


LQES	LQES INDEX
	<p>TABELA DE CARACTERES DOS GRUPOS PONTUAIS DE SIMETRIA</p> <p>Editoria do LQES Website</p>

O uso da Teoria dos Grupos, em Química, é bastante extenso. Hoje, sem sombra de dúvida, deparamo-nos com situações nas quais um sem-número de estudos realizados tem como base considerações rigorosas sobre simetria. Assim, fica clara a importância consagrada pelo químico moderno à Teoria dos Grupos, quer no estudo das reações químicas, nas espectroscopias (infravermelho, Raman, eletrônica), no estudo dos orbitais moleculares, quer na cristalografia, para ficarmos com os mais evidentes.

Neste LQES INDEX poderão ser encontradas as Tabelas de Caracteres para os principais grupos pontuais de simetria. Para facilitarmos o uso deste material, fazemos abaixo a sua apresentação.

Tabela 1. Apresentação dos campos que constituem uma Tabela de Caracteres.

CAMPO 1 Símbolo do grupo usando a notação de Schoenflies	CAMPO 2 Operações e classes de simetria do grupo		
CAMPO 3 Representações irreduzíveis	CAMPO 4 Caracteres das representações irreduzíveis	CAMPO 5 Funções de primeira ordem (translações T_x , T_y e T_z e rotações R_x , R_y e R_z) que formam os conjuntos de base para a representação irreduzível do grupo designado na mesma linha.	CAMPO 6 Funções de segunda ordem que formam os conjuntos de base para a representação irreduzível do grupo designado na mesma linha

Os símbolos utilizados para as operações de simetria são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Símbolos utilizados e respectivas operações de simetria.

Operação de simetria	Descrição
E	Identidade.
C_n^m	Rotação de $2\pi m/n$ ao redor de um eixo de ordem n (o expoente m é colocado para distinguir seguidas rotações ao redor de um mesmo eixo pertencendo à classes de simetria diferentes). O eixo que tem a ordem mais elevada (maior valor de n) é designado como eixo principal; os eixos de ordem 2, perpendiculares ao eixo principal, são representados como C_2 .
σ	Reflexão: σ_h representa uma reflexão através de plano perpendicular ao eixo de maior ordem (principal); σ_v representa uma reflexão através de um plano contendo o eixo principal e, σ_d uma reflexão através do plano que contém o eixo principal e bissetor de dois eixos C_2' .
S_n^m	Rotação de $2\pi m/n$ seguida de uma reflexão através de um plano perpendicular ao eixo de rotação.
i	Inversão em relação ao centro de simetria.

Para as representações irredutíveis, os símbolos são representados tendo como base as seguintes regras:

- A e B são representações irredutíveis de dimensão 1, E de dimensão 2, T de dimensão 3.
- A é uma representação irredutível, cujo caractere na rotação ao redor do eixo principal é 1 e B é uma representação irredutível, cujo caractere para a mesma operação é -1 .
- Se a molécula possui um centro de simetria, os índices g ou u são utilizados de modo que os caracteres na operação de inversão sejam positivos ou negativos.
- Haverá sempre uma representação irredutível, totalmente simétrica, na qual todos os caracteres são 1. Esta é uma representação A, e será representada por A_1 ou A' (com um índice g se a molécula possui um centro de simetria), se houver diversas representações irredutíveis de espécie A.

Nas obras citadas nas referências (1,2) poderão ser encontrados não só todo o desenvolvimento da Teoria dos Grupos, mas também exemplos de sua aplicação em Química.

Tabelas de Caracteres dos Grupos Pontuais

C_3	I	$\sigma(xy)$		
A'	+1	+1	T_x, T_y, R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
A''	+1	-1	T_z, R_x, R_y	α_{yz}, α_{xz}

C_2	I	$C_2(z)$		
A	+1	+1	T_z, R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
B	+1	-1	T_x, T_y, R_x, R_y	α_{yz}, α_{xz}

C_i	I	i		
A_g	+1	+1	R_x, R_y, R_z	Todos os componentes de a
A_u	+1	-1	T_x, T_y, T_z	

C_{2v}	I	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$		
A_1	+1	+1	+1	+1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B_1	+1	-1	+1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B_2	+1	-1	-1	+1	T_y, R_x	α_{yz}

C_{3v}	I	$2C_3(z)$	$3\sigma_v$		
A_1	+1	+1	+1	T_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	-1	R_z	
E	+2	-1	0	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$	$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$

C_{4v}	I	$2C_4(z)$	$C_2^2 \equiv C_2'$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_1	+1	+1	+1	+1	+1	T_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	+1	-1	-1	R_z	
B_1	+1	-1	+1	+1	-1		$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$
B_2	+1	-1	+1	-1	+1		α_{xy}
E	+2	0	-2	0	0	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$

$C_{\infty v}$	I	$2C_{\infty}^{\phi}$	$2C_{\infty}^{2\phi}$	$2C_{\infty}^{3\phi}$...	∞C_{∞}^{ν}		
Σ^+	+1	+1	+1	+1	...	+1	T_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
Σ^-	+1	+1	+1	+1	...	-1	R_z	
Π	+2	$2 \cos \phi$	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 3\phi$...	0	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
Δ	+2	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 2 \cdot 2\phi$	$2 \cos 3 \cdot 2\phi$...	0		
Φ	+2	$2 \cos 3\phi$	$2 \cos 2 \cdot 3\phi$	$2 \cos 3 \cdot 3\phi$...	0		$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$
...		

C_{2h}	I	$C_2(z)$	$\sigma_h(xy)$	i		
A_g	+1	+1	+1	+1	R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
A_u	+1	+1	-1	-1	T_z	
B_g	+1	-1	-1	+1	R_x, R_y	α_{yz}, α_{xz}
B_u	+1	-1	+1	-1	T_x, T_y	

D_3	I	$2C_3(z)$	$3C_2$		
A_1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	-1	T_z, R_z	
E	+2	-1	0	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$	$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$

$D_{2d} \equiv V_d$	I	$2S_4(z)$	$S_4^2 \equiv C_2'$	$2C_2$	$2\sigma_d$		
A_1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	+1	-1	-1	R_z	
B_1	+1	-1	+1	+1	-1		$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$
B_2	+1	-1	+1	-1	+1	T_z	α_{xy}
E	+2	0	-2	0	0	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$

D_{3d}	I	$2S_6(z)$	$2S_6^2 \equiv 2C_3$	$S_6^3 \equiv S_2 \equiv i$	$3C_2$	$3\sigma_d$		
A_{1g}	+1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_{1u}	+1	-1	+1	-1	+1	-1		
A_{2g}	+1	+1	+1	+1	-1	-1	R_z	
A_{2u}	+1	-1	+1	-1	-1	+1	T_z	
E_g	+2	-1	-1	+2	0	0	(R_x, R_y)	$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
E_u	+2	+1	-1	-2	0	0	(T_x, T_y)	

D_{4d}	I	$2S_8(z)$	$2S_8^2 \equiv 2C_4$	$2S_8^3$	$S_8^4 \equiv C_2''$	$4C_2$	$4\sigma_d$		
A_1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	R_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1		
B_1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1		
B_2	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	T_z	$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$
E_1	+2	$+\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	-2	0	0		
E_2	+2	0	-2	0	+2	0	0	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
E_3	+2	$-\sqrt{2}$	0	$+\sqrt{2}$	-2	0	0		

$D_{2h} \equiv V_h$	I	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	i	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$		
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_u	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1		
B_{1g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1		
B_{1u}	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	T_z	α_{xy}
B_{2g}	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1		
B_{2u}	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	R_y	α_{xz}
B_{3g}	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1		
B_{3u}	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	T_y	α_{yz}

D_{3h}	I	$2C_3(z)$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$			
A_1'	+1	+1	+1	+1	+1	+1	R_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$	
A_1''	+1	+1	+1	-1	-1	-1			
A_2'	+1	+1	-1	+1	+1	-1			
A_2''	+1	+1	-1	-1	-1	+1	T_z	$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$	
E'	+2	-1	0	+2	-1	0			
E''	+2	-1	0	-2	+1	0	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$	

D_{4h}	I	$2C_4(z)$	$C_4^2 \equiv C_2''$	$2C_2$	$2C_2'$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$2S_4$	$S_2 \equiv i$		
A_{1g}	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	R_z	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_{1u}	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2g}	+1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1		
A_{2u}	+1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	T_z	$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$
B_{1g}	+1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1		
B_{1u}	+1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	T_z	α_{xy}
B_{2g}	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	+1		
B_{2u}	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
E_g	+2	0	-2	0	0	-2	0	0	0	+2		
E_u	+2	0	-2	0	0	+2	0	0	0	-2	(T_x, T_y)	

D_{5h}	I	$2C_5(z)$	$2C_5^2$	σ_h	$5C_2$	$5\sigma_v$	$2S_5$	$2S_5^3$		
A_1'	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_1''	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1		
A_2'	+1	+1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	R_z	
A_2''	+1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	T_z	
E_1'	+2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	+2	0	0	$+2 \cos 72^\circ$	$+2 \cos 144^\circ$	(T_x, T_y)	
E_1''	+2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	-2	0	0	$-2 \cos 72^\circ$	$-2 \cos 144^\circ$	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
E_2'	+2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	+2	0	0	$+2 \cos 144^\circ$	$+2 \cos 72^\circ$		$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$
E_2''	+2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	-2	0	0	$-2 \cos 144^\circ$	$-2 \cos 72^\circ$		

T_d	I	$8C_3$	$6\sigma_d$	$6S_4$	$3S_4^2 \equiv 3C_2$		
A_1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$
A_2	+1	+1	-1	-1	+1		
E	+2	-1	0	0	+2		$(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} - 2\alpha_{zz}, \alpha_{xx} - \alpha_{yy})$
F_1	+3	0	-1	+1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
F_2	+3	0	+1	-1	-1	(T_x, T_y, T_z)	$(\alpha_{xy}, \alpha_{yz}, \alpha_{xz})$

O_h	I	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_4^2 \equiv 3C_2'$	$S_2 \equiv i$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		
A_{1g}	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$
A_{1u}	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1		
A_{2u}	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1		
E_g	+2	-1	0	0	+2	+2	0	-1	+2	0		$(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} - 2\alpha_{zz}, \alpha_{xx} - \alpha_{yy})$
E_u	+2	-1	0	0	+2	-2	0	+1	-2	0		
F_{1g}	+3	0	-1	+1	-1	+3	+1	0	-1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
F_{1u}	+3	0	-1	+1	-1	-3	-1	0	+1	+1	(T_x, T_y, T_z)	
F_{2g}	+3	0	+1	-1	-1	+3	-1	0	-1	+1		$(\alpha_{xy}, \alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
F_{2u}	+3	0	+1	-1	-1	-3	+1	0	+1	-1		

D_{6h}	I	$2C_6(z)$	$2C_6^2 \equiv 2C_3$	$C_6^3 \equiv C_2'$	$3C_2$	$3C_2'$	σ_h	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	$2S_6$	$2S_3$	$S_6^3 \equiv S_2 \equiv i$		
A_{1g}	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
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	T_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	+1	-1	-2	0	0	-2	0	0	-1	+1	+2	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
E_{1u}	+2	+1	-1	-2	0	0	+2	0	0	+1	-1	-2	(T_x, T_y)	
E_{2g}	+2	-1	-1	+2	0	0	+2	0	0	-1	-1	+2		$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$
E_{2u}	+2	-1	-1	+2	0	0	-2	0	0	+1	+1	-2		

$D_{\infty h}$	I	$2C_{\infty}^{\phi}$	$2C_{\infty}^{2\phi}$	$2C_{\infty}^{3\phi}$...	σ_h	∞C_2	$\infty \sigma_v$	$2S_{\infty}^{\phi}$	$2S_{\infty}^{2\phi}$...	$S_2 \equiv i$		
Σ_g^+	+1	+1	+1	+1	...	+1	+1	+1	+1	+1	...	+1		$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
Σ_u^+	+1	+1	+1	+1	...	-1	-1	+1	-1	-1	...	-1	T_z	
Σ_g^-	+1	+1	+1	+1	...	+1	-1	-1	+1	+1	...	+1	R_z	
Σ_u^-	+1	+1	+1	+1	...	-1	+1	-1	-1	-1	...	-1		
Π_g	+2	$2 \cos \phi$	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 3\phi$...	-2	0	0	$-2 \cos \phi$	$-2 \cos 2\phi$...	+2	(R_x, R_y)	$(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$
Π_u	+2	$2 \cos \phi$	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 3\phi$...	+2	0	0	$+2 \cos \phi$	$+2 \cos 2\phi$...	-2	(T_x, T_y)	
Δ_g	+2	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 4\phi$	$2 \cos 6\phi$...	+2	0	0	$+2 \cos 2\phi$	$+2 \cos 4\phi$...	+2		$(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$
Δ_u	+2	$2 \cos 2\phi$	$2 \cos 4\phi$	$2 \cos 6\phi$...	-2	0	0	$-2 \cos 2\phi$	$-2 \cos 4\phi$...	-2		
Φ_g	+2	$2 \cos 3\phi$	$2 \cos 6\phi$	$2 \cos 9\phi$...	-2	0	0	$-2 \cos 3\phi$	$-2 \cos 6\phi$...	+2		
Φ_u	+2	$2 \cos 3\phi$	$2 \cos 6\phi$	$2 \cos 9\phi$...	+2	0	0	$+2 \cos 3\phi$	$+2 \cos 6\phi$...	-2		
...		

BIBLIOGRAFIA

1. E.B. Wilson, J.C. Decius and P. C. Cross, **Molecular Vibrations**, McGraw-Hill, New York (1955).
2. S.F.A. Cotton, **Chemical Applications of the Group Theory**, John Wiley & Sons, New York, (1970). (existem várias outras edições)