



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

**Programa de Pós-Graduação em Química
Departamento de Química**

Disciplina QUIM7007 – ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ELETRÔNICA

GRUPOS DE SIMETRIA MOLECULAR: Caracteres e Tabelas de Caracteres

Prof. Dr. João Batista Marques Novo

Sumário

Disciplina QUIM7007 – ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ELETRÔNICA.....	1
GRUPOS DE SIMETRIA MOLECULAR: Caracteres e Tabelas de Caracteres.....	1
Prof. Dr. João Batista Marques Novo.....	1
REPRESENTAÇÃO MATRICIAL DE OPERAÇÕES DE SIMETRIA.....	3
Representações matriciais reduzíveis e irreduzíveis.....	4
CARACTERES E TABELAS DE CARACTERES.....	7
Decomposição de representações reduzíveis.....	10
Produto direto das representações.....	11
Descendência de grupos (subgrupos).....	11
REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	11

REPRESENTAÇÃO MATRICIAL DE OPERAÇÕES DE SIMETRIA

Vetor: série de números escritos numa linha ou coluna. Ex: $[1 \quad 3 \quad \cos 2\pi]$

Matriz: arranjo retangular de série de números entre 2 colchetes. Ex: $\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$

Multiplicação de matriz com vetor: $\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32 \\ 16 \\ 16 \end{bmatrix}$

Multiplicação de matriz por matriz: $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 5 \\ 5 & 9 & 13 \\ 1 & 4 & 7 \end{bmatrix}$

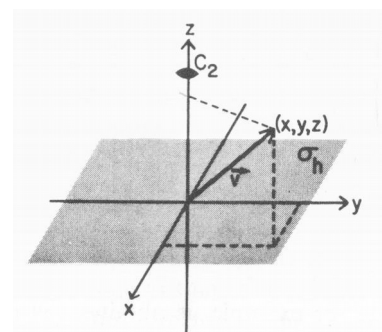
Pode-se representar as operações de simetria com matrizes. Exemplos: Para grupo C_{2h}

$$\begin{array}{l} \text{E.} \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \text{i} \quad \mathbf{v}_1 = -\mathbf{v}_1 \\ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1 \\ -y_1 \\ -z_1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \sigma_h \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ -z_1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} C_2(z) \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_3 \\ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1 \\ -y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} \end{array}$$



Estas 4 matrizes formam um grupo matemático que obedece a mesma tabela de multiplicação que as operações de simetria. Exemplo:

$$C_2 \cdot \sigma_h = i$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Obs: $S_2 = i$

Generalizando: Matriz para representar rotação de um eixo de ângulo θ :

Sistema de coordenadas mostrando o efeito de rotação do vetor \mathbf{r}_1 através de ângulo θ , para resultar no vetor \mathbf{r}_2

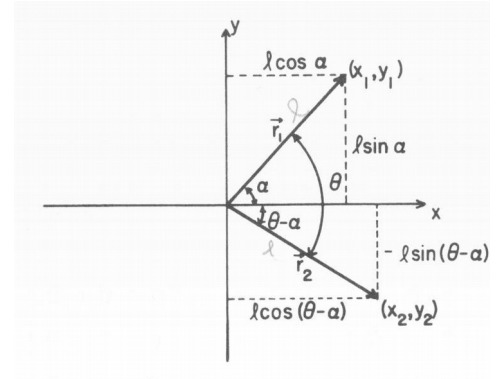
$$\begin{cases} x_1 = l \cos \alpha \\ y_1 = l \sin \alpha \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_2 = l \cos(\theta - \alpha) = l \cos \theta \cos \alpha + l \sin \theta \sin \alpha \\ y_2 = -l \sin(\theta - \alpha) = -l \sin \theta \cos \alpha + l \cos \theta \sin \alpha \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_2 = x_1 \cos \theta + y_1 \sin \theta \\ y_2 = -x_1 \sin \theta + y_1 \cos \theta \end{cases} \quad \text{ou}$$

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$R_\theta(z) \cdot \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ Representação matricial de rotação de ângulo θ para eixo colinear com eixo z



Exemplo:

Para C_2 colinear com z: $\theta = 180^\circ$, portanto $C_2(z) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Representações matriciais reduzíveis e irreduzíveis

Matriz de blocos diagonal: é aquela que tem blocos de números ao longo da diagonal e zeros nos outros lugares.

Propriedade da multiplicação de matrizes de blocos: Exemplo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 7 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 1 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Pode-se desdobrar em diferentes multiplicações de matrizes menores:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 7 \\ 8 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 10 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \quad [1] \cdot [3] = [3]$$

Cada uma destas matrizes obedece às regras de grupo matemático, ou seja, tem a matriz identidade, a inversa e tem-se a multiplicação comutável. Também deve obedecer à transformação de similaridade

Através de transformação de similaridade, é possível obter, a partir de uma matriz maior X (matriz reduzível), uma matriz conjugada Y (matriz irreduzível) que tem a forma de uma matriz de blocos diagonal. Obtêm-se assim uma série de matrizes que representam as várias operações do grupo pontual:

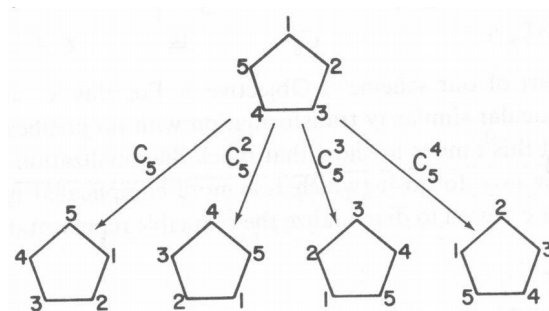
Transformação de similaridade: $Y = Q^{-1} \cdot X \cdot Q$

Existem matrizes Q que quando operadas numa transformação de similaridade fornece matrizes conjugadas Y na forma de matrizes de blocos diagonal.

Y é uma matriz conjugada na forma de matriz de blocos; cada bloco é uma representação matricial irreduzível, que ainda obedecem às mesmas regras de multiplicação de X.

Exemplo: Um esquema para gerar as representações reduzíveis das operações C_5 , C_5^2 e C_5^3 :

$$C_5 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}$$



$$C_5^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_5^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Obs: Vale a multiplicação $C_5 \cdot C_5^2 = C_5^3$

Existem matrizes Q e Q^{-1} que quando operadas numa transformação de similaridade, produzem matrizes conjugadas diagonalizadas em blocos. Estas matrizes têm forma complicada (ver pág. 45 do Harris) e não será mostrada aqui como se obtêm Q e Q^{-1} .

$$C'_5 = Q^{-1} \cdot C_5 \cdot Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\pi/5 & \sin 2\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin 2\pi/5 & \cos 2\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos 4\pi/5 & \sin 4\pi/5 \\ 0 & 0 & 0 & -\sin 4\pi/5 & \cos 4\pi/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & & \\ & B_1 & \\ & & C_1 \end{bmatrix}$$

$$C_5^{2'} = Q^{-1} \cdot C_5^2 \cdot Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 4\pi/5 & \sin 4\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin 4\pi/5 & \cos 4\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos 2\pi/5 & -\sin 2\pi/5 \\ 0 & 0 & 0 & \sin 2\pi/5 & \cos 2\pi/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_2 & & \\ & B_2 & \\ & & C_2 \end{bmatrix}$$

$$C_5^{3'} = Q^{-1} \cdot C_5^3 \cdot Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 4\pi/5 & -\sin 4\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & \sin 4\pi/5 & \cos 4\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos 2\pi/5 & \sin 2\pi/5 \\ 0 & 0 & 0 & -\sin 2\pi/5 & \cos 2\pi/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_3 & & \\ & B_3 & \\ & & C_3 \end{bmatrix}$$

$C_5^1 \cdot C_5^{2'}$ e $C_5^{3'}$ são as matrizes conjugadas na forma de blocos.

Cada bloco é uma representação irreduzível pois não há transformação de similaridade que possa diagonalizá-las posteriormente

Ainda vale $C_5^1 \cdot C_5^{2'} = C_5^{3'}$, ou seja, vale a multiplicação para cada bloco das matrizes conjugadas.

Exemplo: $C_1 \cdot C_2 = C_3$

Importante:

- 1) As matrizes irreduzíveis ainda conservam as mesmas propriedades das matrizes reduzíveis originais;
- 2) Existem infinitas possibilidades de matrizes reduzíveis que podem ser reduzidas a um número finito de representações irreduzíveis (Exemplo: Existem infinitas vibrações complexas nas moléculas que podem ser reduzidas a um número finito de vibrações fundamentais, chamadas de modos normais de vibração das moléculas).

Exercícios do Harris: Cap 1, 1-12 e 1-14

CARACTERES E TABELAS DE CARACTERES

Uma simplificação maior: Ao invés de se trabalhar com as matrizes das representações irreduzíveis, trabalharemos com o caráter da representação irreduzível (traço da matriz irreduzível). Obs: caráter = traço = soma dos elementos diagonais da matriz

Forma rudimentar da Tabela de caracteres do grupo C_{3v} : Exemplo: NH_3

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''	→ Conjunto completo de operações de simetria
Γ_1	1	1	1	1	1	1	
Γ_2	1	1	1	-1	-1	-1	
Γ_3	2	-1	-1	0	0	0	

↓

Nomes das representações irreduzíveis: Número de representações irreduzíveis = 3 = número de classes de operações no grupo pontual (det. através de transformação de similaridade). Em quase todos os grupos, operações que têm o mesmo efeito ou comportamento (traço) estão na mesma classe.

Geralmente: $\left\{ \begin{array}{c} C_n e C_n^{n-1} \\ \sigma_v \\ \sigma_d \\ \sigma_h \end{array} \right\}$ formam classes distintas.

Tem-se assim a tabela de caracteres C_{3v} condensada:

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

Símbolos de Mulliken para os nomes das representações irreduzíveis:

- unidimensional: **A** quando o caráter sob a operação C_n do eixo principal for +1 ou **B** quando o caráter sob a operação C_n do eixo principal for -1
- bidimensional: **E** (não confundir com operação identidade)
- tridimensional: **T** ou **F**

A dimensão de uma representação irreduzível é a dimensão de sua matriz (no. de linhas ou colunas)

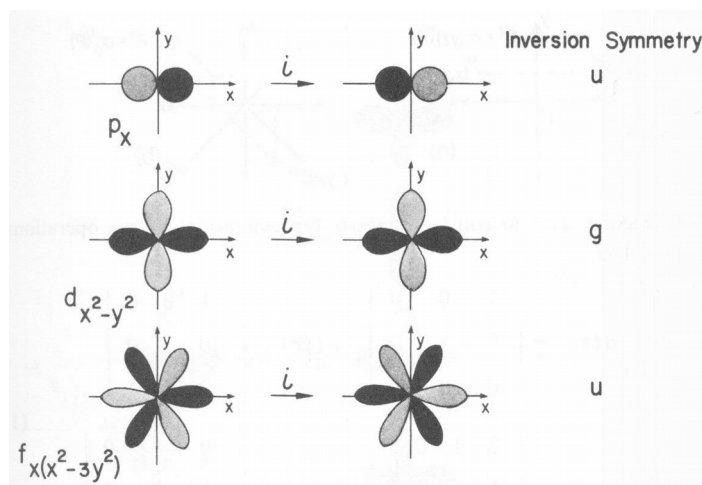
- subscritos **1, 2, 3** etc. junto aos símbolos A, B, E ou T são arbitrários

- subscritos : **g** (gerade) quando for simétrico (caráter +1) com respeito à inversão **u** (ungerade) quando for anti-simétrico com respeito à inversão

Significado da simetria com respeito à inversão (subscritos g e u): paridade

- função par: $f(x) = f(-x)$

- função ímpar: $f(x) = -f(-x)$



- sobrescritos: ' quando for simétrica com respeito à reflexão σ_h

'' quando for anti-simétrica com respeito à reflexão σ_h

Exemplo: Tabela de caracteres do grupo C_{4v} completa:

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$			
A_1	1	1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$	z^3
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z		
B_1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$	$z(x^2 - y^2)$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy	xyz
E	2	0	-2	0	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)	$(xz^2, yz^2), [x(x^2 - 3y^2), y(3x^2 - y^2)]$
$\Gamma_{x,y,z}$	3	1	-1	1	1			

- 5 classes de operações de simetria \rightarrow 5 representações irreduzíveis (obs: $2C_4$ significa que C_4 e C_4^3 têm o mesmo comportamento)

- Funções de base: translações (x, y, z), rotações (R_x, R_y, R_z), funções quadráticas ou cúbicas têm as mesmas propriedades de simetria que os orbitais de mesmo nome. Exemplo: a função de base $x^2 - y^2$ tem a mesma simetria do orbital $d_{x^2-y^2}$ e se transforma como B_1 .

- Função de base z: z forma uma base para a representação irreduzível A_1 .

- Função de base (x,y): Neste grupo, não se consegue separar x de y quando se faz a operação C_4 . (x,y) forma uma base para a representação bidimensional E

- Representação irreduzível E é bidimensional \rightarrow função de base (x,y) entre parênteses

- Representação reduzível $\Gamma_{x,y,z}$ é obtida pela soma de Γ_z com $\Gamma_{x,y}$

- Representação irreduzível da função $\Gamma(xy)$ **não** é obtida pela multiplicação $\Gamma(x,y) \cdot \Gamma(x,y) = E \cdot E =$ representação reduzível

Para entender as funções de base: matrizes para as operações no grupo C_{4v} :

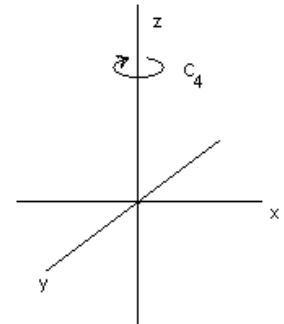
- Translações:

$$\begin{array}{c} E \qquad C_4 \qquad C_4^3 \qquad C_2 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \Gamma_{x,y} \rightarrow & 2 & 0 \\ \Gamma_z \rightarrow & 1 & 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \sigma(xz) \qquad \sigma(yz) \qquad \sigma_d \qquad \sigma'_d \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \Gamma_{x,y} \rightarrow & 0 & 0 \\ \Gamma_z \rightarrow & 1 & 1 \end{array}$$



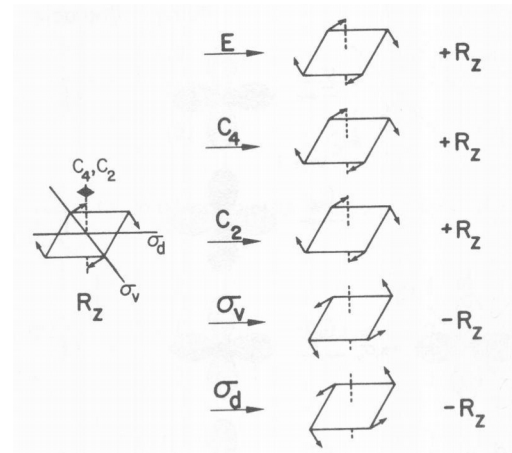
Vetor (x,y) se transforma como representação irreduzível bidimensional E

Vetor z se transforma como representação irreduzível A_1 (representação totalmente simétrica)

- Rotações:

Exemplo: Transformação de R_z pelas operações de simetria do grupo C_{4v} :

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$\Gamma(R_z) = A_2$	1	1	1	-1	-1



- Muitos grupos apresentam caracteres imaginários $\pm i$ ou símbolos ε e ε^* . Para um grupo com eixo principal C_n , $\varepsilon = e^{2\pi i/n}$. Mas $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$; portanto: $\varepsilon = e^{2\pi i/n} = \cos 2\pi/n + i\sin 2\pi/n$ = pares de conjugados complexos \rightarrow geralmente grupos contendo $C_3, C_5, C_6, C_7, C_8, C_9, C_{10}$.

- Grupos pontuais infinitos $C_{\infty v}$ e $D_{\infty h}$: Tem infinitos números de operações e para os nomes das representações irreduzíveis usa-se letras gregas Σ (unidimensional), $\Pi, \Delta, \Phi, \Gamma$, etc (bidimensionais)

- Para grupos esféricos: Usa-se letras S, P, D, F, G, ... com dimensão 1, 3, 5, 7, 9, etc

Decomposição de representações reduzíveis

Para se decompor representações reduzíveis em representações irreduzíveis, usa-se a fórmula:

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R (\chi_R \cdot \chi_i^R \cdot C^R)$$

onde:

a_i = número de vezes que a representação irreduzível aparece na representação reduzível

h = ordem do grupo pontual = soma de todas as operações no grupo

R = uma operação no grupo

χ^R = caráter da operação R na representação reduzível

χ_i^R = caráter da operação R na representação irreduzível

C^R = número de membros na classe à qual a operação R pertence

Exemplos de aplicação:

1. Decompor Γ_{red} no grupo C_{2v} :

$C^R \rightarrow$	C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
	A₁	1	1	1	1
	A₂	1	1	-1	-1
$\chi_i^R \rightarrow$	B₁	1	-1	1	-1
	B₂	1	-1	-1	1
$\chi^R \rightarrow$	Γ_{red}	3	1	3	1

$h = 4$ (ordem do grupo)

$$a(A_1) = \frac{1}{4} (3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot 1 + 3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot 1) = \frac{8}{4} = 2$$

$$a(A_2) = \frac{1}{4} (3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot 1 + 3 \cdot (-1) \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \cdot 1) = 0$$

$$a(B_1) = \frac{1}{4} (3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \cdot 1 + 3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \cdot 1) = \frac{4}{4} = 1$$

$$a(B_2) = \frac{1}{4} (3 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \cdot 1 + 3 \cdot (-1) \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot 1) = 0$$

Portanto $\Gamma_{\text{red}} = 2A_1 + B_1$

2. Decompor Γ_{red} no grupo C_{3v}

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
A₁	1	1	1	
A₂	1	1	-1	
E	2	-1	0	
Γ_{red}	12	0	2	Resposta: $\Gamma_{\text{red}} = 3A_1 + A_2 + 4E$

Produto direto das representações

Multiplica-se os caracteres das duas representações irreduzíveis. Como resultado, tem-se uma representação que pode ser reduzível ou irreduzível.

Exemplo: Para grupo D_3

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$	
A_1	1	1	1	
A_2	1	1	-1	
E	2	-1	0	
$A_1 \times E$	2	-1	0	= E
$A_2 \times E$	2	-1	0	= E
$A_2 \times A_2$	1	1	1	= A_1
$E \times E$	4	1	0	= $A_1 + A_2 + E$

Tabelas contendo produtos diretos: Ver livro do Harris, Apêndice B, pág 479.

Descendência de grupos (subgrupos)

C_2, C_{2h}

D_2, D_{2h}

C_3, C_{3h}, S_6

$C_{3v}, D_3, D_{3d}, D_{3h}$

$C_{4v}, D_4, D_{2d}, D_{4h}$

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci, Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Dover, 1989.