1 + 1 = 3 = \frac{6}{2}$$

$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(E) \chi^{\alpha}(C_3) = 1 + 1 - 2 = 0$$

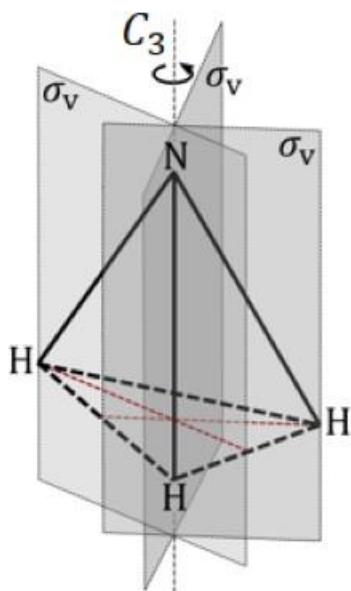
$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(C_2) \chi^{\alpha}(C_2) = 1 + 1 + 0 = 2 = \frac{6}{3}$$

$$\sum_{\alpha} \chi^{*\alpha}(C_2) \chi^{\alpha}(C_3) = 1 - 1 + 0 = 0$$



# Construção das Tabelas de Caracteres

Molécula de amônia



Não é linear e nem de alta simetria. Não pertence aos grupos de baixa simetria e não possui eixos impróprios. O único eixo de rotação é o  $C_3$ . Existem três planos verticais passando pelos vértices (átomos de H), que se interceptam no eixo  $C_3$ . Portanto, a molécula de amônia pertence ao grupo  $C_{3v}$ . As operações são  $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ .

$C_{3v} \Rightarrow$  6 operações de simetria  $\Rightarrow$  grupo de ordem  $h = 6$   
3 classes:  $E, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$

grupo	elementos do grupo reunidos em classes			
$C_{3v}$	$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$
				$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$

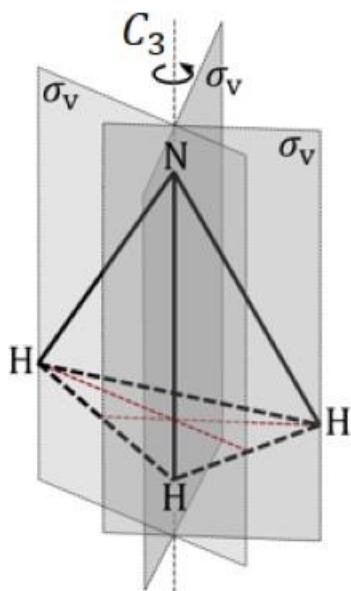
símbolos que designam as diversas representações irreduutíveis  $\Gamma^\alpha$ 
caractere das representações irreduutíveis do grupo  $\Rightarrow$  representam os traços das matrizes das representações irreduutíveis



# Construção das Tabelas de Caracteres

Molécula de amônia

Não é linear e nem de alta simetria. Não pertence aos grupos de baixa simetria e não possui eixos impróprios. O único eixo de rotação é o  $C_3$ . Existem três planos verticais passando pelos vértices (átomos de H), que se interceptam no eixo  $C_3$ . Portanto, a molécula de amônia pertence ao grupo  $C_{3v}$ . As operações são  $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ .



$C_{3v} \Rightarrow$  6 operações de simetria  $\Rightarrow$  grupo de ordem  $h = 6$   
3 classes:  $E, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$

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

- RI  $\Rightarrow$  unidimensionais designadas como  $A$  ou  $B$ , bidimensionais como  $E$  e tridimensionais como  $T$ .
- $A \Rightarrow$  são RI simétricas com relação ao eixo principal  $C_n \Rightarrow \chi(C_n) = 1$ .  $B \Rightarrow$  são RI antissimétricas  $\Rightarrow \chi(C_n) = -1$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{4v}$	E	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
E	2	0	-2	0	0

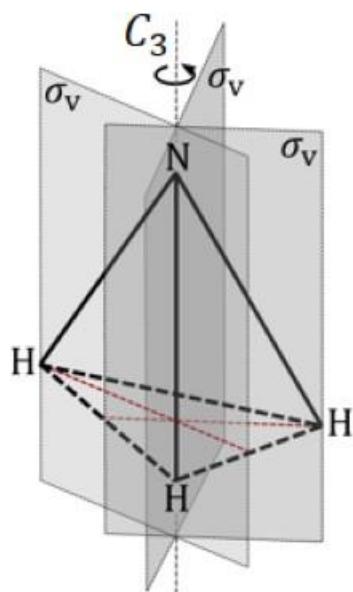
- $A \Rightarrow$  são RI simétricas com relação ao eixo principal  $C_n \Rightarrow \chi(C_n) = 1$        $B \Rightarrow$  são RI antissimétricas  $\Rightarrow \chi(C_n) = -1$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



Não é linear e nem de alta simetria. Não pertence aos grupos de baixa simetria e não possui eixos impróprios. O único eixo de rotação é o  $C_3$ . Existem três planos verticais passando pelos vértices (átomos de H), que se interceptam no eixo  $C_3$ . Portanto, a molécula de amônia pertence ao grupo  $C_{3v}$ . As operações são  $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ .

$C_{3v} \Rightarrow$  6 operações de simetria  $\Rightarrow$  grupo de ordem  $h = 6$   
3 classes:  $E, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$

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

- RI  $\Rightarrow$  unidimensionais designadas como  $A$  ou  $B$ , bidimensionais como  $E$  e tridimensionais como  $T$ .
- $A \Rightarrow$  são RI simétricas com relação ao eixo principal  $C_n \Rightarrow \chi(C_n) = 1$ .  $B \Rightarrow$  são RI antissimétricas  $\Rightarrow \chi(C_n) = -1$ .
- Subíndices 1 e 2 ( $A_1, A_2, B_1, B_2$ ) designam as RI simétricas e antissimétricas com relação à  $C_2 \perp C_n$  ou com relação à  $\sigma_v$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{4v}$	E	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
E	2	0	-2	0	0

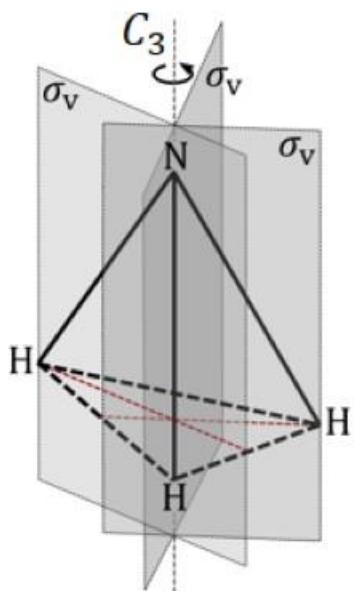
- Subíndices 1 e 2 ( $A_1, A_2, B_1, B_2$ ) designam as RI simétricas e antissimétricas com relação à  $C_2 \perp C_n$  ou com relação à  $\sigma_v$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres

Molécula de amônia

Não é linear e nem de alta simetria. Não pertence aos grupos de baixa simetria e não possui eixos impróprios. O único eixo de rotação é o  $C_3$ . Existem três planos verticais passando pelos vértices (átomos de H), que se interceptam no eixo  $C_3$ . Portanto, a molécula de amônia pertence ao grupo  $C_{3v}$ . As operações são  $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ .



$C_{3v} \Rightarrow$  6 operações de simetria  $\Rightarrow$  grupo de ordem  $h = 6$   
3 classes:  $E, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$

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

- RI  $\Rightarrow$  unidimensionais designadas como  $A$  ou  $B$ , bidimensionais como  $E$  e tridimensionais como  $T$ .
- $A \Rightarrow$  são RI simétricas com relação ao eixo principal  $C_n \Rightarrow \chi(C_n) = 1$ .  $B \Rightarrow$  são RI antissimétricas  $\Rightarrow \chi(C_n) = -1$ .
- Subíndices 1 e 2 ( $A_1, A_2, B_1, B_2$ ) designam as RI simétricas e antissimétricas com relação à  $C_2 \perp C_n$  ou com relação à  $\sigma_v$ .
- Sobre-índices ' e " são RI simétricas e antissimétricas com relação à  $\sigma_h$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



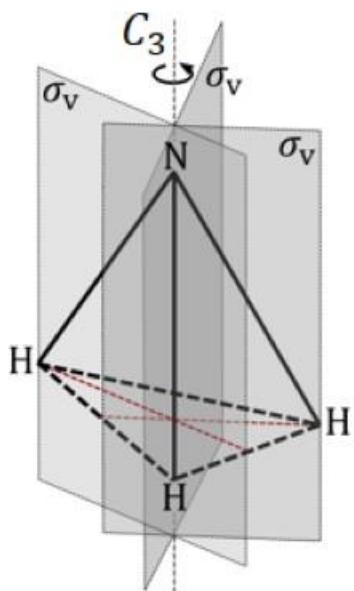
$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$2\sigma_v$
$A'_1$	1	1	1	1	1	1
$A'_2$	1	1	-1	1	1	-1
$E'$	2	-1	0	2	-1	0
$A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1
$A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1
$E''$	2	-1	0	-2	1	0

- Sobre-índices ' e " são RI simétricas e antissimétricas com relação à  $\sigma_h$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres

Molécula de amônia



Não é linear e nem de alta simetria. Não pertence aos grupos de baixa simetria e não possui eixos impróprios. O único eixo de rotação é o  $C_3$ . Existem três planos verticais passando pelos vértices (átomos de H), que se interceptam no eixo  $C_3$ . Portanto, a molécula de amônia pertence ao grupo  $C_{3v}$ . As operações são  $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ .

$C_{3v} \Rightarrow$  6 operações de simetria  $\Rightarrow$  grupo de ordem  $h = 6$   
3 classes:  $E, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$

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

- RI  $\Rightarrow$  unidimensionais designadas como  $A$  ou  $B$ , bidimensionais como  $E$  e tridimensionais como  $T$ .
- $A \Rightarrow$  são RI simétricas com relação ao eixo principal  $C_n \Rightarrow \chi(C_n) = 1$ .  $B \Rightarrow$  são RI antissimétricas  $\Rightarrow \chi(C_n) = -1$ .
- Subíndices 1 e 2 ( $A_1, A_2, B_1, B_2$ ) designam as RI simétricas e antissimétricas com relação à  $C_2 \perp C_n$  ou com relação à  $\sigma_v$ .
- Sobre-índices ' e " são RI simétricas e antissimétricas com relação à  $\sigma_h$ .
- **Grupo com centro de inversão:** índices  $g$  (gerade = par) ou  $u$  (ungerade = ímpar) indicam se as RI são simétricas ou antisimétricas com relação à inversão.



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{2h}$	E	$C_2$	$i$	$\sigma_h$
$A_g$	1	1	1	1
$B_g$	1	-1	1	-1
$A_u$	1	1	-1	-1
$B_u$	1	-1	-1	1

- **Grupo com centro de inversão:** índices  $g$  (*gerade* = par) ou  $u$  (*ungerade* = ímpar) indicam se as RI são simétricas ou antisimétricas com relação a inversão.



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

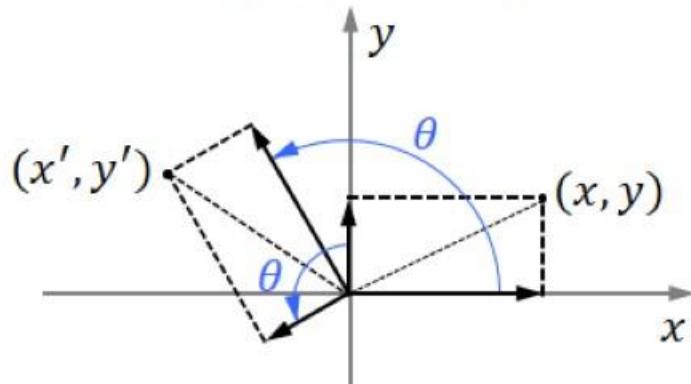
$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Esta região da tabela apresenta funções ou vetores que constituem uma base para uma dada RI  $\Rightarrow$  Qualquer conjunto de vetores ou de funções algébricas pode servir como base para uma representação  $\Rightarrow$  determinação das matrizes que mostram como se transformam segundo as operações de simetria do grupo.

Matriz de transformação para rotações de  $\theta^\circ$  em torno do eixo z:



eixo de rotação em torno do eixo z

Caso geral:

$$x' = x \cos\theta - y \sin\theta$$

$$y' = x \sin\theta + y \cos\theta$$

$$z' = z$$

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Esta região da tabela apresenta funções ou vetores que constituem uma base para uma dada RI  $\Rightarrow$  Qualquer conjunto de vetores ou de funções algébricas pode servir como base para uma representação  $\Rightarrow$  determinação das matrizes que mostram como se transformam segundo as operações de simetria do grupo.

Matriz de transformação para rotações  $C_3$ :  $\theta = (2\pi)/3$

$$x' = x \cos(2\pi/3) - y \sin(2\pi/3) = -\frac{1}{2}x - \frac{\sqrt{3}}{2}y$$

$$y' = x \sin(2\pi/3) + y \cos(2\pi/3) = \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y$$



$$\Gamma(C_3) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

$$\Gamma(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Gamma(C_3) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Gamma(\sigma_{v(xz)}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Estas matrizes de transformação, quando aplicadas ao vetor de componentes  $x, y$  e  $z$ , nunca misturam a coordenada  $z$  com as  $x$  e  $y$ :

	$\Gamma(E)$	$\Gamma(C_3)$	$\Gamma(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
$\Gamma^z$	1	1	1



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$x^2 + y^2, z^2$

$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$

	$\Gamma(E)$	$\Gamma(C_3)$	$\Gamma(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
$\Gamma^z$	1	1	1

	$\chi(E)$	$\chi(C_3)$	$\chi(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	2	-1	0
$\Gamma^z$	1	1	1



# Construção das Tabelas de Caracteres



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

	$\Gamma(E)$	$\Gamma(C_3)$	$\Gamma(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
$\Gamma^z$	1	1	1

	$\chi(E)$	$\chi(C_3)$	$\chi(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	2	-1	0
$\Gamma^z$	1	1	1

$\Gamma^z$  é a representação irredutível  $A_1 \Rightarrow z$  constitui uma base da representação  $A_1 \Rightarrow z$  transforma-se de acordo com a representação  $A_1$



# Construção das Tabelas de Caracteres



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

	$\Gamma(E)$	$\Gamma(C_3)$	$\Gamma(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
$\Gamma^z$	1	1	1

	$\chi(E)$	$\chi(C_3)$	$\chi(\sigma_v)$
$\Gamma^{xy}$	2	-1	0
$\Gamma^z$	1	1	1

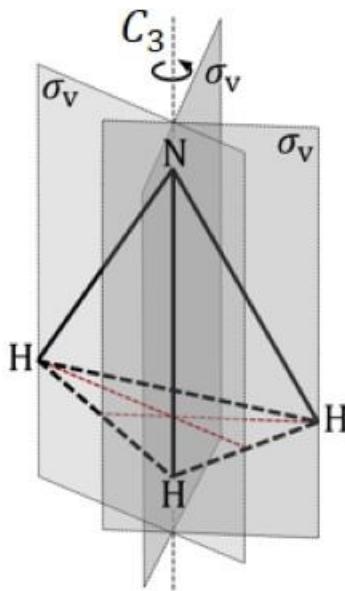
$\Gamma^{xy}$  é a representação irredutível E  $\Rightarrow$  as coordenadas x e y constituem uma base da representação E  $\Rightarrow$  x e y transformam-se de acordo com a representação E



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Para descobrir como  $R_x, R_y$  e  $R_z$  se transformam segundo as diversas representações irreduutíveis do grupo, devemos considerar um vetor axial. Utilizando como protótipo o produto vetorial podemos escrever:

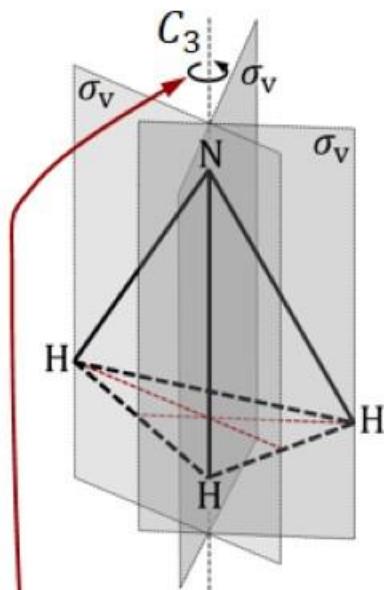
$$\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x & y & z \\ x' & y' & z' \end{vmatrix} = (yz' - zy')\hat{i} + (zx' - xz')\hat{j} + (xy' - yx')\hat{k} \Rightarrow \begin{array}{l} R_x \rightarrow yz' - zy' \\ R_y \rightarrow zx' - xz' \\ R_z \rightarrow xy' - yx' \end{array}$$



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Aplicando-se as operações do grupo  $C_{3v}$  em  $R_z$  ( $\rightarrow xy' - yx'$ ), obtemos:

$$E(xy' - yx') = xy' - yx' \Rightarrow \chi(E) = 1$$

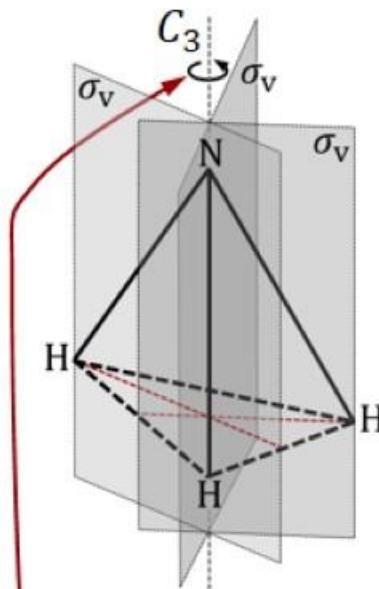
Esta flecha se mantém inalterada se aplicarmos a operação E



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Aplicando-se as operações do grupo  $C_{3v}$  em  $R_z$  ( $\rightarrow xy' - yx'$ ), obtemos:

$$E(xy' - yx') = xy' - yx' \Rightarrow \chi(E) = 1$$

$$C_3(xy' - yx') = xy' - yx' \Rightarrow \chi(C_3) = 1$$

$$\sigma_v(xy' - yx') = -(xy' - yx') \Rightarrow \chi(\sigma_v) = -1$$

$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \Rightarrow R_z$  constitui uma base para uma representação com caracteres 1,1,-1  $\Rightarrow$

Esta flecha se mantém inalterada se aplicarmos as operações E e  $C_3$  e inverte de sentido se aplicarmos  $\sigma_v$

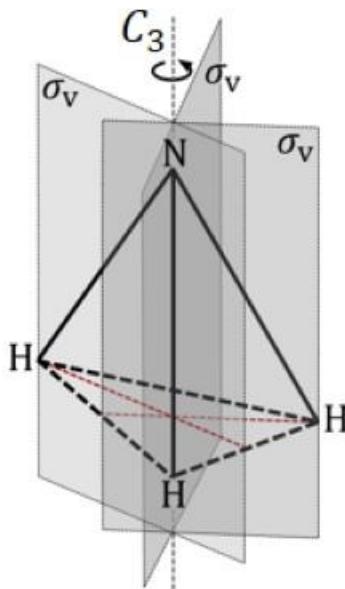
Uma rotação em torno do eixo z se transforma de acordo com a representação irreductível  $A_2$ .



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1$	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$
$E$	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$

$$x^2 + y^2, z^2$$

$$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$$

$x, y, z \Rightarrow$  são coordenadas;  $R_x, R_y, R_z \Rightarrow$  rotações em torno dos eixos  $x, y, z$

Aplicando-se a operação  $C_3$  em  $R_x$  ( $\rightarrow yz' - zy'$ ) e em  $R_y$  ( $\rightarrow zx' - xz'$ ), obtemos:

$$C_3(yz' - zy') = -(yz' - zy')/2 - [(zx' - xz')\sqrt{3}]/2$$

$$C_3(zx' - xz') = [(yz' - zy')\sqrt{3}]/2 - (zx' - xz')/2$$

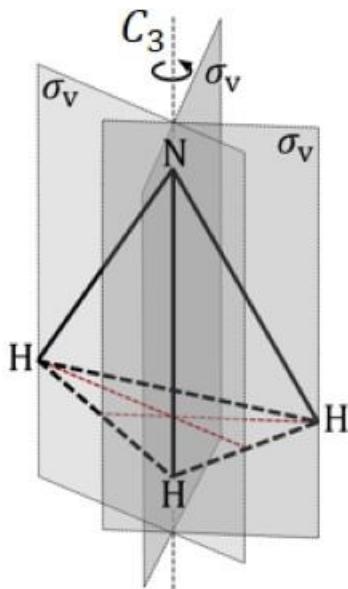
$\Rightarrow R_x$  e  $R_y$  não podem ser consideradas separadamente e, por aplicação das operações do grupo, encontramos que elas se transformam, conjuntamente, de acordo com a representação irreduzível  $E$ , formando uma base para esta representação.



# Construção das Tabelas de Caracteres



Molécula de amônia



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

São combinações dos quadrados e dos produtos cruzados de coordenadas, de acordo com as suas propriedades de transformações, tais como  $x^2 + y^2$  e  $z^2$  em  $A_1$  e os pares de funções  $(x^2 - y^2, xy)$  e  $(xz, yz)$  em  $E$ . Essas propriedades de transformações podem ser determinadas do mesmo modo que foi feito para as  $x, y$  e  $z$ .

Em concordância com os orbitais atômicos  $s, p, d, f, \dots$  (veremos mais adiante)



## 32 grupos pontuais cristalográficos

Número	Símbolo de Schoenflies	Símbolo Internacional	Sistema Cristalino
1	$C_1$	1	Triclínico
2	$C_i (S_2)$	$\bar{1}$	
3	$C_s (C_{1h})$	$m$	Monoclínico
4	$C_2$	2	
5	$C_{2h}$	$2/m$	Ortorombico
6	$C_{2v}$	$mm$	
7	$D_2$	222	
8	$D_{2h}$	$mmm$	Tetragonal
9	$C_4$	4	
10	$S_4$	$\bar{4}$	
11	$C_{4h}$	$4/m$	
12	$C_{4v}$	$4mm$	
13	$D_{2d}$	$\bar{4}2m$	
14	$D_4$	422	
15	$D_{4h}$	$4/mmm$	Romboédrico
16	$C_3$	3	
17	$S_6$	$\bar{3}$	
18	$C_{3v}$	$3m$	
19	$D_3$	32	
20	$D_{3d}$	$\bar{3}m$	Hexagonal
21	$C_{3h}$	$\bar{6}$	
22	$C_6$	6	
23	$C_{6h}$	$6/m$	
24	$D_{3h}$	$\bar{6}m2$	
25	$C_{6v}$	$6mm$	
26	$D_6$	622	
27	$D_{6h}$	$6/mmm$	Cúbico
28	$T$	23	
29	$T_h$	$m3$	
30	$T_d$	$\bar{4}3m$	
31	$O$	432	
32	$O_h$	$m3m$	

→ Redes de Bravais



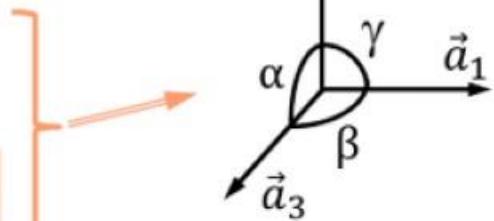
# 7 sistemas cristalinos e 14 tipos de redes de Bravais em três dimensões

Sistema Cristalino	Número de redes	Símbolo da rede	Relação Axial	Ângulos Interaxiais	Grupo Pontual (classe do cristal)
Triclínico	1	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$C_i (C_1)$
Monoclínico	2	P, C	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$C_{2h} (C_2, C_s)$
Ortorrombico	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$D_{2h} (D_2, C_{2v})$
Tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$D_{4h} (D_4, C_{4v}, C_{4h}, C_4, D_{2d}, S_4)$
Trigonal (Romboedral)	1	R	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	$D_{3d} (D_3, C_{3v}, S_6, C_3)$
Hexagonal	1	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$D_{6h} (D_6, C_{6v}, C_{6h}, C_6, D_{3h}, C_{3h})$
Cúbico	3	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$O_h (O, T_d, T_h, T)$

$$|\vec{a}_1| = a, |\vec{a}_2| = b \text{ e } |\vec{a}_3| = c$$

As relações entre os vetores primitivos  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  e os ângulos  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  são:

$$\alpha a, b = \gamma, \alpha a, c = \beta \text{ e } \alpha b, c = \alpha$$





# Tabelas de Caracteres



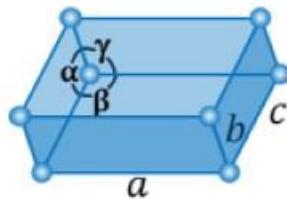
## Sistema triclinico (P)

**Relação axial:**  $a \neq b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



$$C_1 \equiv 1$$

$$C_i \equiv S_2 \equiv \bar{1}$$

Grupos espaciais: 2  
(1 e 2)

$C_1$	$E$
$A$	1

$C_i$	$E$	$i$		
$A_g$	1	1	$R_x, R_y, R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz$
$A_u$	1	-1	$x, y, z$	



# Tabelas de Caracteres



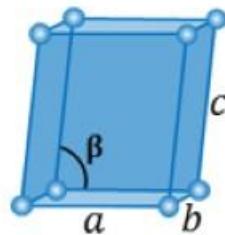
## Sistema monoclinico ( $P, C$ )

**Relação axial:**  $a \neq b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 13  
(3 ao 15)

$$\begin{aligned}C_2 &\equiv 2 \\ C_s &\equiv m \\ C_{2h} &\equiv 2/m\end{aligned}$$

$C_2$	$E$	$C_2$	(3 grupos: 3-5)	
$A$	1	1	$z, R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$B$	1	-1	$x, y, R_x, R_y$	$xz, yz$

$$C_s \equiv C_{1h}$$

$C_s$	$E$	$\sigma_h$	(4 grupos: 6-9)	
$A'$	1	1	$x, y, R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$A''$	1	-1	$z, R_x, R_y$	$xz, yz$

$C_{2h}$	$E$	$C_2$	$i$	$\sigma_h$	(6 grupos: 10-15)	
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$B_g$	1	-1	1	-1	$R_x, R_y$	$xz, yz$
$A_u$	1	1	-1	-1	$z$	
$B_u$	1	-1	-1	1	$x, y$	



# Tabelas de Caracteres



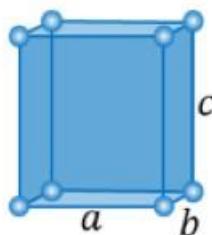
## Sistema ortorrômbico ( $P, C, I, F$ )

**Relação axial:**  $a \neq b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



$D_2$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	(9 grupos: 16-24)
$A$	1	1	1	1	$x^2, y^2, z^2$
$B_1$	1	1	-1	-1	$z, R_z$
$B_2$	1	-1	1	-1	$y, R_y$
$B_3$	1	-1	-1	1	$x, R_x$

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	(22 grupos: 25-46)
$A_1$	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	$y, R_x$

$D_{2h}$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	$i$	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	(28 grupos: 47-74)
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2, y^2, z^2$
$B_{1g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$R_y$
$B_{3g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$R_x$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	
$B_{1u}$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$z$
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$y$
$B_{3u}$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$x$

Grupos espaciais: 59  
(16 ao 74)

$$D_2 \equiv 222$$

$$C_{2v} \equiv mm2$$

$$D_{2h} \equiv mmm$$



# Tabelas de Caracteres



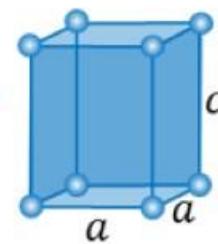
## Sistema tetragonal ( $P, I$ )

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



$C_{4h}$	$E$	$C_4$	$C_2$	$C_4^3$	$i$	$S_4^3$	$\sigma_h$	$S_4$	(6 grupos: 83-88)
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$ $x^2 + y^2, z^2$
$B_g$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$x^2 - y^2, xy$
$E_g$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} i & -1 \\ -i & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ 1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{cases}$	$(R_x, R_y)$ $(xz, yz)$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$z$
$B_u$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
$E_u$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} -i & -1 \\ -i & 1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -1 \\ 1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{cases}$	$(x, y)$

$C_4$	$E$	$C_4$	$C_2$	$C_4^3$	(6 grupos: 75-80)	
$A$	1	1	1	1	$z, R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$B$	1	-1	1	-1		$x^2 - y^2, xy$
$E$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -1 \\ 1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} -i & 1 \\ i & -1 \end{cases}$	$(x, y); (R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

$S_4$	$E$	$S_4$	$C_2$	$S_4^3$	(2 grupos: 81 e 82)	
$A$	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$B$	1	-1	1	-1	$z$	$x^2 - y^2, xy$
$E$	$\begin{cases} 1 & i \\ 1 & -i \end{cases}$	$\begin{cases} -1 & -i \\ -1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} 1 & -1 \\ 1 & i \end{cases}$	$\begin{cases} -i & 1 \\ i & -1 \end{cases}$	$(x, y); (R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

Grupos espaciais: 68  
(75 ao 142)

$$C_4 \equiv 4$$

$$S_4 \equiv \bar{4}$$

$$C_{4h} \equiv 4/m$$

$$D_4 \equiv 422$$

$$C_{4v} \equiv 4mm$$

$$D_{2d} \equiv \bar{4}2m$$

$$D_{4h} \equiv 4/mmm$$



Lucy V.C. Assali



# Tabelas de Caracteres



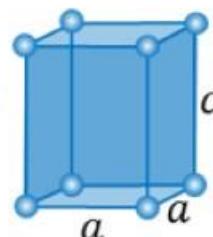
## Sistema tetragonal ( $P, I$ )

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



$D_4$	$E$	$2C_4$	$C_2 (= C_4^2)$	$2C'_2$	$2C''_2$	(10 grupos: 89-98)
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$z, R_z$
$B_1$	1	-1	1	1	-1	$x^2 - y^2$
$B_2$	1	-1	1	-1	1	$xy$
$E$	2	0	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$
						$(xz, yz)$

$C_{4v}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	(12 grupos: 99-110)
$A_1$	1	1	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_1$	1	-1	1	1	-1	
$B_2$	1	-1	1	-1	1	
$E$	2	0	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$
						$(xz, yz)$

Grupos espaciais: 68  
(75 ao 142)

$\uparrow$   
 $C_4 \equiv 4$   
 $S_4 \equiv \bar{4}$   
 $C_{4h} \equiv 4/m$ 

 $D_4 \equiv 422$   
 $C_{4v} \equiv 4mm$   
 $D_{4h} \equiv 4/mmm$ 

 $D_{2d} \equiv \bar{4}2m$   
 $D_{4h} \equiv 4/mmm$



Lucy V.C. Assali



# Tabelas de Caracteres



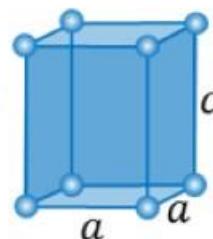
## Sistema tetragonal ( $P, I$ )

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



$D_{2d}$	$E$	$2S_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2\sigma_d$	(12 grupos: 111-122)
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_1$	1	-1	1	1	-1	$x^2 - y^2$
$B_2$	1	-1	1	-1	1	$z$
$E$	2	0	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$
						$(xz, yz)$

$D_{4h}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2C''_2$	$i$	$2S_4$	$\sigma_h$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	(20 grupos: 123-142)
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_{1g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	$x^2 - y^2$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	$xy$
$E_g$	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	$(R_x, R_y)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	$(xz, yz)$
$A_{2u}$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	$z$
$B_{1u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	
$E_u$	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	$(x, y)$

$$C_4 \equiv 4$$

$$S_4 \equiv \bar{4}$$

$$C_{4h} \equiv 4/m$$

Grupos espaciais: 68  
(75 ao 142)



$$D_4 \equiv 422$$

$$D_{2d} \equiv \bar{4}2m$$

$$C_{4v} \equiv 4mm$$

$$D_{4h} \equiv 4/mmm$$



# Tabelas de Caracteres



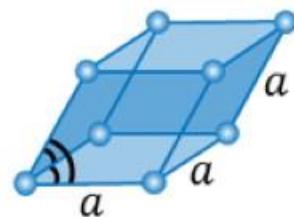
## Sistema romboédrico ou trigonal (*R* ou *P*)

**Relação axial:**  $a = b = c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 25  
(143 ao 167)

$$C_3 \equiv 3$$

$$S_6 \equiv \bar{3}$$

$$D_3 \equiv 32$$

$$C_{3v} \equiv 3m$$

$$D_{3d} \equiv \bar{3}m$$



$$S_6 \equiv C_{3i}$$

$C_3$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/3}$ (4 grupos: 143-146)		
$A$	1	1	1	$z, R_z$		
$E$	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$	$(x, y); (R_x, R_y)$			$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$	

$S_6$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$i$	$S_6^5$	$S_6$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/3}$ (2 grupos: 147 e 148)	
$A_g$	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$E_g$	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{Bmatrix}$	$(R_x, R_y)$			$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$			
$A_u$	1	1	1	-1	-1	-1	$z$	
$E_u$	$\begin{Bmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \end{Bmatrix}$	$(x, y)$						

$D_3$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	(7 grupos: 149-155)	
$A_1$	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$	
$A_2$	1	1	-1	$z, R_z$	
$E$	2	-1	0	$(x, y); (R_x, R_y)$	



# Tabelas de Caracteres



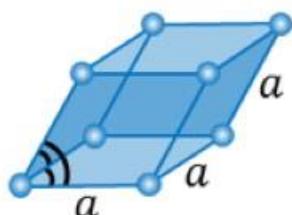
## Sistema romboédrico ou trigonal (*R* ou *P*)

**Relação axial:**  $a = b = c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 25  
(143 ao 167)



$$C_3 \equiv 3$$

$$S_6 \equiv \bar{3}$$

$$D_3 \equiv 32$$

$$C_{3v} \equiv 3m$$

$$D_{3d} \equiv \bar{3}m$$

$C_{3v}$	$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$				(6 grupos: 156-161)
$A_1$	1	1	1	$z$			$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$			
$E$	2	-1	0	$(x, y); (R_x, R_y)$			$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$

$D_{3d}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$i$	$2S_6$	$3\sigma_d$	(6 grupos: 162-167)	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	-1	1	1	-1	$R_z$	
$E_g$	2	-1	0	2	-1	0	$(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	-1	-1	-1		
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	-1	1	$z$	
$E_u$	2	-1	0	-2	1	0	$(x, y)$	



# Tabelas de Caracteres



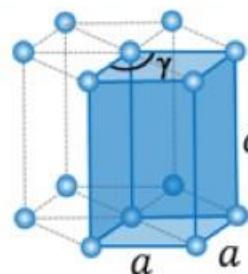
## Sistema hexagonal (P)

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

**Geometria da Célula:**



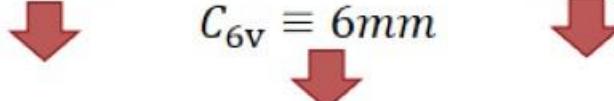
Grupos espaciais: 27  
(168 ao 194)

$C_6$	$E$	$C_6$	$C_3$	$C_2$	$C_3^2$	$C_6^5$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/6}$	(6 grupos: 168-173)
$A$	1	1	1	1	1	1	$z, R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$B$	1	-1	1	-1	1	-1		
$E_1$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & -\varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & -\varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & \varepsilon \end{cases}$						$(x, y); (R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$E_2$	$\begin{cases} 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \\ 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \end{cases}$							$(x^2 - y^2, xy)$

$C_{3h}$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/3}$	(1 grupo: 174)
$A'$	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$E'$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon \end{cases}$						$(x, y)$	$(x^2 - y^2, xy)$
$A''$	1	1	1	-1	-1	-1	$z$	
$E''$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \end{cases}$						$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

$$C_6 \equiv 6 \quad C_{6h} \equiv 6/m \quad D_6 \equiv 622 \quad D_{3h} \equiv \bar{6}m2 \quad D_{6h} \equiv 6/mmm$$

$$C_{3h} \equiv \bar{6} \quad C_{6v} \equiv 6mm$$





# Tabelas de Caracteres



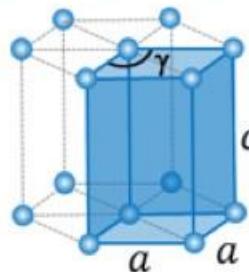
## Sistema hexagonal (P)

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 27  
(168 ao 194)



$$C_6 \equiv 6 \quad C_{6h} \equiv 6/m \quad D_6 \equiv 622 \quad D_{3h} \equiv \bar{6}m2 \quad C_{3h} \equiv \bar{6}$$

$$C_{6v} \equiv 6mm$$



$C_{6h}$	$E$	$C_6$	$C_3$	$C_2$	$C_3^2$	$C_6^5$	$i$	$S_3^5$	$S_6^5$	$\sigma_h$	$S_6$	$S_3$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/6}$
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$
$B_g$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$x^2 + y^2, z^2$
$E_{1g}$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & -\varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & \varepsilon^* \\ 1 & \varepsilon^* & -\varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & \varepsilon \end{cases}$	1	$\varepsilon$	$-\varepsilon^*$	-1	$-\varepsilon$	$\varepsilon^*$	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$				
$E_{2g}$	$\begin{cases} 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon \\ 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* \end{cases}$	1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon$	1	$-\varepsilon^* - \varepsilon$	1	$-\varepsilon^* - \varepsilon$	$(x^2 - y^2, xy)$				
$A_u$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	$z$
$B_u$	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	
$E_{1u}$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & -\varepsilon^* & -1 & -\varepsilon & \varepsilon^* & -1 & -\varepsilon \\ 1 & \varepsilon^* & -\varepsilon & -1 & -\varepsilon^* & \varepsilon & -1 & -\varepsilon^* \end{cases}$	1	$\varepsilon$	$-\varepsilon^*$	-1	$-\varepsilon$	$\varepsilon^*$	1	$\varepsilon$	$-\varepsilon^*$	$(x, y)$		
$E_{2u}$	$\begin{cases} 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & 1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & -1 & \varepsilon^* \\ 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & 1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & -1 & \varepsilon \end{cases}$	1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon$	1	$-\varepsilon^* - \varepsilon$	-1	$\varepsilon^*$	$\varepsilon$	$\varepsilon^*$	$\varepsilon$		

$$D_{6h} \equiv 6/mmm$$





# Tabelas de Caracteres



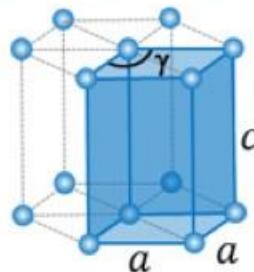
## Sistema hexagonal (P)

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 27  
(168 ao 194)

$$\begin{array}{llllll} C_6 \equiv 6 & C_{6h} \equiv 6/m & D_6 \equiv 622 & D_{3h} \equiv \bar{6}m2 & D_{6h} \equiv 6/mmm \\ C_{3h} \equiv \bar{6} & & C_{6v} \equiv 6mm & & \end{array}$$

$D_6$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3C'_2$	$3C''_2$	(6 grupos: 177-182)
$A_1$	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	1	-1	-1	$z, R_z$
$B_1$	1	-1	1	-1	1	-1	
$B_2$	1	-1	1	-1	-1	1	
$E_1$	2	1	-1	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$
$E_2$	2	-1	-1	2	0	0	$(xz, yz)$ $(x^2 - y^2, xy)$

$C_{6v}$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	(4 grupos: 183-186)
$A_1$	1	1	1	1	1	1	$z$
$A_2$	1	1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_1$	1	-1	1	-1	1	-1	
$B_2$	1	-1	1	-1	-1	1	
$E_1$	2	1	-1	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$
$E_2$	2	-1	-1	2	0	0	$(xz, yz)$ $(x^2 - y^2, xy)$



# Tabelas de Caracteres



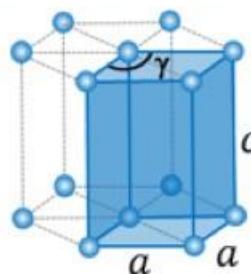
## Sistema hexagonal (*P*)

Relação axial:  $a = b \neq c$

Ângulos interaxiais:

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

Geometria da Célula:



$D_{3h}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma_v$	(4 grupos: 187-190)	
$A'_1$	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
$A'_2$	1	1	-1	1	1	-1	$R_z$	
$E'$	2	-1	0	2	-1	0	$(x, y)$	$(x^2 - y^2, xy)$
$A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1		
$A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1	$z$	
$E''$	2	-1	0	-2	1	0	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

Grupos espaciais: 27  
(168 ao 194)

$$\begin{array}{lllll}
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & & \downarrow \\
 C_6 \equiv 6 & C_{6h} \equiv 6/m & D_6 \equiv 622 & D_{3h} \equiv \bar{6}m2 & D_{6h} \equiv 6/mmm \\
 C_{3h} \equiv \bar{6} & & C_{6v} \equiv 6mm & &
 \end{array}$$



# Tabelas de Caracteres



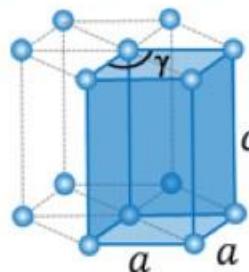
## Sistema hexagonal (P)

**Relação axial:**  $a = b \neq c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 27  
(168 ao 194)

$D_{6h}$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3C'_2$	$3C''_2$	$i$	$2S_3$	$2S_6$	$\sigma_h$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$	(4 grupos: 191-194)
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	$R_z$
$B_{1g}$	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	
$E_{1g}$	2	1	-1	-2	0	0	2	1	-1	-2	0	0	$(R_x, R_y)$ ( $xz, yz$ )
$E_{2g}$	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0	$(x^2 - y^2, xy)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	$z$
$B_{1u}$	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	
$E_{1u}$	2	1	-1	-2	0	0	-2	-1	1	2	0	0	$(x, y)$
$E_{2u}$	2	-1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0	



$$C_6 \equiv 6 \\ C_{3h} \equiv \bar{6}$$



$$C_{6h} \equiv 6/m \\ C_{6v} \equiv 6mm$$



$$D_6 \equiv 622$$



$$D_{3h} \equiv \bar{6}m2 \\ D_{6h} \equiv 6/mmm$$



# Tabelas de Caracteres



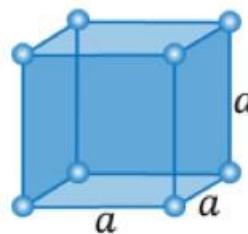
## Sistema cúbico ( $P, I, F$ )

**Relação axial:**  $a = b = c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 36  
(195 ao 230)

$$T \equiv 23 \quad O \equiv 432$$

$$T_h \equiv m\bar{3} \quad T_d \equiv \bar{4}3m \quad O_h \equiv m\bar{3}m$$



$T$	$E$	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/3}$	(5 grupos: 195-199)
$A$	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
$E$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 \end{cases}$					$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T$	3	0	0	-1	$(R_x, R_y, R_z); (x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$

$T_h$	$E$	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	$i$	$4S_6$	$4S_6^5$	$3\sigma_h$	$\varepsilon = e^{(i2\pi)/3}$	(7 grupos: 200-206)
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
$E_g$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 \end{cases}$									$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_g$	3	0	0	-1	3	0	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$	$(xy, xz, yz)$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
$E_u$	$\begin{cases} 1 & \varepsilon & \varepsilon^* & 1 & -1 & -\varepsilon & -\varepsilon^* & -1 \\ 1 & \varepsilon^* & \varepsilon & 1 & -1 & -\varepsilon^* & -\varepsilon & -1 \end{cases}$									
$T_u$	3	0	0	-1	-3	0	0	1	$(x, y, z)$	



# Tabelas de Caracteres



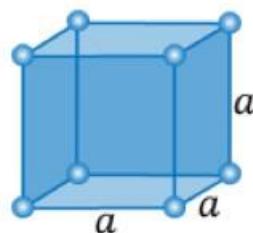
## Sistema cúbico ( $P, I, F$ )

**Relação axial:**  $a = b = c$

**Ângulos interaxiais:**

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**Geometria da Célula:**



Grupos espaciais: 36  
(195 ao 230)



$$T \equiv 23 \quad O \equiv 432$$

$$T_h \equiv m\bar{3} \quad T_d \equiv \bar{4}3m \quad O_h \equiv m\bar{3}m$$



$O$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	(8 grupos: 207-214)
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_2$	1	-1	1	1	-1	
$E$	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_1$	3	1	-1	0	-1	$(x, y, z); (R_x, R_y, R_z)$
$T_2$	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$

$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	(6 grupos: 215-220)
$A_1$	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	$(x, y, z)$
						$(xy, xz, yz)$



# Tabelas de Caracteres



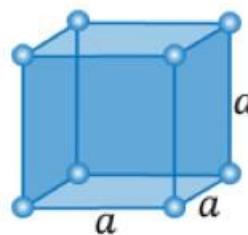
## Sistema cúbico ( $P, I, F$ )

Relação axial:  $a = b = c$

Ângulos interaxiais:

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Geometria da Célula:



Grupos espaciais: 36  
(195 ao 230)

$$T \equiv 23 \quad O \equiv 432 \\ T_h \equiv m\bar{3} \quad T_d \equiv \bar{4}3m \quad O_h \equiv m\bar{3}m$$

$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	(10 grupos: 221-230)
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	



# 32 grupos pontuais cristalográficos tridimensionais arrumados de acordo com o sistema cristalino

(Hermann-Mauguin símbolos à esquerda e Schoenflies símbolos à direita)

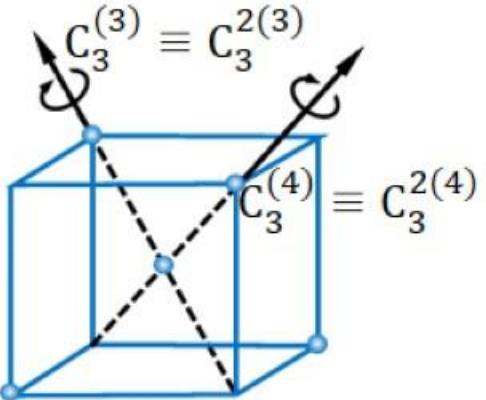
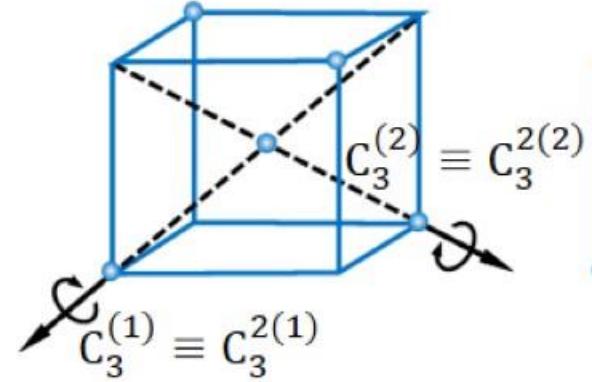
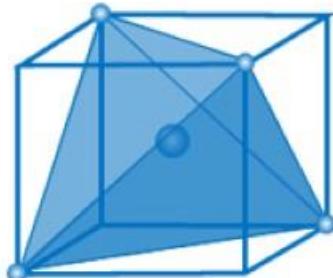
Símbolo Geral	Sistema cristalino											
	Triclínico		monoclínico (cima) ortorrômbico (baixo)		Tetragonal		Trigonal		Hexagonal		Cúbico	
$n$	1	$C_1$	2	$C_2$	4	$C_4$	3	$C_3$	6	$C_6$	23	$T$
$\bar{n}$	$\bar{1}$	$C_i$	$\bar{2} \equiv m$	$C_s$	$\bar{4}$	$S_4$	$\bar{3}$	$C_{3i}$	$\bar{6} \equiv 3/m$	$C_{3h}$	—	—
$n/m$			$2/m$	$C_{2h}$	$4/m$	$C_{4h}$	—	—	$6/m$	$C_{6h}$	$2/m\bar{3}$	$T_h$
$n22$			222	$D_2$	422	$D_4$	32	$D_3$	622	$D_6$	432	$O$
$nmm$			2mm	$C_{2v}$	4mm	$C_{4v}$	3m	$C_{3v}$	6mm	$C_{6v}$	—	—
$\bar{n}2m$			—	—	$\bar{4}2m$	$D_{2d}$	$\bar{3}2/m$	$D_{3d}$	$\bar{6}2m$	$D_{3h}$	$\bar{4}3m$	$T_d$
$n/m\ 2/m\ 2/m$			2/m 2/m 2/m	$D_{2h}$	4/m 2/m 2/m	$D_{4h}$	—	—	6/m 2/m 2/m	$D_{6h}$	4/m $\bar{3}$ 2/m	$O_h$



# Tabelas de Caracteres: Grupo $T_d$



$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
$A_1$	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	$(x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$

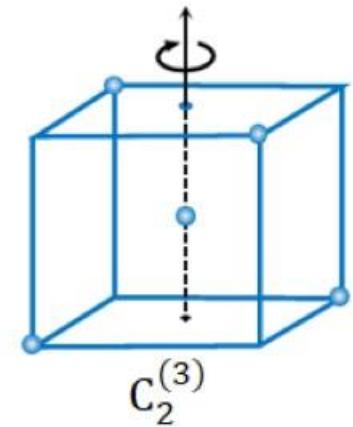
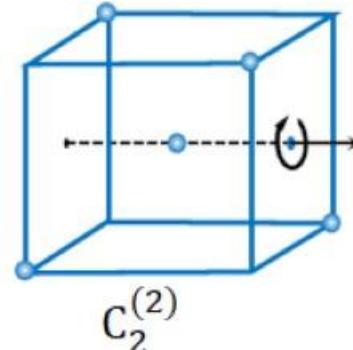
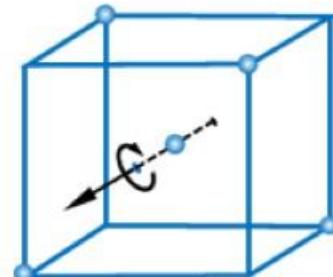
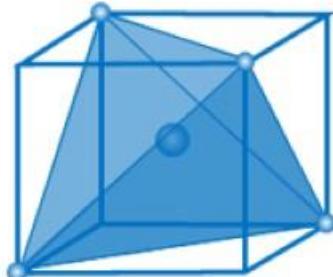




# Tabelas de Caracteres: Grupo $T_d$



$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
$A_1$	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	$(x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$

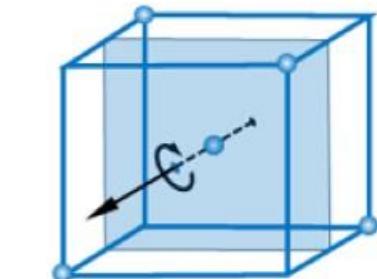
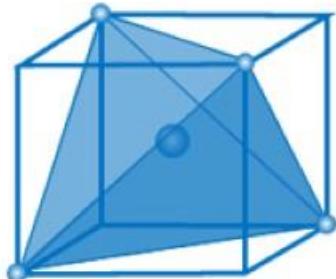




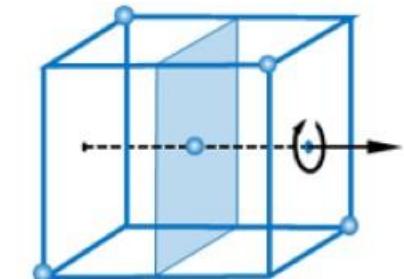
# Tabelas de Caracteres: Grupo $T_d$



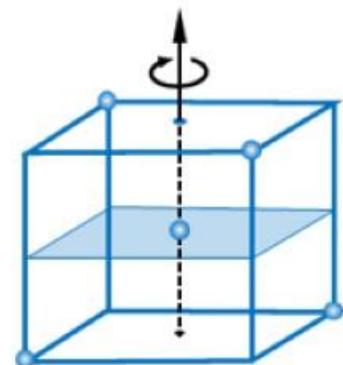
$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1		
$E$	2	-1	2	0	0		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_1$	3	0	-1	1	-1	$(R_x, R_y, R_z)$	
$T_2$	3	0	-1	-1	1	$(x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$



$$C_4^{(1)} + \sigma_{yz} = S_4^{(1)}$$



$$C_4^{(2)} + \sigma_{xz} = S_4^{(2)}$$



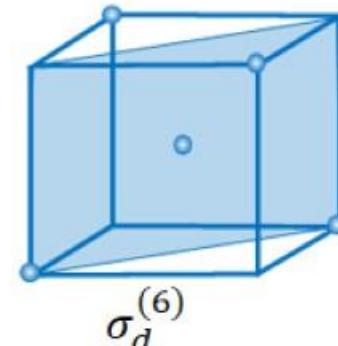
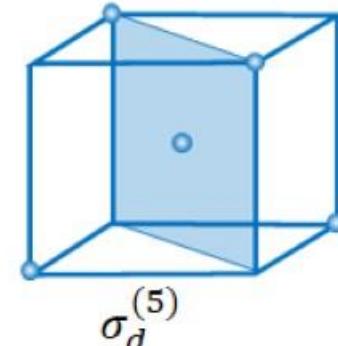
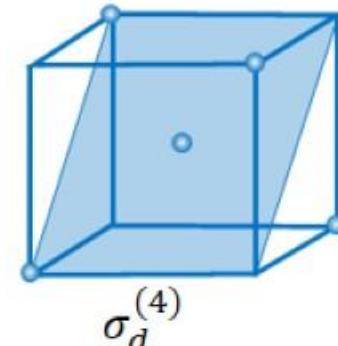
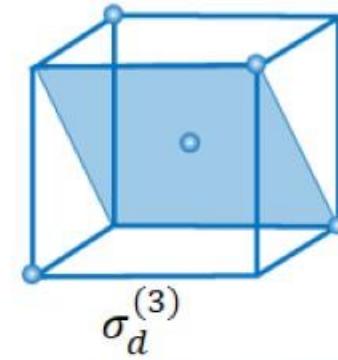
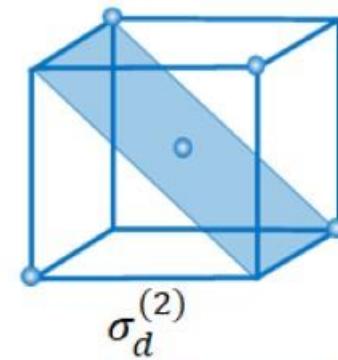
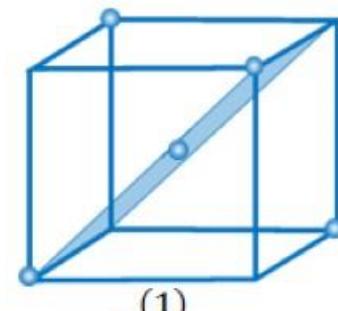
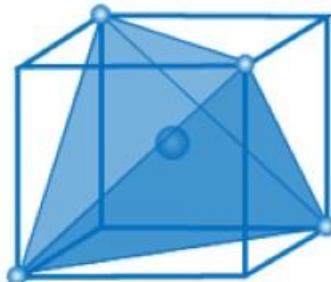
$$C_4^{(3)} + \sigma_{xy} = S_4^{(3)}$$



# Tabelas de Caracteres: Grupo $T_d$



$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
$A_1$	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	$(x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$

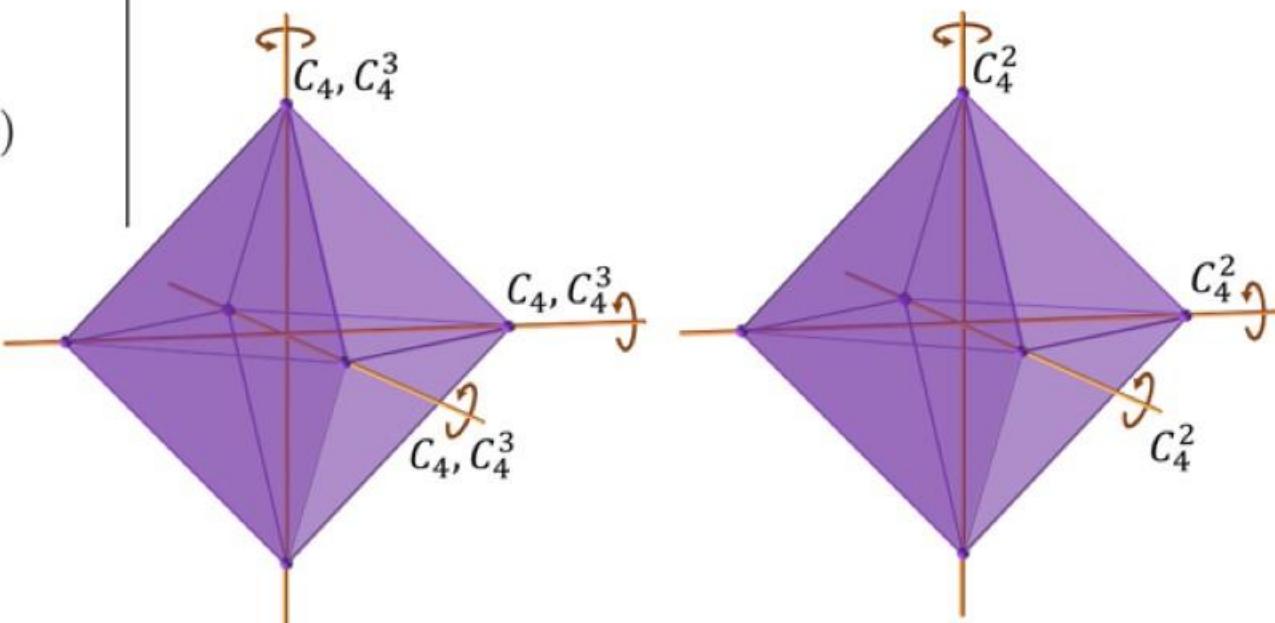




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	

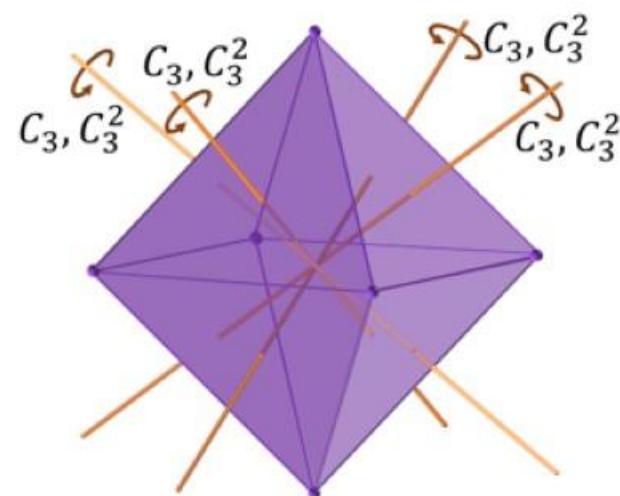




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	

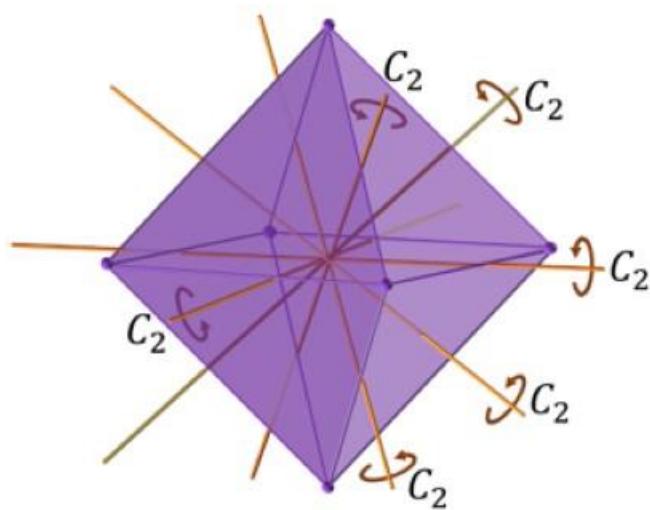




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	

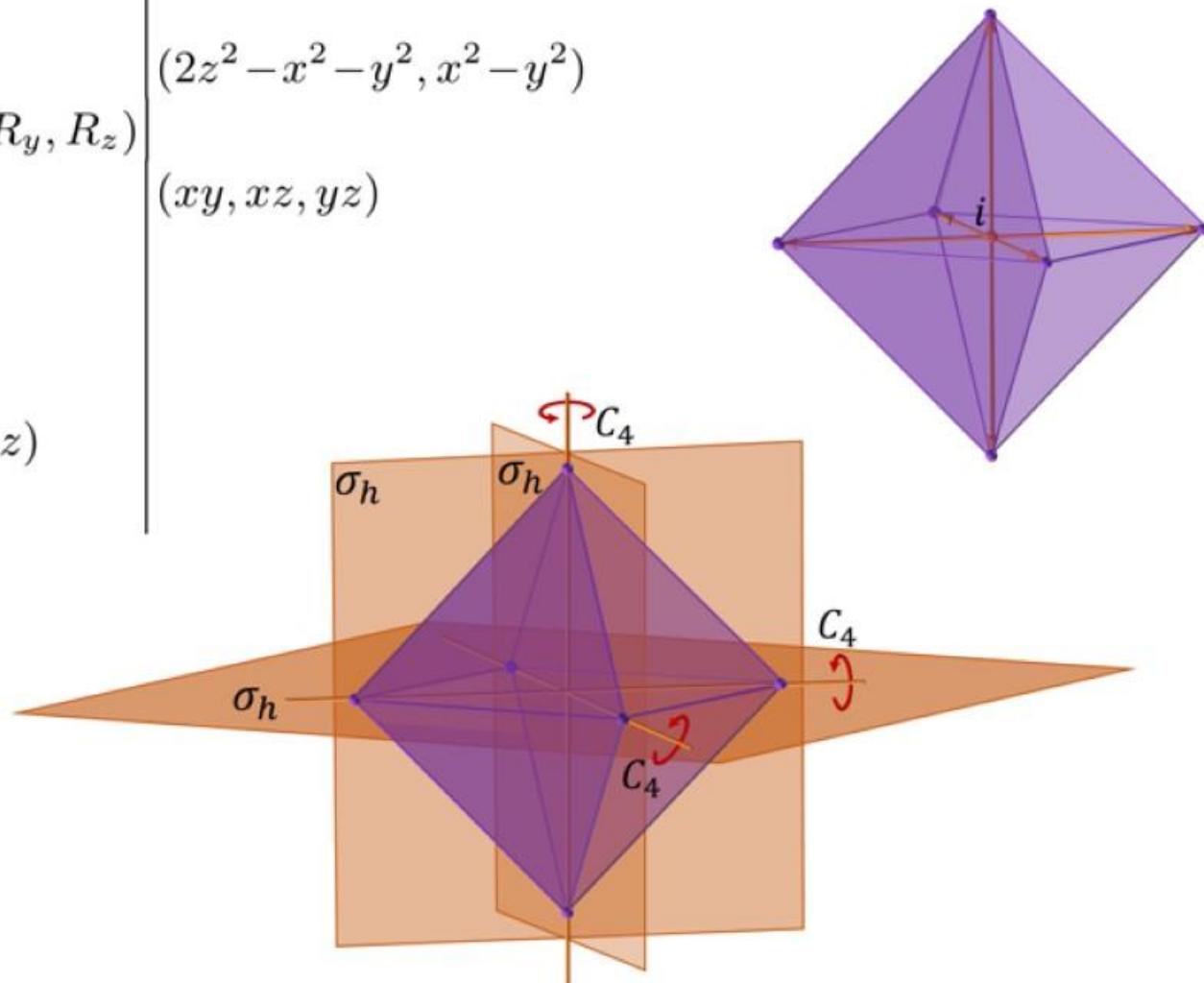




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	

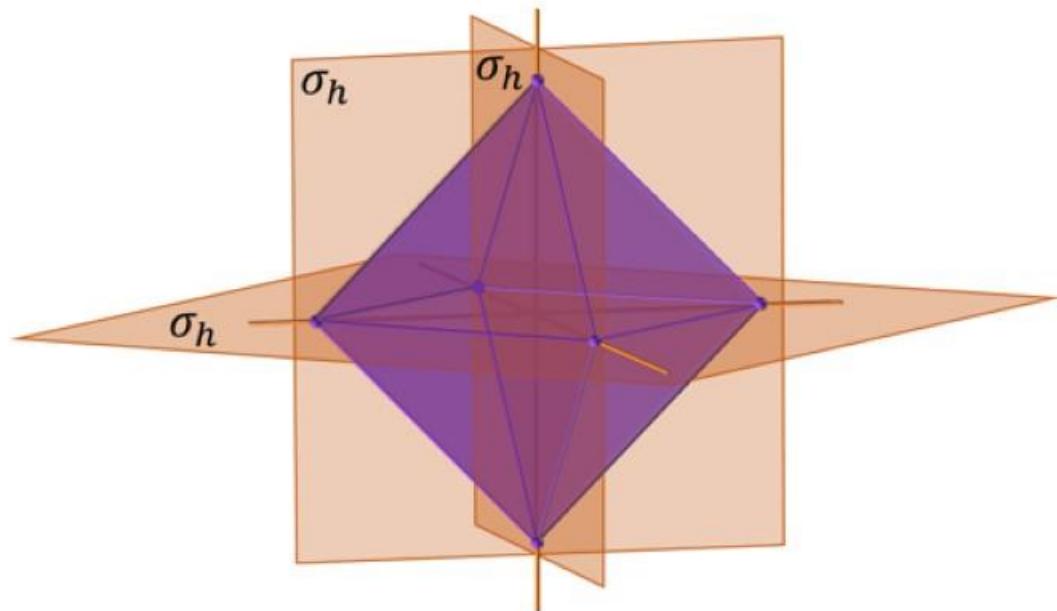




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	

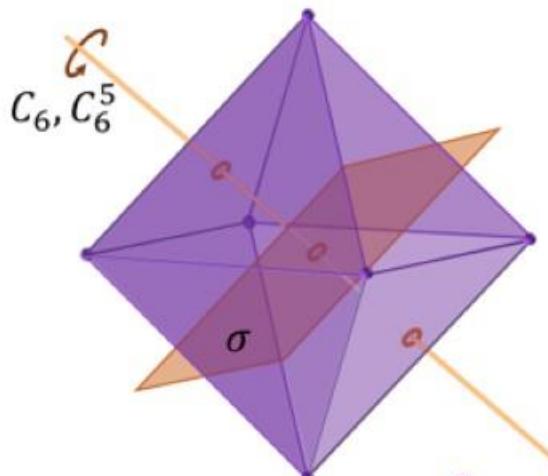
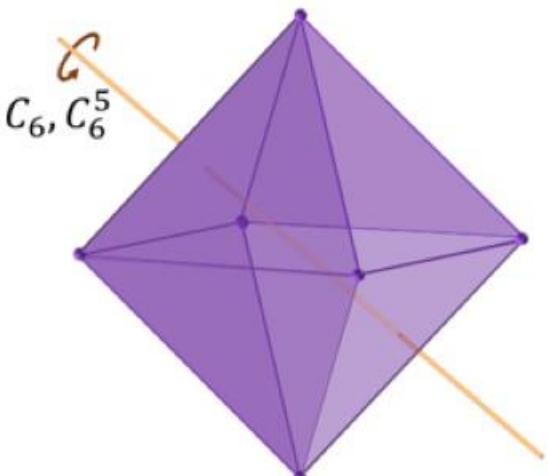
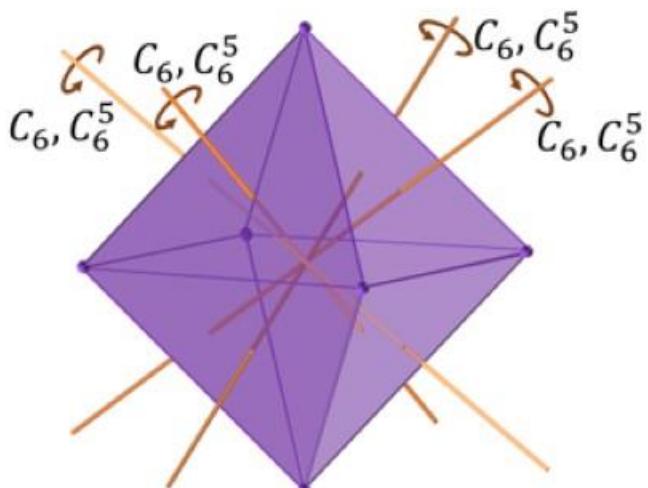




# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	



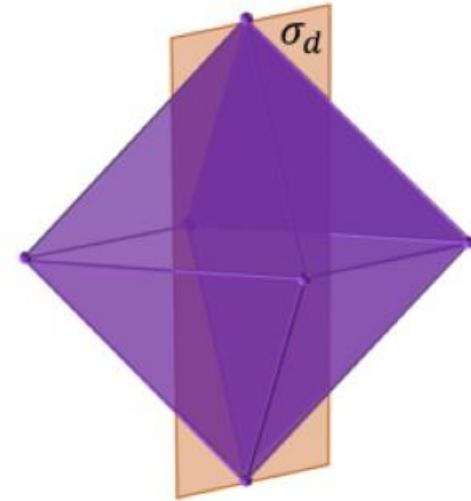
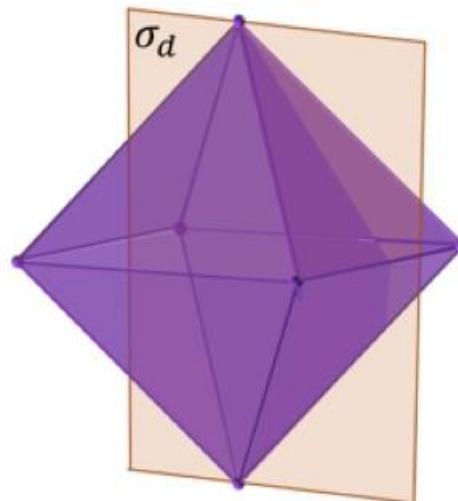
Lucy V.C. Assali



# Tabelas de Caracteres: Grupo $O_h$



$O_h$	$E$	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2$	$i$	$6S_4$	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_{2g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	
$E_g$	2	0	2	-1	0	2	0	2	-1	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$T_{1g}$	3	1	-1	0	-1	3	1	-1	0	-1	$(R_x, R_y, R_z)$
$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1	$(xy, xz, yz)$
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
$E_u$	2	0	2	-1	0	-2	0	-2	1	0	
$T_{1u}$	3	1	-1	0	-1	-3	-1	1	0	1	$(x, y, z)$
$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1	



2 dos 6 planos de reflexão  $\sigma_d$