

DESCRIÇÃO DAS TABELAS DE CARACTERES

| T_d | E | $8C_3$ | $3C_2$ | $6S_4$ | $6\sigma_d$ | | | |
|-------|---|--------|--------|--------|-------------|-------------------|---------------------------|--------------------------------------|
| A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $x^2+y^2+z^2$ | xyz |
| 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) | | $[x(z^2-y^2), y(z^2-x^2), zx^2-y^2]$ |
| T_2 | 3 | 0 | -1 | -1 | 1 | (x, y, z) | (xy, xz, yz) | (x^3, y^3, z^3) |
| II | | | I | | | III | IV | V |

Canto esquerdo superior: Símbolo de Schoenflies para o grupo de pontos da molécula.

Área I: Traços das matrizes para cada operação de simetria de cada representação irreduzível.

Área II: Símbolos de Mulliken das representações irreduzíveis, segundo as convenções:

1) As representações A ou B são unidimensionais, E são bidimensionais, T (ou F) são tridimensionais, G são tetradimensionais e H são pentadimensionais.

2) As representações irreduzíveis A são simétricas com relação ao C_n principal ($\chi(C_n) = 1$). As antissimétricas ($\chi(C_n) = -1$) são B .

3) Os índices 1 e 2 indicam representações irreduzíveis simétrica e antissimétrica, respectivamente, e são usados em diferentes situações:

3a) Nos grupos C_{nv} referem-se ao σ_v^{xz} .

3b) Nos grupos D_n referem-se ao $C_2^x \perp$ ao C_n principal.

3c) No grupo octaédrico, O_h , referem-se à operação σ_d .

3d) No grupo tetraédrico, T_d , referem-se à operação S_4 .

4) Os índices 1, 2 e 3 são usados nos grupos D_2 e D_{2h} e indicam quando as operações C_2^z , C_2^y e C_2^x são simétricas nas representações irreduzíveis B_1 , B_2 e B_3 , respectivamente.

5) Linha (') e duas linhas (") indicam uma representação simétrica ou antissimétrica, respectivamente, em relação ao σ_h .

6) Os índices g ou u indicam uma representação simétrica ou antissimétrica, respectivamente, em relação ao centro de inversão, i .

7) Nos grupos $C_{\infty v}$ e $D_{\infty h}$ para as moléculas lineares, as representações unidimensionais são designadas por Σ e as bidimensionais por Π , Δ , Φ , etc.

8) Nas representações Σ dos grupos $C_{\infty v}$ e $D_{\infty h}$ para as moléculas lineares, os índices + e - indicam uma representação irreduzível simétrica e antissimétrica, respectivamente, em relação aos planos $\infty\sigma_v$.

Área III: Indica as representações irreduzíveis às quais pertencem os orbitais p , eixos cartesianos e as rotações em torno desses eixos.

Área IV: Indica as representações irreduzíveis às quais pertencem os orbitais d , os quadrados e os produtos binários dos eixos cartesianos.

Área V: Indica as representações irreduzíveis às quais pertencem os orbitais f .