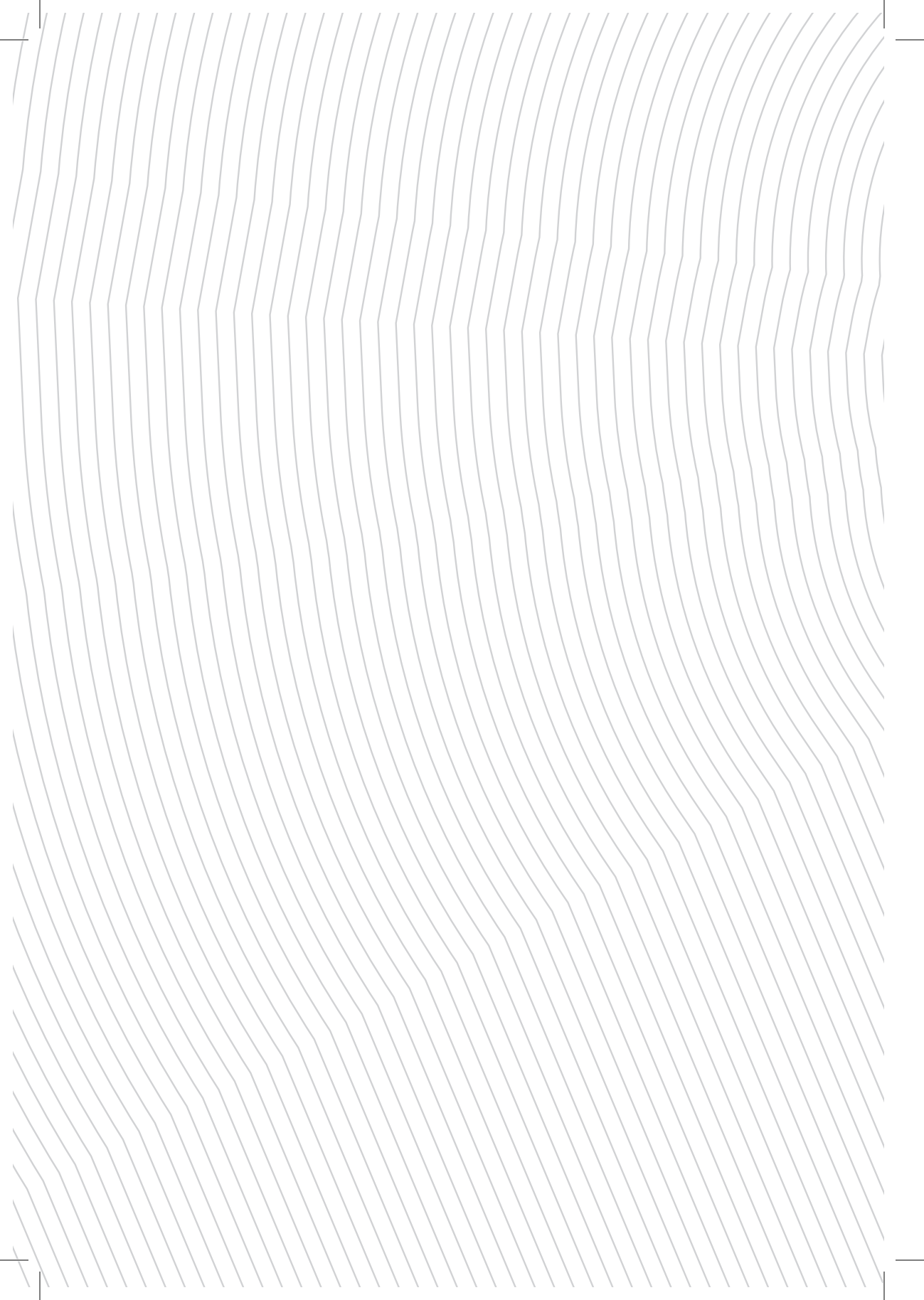
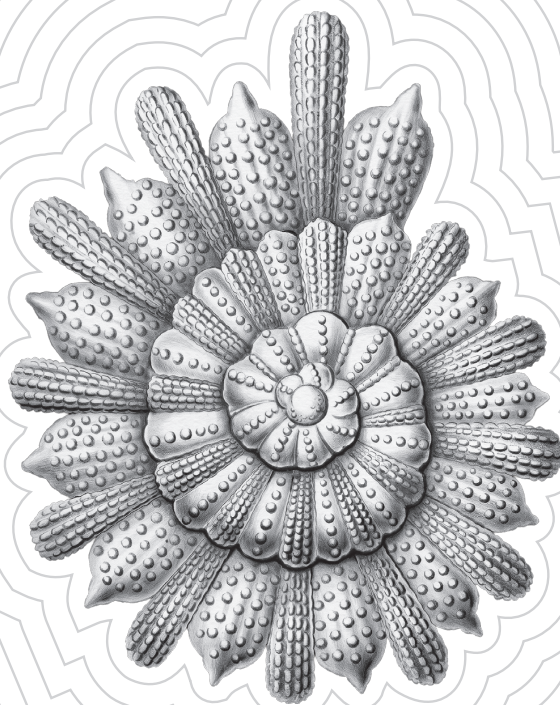


INTRODUÇÃO À **TEORIA DE GRUPOS**

APLICADA EM MOLÉCULAS E SÓLIDOS

3ª EDIÇÃO REVISTA E AMPLIADA





INTRODUÇÃO À **TEORIA DE GRUPOS**

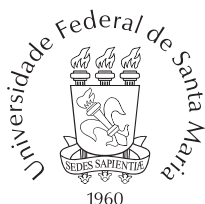
APLICADA EM MOLÉCULAS E SÓLIDOS

3ª EDIÇÃO REVISTA E AMPLIADA

ADALBERTO **FAZZIO** • KAZUNORI **WATARI**


editora **ufsm**





Universidade Federal de Santa Maria

Reitora: Martha Bohrer Adaime

Vice-reitor: Tiago Bandeira Marchesan

Diretor da Editora: Enéias Tavares

Conselho editorial: Elisete Medianeira Tomazetti, Enéias Tavares (Presidente), Fernanda Alice Antonello Londero Backes, Hans Rogerio Zimmermann, Jucemara Antunes, Lana D'Avilla Campanella, Lucas da Cunha Zamberlan, Luciane Sanchotene Etchepare, Marcelo Battesini, Márcia Lenir Gerhardt, Marília de Araujo Barcellos, Olavo Avaloni Neto, Paulo Roberto Costa, Raone Somavilla, Rosani Spanevello e Rosmari Horner

Preparação e revisão: Maicon Antonio Paim

Diagramação: Adalberto Fazzio e Kazunori Watari

Capa e supervisão gráfica: Gilberto de Moraes Jr.

Ilustração da capa: Ernst Haeckel: Kunstformen der Natur, 1904

© 2026, Adalberto Fazzio e Kazunori Watari

F287i Fazzio, Adalberto

Introdução à teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos /
Adalberto Fazzio, Kazunori Watari. – 3. ed rev. ampl.. – Santa
Maria : Ed. UFSM, Ed. Livraria da Física, 2026.
343 p. : il. ; 23 cm.

ISBN 978-65-5716-178-4

ISBN 978-65-5563-810-3

1. Teoria dos grupos 2. Álgebra 3. Mecânica
quântica 4. Ciência dos materiais 5. Física dos
materiais 6. Física molecular 7. Física do estado
sólido I. Watari, Kazunori II. Título.

CDU 512.54
530.145
538.9

Ficha catalográfica elaborada por Paula Schoenfeldt Patta CRB-10/1728 - Biblioteca Central – UFSM



ABEU
Associação Brasileira das
Editoras Universitárias



editoraufsm



Direitos reservados à:

Editora da Universidade Federal de Santa Maria

Campus Universitário - Reitoria | Camobi | Santa Maria, RS | (55) 3220.8610 | www.ufsm.br/editora

Livraria da Física

Rua Enéias Luís Carlos Barbanti, 193 | Freguesia do Ó | São Paulo, SP | (11) 3936-3413 | www.livrariadafisica.com.br

Sumário

Prefácio da Terceira Edição	13
Prefácio da Segunda Edição	15
Prefácio	17
1 Definições e Teoremas	19
1.1 Conjuntos e Operações	19
1.2 Aplicações	27
1.2.1 Tipos de Aplicação Regular	29
2 Grupo	31
2.1 Grupo Abstrato	31
2.1.1 Exemplos de Grupos	33
2.1.2 Tabela de Multiplicação	34
2.1.3 Grupos Cíclicos	35
2.1.4 Propriedades dos Grupos Finitos	36
2.2 Subgrupos	37
2.3 Elementos Conjugados e Classes	39
3 Simetria e Grupos de Simetria	43
3.1 Operações de Simetria	43
3.2 Planos de Simetria e Reflexões	44
3.3 Centro de Inversão	46
3.4 Eixos Próprios e Rotações Próprias	48
3.5 Eixos Impróprios e Rotações Impróprias	50
3.6 Relações Gerais entre Operações e Elementos de Simetria	53
3.7 Grupos Pontuais Cristalográficos	55
3.7.1 Grupos Pontuais	56
3.7.2 Grupo das Moléculas de Alta Simetria	60
3.7.3 Sistemas Cristalinos	62

3.8	Procedimento Sistemático para Classificar as Moléculas . . .	62
3.9	Exemplos Ilustrativos	64
3.10	Adendo: Notação Internacional	65
4	Grupos e suas Representações	67
4.1	Conceitos Básicos de Álgebra Linear	67
4.1.1	Definições Básicas	68
4.1.2	Operadores Lineares	72
4.2	Operadores Lineares e Matrizes	73
4.3	Representação de um Grupo	77
4.4	Redutibilidade de uma Representação	80
4.5	Teoremas Fundamentais	83
4.6	Caracteres de uma Representação	89
4.7	O Produto Direto	93
4.8	Decomposição de uma Representação	97
5	Tabela de Caracteres	101
5.1	Construção de uma Tabela de Caracteres	101
5.2	Estrutura das Tabelas de Caracteres	108
5.3	Tabela de Caracteres de um Grupo Cíclico	110
5.4	As Tabelas de Caracteres	113
6	O grupo da Equação de Schrödinger: Sistemas Eletrônicos	125
6.1	O Grupo da Equação de Schrödinger	126
6.2	Gerador de Funções de Base	133
6.3	Desdobramento de Níveis Atômicos em Um Campo Cristalino	143
6.4	Fatoração da Equação Secular	149
6.5	Simetria das Ligações Covalentes	156
6.6	Fatoração de uma Matriz Secular	160
7	Moléculas Lineares	163
7.1	Grupo Contínuo	163
7.2	Grupo de Simetria Axial	170
7.2.1	O Grupo $C_{\infty v}$	173
7.2.2	O Grupo $D_{\infty h}$	189
7.3	Complemento Matemático	197
8	Estados Multieletrônicos	199
8.1	Estados de Multipletos	199
8.2	Teoria do Campo Ligante	207
8.3	Efeito Jahn-Teller	215
8.4	Grupo Duplo	219

9	Regras de Seleção e Simetria	231
9.1	Regras de Seleção	231
9.1.1	Excitações Eletrônicas	234
9.2	Simetrias em Movimentos Vibracionais e Rotacionais	236
9.3	Espectro Infravermelho	241
9.4	Espectro Raman	243
10	Propriedades de Simetria em Sistemas Cristalinos	245
10.1	Energias Potenciais Periódicas	246
10.2	Grupo Espacial	247
10.2.1	Subgrupo do Grupo Espacial	248
10.3	Grupo de Translações e o Teorema de Bloch	251
10.4	Rede Recíproca e Zona de Brillouin	252
10.5	Condição de Contorno Cíclica	254
10.6	Grupo de Ponto	255
10.7	Classificação dos Estados Eletrônicos	256
10.8	Exemplos de Primeira Zona de Brillouin	257
10.9	Método da Expansão em Ondas Planas	261
10.10	Estrutura “Zinc Blende” como Exemplo	272
10.11	Simetrização de Função de Onda no Método “Tight Binding”	279
10.11.1	Grafeno	282
10.11.2	Distorção de Peierls	286
11	Além do Gap: Topologia nos Materiais	289
11.1	Introdução	289
11.2	Isolantes e Topologia	292
11.3	A fase geométrica	293
11.3.1	Fase de Berry no Espaço Real	293
11.3.2	Fase de Berry no Espaço Recíproco	295
11.4	Simetria de Reversão Temporal (TRS)	297
11.5	Invariante topológico $\mathbb{Z}_2$	299
11.6	Os Materiais	307
11.6.1	Materiais 2D	308
11.6.2	Materiais 3D	311
11.7	Comentários Finais	312
11.8	Referências Bibliográficas do Capítulo 11	314
12	Exercícios	319
12.1	Exercícios do Capítulo 1	319
12.2	Exercícios do Capítulo 2	320
12.3	Exercícios do Capítulo 3	322
12.4	Exercícios do Capítulo 4	323
12.5	Exercícios do Capítulo 5	326

12.6 Exercícios do Capítulo 6	327
12.7 Exercícios do Capítulo 7	328
12.8 Exercícios do Capítulo 8	330
12.9 Exercícios do Capítulo 9	330
12.10 Exercícios do Capítulo 10	331
Bibliografia	335
Índice	337

Para Eyri, Yugo, e Ricky com muito carinho
(K.W.)

À Dê e aos meus filhos Ila, Luana, Lucas e Matheus
(A.F.)



... a natureza, legando-nos a maravilhosa dádiva das uvas muito apreciadas por Noé, produziu apenas uma das formas, e deixou para Pasteur produzir a outra! ... a maioria dos numerosos compostos de carbono ocorrem na natureza somente na forma levógira ou dextrógira.

Simetria

Hermann Weyl



Prefácio da Terceira Edição

Nesta edição foi incluída uma breve discussão sobre Grupo Duplo na secção 8.4, atendendo sugestão de vários leitores. Além disso, foi também acrescentado um novo capítulo que trata de Topologia nos Materiais, relacionada à transição que reflete uma estrutura topológica dos estados quânticos, resistente a imperfeições do material.

Agradecemos aos editores, aos professores, aos muitos alunos e leitores que nos conduziram a esta nova edição, expressando a nossa imensa satisfação por isso.

K. Watari
A. Fazzio

São Paulo, dezembro de 2025.



Prefácio da Segunda Edição

Nesta segunda edição, um novo capítulo, que trata da simetria axial em moléculas lineares (capítulo 7, “Moléculas Lineares”), foi incluído para completar o tema que os livros didáticos existentes tratam, geralmente, ou de forma muito superficial ou apresentam uma formulação demasiadamente complexa, que fogem dos objetivos de um curso introdutório. Os professores que adotaram este livro, para ministrarem curso de Teoria de Grupos, sentiram também a necessidade de incluir este assunto, de forma que grupos contínuos fossem mais explorados. Além disso, pequenas inclusões foram feitas no capítulo que trata da simetria translacional, como, por exemplo, aplicações usando o método “Tight-Binding”.

Agradecemos aos editores, aos professores e aos muitos alunos pelos incentivos para trabalhar nesta segunda edição. Gostaríamos de registrar também a nossa imensa satisfação ao receber o convite da Editora para a publicação de uma nova edição.

K. Watari
A. Fazzio

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

São Paulo, fevereiro de 2009.



Prefácio

Esta obra é dirigida primordialmente aos estudantes de graduação em Física, Química e Engenharia de Materiais que tenham um conhecimento de Estrutura da Matéria ou de Mecânica Quântica em nível elementar. A intenção dos autores é que este seja o livro de primeira leitura em teoria de grupos finitos aplicado aos problemas de Ciência dos Materiais.

Após ministrar esse curso diversas vezes para estudantes de pós-graduação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo, sentimos a necessidade de escrever um texto acessível para aqueles que pretendem seguir a carreira de pesquisador, tanto teórico quanto experimental, na área de Física dos Materiais. Sabemos que existem excelentes livros textos sobre a Teoria de Grupo dirigidos para áreas de Física Molecular e do Estado Sólido. Entretanto, muitas vezes, as ideias ali apresentadas parecem desconectadas das aplicações, por exigir do leitor conhecimentos mais avançados da Teoria Quântica e de Matemática. Isso tem levado estudantes a criar uma aversão ao estudo da Teoria de Grupo aplicada. Há também inúmeros livros textos extremamente elementares sobre a Teoria de Grupo, deixando o estudante com a ilusão de ter aprendido após a sua leitura. Contudo, no primeiro momento em que necessitam desse conhecimento para aplicá-lo a seu problema específico de pesquisa ou para entender um artigo científico sentem-se frustrados, pois percebem o quão incompletos estão os seus conhecimentos da matéria. Hoje em dia, trabalhos científicos na área de materiais usam conceitos técnicos e notações que integram a “linguagem” da Teoria de Grupo. Mas esse vocabulário especializado, que parece ser complexo, não faz parte do dia-a-dia de um estudante de graduação e de ingressantes na pós-graduação. Nosso objetivo é, portanto, fornecer um conhecimento básico da Teoria de Grupo aplicada, para que o aluno tenha os elementos necessários para poder usá-la de forma independente em seu campo de trabalho.

Sempre que iniciávamos nossas aulas de Teoria de Grupo através de definições e teoremas matemáticos, os mais impacientes sempre perguntavam: “Para que serve isso?” ou “Onde iremos chegar?” Nós, então, dedicávamos uma aula procurando mostrar sua relevância, em áreas de atuação como na Física, na Química, na Biologia, nas Artes Plásticas, na Literatura etc. Neste livro iniciamos com definições e teoremas; continuando a leitura, o

leitor verá a beleza de uma matemática aplicada.

Grosso modo, a obra pode ser dividida em duas partes. Nos capítulos 1 ao 5, são apresentados conceitos básicos e teoremas necessários para uma boa compreensão da Teoria de Grupo. Nos capítulos 6 ao 9, encontram-se algumas aplicações mais importantes.

O capítulo 1 fornece conceitos básicos e teoremas referentes à Teoria dos Conjuntos e às estruturas algébricas modernas em nível elementar. Como a Teoria de Grupo é uma parte da estrutura da Álgebra Moderna, as noções selecionadas são muito úteis, principalmente nas abstrações. O capítulo 2 apresenta definições e conceitos de grupo propriamente dito, do ponto de vista puramente matemático. No capítulo 3, são mostrados a associação das operações de simetria de moléculas com os elementos de grupo e o procedimento sistemático para classificá-lo segundo as simetrias envolvidas. O capítulo 4, por sua vez, contém a teoria de representações, na qual os conceitos de redutibilidade e irredutibilidade são investigados. Teoremas referentes a representações irredutíveis são apresentados e demonstrados. A tabela de caracteres, em que os grupos são classificados, e as representações irredutíveis de cada um deles é o assunto do capítulo 5. Discute-se, ainda, construção de uma tabela de caracteres baseada em teoremas estudados no capítulo 4, mostrando uma lista de tabelas de caracteres. *Enfatizamos neste ponto que os capítulos 4 e 5 constituem o cerne do aprendizado das aplicações da Teoria de Grupo*. O capítulo 6 é onde começam de fato as aplicações da Teoria de Grupo em problemas da Física. Examina-se a conexão da Teoria de Grupo com a Mecânica Quântica para se estudar os estados eletrônicos de átomos, moléculas e aglomerados. O capítulo 7, por seu turno, é dedicado à aplicação da Teoria de Grupo em sistemas com estados multieletrônicos. Já a aplicação na determinação das regras de seleção em excitações eletrônicas e vibracionais é discutida no capítulo 8. Finalmente, o sistema cristalino é objeto do capítulo 9, enfatizando-se noções básicas de cálculo de faixas de energia de um cristal com a aplicação da Teoria de Grupo.

Os autores agradecem aos professores e aos alunos que fizeram leituras críticas e inúmeras sugestões. Agradecemos também ao professor Luis Vidal Negreiros Gomes e à Editora da Universidade Federal de Santa Maria pela cedência das figuras e a capa deste livro.

A. Fazzio
K. Watari

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

São Paulo, fevereiro de 1998.

1

Definições e Teoremas

Para a compreensão do assunto abordado neste livro, são de fundamental importância as definições e os teoremas apresentados a seguir.

1.1 Conjuntos e Operações

O propósito de se começar com um resumo a respeito de Teoria dos *Conjuntos* e algumas *estruturas algébricas modernas* é uma tentativa de apresentar uma visão unificada daquilo que poderia parecer um tópico de matemática com alto grau de abstração. O interesse deste livro não é uma visão matemática completamente abstrata, mas o uso de abstração é útil na compreensão de muitos princípios matemáticos modernos que o leitor fatalmente terá de enfrentar. Aqui se encontram somente as definições e os teoremas imprescindíveis para o desenvolvimento dos tópicos da Teoria de Grupo nos capítulos e nas secções adiante.

Definição 1.1 — Um *conjunto* é uma coleção de entidades bem definidas chamadas *elementos* ou *objetos*. Esses elementos podem ser números, pessoas, animais, países, rios, livros etc.

Neste livro, será adotada a convenção comum de denotar conjuntos por letras maiúsculas $\mathbb{A}$, $\mathbb{B}$, $\mathbb{C}$ etc., e os elementos por letras minúsculas a , b , c etc. Um conjunto pode ser apresentado na *forma tabular*, como em

$$\mathbb{A} = \{a, b, c, p, t\},$$

ou na *forma de construção*, em que se descrevem determinadas propriedades que devem ser satisfeitas pelos elementos, como em

$$\mathbb{E} = \{x \mid x \text{ é múltiplo de } 3\}$$

ou em

$$\mathbb{E} = \{x \mid x \text{ é primo}\}.$$

Se um elemento x pertencer ao conjunto $\mathbb{A}$, diz-se que x *pertence a* $\mathbb{A}$, ou x *está em* $\mathbb{A}$ e é denotado por:

$$x \in \mathbb{A}.$$

Por outro lado, se x é um elemento qualquer e se $\mathbb{A}$ é um conjunto, então, admite-se que se saiba se x pertence a $\mathbb{A}$ ou se x não pertence a $\mathbb{A}$. Se x não pertencer a $\mathbb{A}$, denota-se por:

$$x \notin \mathbb{A}.$$

Um conjunto pode ser classificado em:

Conjunto Vazio – se o número de elementos for zero. Denota-se por $\{\}$ ou $\emptyset$. Note que quando escrever $\{\emptyset\}$, não se trata de um conjunto vazio.

Conjunto Finito – se o número de elementos for finito. *Exemplo:* Os conjuntos $\{-1, 1, 2\}$ e $\{a, e, i, o, u\}$ são conjuntos finitos.

Conjunto Infinito Enumerável – se o número de elementos for infinito e se puder associar, a cada elemento, um número natural numa correspondência um a um, tal como em $\{2, 4, 6, \dots\}$ e $\{1, 4, 7, 10, \dots\}$ que são exemplos de conjuntos infinitos e enumeráveis.

Conjunto Infinito não-Enumerável – se o número de elementos for infinito e se não puder fazer a associação um a um de números naturais a cada elemento. Um exemplo familiar deste tipo de conjunto é o dos números reais.

Definição 1.2 — Seja um conjunto $\mathbb{E} = \{a, b, c, d, \dots\}$. *Operação* entre dois elementos desse conjunto é definida e simbolizada como:

$$\begin{aligned} a b &= c, \\ b a &= d. \end{aligned}$$

No primeiro caso, diz-se que “ a operando sobre b resulta c ” e, no segundo caso, “ b operando sobre a resulta d ”. Essas simbolizações não necessariamente significam multiplicações e nem que $c = d$.

Para um conjunto finito, cujo número de elementos é pequeno, pode ser conveniente usar uma *tabela de operação* que a define. Por exemplo, seja