



Universidade Federal do Ceará
Centro de Ciências
Programa de Pós-Graduação em Química
Caixa Postal 12.200 Tel. 85 3366 9981
CEP: 60.450-970 Fortaleza - Ceará - Brasil

**EXAME DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ (PPGQ-UFC)/2016.1**

DOUTORADO

Data: 18/01/2016 Horário: 14h

Instruções gerais:

- 1. A prova consta de 12 (doze) questões, sendo quatro questões de Conhecimentos Gerais em Química e oito questões de Conhecimentos Específicos em Química. Dentre as questões de Conhecimentos Específicos, APENAS as quatro questões assinaladas pelo candidato serão consideradas para correção.**
- 2. As questões de Conhecimentos Específicos escolhidas pelos candidatos deverão estar CLARAMENTE assinaladas na tabela da página 6.**
- 3. Para efeito de correção, APENAS oito questões serão corrigidas.**
- 4. A duração da prova será de 4 (quatro) horas.**
- 5. Cada questão deve ser respondida na própria folha (frente e verso) do enunciado. Não serão corrigidas questões fora do espaço reservado às respostas.**
- 6. Somente serão corrigidas as questões respondidas à caneta.**
- 7. A questão redigida em inglês poderá ser respondida em português.**
- 8. Para efeito de consulta, há material suplementar no final da prova.**
- 9. Será permitido o uso de calculadora.**
- 10. NÃO será permitido o uso de celular ou outros aparelhos eletrônicos durante a realização da prova. Portanto, tais aparelhos deverão permanecer desligados.**
- 11. O nome do candidato deverá ser preenchido APENAS na primeira folha do caderno de prova. Os outros espaços serão reservados à Comissão de Seleção. Qualquer tipo de identificação no caderno de prova implicará na desclassificação do candidato.**

NOME DO CANDIDATO

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

CÓDIGO:

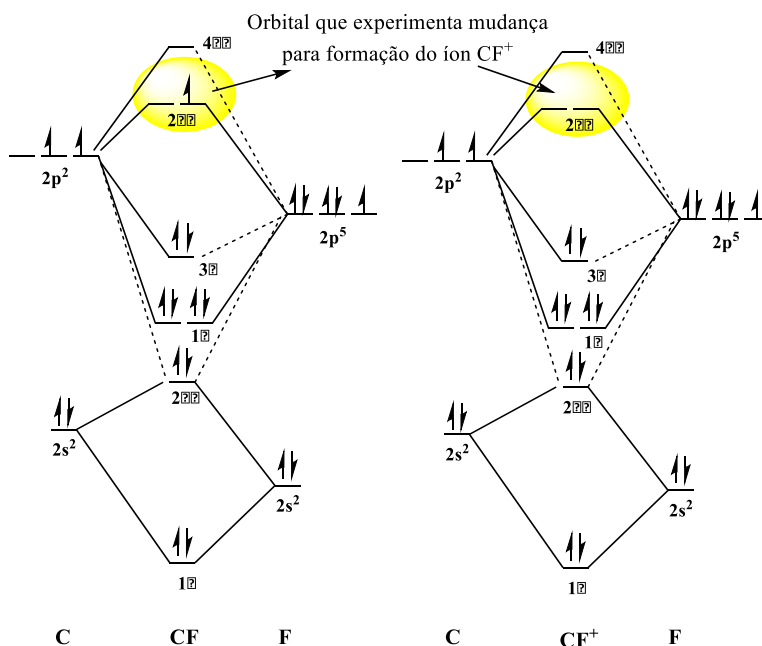
QUESTÃO DE CONHECIMENTOS GERAIS EM QUÍMICA

1ª Questão: Sabendo que os comprimentos de ligação das espécies CF e CF⁺ são, respectivamente, 1,291 Å e 1,173 Å, pede-se:

- a explicação dos diferentes comprimentos de ligação com base no diagrama qualitativo de energia de orbitais moleculares. Apresente o(s) diagrama(s);
- o caráter magnético das duas espécies.

Resolução

- De acordo com os diagramas apresentados abaixo, a retirada de um elétron para formação do íon CF⁺ ocorre em um orbital anti-ligante ($2\pi^*$) da molécula neutra resultando em um aumento da ordem de ligação (OL) de 2,5 na molécula de CF para 3,0 no íon CF⁺. O maior valor de OL justifica o menor comprimento de ligação observado para o íon CF⁺.
- Ainda de acordo com os diagramas apresentados abaixo, a molécula de CF é paramagnética (um elétron não emparelhado nos orbitais $2\pi^*$) e o íon CF⁺ é diamagnético (todos os elétrons estão emparelhados).



RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO DE CONHECIMENTOS GERAIS EM QUÍMICA

2ª Questão: Calculate the concentration and pH of an aqueous solution containing 6.32 g of acetic acid (H_3CCOOH) per liter. $K_{a(\text{H}_3\text{CCOOH})} = 1.8 \times 10^{-5}$.

Resolução

Número de mol de ácido acético = $6,32 \text{ g} / 60 \text{ g/mol} = 0,105 \text{ mol}$ de ácido em 1 litro de solução \Rightarrow $[\text{H}_3\text{CCOOH}] = 0,105 \text{ mol/L}$.

| REAÇÃO | $\text{H}_3\text{CCOOH}_{(aq)}$ + | $\text{H}_2\text{O}_{(l)}$ | \leftrightarrow | $\text{H}_3\text{CCOO}^-_{(aq)}$ + | $\text{H}_3\text{O}^+_{(aq)}$ |
|------------|--------------------------------------|----------------------------|-------------------|------------------------------------|-------------------------------|
| INÍCIO | 0,105 | | | 0 | 0 |
| VARIAÇÃO | -x | | | +x | +x |
| EQUILÍBRIO | 0,105 -x | | | x | x |

ADMITINDO : $0,105 - x = 0,105$

$$K_a = [\text{H}_3\text{CCOO}^-][\text{H}_3\text{O}^+] / [\text{H}_3\text{CCOOH}]$$

$$1,8 \times 10^{-5} = x^2 / 0,105 \Rightarrow x^2 = 1,89 \times 10^{-6} \text{ mol/L} \Rightarrow x = 1,37 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$$

$$0,105 \text{ mol/L} \quad \text{----}100\%$$

$$1,37 \times 10^{-3} \text{ mol/L} \text{----}x \Rightarrow 1,3\% \text{ (aproximação é válida)}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 1,37 \times 10^{-3} \text{ mol/L} \Rightarrow \text{pH} = 2,86$$

RESERVADO À COMISSÃO

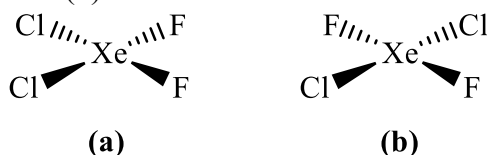
CÓDIGO:

QUESTÃO DE CONHECIMENTOS GERAIS EM QUÍMICA

3ª Questão: Você e seu companheiro de laboratório sintetizaram um composto de formulação XeCl_2F_2 . O seu composto é líquido e o do seu colega é um gás (nas mesmas condições de temperatura e de pressão). Explique como dois compostos com mesma fórmula química podem existir em diferentes fases nas mesmas condições de pressão e temperatura.

Resolução

Dois isômeros geométricos, cis (a) e trans (b), são possíveis para a formulação XeCl_2F_2 . O estudante que sintetizou a molécula (a) obteve o composto líquido ao passo que a molécula (b) corresponde ao gás. As diferentes fases devem-se às diferentes forças intermoleculares: forças de dipolo permanente (forte interação intermolecular), estrutura (a), e forças de dispersão (fraca interação intermolecular), estrutura (b).



CÓDIGO:

QUESTÃO DE CONHECIMENTOS GERAIS EM QUÍMICA

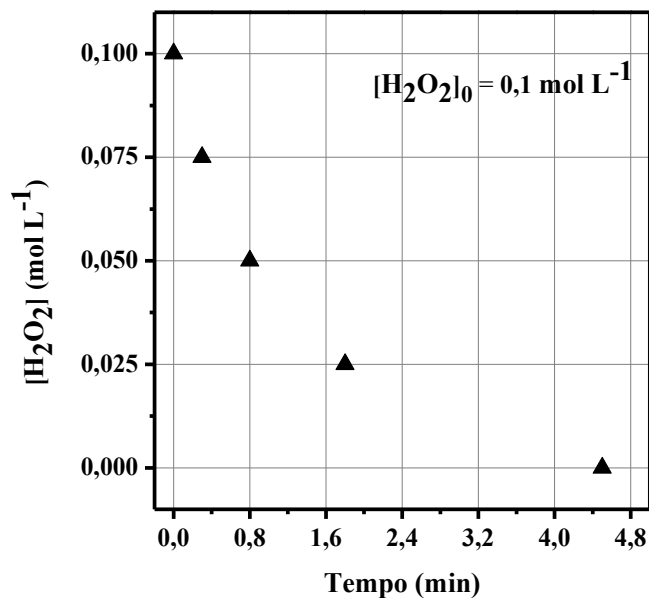
4ª Questão: O gráfico ao lado representa a reação de decomposição de peróxido de hidrogênio a água e oxigênio molecular a 20 °C. Sabendo que o tempo de meia-vida ($t_{1/2}$) da reação independe da concentração inicial, pede-se os valores de:

- a) tempo de meia-vida ($t_{1/2}$, em min);
b) constante de velocidade (k).

Resolução

A reação de decomposição do peróxido de hidrogênio, representada pela equação $\text{H}_2\text{O}_2(\text{l}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g})$, é uma reação de primeira ordem, uma vez que independe da concentração inicial. O tempo de meia-vida ($t_{1/2}$) corresponde ao tempo necessário para que a concentração de uma dada espécie atinja metade do valor da concentração inicial.

Assim, de acordo com o gráfico apresentado, $t_{1/2} = 0,8 \text{ min}$ (a); $k = 0,866 \text{ min}^{-1}$ (b). Para $t = t_{1/2}$, $[\text{A}] = ([\text{A}]_0)/2$, logo $k = [\ln(2)]/t_{1/2} \Rightarrow k = 0,866 \text{ min}^{-1}$.



**QUESTÕES DE
CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS
(ASSINALAR APENAS QUATRO QUESTÕES)**

| Questões | A CORRIGIR |
|-----------------------|-------------------|
| 5^a | |
| 6^a | |
| 7^a | |
| 8^a | |
| 9^a | |
| 10^a | |
| 11^a | |
| 12^a | |

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ANALÍTICA

5ª Questão: 50 mL de uma solução contendo uma mistura de KCl a x mol L⁻¹, KBr a y mol L⁻¹ e KI a z mol L⁻¹ é titulada com AgNO₃ a 0,2025 mol L⁻¹. A curva de titulação de pAg em função do volume de titulante apresenta pontos de inflexão visíveis a 12,0; 30,0 e 38,0 mL de AgNO₃. Determine as concentrações x , y e z , sabendo que: pKps(AgCl) = 9,74; pKps(AgBr) = 12,30; pKps(AgI) = 16,08.

Resolução

Pode-se afirmar, pelos valores de Kps, que no 1º ponto de equivalência ocorrerá a precipitação do AgI (menos solúvel), seguido do AgBr e por último do AgCl.

Assim:

1º ponto de equivalência: foi gasto 12 mL de AgNO₃ 0,2025 mol L⁻¹ para reagir com I⁻

$$[I^-] = \frac{12\text{mL} \times 0,2025\text{mol L}^{-1}}{50\text{mL}} = 0,0486 \text{ mol L}^{-1}$$

2º ponto de equivalência: foi gasto (30 - 12) = 18 mL de AgNO₃ 0,2025 mol L⁻¹ para reagir com Br⁻

$$[Br^-] = \frac{18\text{mL} \times 0,2025\text{mol L}^{-1}}{50\text{mL}} = 0,0729 \text{ mol L}^{-1}$$

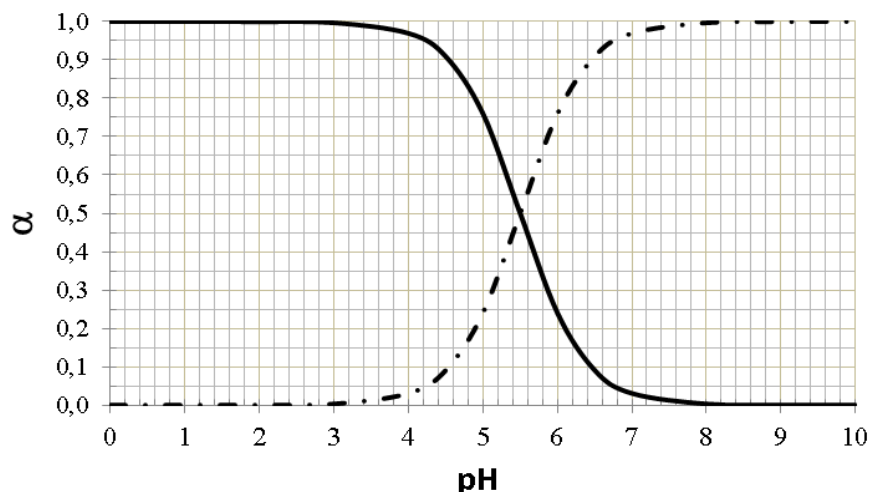
3º ponto de equivalência: foi gasto (38 - 30) = 8 mL de AgNO₃ 0,2025 mol L⁻¹ para reagir com Cl⁻

$$[Cl^-] = \frac{8\text{mL} \times 0,2025\text{mol L}^{-1}}{50\text{mL}} = 0,0324 \text{ mol L}^{-1}$$

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ANALÍTICA

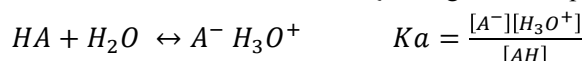
6ª Questão: O gráfico abaixo representa a variação da fração de espécies (α) em função do pH. Considere que o diagrama seja válido para as espécies, HA e A^- , presentes em uma solução do ácido HA a $0,100 \text{ mol L}^{-1}$ quando pequenos incrementos de volume de uma base forte são adicionados. Considere que o volume total da solução não varia com a adição de base.



- a) Com base no diagrama de distribuição de espécies e usando as equações de equilíbrio apropriadas, determine o K_a para o ácido HA e o K_b para sua base conjugada A^- ;
 b) A fração de cada espécie em um determinado pH pode ser avaliada utilizando indicadores de pH. Quais são as frações (α) de HA e de A^- , e suas concentrações, em mol L^{-1} , se um indicador (HInd) com pK_a de 4,9 (para o qual a forma ácida é azul e a forma básica é vermelha) estiver com 65% de sua forma vermelha, na solução?

Resolução

a) Como o ácido HA é um ácido fraco sofre dissociação segundo o equilíbrio:

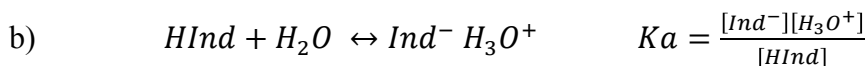


Quando $[A^-] = [HA]$ temos que $[H_3O^+] = K_a$; pelo gráfico observa-se que $[A^-] = [HA]$ em $pH = 5,5$.

Assim, temos $pH = pK_a = 5,5$ que leva a um $K_a = 3,16 \times 10^{-6}$

Pela relação: $K_w = K_a \cdot K_b$ podemos encontrar K_b para a base conjugada A^- :

$$K_b = \frac{1,0 \times 10^{-14}}{3,16 \times 10^{-6}} = 3,16 \times 10^{-9}$$



Se 65% do indicador está na forma vermelha (Ind^-) tem-se 35% dele na forma azul (HInd), assim:

$$[H_3O^+] = K_a \frac{[HInd]}{[Ind^-]} = 1,25 \times 10^{-5} \cdot \frac{35}{65} = 6,7 \times 10^{-6}; \quad pH = 5,2$$

Pelo gráfico verifica-se que em $pH = 5,2$ a $\alpha(HA) = 0,65$ e $\alpha(A^-) = 0,35$

$$\alpha(HA) = [HA]/C_t = 0,65 \times 0,100 = 0,065 \text{ mol L}^{-1}$$

$$\alpha(A^-) = [A^-]/C_t = 0,35 \times 0,100 = 0,035 \text{ mol L}^{-1}$$

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE FÍSICO-QUÍMICA

7ª Questão: Quando se queima completamente 6,84 g de sacarose ($C_{12}H_{22}O_{11}$), a 25 °C em uma bomba calorimétrica, o calor liberado (q_v) é igual a $-112,80$ kJ.

- a) Calcule a variação de entalpia padrão molar para a reação de combustão completa da sacarose a 25 °C;
b) Calcule a variação de entalpia padrão de formação da sacarose.

Resolução

a) $M_{\text{sacarose}} = 342 \text{ g mol}^{-1}$

$m_{\text{sacarose}} = 6,84 \text{ g}$

$n_{\text{sacarose}} = 0,02 \text{ mol}$

Se 0,02 mol de sacarose liberam $-112,80$ kJ a volume constante, 1 mol liberará $\Delta U^\circ = -5640$ kJ.

Sabendo que $C_{12}H_{22}O_{11(s)} + 12O_{2(g)} \rightarrow 12 CO_{2(g)} + 11H_2O_{(l)}$ e que $\Delta H^\circ = \Delta U^\circ + \Delta n_g RT$, tem-se que $\Delta n_g = 0$. Assim, $\Delta H^\circ = \Delta U^\circ \therefore \Delta H^\circ = -5640 \text{ kJ mol}^{-1}$.

b) $\Delta_{\text{comb}} H^\circ = \sum v \Delta_f H^\circ_{\text{produtos}} - \sum v \Delta_f H^\circ_{\text{reagentes}}$

$$\Delta_{\text{comb}} H^\circ = [12 \cdot (-393,51 \text{ kJ mol}^{-1}) + 11 \cdot (-285,83 \text{ kJ mol}^{-1})] - \Delta_f H^\circ_{\text{sacarose}} = -5640 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ_{\text{sacarose}} \cong -2226 \text{ kJ mol}^{-1}$$

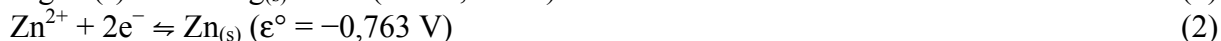
RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE FÍSICO-QUÍMICA

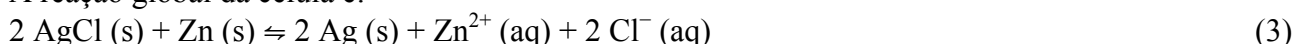
8ª Questão: Calcule a força eletromotriz da célula eletroquímica

$Zn_{(s)} | ZnCl_{2(aq)} 0,002 \text{ mol kg}^{-1} | AgCl_{(s)} | Ag_{(s)}$ a $25^\circ C$ usando a equação da lei limite de Debye-Hückel. Os potenciais padrões das semi-reações estão listados abaixo:



Resolução

A reação global da célula é:



A partir das semi-reações, é possível obter o valor de $\Delta\epsilon^\circ = 0,985 \text{ V}$. Para calcular a força eletromotriz da célula eletroquímica, deve-se usar a equação de Nernst (considerando que sólidos têm atividade igual a 1), de acordo com:

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^\circ - \frac{0,0591}{n} \log[a_{Zn^{2+}} a_{Cl^-}^2] \quad (4)$$

em que $n = 2$.

Sabendo que:

$$a_{Zn^{2+}} = \gamma_{Zn^{2+}} c_{Zn^{2+}} \quad (5)$$

$$a_{Cl^-} = \gamma_{Cl^-} c_{Cl^-} \quad (6)$$

e substituindo as equações (5) e (6) na equação (4), tem-se:

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^\circ - \frac{0,0591}{2} \log[(\gamma_{Zn^{2+}} c_{Zn^{2+}}) (\gamma_{Cl^-} c_{Cl^-})^2] \quad (7)$$

Considerando:

$$c_{Zn^{2+}} = m \quad (8)$$

$$c_{Cl^-} = 2m \quad (9)$$

$$\gamma_{\pm}^3 = \gamma_{Zn^{2+}} \gamma_{Cl^-}^2 \quad (10)$$

e substituindo as equações (8), (9) e (10) na equação (7), resulta:

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^\circ - 0,08865 \log(4m^3) - 0,08865 \log \gamma_{\pm} \quad (11)$$

Sabe-se que a lei limite de Debye-Hückel para soluções aquosas pode ser escrita como:

$$\log \gamma_{\pm} = -0,5092 z_+ z_- \sqrt{I} \quad (12)$$

Sendo que z_+ e z_- são as cargas dos íons Zn^{2+} e Cl^- , respectivamente.

Calculando a força iônica (I) da solução, tem-se:

$$I = \frac{1}{2} \sum_i^n c_i z_i^2 = \frac{1}{2} (0,002 \times 2^2 + 2 \times 0,002 \times 1^2) = 0,003 \text{ mol kg}^{-1} \quad (13)$$

Substituindo o valor de I calculado pela equação (13) na equação (12), tem-se: $\gamma_{\pm} = 0,879$.

Assim, substituindo os valores de $\gamma_{\pm} = 0,879$, $m = 0,002 \text{ mol kg}^{-1}$ e $\Delta\epsilon^\circ = 0,985 \text{ V}$ na equação (11), pode-se calcular a força eletromotriz da célula eletroquímica:

$$\Delta\epsilon = 0,985 - 0,08865 \log(4 \times 0,002^3) - 0,08865 \log 0,879$$

$$\Delta\epsilon = 0,3255 \text{ V}$$

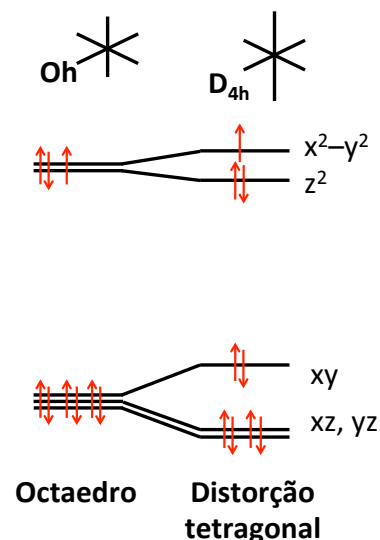
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA INORGÂNICA

9ª Questão: As reações entre moléculas de água e os íons Cr^{3+} , Mn^{2+} e Cu^{2+} resultam em compostos de coordenação que apresentam seis eixos internucleares e configurações de alto spin. Para o íon complexo que apresenta distorção de Jahn-Teller, pede-se a representação do desdobramento dos orbitais d do íon metálico após a mudança de simetria, assumindo que não há quebra de ligação e que o estado final resulta em uma configuração de menor energia.

Resolução

Os íons metálicos em análise apresentam as seguintes configurações eletrônicas: ${}_{24}\text{Cr}^{3+}$: $[\text{Ar}]3d^3$; ${}_{25}\text{Mn}^{3+}$: $[\text{Ar}]3d^5$ e ${}_{29}\text{Cu}^{2+}$: $[\text{Ar}]3d^9$. Destes, apenas o íon Cu^{2+} é passível de distorção de Jahn-Teller, uma vez que há assimetria de configuração eletrônica nos orbitais duplamente degenerados, e.g. Tal distorção pode ser resultante de alongamento ou compressão ao longo do eixo z. Como a configuração final é a de menor energia, tem-se o alongamento, uma vez que a compressão resultaria no enfraquecimento de quatro ligações no plano equatorial. O diagrama qualitativo de energia dos orbitais d do íon metálico após a mudança de simetria encontra-se representado ao lado.



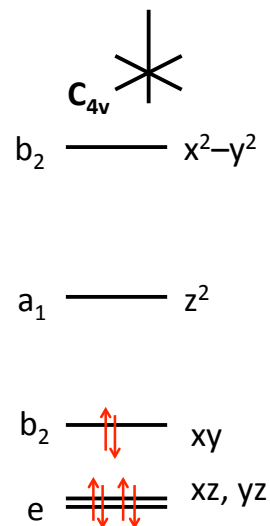
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA INORGÂNICA

10ª Questão: Qual é o grupo pontual do íon complexo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$? Após substituição no eixo axial por um íon Cl^- , há mudança de simetria? Se sim, qual é o novo grupo pontual? Apresente o desdobramento dos orbitais d do íon metálico central (com as respectivas representações) para o íon complexo formado após a reação de substituição. Justifique sua resposta em termos de teoria de grupo.

Resolução

O íon complexo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ contém seis ligantes idênticos e apresenta, dentre outras, as operações de simetria C_3 , C_2 , C_4 , S_4 , S_6 , σ_h e σ_v ; portanto, grupo pontual O_h . Seguindo o fluxograma para identificação do grupo pontual do íon complexo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$, verifica-se que o mesmo tem o elemento de simetria C_4 como eixo de rotação própria de maior ordem, não possui eixo C_2 perpendicular ao C_4 e não possui elemento σ_h , mas sim σ_v . O grupo pontual, portanto, é C_{4v} e o desdobramento dos orbitais d do íon metálico após a mudança de simetria encontra-se representado ao lado.

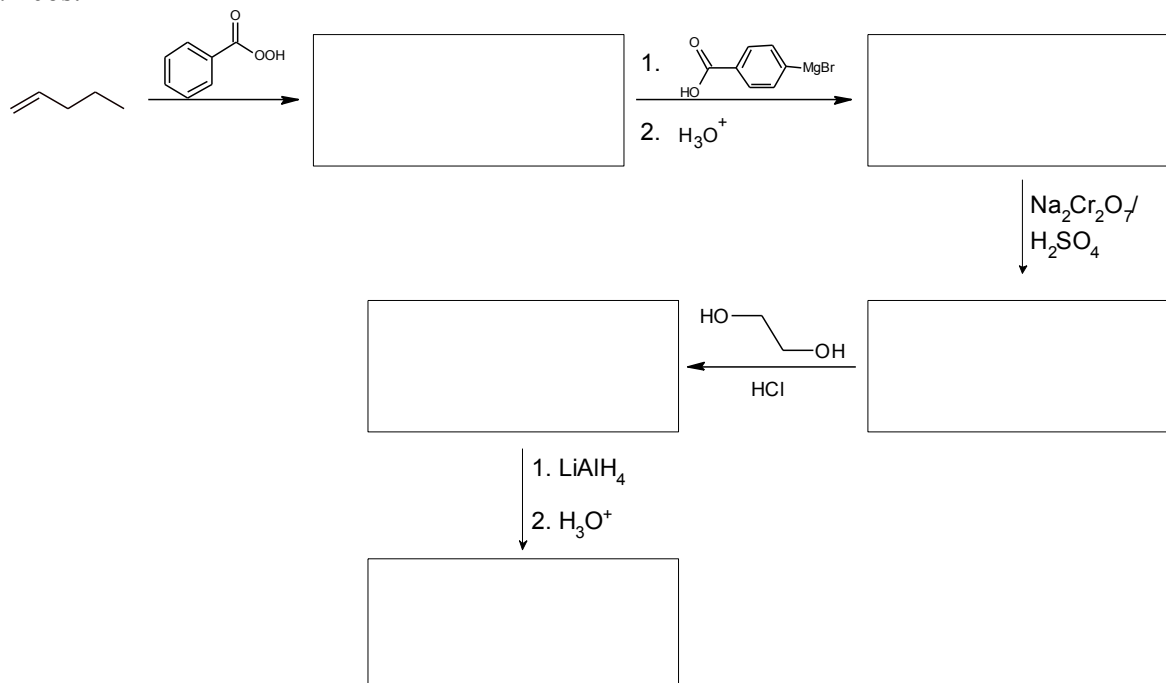


RESERVADO À COMISSÃO

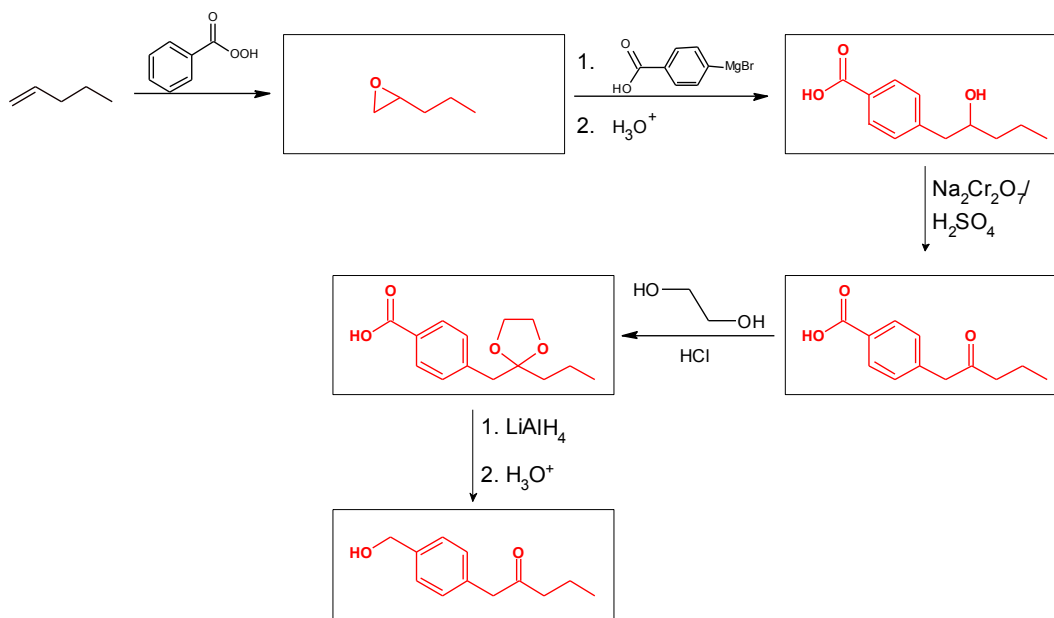
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ORGÂNICA

11ª Questão: Complete o esquema reacional abaixo com as estruturas dos respectivos produtos orgânicos.



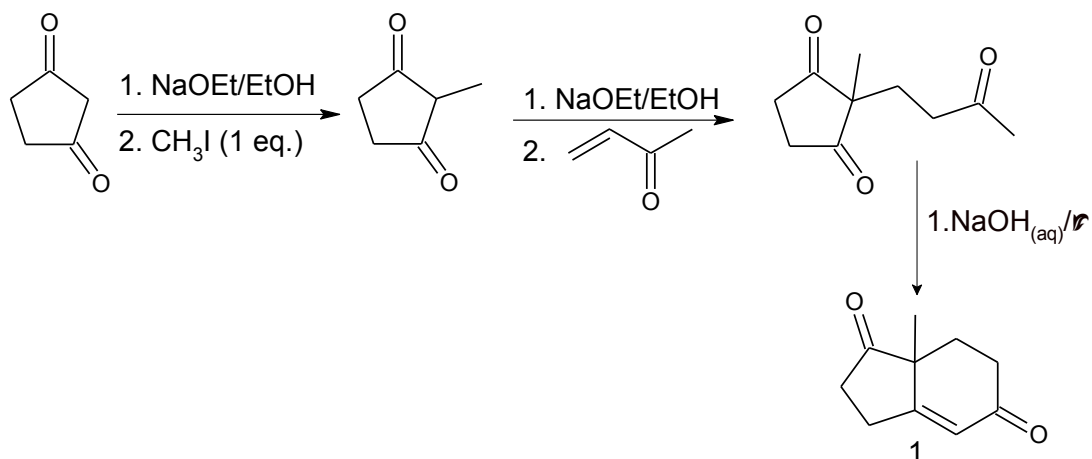
Resolução



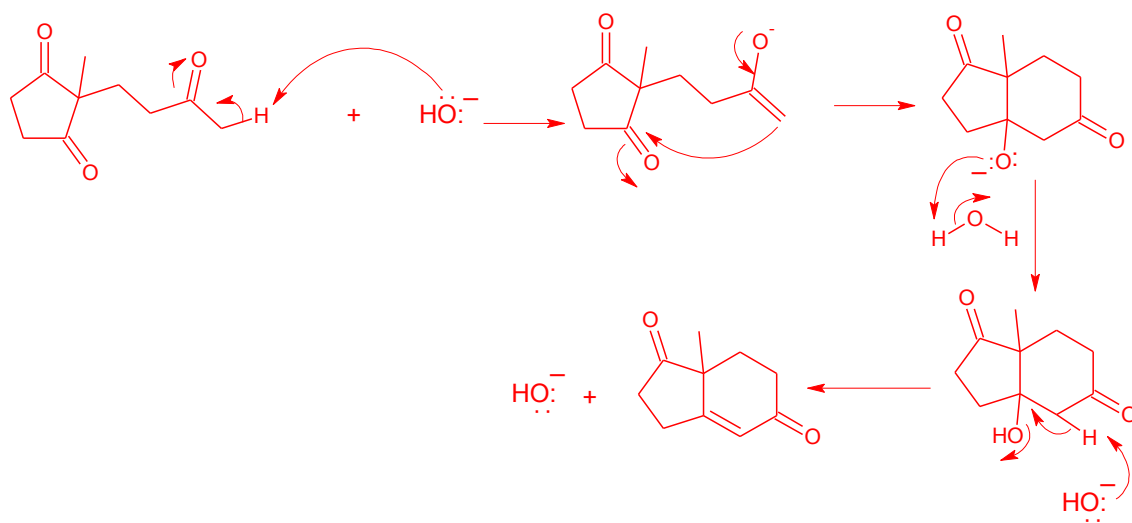
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ORGÂNICA

12ª Questão: A síntese do composto 1 é apresentada abaixo. Proponha o mecanismo reacional envolvido na etapa final desta rota sintética.



Resolução



MATERIAL SUPLEMENTAR

| Ordem | Lei de velocidade | Equação de concentração versus tempo |
|-------|-------------------|--|
| 0 | $v = k$ | $[A] = [A]_0 - kt$ |
| 1 | $v = k[A]$ | $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$ |
| 2 | $v = k[A]^2$ | $\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$ |

$[A]$ e $[A]_0$ são as concentrações do reagente A no tempo $t = t$ e $t = 0$, respectivamente.

$$\Delta E = \Delta E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln \frac{\prod_i a_i^{v_i} \text{produtos}}{\prod_i a_i^{v_i} \text{reagentes}}$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_i^n c_i z_i^2$$

$$\log \gamma_{\pm} = -0,5092 z_+ z_- \sqrt{I}$$

$$a_+ = \gamma_+ c_+$$

$$a_{\pm} = \gamma_{\pm} c_{\pm}$$

$$\gamma_{\pm}^v = \gamma_+^{v+} \gamma_-^{v-}$$

$$a_- = \gamma_- c_-$$

$$\gamma_{\pm}^v c_{\pm}^v = \gamma_+^{v+} \gamma_-^{v-} c_+^{v+} c_-^{v-}$$

$$v = v_+ + v_-$$

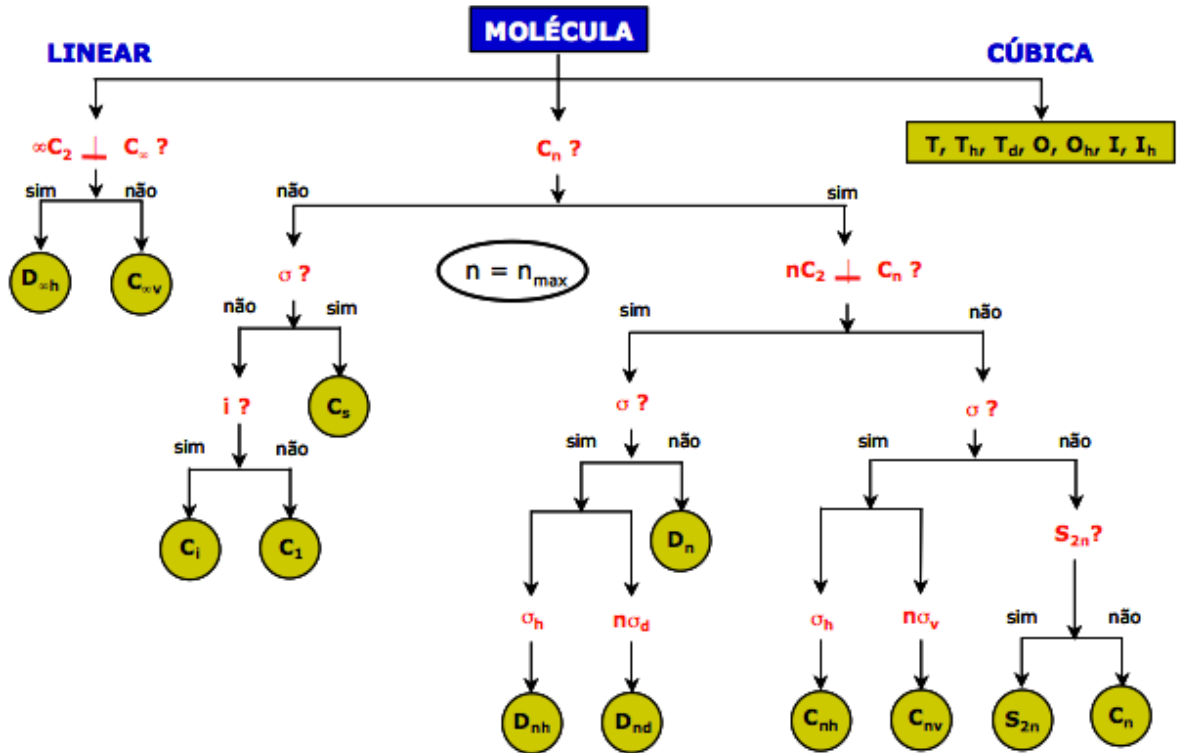
$$\Delta_f H^\circ_{\text{CO}_2, g} = -393,51 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ_{\text{H}_2\text{O}, l} = -285,83 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta H^\circ = \Delta U^\circ + \Delta n_g RT$$

$$R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273,15$$



Grupo pontual: O_h

| | E | $8C_3$ | $6C_2$ | $6C_4$ | $3C_2=(C_4)^2$ | i | $6S_4$ | $8S_6$ | $3\sigma_h$ | $6\sigma_d$ | linear, rotations | quadratic |
|----------|---|--------|--------|--------|----------------|----|--------|--------|-------------|-------------|-------------------|---------------------------|
| 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 | -1 | 0 | 0 | 2 | 2 | 0 | -1 | 2 | 0 | | $(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$ |
| T_{1g} | 3 | 0 | -1 | 1 | -1 | 3 | 1 | 0 | -1 | -1 | (R_x, R_y, R_z) | |
| T_{2g} | 3 | 0 | 1 | -1 | -1 | 3 | -1 | 0 | -1 | 1 | | (xz, yz, xy) |
| 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 | -1 | 0 | 0 | 2 | -2 | 0 | 1 | -2 | 0 | | |
| T_{1u} | 3 | 0 | -1 | 1 | -1 | -3 | -1 | 0 | 1 | 1 | (x, y, z) | |
| T_{2u} | 3 | 0 | 1 | -1 | -1 | -3 | 1 | 0 | 1 | -1 | | |

Grupo pontual: T_d

| | E | $8C_3$ | $3C_2$ | $6S_4$ | $6\sigma_d$ | linear, rotations | quadratic |
|-------|---|--------|--------|--------|-------------|-------------------|---------------------------|
| 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) |

Grupo pontual: D_{4h}

| | E | $2C_4(z)$ | C_2 | $2C'_2$ | $2C''_2$ | i | $2S_4$ | σ_h | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ | linears, rotations | quadratic |
|----------|---|-----------|-------|---------|----------|----|--------|------------|-------------|-------------|--------------------|----------------|
| 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) | (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 | 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) | |

Grupo puntual: D_{6h}

| | E | $2C_6$ | $2C_3$ | C_2 | $3C'_2$ | $3C''_2$ | i | $2S_3$ | $2S_6$ | σ_h | $3\sigma_d$ | $3\sigma_v$ | Linear, rotations | Quadratic |
|----------|---|--------|--------|-------|---------|----------|----|--------|--------|------------|-------------|-------------|-------------------|-----------------|
| 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 | | |

Grupo puntual: C_{2v}

| | E | $C_2(z)$ | $\sigma_v(xz)$ | $\sigma_v(yz)$ | linear, rotations | quadratic |
|-------|---|----------|----------------|----------------|-------------------|-----------------|
| A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | z | x^2, y^2, z^2 |
| A_2 | 1 | 1 | -1 | -1 | R_z | xy |
| B_1 | 1 | -1 | 1 | -1 | x, R_y | xz |
| B_2 | 1 | -1 | -1 | 1 | y, R_x | yz |

Grupo puntual: C_{4v}

| | E | $2C_4(z)$ | C_2 | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ | linear, rotations | quadratic |
|-------|---|-----------|-------|-------------|-------------|---------------------|----------------|
| A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | z | 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 | | xy |
| E | 2 | 0 | -2 | 0 | 0 | $(x, y) (R_x, R_y)$ | (xz, yz) |

Grupo puntual: C_{2h}

| | E | $C_2(z)$ | i | σ_h | linear, rotations | quadratic |
|-------|---|----------|----|------------|-------------------|---------------------|
| 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 | |

Grupo puntual: C_{4h}

| | E | $C_4(z)$ | C_2 | $(C_4)^3$ | i | $(S_4)^3$ | σ_h | S_4 | linear, rotations | quadratic |
|-------|---|----------|-------|-----------|----|-----------|------------|-------|--------------------------|----------------|
| 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 | 1 | i | -1 | -i | 1 | i | -1 | -i | R_x+iR_y R_x-iR_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 | 1 | i | -1 | -i | -1 | -i | 1 | i | x+iy x-iy | |

