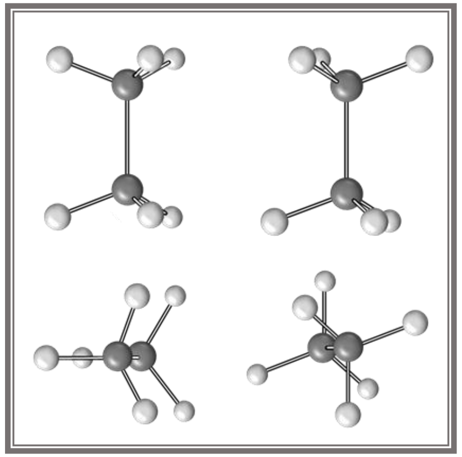
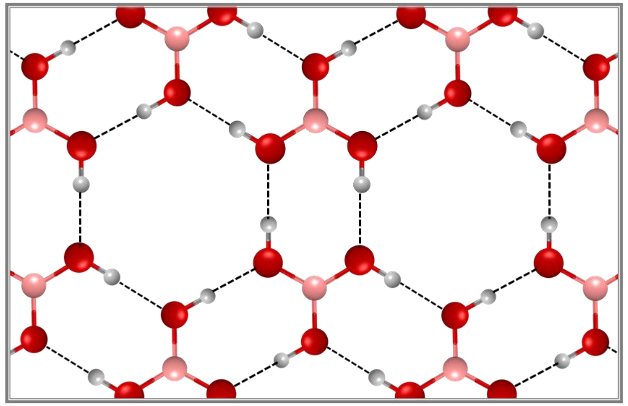
Teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



Lucy V. C. Assali

Instituto de Física
Universidade de São Paulo



Aula 8 – 25/04

1º Semestre/2023

Teoremas fundamentais

Caracteres de uma representação

Dado um grupo $\mathbb{G}$, de ordem h, os números

$$\chi^{\alpha}(R) = \sum_i \mathbf{\Gamma}_{ii}^{\alpha}(R) = \mathrm{tr}\,\mathbf{\Gamma}^{\alpha}(\mathrm{R}),$$

que expressam os valores dos traços das matrizes da representação $\mathbf{\Gamma}^{\alpha}$, são chamados caracteres da representação.

Consequências:

i. representações equivalentes têm os mesmos caracteres, uma vez que o traço de duas matrizes equivalentes por transformação unitária são iguais;

ii. o caracter de todos os elementos pertencentes à mesma classe são iguais, pois $\mathbf{\Gamma}'(A) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{S} \Longrightarrow \mathrm{tr}\,\mathbf{\Gamma}'(A) = \mathrm{tr}\,\mathbf{\Gamma}(A)$;

iii. a designação de caracter da classe $\mathcal{C}_{\mu}$ é $\chi^{\alpha}(\mathcal{C}_{\mu})$;

iv. o caracter do elemento identidade E, de uma dada representação do grupo, é igual à dimensionalidade dessa representação.

Todos os grupos apresentam uma RI totalmente simétrica, unidimensional, com caracteres unitários para todas as operações do grupo $\Rightarrow$ essa RI é, em geral, rotulada por A_1

	D_3	E	$2C_3$	$3C_2$	
$A_1 \Rightarrow$	$\mathbf{\Gamma}^1$	1	1	1	$\Rightarrow$ *unidimensional*
$A_2 \Rightarrow$	$\mathbf{\Gamma}^2$	1	1	-1	$\Rightarrow$ *unidimensional*
$E \Rightarrow$	$\mathbf{\Gamma}^3$	2	-1	0	$\Rightarrow$ *bidimensional*

classes e # de elementos

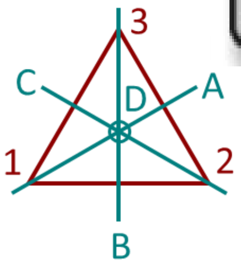
$\chi^1(C_2)$

$\chi^3(\mathrm{E})$

representações irredutíveis

Lucy V. C. Assali

Aplicação dos conceitos



Exemplo $\Longrightarrow$ grupo de matrizes quadradas 2×2 que possui a mesma tabela de multiplicação do triângulo equilátero

$$\boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{E}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(\mathrm{E}) = 2$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(A) = 0$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(B) = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(B) = 0$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(C) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(C) = 0$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(D) = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(D) = -1$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(F) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \chi(F) = -1$$

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
$\boldsymbol{A_1}$	1	1	1
$\boldsymbol{A_2}$	1	1	-1
$\boldsymbol{E}$	2	-1	0
$\boldsymbol{\Gamma}$	2	-1	0

$\Longrightarrow$ ***Redutível?????***

$$n_\alpha = \frac{1}{h} \sum_{\mu=1}^{p} N_\mu \; \chi^{*\alpha}(\mathcal{C}_\mu) \chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_\mu)$$

$$n_{A_1} = \frac{1}{6}\{1(1)(2) + 2(1)(-1) + 3(1)(0)\} = 0$$

$$n_{A_2} = \frac{1}{6}\{1(1)(2) + 2(1)(-1) + 3(-1)(0)\} = 0$$

$$n_E = \frac{1}{6}\{1(2)(2) + 2(-1)(-1) + 3(0)(0)\} = 1$$

$\boldsymbol{\Gamma}$ se transforma segundo $\boldsymbol{E}$ $\therefore$ $\boldsymbol{\Gamma}$ é uma ***representação irredutível*** bidimensional do grupo.

As matrizes 2×2 que representam a RI $\boldsymbol{E}$ não podem ser reduzidas por uma transformação de semelhança.

Lucy V. C. Assali

Decomposição de uma Representação Redutível

$\mathbf{\Gamma}(A)$ representação redutível

$$S^{-1}\mathbf{\Gamma}'(A)S = \mathbf{\Gamma}(A) = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}^1(A) & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \mathbf{\Gamma}^p(A) \end{bmatrix}} = n_1\mathbf{\Gamma}^1(A) \oplus \cdots \oplus \cdots \oplus n_p\mathbf{\Gamma}^p(A)$$

matriz bloco-diagonalizada:
blocos são compostos pelas matrizes das RI

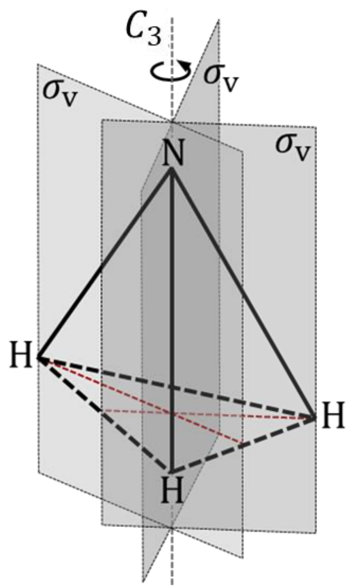
Caracteres das matrizes de $\mathbf{\Gamma}(A)$ ⇒ combinações lineares dos caracteres das matrizes das RI do grupo: $\chi^{\Gamma}(R) = \sum_{\alpha} n_\alpha \, \chi^{\alpha}(R)$

Natureza e número n_α de RI que compõem $\mathbf{\Gamma}$: $n_\alpha = \dfrac{1}{h}\sum_{R} \chi^{*\alpha}(R)\chi^{\Gamma}(R)$ ou $n_\alpha = \dfrac{1}{h}\sum_{\mu=1}^{p} N_\mu \, \chi^{*\alpha}(\mathcal{C}_\mu)\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_\mu)$

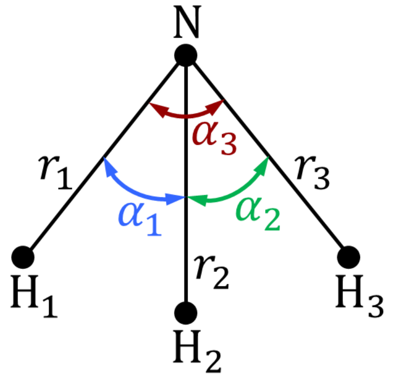
h ⇒ ordem do grupo
p ⇒ número de classes
N_μ ⇒ número de elementos na μ-ésima classe

Decomposição de uma Representação Redutível

Molécula de amônia NH_3: grupo de simetria $C_{3v} \Longrightarrow \{E, \underbrace{C_3, C_3^2}, \underbrace{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''}\}$



C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\boldsymbol{A_1}$	1	1	1
$\boldsymbol{A_2}$	1	1	-1
$\boldsymbol{E}$	2	-1	0



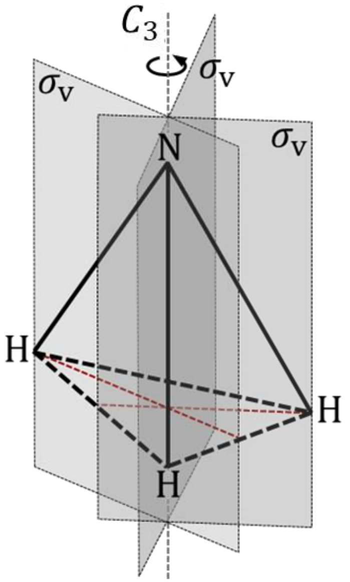
- descrever o sistema utilizando o conjunto das coordenadas (base): $\{r_1, r_2, r_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$
- determinar as RI que com-põem a representação $\boldsymbol{\Gamma}$ na base das seis coordenadas

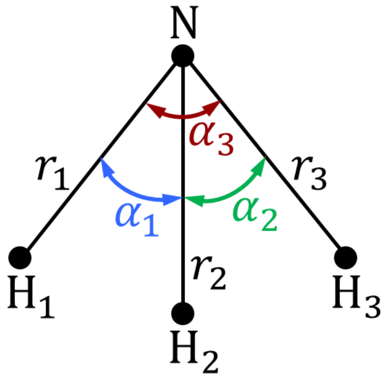
- operação E: deixa as 6 coordenadas inalterados ∴ é a matriz identidade:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} \Longrightarrow \boxed{\chi^{\Gamma}(E) = 6}$$

Decomposição de uma Representação Redutível

Molécula de amônia NH_3: grupo de simetria $C_{3v} \Longrightarrow \{E, 2C_3, C_3^2, 3\sigma_v\}$





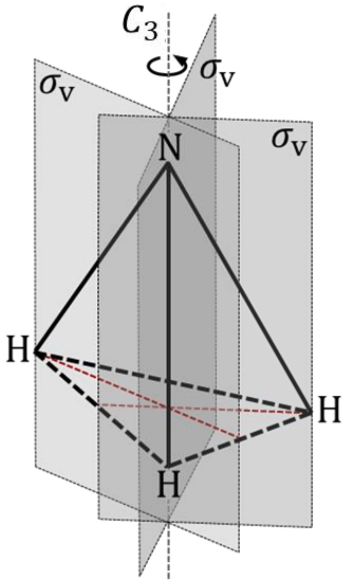
C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\boldsymbol{A_1}$	1	1	1
$\boldsymbol{A_2}$	1	1	− 1
$\boldsymbol{E}$	2	− 1	0
$\boldsymbol{\Gamma}$	6	0	2

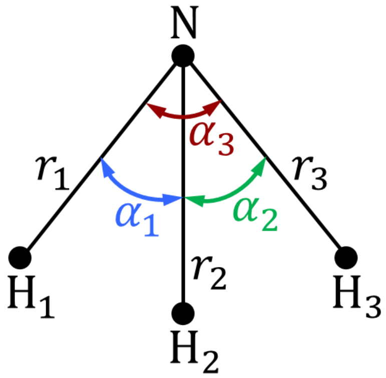
$$n_\alpha = \frac{1}{h}\sum_{\mu=1}^{p} N_\mu\ \chi^{*\alpha}(\mathcal{C}_\mu)\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_\mu)$$

$$\left.\begin{aligned}
n_{A_1} &= \frac{1}{6}[6(1\times 1) + 0(1\times 2) + 2(1\times 3)] = 2\\
n_{A_2} &= \frac{1}{6}[6(1\times 1) + 0(1\times 2) + 2(-1\times 3)] = 0\\
n_E &= \frac{1}{6}[6(2\times 1) + 0(-1\times 2) + 2(0\times 3)] = 2
\end{aligned}\right\} \boldsymbol{\Gamma} = 2\boldsymbol{A_1} + 2\boldsymbol{E}$$

Decomposição de uma Representação Redutível

Molécula de amônia NH_3: grupo de simetria $C_{3v} \Longrightarrow \{E, 2C_3, C_3^2, 3\sigma_v\}$





C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\boldsymbol{A_1}$	1	1	1
$\boldsymbol{A_2}$	1	1	−1
$\boldsymbol{E}$	2	−1	0
$\boldsymbol{\Gamma}$	6	0	2

$$n_{A_1} = 2;\ n_{A_2} = 0;\ n_E = 2$$

Matriz $\boldsymbol{\Gamma}$ da representação bloco-diagonalizada

$$\boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{A_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{$\boldsymbol{E}$}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{$\boldsymbol{E}$}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \end{bmatrix}$$

Lucy V.C. Assali

Produto Direto

Produto Direto: $A \otimes B = C$

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{13}b_{11} & a_{13}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{13}b_{21} & a_{13}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{23}b_{11} & a_{23}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{23}b_{21} & a_{23}b_{22} \\ a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{33}b_{11} & a_{33}b_{12} \\ a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{33}b_{21} & a_{33}b_{22} \end{bmatrix}$$

Propriedades do produto direto:

a) $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$;

b) $A \otimes B \neq B \otimes A$;

c) Se A, A_1 e A_2 são matrizes $(m \times m)$ e B, B_1 e B_2 são matrizes $(n \times n)$, então

$$(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) = (A_1 A_2) \otimes (B_1 B_2)$$

Consequência: $(A \otimes B)(A^{-1} \otimes B^{-1}) = (AA^{-1}) \otimes (BB^{-1}) = \mathrm{I}_m \otimes \mathrm{I}_n = \mathrm{I}_{mn}$,

$\Longrightarrow$ a inversa de $A \otimes B$ é $A^{-1} \otimes B^{-1}$;

d) $(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$;

e) Se U e V são matrizes unitárias, então $U \otimes V$ também é unitária.

Grupos de Produto Direto

$\mathbb{G}_a \Longrightarrow$ Grupo de ordem h_a e elementos $\{\mathrm{E}, A_2, \cdots, A_{h_a}\}$

$\mathbb{G}_b \Longrightarrow$ Grupo de ordem h_b e elementos $\{\mathrm{E}, B_2, \cdots, B_{h_b}\}$

Se todos os elementos h_a de $\mathbb{G}_a$ comutam com todos os elementos h_b de $\mathbb{G}_b$ e o único elemento em comum aos dois grupos é a identidade, então

$\mathbb{G} = \mathbb{G}_a \otimes \mathbb{G}_b \Longrightarrow$ é um grupo (obedece todas as propriedades de um grupo) com $h = h_a h_b$ elementos e é denominado grupo de produto direto

$\mathbb{G} = \mathbb{G}_a \otimes \mathbb{G}_b \Longrightarrow$ Grupo de ordem $h = h_a h_b$ e elementos $\{\mathrm{E}, A_2, \cdots, A_{h_a}, B_2, \cdots, B_{h_b}, A_2 B_2, \cdots, A_{h_a} B_{h_b}\}$

Os produtos diretos das matrizes que representam as representações irredutíveis dos grupos componentes formam representações irredutíveis do grupo de produto direto.

Lucy V.C. Assali

Grupos de Produto Direto

Caracteres das representações irredutíveis do Grupo de Produto Direto

$\mathbb{G}_a \Longrightarrow$ Grupo de ordem h_a e elementos $\{\mathrm{E}, A_2, \cdots, A_{h_a}\} \quad \Longrightarrow \quad \chi^a(A_k) \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{\Gamma}^a(A_k)$

$\mathbb{G}_b \Longrightarrow$ Grupo de ordem h_b e elementos $\{\mathrm{E}, B_2, \cdots, B_{h_b}\} \quad \Longrightarrow \quad \chi^b(B_l) \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{\Gamma}^b(B_l)$

$\mathbb{G} = \mathbb{G}_a \otimes \mathbb{G}_b \Longrightarrow$ Grupo de ordem $h = h_a h_b$ e elementos $\{\mathrm{E}, A_2, \cdots, A_{h_a}, B_2, \cdots, B_{h_b}, A_2B_2, \cdots, A_{h_a}B_{h_b}\}$

$$\Longrightarrow \quad \chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{\Gamma}^a(A_k) \otimes \boldsymbol{\Gamma}^b(B_l)$$

$$\boxed{\boldsymbol{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}}$$

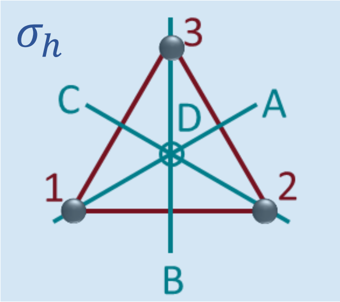
$$\begin{bmatrix}\text{caracter de uma RI do gru–}\\ \text{po de produto direto}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{produto dos caracteres das}\\ \text{RI dos grupos componentes}\end{bmatrix}$$

Lucy V.C. Assali

Grupos de Produto Direto

Exemplo: Vamos considerar o triângulo equilátero, só que agora ele é tridimensional $\Longrightarrow$ espessura finita

$\Longrightarrow$ face superior é idêntica à face inferior $\Longrightarrow$ operação de reflexão σ_h no plano do triângulo



Grupo C_{1h} (ou C_s): formado pela operação de reflexão σ_h e a operação identidade $\Longrightarrow$ é abeliano de ordem 2 $\Longrightarrow$ duas classes e duas representações irredutíveis unidimensionais.

tabela de multiplicação

	E	σ_h
E	E	σ_h
σ_h	σ_h	E

tabela de caracteres

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	-1

Aplicação de uma operação do grupo D_3 e uma operação do grupo C_{1h}, em qualquer ordem: leva o triângulo a configurações finais equivalentes $\Longrightarrow$ cada operação de C_{1h} comuta com todas do grupo D_3 $\Longrightarrow$ o grupo de produto direto $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$

Lucy V.C. Assali

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^{a}(A_k)\chi^{b}(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	−1

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

$$\Longrightarrow \begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \\ \multicolumn{2}{c}{\begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1} \\ 1 \quad -1 \end{bmatrix}} \end{array} \begin{array}{ccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 \\ \multicolumn{3}{c}{\begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1 \quad 1} \\ 1 \quad 1 \quad -1 \\ 2 \quad -1 \quad 0 \end{bmatrix}} \end{array} = \begin{array}{cccccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 & \sigma_h & 2C_3\sigma_h & 3C_2\sigma_h \\ \multicolumn{6}{c}{\begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{bmatrix}} \end{array}$$

Lucy V. C. Assali

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	−1

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

$$\begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \end{array} \qquad \begin{array}{ccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 \end{array} \qquad \begin{array}{cccccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 & \sigma_h & 2C_3\sigma_h & 3C_2\sigma_h \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1} \\ 1 \quad -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \boxed{1 \quad 1 \quad -1} \\ 2 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \boxed{1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1} \\ \\ \\ \\ \end{bmatrix}$$

Lucy V. C. Assali

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	− 1

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

$$\Longrightarrow \begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \\ \end{array} \begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1} \\ 1 \quad -1 \end{bmatrix} \begin{array}{c} \mathrm{E} \quad 2C_3 \quad 3C_2 \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ \boxed{2 \quad -1 \quad 0} \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \mathrm{E} \quad 2C_3 \quad 3C_2 \quad \sigma_h \quad 2C_3\sigma_h \quad 3C_2\sigma_h \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ \boxed{2 \quad -1 \quad 0 \quad 2 \quad -1 \quad 0} \\ \\ \\ \end{bmatrix}$$

Lucy V. C. Assali

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	− 1

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

$$\Longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \boxed{1 \quad -1} \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 \end{array} \\ \begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1 \quad 1} \\ 1 \quad 1 \quad -1 \\ 2 \quad -1 \quad 0 \end{bmatrix} \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 & \sigma_h & 2C_3\sigma_h & 3C_2\sigma_h \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ & & & & & \\ & & & & & \end{bmatrix} \end{array}$$

Lucy V. C. Assali

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	−1

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

$$\Longrightarrow \begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \\ \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{array}{ccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{array}{cccccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 & \sigma_h & 2C_3\sigma_h & 3C_2\sigma_h \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ & & & & & \end{bmatrix}$$

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e $C_{1h} \Longrightarrow$

$$D_3 = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2\} \text{ e } C_{1h} = \{\mathrm{E}, \sigma_h\}$$

Tabela de caracteres do grupo D_{3h}: construída pelo produto dos caracteres das representações irredutíveis constantes nas tabelas de caracteres dos dois grupos:

$$\boxed{\chi^{(a\otimes b)}(A_k B_l) = \chi^a(A_k)\chi^b(B_l)}$$

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h} = \{\mathrm{E}, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2C_3\sigma_h, 3C_2\sigma_h\}$

Como construir? Imaginar os caracteres das tabelas dos grupos C_{1h} e D_3 como sendo elementos de matrizes 2×2 e 3×3 e a tabela de caracteres do grupo D_{3h} pode ser concebida como sendo uma matriz resultante do produto direto entre as matrizes dos dois grupos componentes.

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	−1

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

$$\Longrightarrow \begin{array}{cc} \mathrm{E} & \sigma_h \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \boxed{1 \quad -1} \end{bmatrix} \begin{array}{ccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ \boxed{2 \quad -1 \quad 0} \end{bmatrix} = \begin{array}{cccccc} \mathrm{E} & 2C_3 & 3C_2 & \sigma_h & 2C_3\sigma_h & 3C_2\sigma_h \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ \boxed{2 \quad -1 \quad 0 \quad -2 \quad 1 \quad 0} \end{bmatrix}$$

Grupos de Produto Direto

Grupo $D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$: 12 operações de simetria resultantes do produto direto entre as operações dos grupos D_3 e C_{1h} $\Longrightarrow$

$$\{\mathrm{E},\, 2C_3,\, 3C_2,\, \sigma_h,\, 2\underbrace{C_3\sigma_h}_{S_3},\, 3\underbrace{C_2\sigma_h}_{\sigma_\mathrm{v}}\}$$

C_{1h}	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	-1

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

$\Longrightarrow$

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_\mathrm{v}$
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

Grupos de Produto Direto

$$C_{2h} = C_2 \otimes C_i \qquad D_{2h} = D_2 \otimes C_i \qquad T_h = T \otimes C_i$$

$$C_{4h} = C_4 \otimes C_i \qquad D_{4h} = D_4 \otimes C_i \qquad O_h = O \otimes C_i$$

$$C_{6h} = C_6 \otimes C_i \qquad D_{6h} = D_6 \otimes C_i \qquad C_{3h} = C_3 \otimes C_{1h}$$

$$S_6 = C_3 \otimes C_i \qquad D_{3d} = D_3 \otimes C_i \qquad D_{3h} = D_3 \otimes C_{1h}$$