



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**

DOCTORADO

Data: 11/07/2024 Horário: 14h

Instruções gerais:

1. A prova consta de oito (08) questões de Conhecimentos Específicos em Química. Dentre as questões de Conhecimentos Específicos, APENAS as quatro questões assinaladas pelo(a) candidato(a) serão consideradas para correção.
2. As questões de Conhecimentos Específicos escolhidas pelo(a)s candidato(a)s deverão estar CLARAMENTE assinaladas na tabela da página 2.
3. Para efeito de correção, APENAS quatro questões serão corrigidas.
4. A duração da prova será de 3 (três) 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. Para efeito de consulta, há material suplementar no final da prova.
8. Será permitido o uso de calculadora.
9. NÃO será permitido o uso de celular ou outros aparelhos eletrônicos durante a realização da prova. Portanto, tais aparelhos deverão permanecer desligados.
10. O nome do(a) candidato(a) 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:

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÕES DE CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS

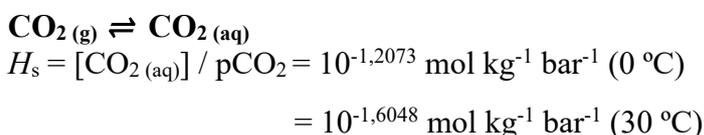
Questões	A CORRIGIR
1^a	
2^a	
3^a	
4^a	
5^a	
6^a	
7^a	
8^a	

RESERVADO À COMISSÃO

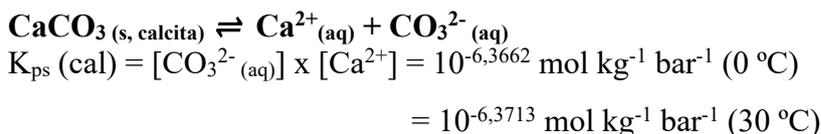
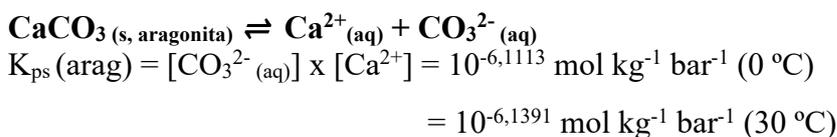
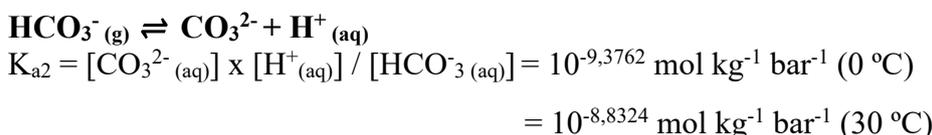
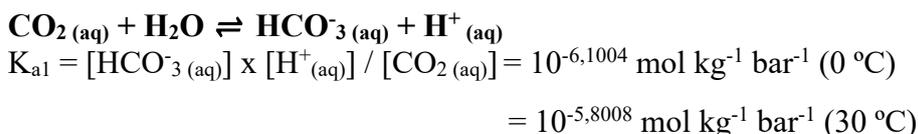
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ANALÍTICA

1ª Questão: A década das nações unidas da ciência oceânica para o desenvolvimento sustentável, compreende o período entre os anos de 2021 a 2030 e busca construir uma estrutura de apoio às ações de gerenciamento sustentável dos Oceanos efetuadas por diversos países. A vida marinha com conchas e esqueletos de CaCO_3 está ameaçada de extinção nas águas frias polares antes que aconteça o aquecimento das águas tropicais. As seguintes constantes de equilíbrio se aplicam à água do mar a 0°C e 30°C , quando as concentrações são medidas em número de mols por kg de água do mar e a pressão em bars.



OBS: H_s é a constante de solubilidade de Henry.

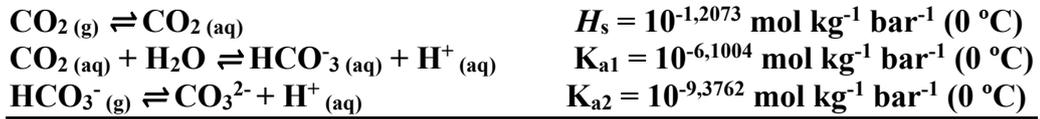


- a) Encontrar uma expressão para $[\text{CO}_3^{2-}]$ em termos de $p\text{CO}_2$ e $[\text{H}^+]$ nas temperaturas de 0°C e 30°C , utilizando as reações acima;
- b) A partir do resultado em (a), calcule $[\text{CO}_3^{2-}]$ (mol kg^{-1}) em $p\text{CO}_2 = 800 \mu\text{bar}$ e $\text{pH} = 7,80$ na temperatura de 0°C (oceano polar) e 30°C (oceano tropical). Essas

são as condições que podem ser atingidas em torno do ano 2100 se continuarmos a liberar CO₂ na velocidade atual.

RESPOSTA

a) T = 0 °C, temos:



Logo, para 30 °C, temos:



$$K = [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{H}^+]^2 / p\text{CO}_2$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = Kc \times p\text{CO}_2 / [\text{H}^+]^2 \quad (T = 0 \text{ }^\circ\text{C})$$

Seguindo o mesmo raciocínio para T = 30 °C, temos:

$$[\text{CO}_3^{2-}] = (kH \times K_{a1} \times K_{a2}) \times p\text{CO}_2 / [\text{H}^+]^2 \quad (T = 30 \text{ }^\circ\text{C})$$

b) Quando: $p\text{CO}_2 = 800 \text{ } \mu\text{bar} (800 \times 10^{-6} \text{ bar})$ e $\text{pH} = 7,80 (H^+ = 1,58 \times 10^{-8})$

Substituindo na equação $[\text{CO}_3^{2-}] = Kc \times p\text{CO}_2 / [\text{H}^+]^2 \quad (T = 0 \text{ }^\circ\text{C})$

Temos:

$$[\text{CO}_3^{2-}] = 6,59 \times 10^{-5} \text{ M} \quad (T = 0 \text{ }^\circ\text{C})$$

e

$$[\text{CO}_3^{2-}] = 1,84 \times 10^{-4} \text{ M} \quad (T = 30 \text{ }^\circ\text{C})$$

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ANALÍTICA

2ª Questão: Abaixo segue uma tabela com dados de uma titulação de 50 mL de uma solução de um ácido fraco HA 0,1 mol L⁻¹ com NaOH 0,1 mol L⁻¹. Preencha a tabela com o valor de pH quando 10% da titulação se processou. Apresente os cálculos.

% titulação	Fração titulada	pH
0	0	2,87
10	0,10	

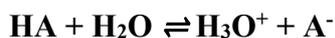
RESPOSTA

- Cálculo do pK_a de HA:

$$\text{pH} = 2,87$$

$$-\log [\text{H}^+] = 2,87$$

$$[\text{H}^+] = 10^{-2,87}$$



$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{A}^-] \text{ (balanço de carga)}$$

$$0,1 \text{ M} = [\text{HA}] + [\text{A}^-] \text{ (balanço de massa)}$$

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{0,1 - [\text{H}_3\text{O}^+]}$$

Sabendo que $[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-2,87}$:

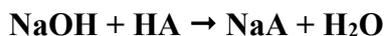
$$K_a = 1,84 \times 10^{-5}$$

$$\text{p}K_a = -\log K_a$$

$$\text{p}K_a = -\log (1,84 \times 10^{-5})$$

$$\text{p}K_a = 4,73$$

- **Volume de NaOH necessário para atingir o ponto de equivalência:**



$$\begin{aligned} n_{\text{NaOH}} &= n_{\text{HA}} \\ [\text{NaOH}] \times V_{\text{NaOH}} &= [\text{HA}] \times V_{\text{HA}} \\ 0,1 \times V_{\text{NaOH}} &= 0,1 \times 50 \\ V_{\text{NaOH}} &= 50 \text{ mL} \end{aligned}$$

- **Cálculo de 10 % de 50 mL:**

$$\begin{aligned} 50 \text{ mL} &\text{-----} 100\% \\ x &\text{-----} 10\% \\ x &= 5 \text{ mL} \end{aligned}$$

- **Cálculo do pH quando 10 % da titulação se processou:**

Nº de mol de HA antes da adição de NaOH: $n_{\text{HA}} = 0,1 \times 50 = 5 \text{ mmol}$

Nº de mol de NaOH adicionado à solução de HA quando 10 % da titulação se processou: $n_{\text{NaOH}} = 0,1 \times 5 = 0,5 \text{ mmol}$

Nº de mol de HA após adição de 5 mL de NaOH: $n_{\text{HA}} = 5 - 0,5 = 4,5 \text{ mmol}$

Nº de mol de A⁻ formado após adição de 5 mL de NaOH: $n_{\text{A}^-} = 0,5 \text{ mmol}$

Tem-se, portanto, a formação de um tampão, cujo pH pode ser calculado a partir da equação de Henderson-Hasselbalch:

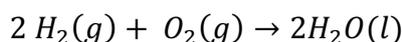
$$\begin{aligned} \text{pH} &= \text{p}K_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \\ \text{pH} &= 4,73 + \log \frac{0,5/55}{4,5/55} \\ \text{pH} &= 3,78 \end{aligned}$$

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE FÍSICO-QUÍMICA

3ª Questão: A seguinte reação de formação da água líquida, a 25°C possui um valor de $\Delta H^\circ = 571,66$ kJ. Sabendo que 4 mol de elétrons estão envolvidos nesse processo eletroquímico, determine o coeficiente de temperatura do potencial padrão E° . Dado: $E^\circ = 1,23$ V.



RESPOSTA

Os parâmetros termodinâmicos de envolvidos em um processo eletroquímico podem ser determinados pelas seguintes equações:

$$\Delta S^\circ = nF \left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p \quad (1)$$

$$\Delta G^\circ = - nFE^\circ \quad (2)$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \quad (3)$$

Para determinar o coeficiente de temperatura, $(\partial E^\circ / \partial T)_p$, pode-se substituir as expressões (1) e (2) na equação (3). Logo:

$$- nFE^\circ = \Delta H^\circ - T \left[nF \left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p \right] \quad (4)$$

$$\left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p = \frac{nFE^\circ + \Delta H^\circ}{nFT} \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p = \frac{E^\circ}{T} + \frac{\Delta H^\circ}{nF T} \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p = \frac{1,23 \text{ V}}{298 \text{ K}} + \frac{571.660 \text{ C V}}{4 \text{ mol} (96.485 \text{ C mol}^{-1}) 298 \text{ K}}$$

$$\left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p = 9,1 \times 10^{-3} \text{ V K}^{-1}$$

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE FÍSICO-QUÍMICA

4ª Questão: Através da função de estado $\left(\frac{\partial U}{\partial \bar{V}}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p$, avalie $\left(\frac{\partial U}{\partial \bar{V}}\right)_T$ para um gás de van der Waals.

RESPOSTA

Um gás de van der Waals segue o seguinte modelo matemático:

$$p = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a}{\bar{V}^2} \quad (1)$$

Logo:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \frac{R}{\bar{V} - b} \quad (2)$$

A função de estado apresentada no enunciado da questão foi:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial \bar{V}}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p \quad (3)$$

Substituindo as Equações (1) e (2) na (3), tem-se:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial \bar{V}}\right)_T = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{RT}{\bar{V} - b} + \frac{a}{\bar{V}^2} \quad (4)$$

$$\therefore \left(\frac{\partial U}{\partial \bar{V}}\right)_T = \frac{a}{\bar{V}^2}$$

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA INORGÂNICA

5ª Questão: O número de modos vibracionais de uma molécula não linear pode ser calculado contando os graus de liberdade dos átomos ($3N$, três por átomo para o movimento X, Y e Z) e subtraindo os três graus de liberdade de translação e os três de rotação, ($3N-6$). Isso foi usado para chegar a uma representação irreduzível (Γ_{3N} : $A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g} + 3T_{1u} + T_{2u}$) para a base de 21 graus de liberdade atômicos do íon complexo $[\text{CuF}_6]^{4-}$ assumindo o grupo pontual O_h .

- Com base nas informações acima, determine a representação irreduzível das vibrações (Γ_{3N-6}) e indique as quantidades de bandas ativas no Raman e no Infravermelho para este íon complexo;
- De acordo com a literatura (Z. anorg. allg. Chem. 409, 1974, 11-22), resultados de difração de raios-X indicam que há dois comprimentos diferentes (2,22 e 1,92 Å) para as ligações Cu-F no íon complexo $[\text{CuF}_6]^{4-}$. Com base nessas informações, indique quantas bandas devem ser observadas no infravermelho e no Raman para este complexo.

RESPOSTA

a)

Γ_{total}	$3N$	A_{1g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}	$3T_{1u}$	T_{2u}
Γ_{trans}	3					T_{1u}	
Γ_{rot}	3			T_{1g}			
Γ_{vib}	$3N-6$	A_{1g}	E_g		T_{2g}	$2T_{1u}$	T_{2u}
IV						$2T_{1u}$	
Raman		A_{1g}	E_g		T_{2g}		

2 bandas no IV e 3 bandas no Raman

b)

Complexos octaedros com configuração d^9 (preenchimento assimétrico dos orbitais e_g) são susceptíveis ao efeito Jahn-Teller.

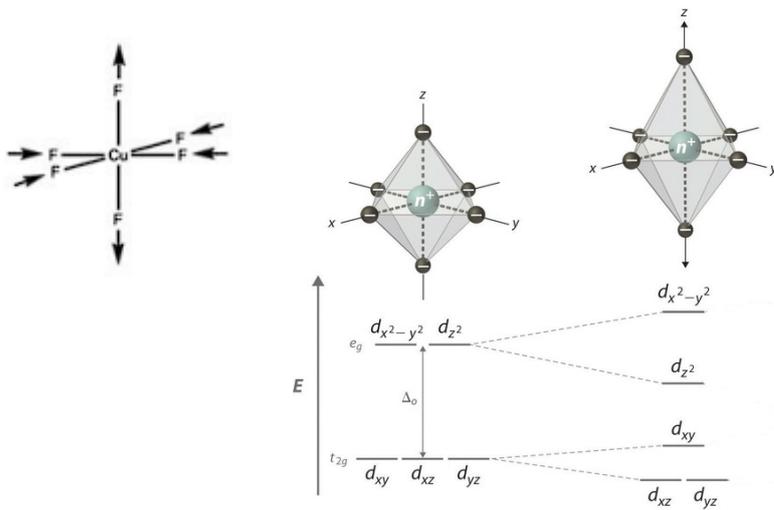


Diagrama de correlação:

	O_h		D_{4h}	
z^2	A_{1g}	→	A_{1g}	Raman
x^2-y^2	E_g	→	$A_{1g}+B_{1g}$	Raman
(xy, yz, zx)	T_{2g}	→	$B_{2g}+E_g$	Raman
(x, y, z)	$2T_{1u}$	→	$2A_{2u}+2E_u$	IV

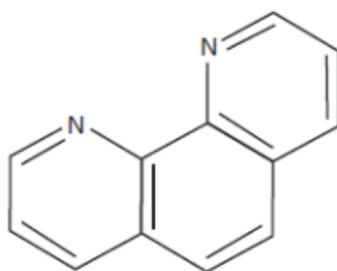
4 bandas no IV e 5 bandas no Raman

RESERVADO À COMISSÃO

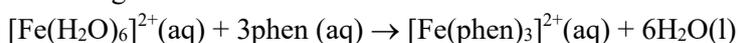
CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA INORGÂNICA

6ª Questão: (Baseado Enade 2021) Uma das técnicas analíticas utilizadas em setores industriais e em pesquisas científicas para a determinação quantitativa de íons ferro baseia-se no método colorimétrico da ortofenantrolina. Após a abertura da amostra, os íons Fe^{2+} em solução aquosa reagem com moléculas do ligante ortofenantrolina (1,10-fenantrolina = phen), cuja estrutura está apresentada a seguir.



A reação resulta na formação dos íons complexos com fórmula $[Fe(phen)_3]^{2+}$, denominado tris(1,10-fenantrolina)ferro (II), os quais apresentam intensa coloração vermelha, podendo ser analisados por espectrofotometria de absorção UV-Vis sob irradiação a 510 nm. A reação em questão é apresentada a seguir:

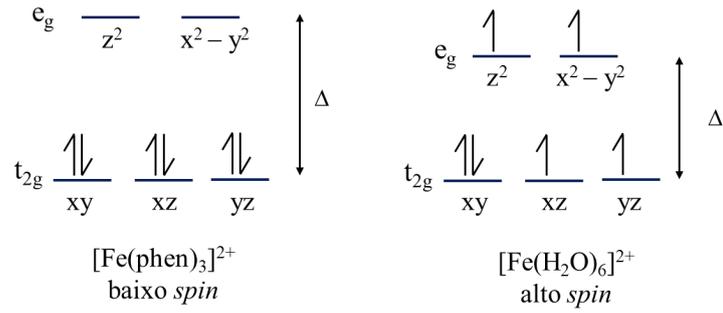


Considerando-se as características dos ligantes e a reação de formação do íon complexo $[Fe(phen)_3]^{2+}$ apresentada, **responda e justifique** as afirmações abaixo:

- Qual íon complexo teria maior constante de formação, K_f , $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$ ou $[Fe(phen)_3]^{2+}$?
- Por que o íon $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$ é paramagnético, enquanto o $[Fe(phen)_3]^{2+}$ é diamagnético?
- O comprimento de onda da radiação eletromagnética absorvido pelo íon $[Fe(phen)_3]^{2+}$ é 510 nm. O íon $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$ absorverá radiação com comprimento de onda mais longo ou mais curto?

RESPOSTA

- $[Fe(phen)_3]^{2+}$, phen é um ligante bidentado. Um íon complexo com ligantes polidentados, usualmente terá um valor maior para sua constante de formação. O aumento da estabilidade resultante é chamado de efeito quelato.**
- Ambos os íons apresentam geometria octaédrica e Fe^{2+} : $[Ar]3d^6$. Para justificar as propriedades magnéticas, devemos ter um campo forte para $[Fe(phen)_3]^{2+}$ e um campo fraco para $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$.**



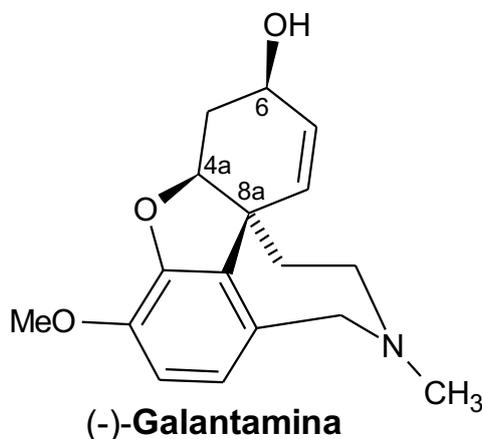
- (c) $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ apresenta menor desdobramento dos orbitais d ($< \Delta$) e absorverá a radiação eletromagnética em maior comprimento de onda (menor energia, e energia e comprimento de onda são inversamente proporcionais, $\lambda = hc/\Delta E$).

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ORGÂNICA

7ª Questão: A (-)-galantamina é um alcaloide isolado do bulbo de diferentes espécies da família Amaryllidaceae, que é utilizado como fármaco no tratamento da doença de Alzheimer (*Nat. Prod. Rep.*, 2024, doi.org/10.1039/D4NP00001C). A partir da estrutura da (-)-galantamina, mostrada abaixo, avalie as afirmativas apresentadas e forneça o somatório de pontos relacionados às afirmações que estão **CORRETAS**.



- i. A (-)-galantamina é uma molécula quiral do tipo destro-rotatória (ou destrógira), enquanto seu enantiômero, a (+)-galantamina, é do tipo levo-rotatória (ou levógira). (02)
- ii. Por apresentar 3 (três) centros estereogênicos, a (-)-galantamina possui 2^3 ou 8 (oito) enantiômeros. (04)
- iii. Os centros estereogênicos da (-)-galantamina apresentam configurações (6*R*, 4a*S*, 8a*S*). (08)
- iv. Por se tratar de um alcaloide, no processo de isolamento da (-)-galantamina, seria possível convertê-la em um cloridrato, a partir da reação com uma solução de HCl. (16)
- v. Um diastereoisômero da (-)-galantamina é obtido pela oxidação no carbono 6, o qual contém a hidroxila, que seria convertida em carbonila. (32)
- vi. A mistura equimolar (1:1) da (-)-galantamina e (+)-galantamina, na análise polarimétrica, seria opticamente ativa por se tratar de uma mistura racêmica ou racemato. (64)

RESPOSTA

24 pontos

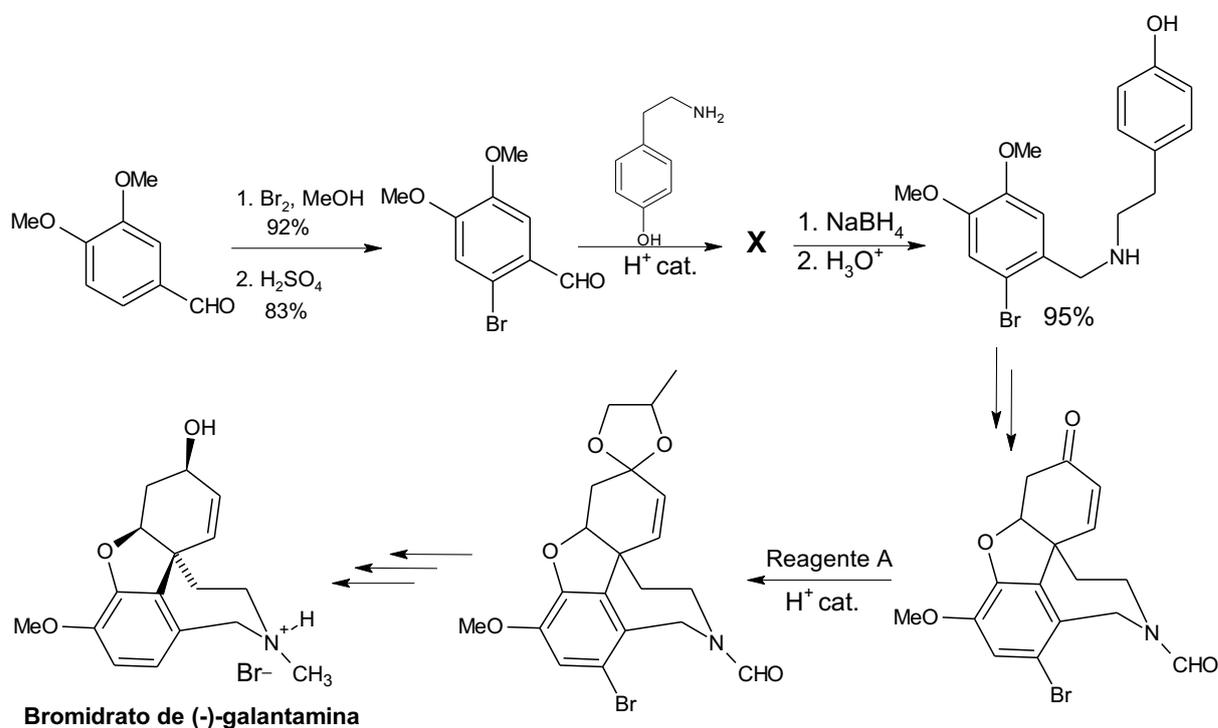
- i. Incorreta. A (-)-galantamina é uma molécula do tipo *levo-rotatória* (ou *levogira*), enquanto seu enantiômero, a (+)-galantamina, é do tipo *destro-rotatória* (ou *destrógira*). (02)
- ii. Incorreta. A (-)-galantamina possui somente 1 enantiômero. (04)
- iii. Correta. A (-)-galantamina apresenta configurações (6*R*, 4*aS*, 8*aS*). (08)
- iv. Correta. A (-)-galantamina, que apresenta natureza básica sofre reação ácido-base com o HCl, ocorrendo a protonação do nitrogênio e formação de um sal do tipo cloridrato. (16)
- v. Incorreta. A oxidação da (-)-galantamina à transforma em uma molécula com fórmula molecular diferente, não sendo portanto, um estereoisômero desta. (32)
- vi. Incorreta. A mistura equimolar (1:1) da (-)-galantamina e (+)-galantamina, na análise polarimétrica, seria opticamente inativa por se tratar de um racemato. (64)

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

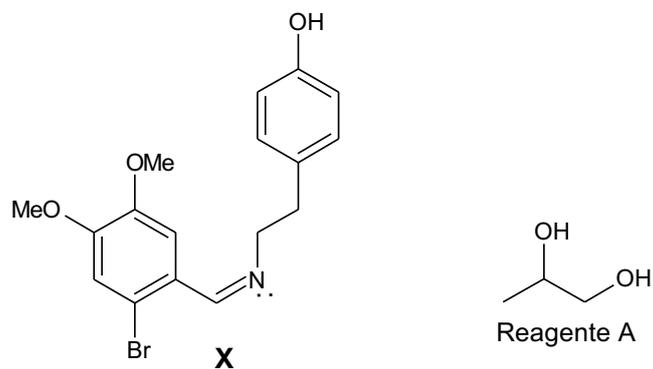
QUESTÃO ESPECÍFICA DE QUÍMICA ORGÂNICA

8ª Questão: A produção sintética da (-)-galantamina envolve diferentes estratégias de síntese orgânica, que utilizam desde reações clássicas até resolução cinética, para obtenção do fármaco enantiomericamente puro. Com isso, abaixo é apresentado um esquema resumido de síntese da (-)-galantamina na forma de bromidrato. Em relação ao esquema, responda o que se pede.

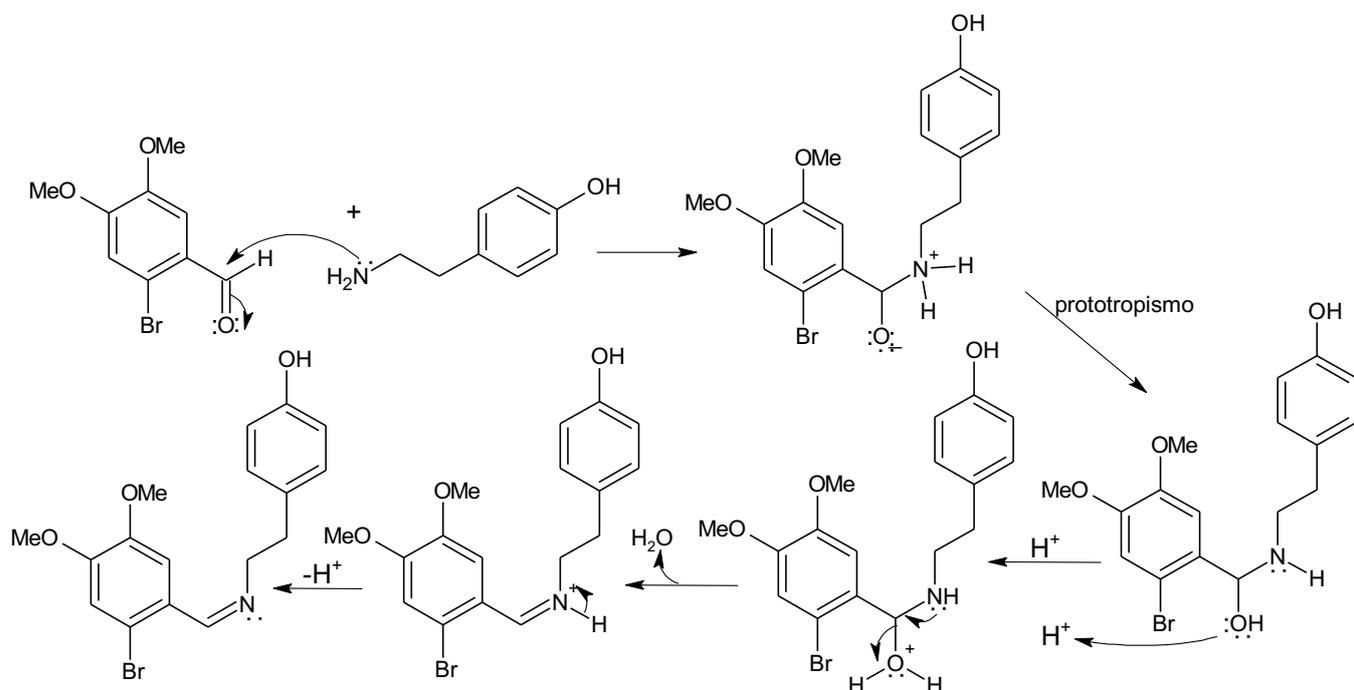


- Mostre as estruturas do produto **X** e do reagente **A**, que estão faltando no esquema reacional.
- Mostre o mecanismo reacional que justifica a formação do produto **X**.

RESPOSTA



Mecanismo:



MATERIAL SUPLEMENTAR

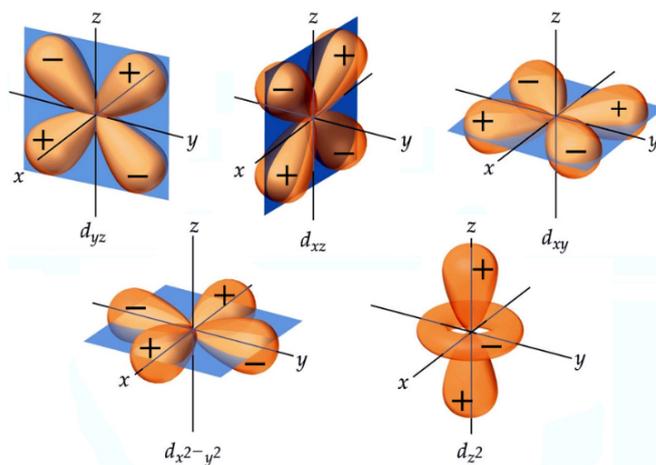
- Equação de Henderson-Hasselbalch:

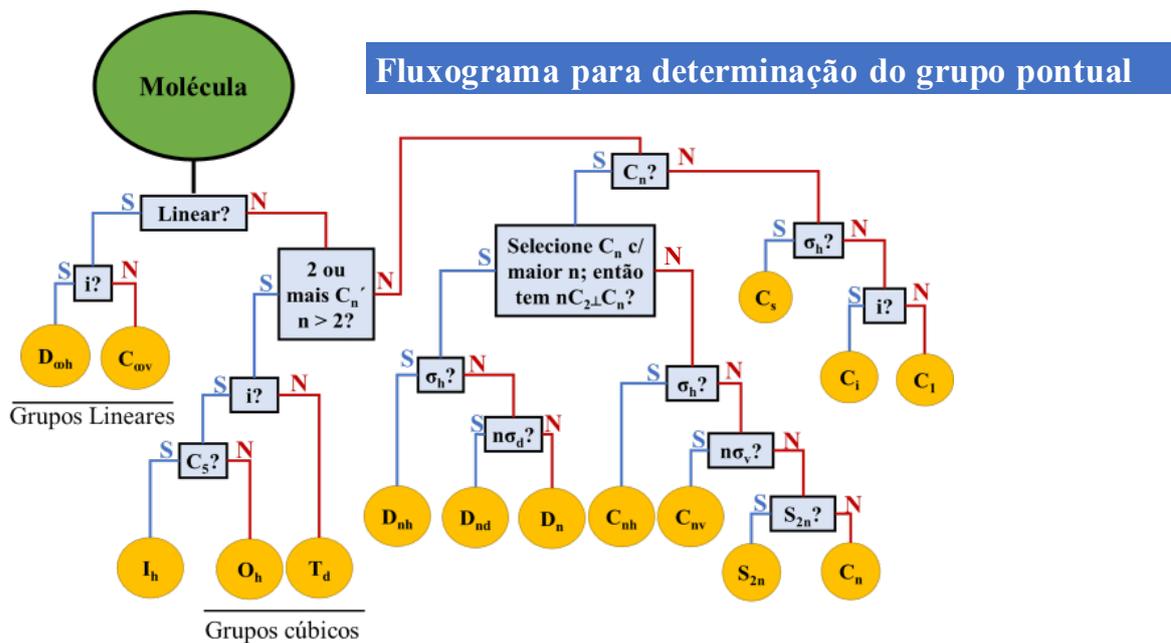
$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

- Equações da Prova Específica de Físico-Química

$\Delta S^\circ = nF \left(\frac{\partial E^\circ}{\partial T} \right)_p$	$\Delta G^\circ = -nFE^\circ$
$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$	$p = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a}{\bar{V}^2}$

- Informações suplementares da Prova Específica de Química Inorgânica





Tabelas de Caracteres

C_{4h}	E	C_4	C_2	C_4^3	i	S_4^3	σ_h	S_4		
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	$\left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \right.$	i	-1	-i	1	i	-1	-i	(R_x, R_y)	(xz, yz)
A_u		1	1	1	1	-1	-1	-1		
B_u	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1		
E_u	$\left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \right.$	i	-1	-i	-1	-i	1	i	(x, y)	
		1	-i	-1	i	-1	i	1		-i

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1		$x^2 - y^2$
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	(R_x, R_y)	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		(xz, yz)
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0		
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	z	
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1		
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)	

D_{4d}	E	$2S_8$	$2C_4$	$2S_8^3$	C_2	$4C_2'$	$4\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	-1	1	1	-1		
B_2	1	-1	1	-1	1	-1	1	z	
E_1	2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	-2	0	0	(x, y)	
E_2	2	0	-2	0	2	0	0		$(x^2 - y^2, xy)$
E_3	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$4S_4$	$6\sigma_d$		
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)

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2(=C_4^2)$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	
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	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0	
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	(xy, 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	
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	

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