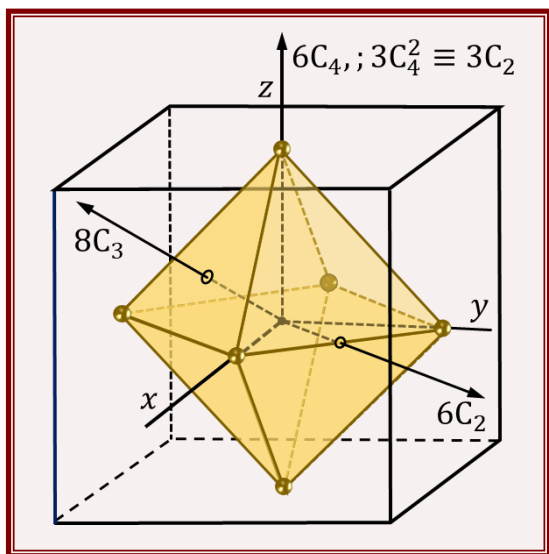




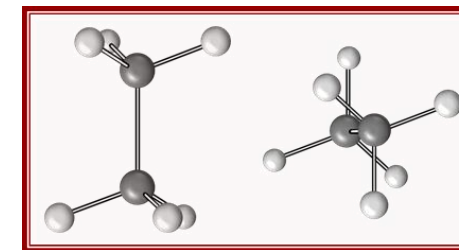
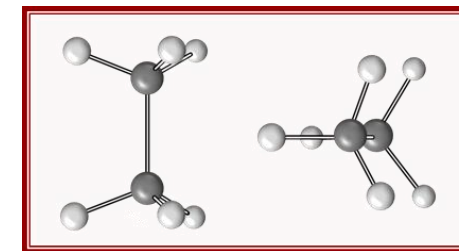
Teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



Lucy V. C. Assafí

Instituto de Física
Universidade de São Paulo





Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Grupos Pontuais

➤ Grupos de rotações simples (notação de Schoenflies)

1. $C_n \Rightarrow$ simetria consiste somente de rotações próprias C_n e são grupos *abelianos cíclicos* de ordem n . **Exemplo:** o grupo C_4 possui apenas os elementos $\{C_4, C_4^2 = C_2, C_4^3 = (C_4)^{-1}, C_4^4 = E\}$. Pode-se provar que as possíveis simetrias rotacionais que são compatíveis com a simetria translacional das redes cristalinas são as rotações de $2\pi/n$, $n = 1, 2, 3, 4, 6 \Rightarrow C_1, C_2, C_3, C_4$ e C_6 . Grupos de ordem n .
2. $C_{nv} \Rightarrow$ eixo C_n e n planos de reflexão σ_v que contêm o eixo C_n ("verticais" $\Rightarrow$ paralelos ao eixo rotacional da molécula) $\Rightarrow C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}$ e C_{6v} . Grupos de ordem $2n$.
3. $C_{nh} \Rightarrow$ eixo C_n e um plano de reflexão σ_h (plano horizontal) no plano da molécula $\Rightarrow C_{1h}, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}$ e C_{6h} . O grupo $C_{1h} = \{E, \sigma_h\}$ é também conhecido como grupo C_s . Os grupos C_{nh} com n par incluem a simetria de inversão (operação i). Grupos de ordem $2n$.
4. $S_n \Rightarrow$ eixo de rotação imprópria de ordem n par, pois se n ímpar, são idênticos aos $C_{nh} \Rightarrow S_2, S_4$ e S_6 , cada qual incluindo o grupo $C_{n/2}$ como subgrupo. O grupo $S_2 = \{E, i\}$ é também conhecido como grupo C_i . Grupos de ordem n .
5. $D_n \Rightarrow$ n eixos duplos (ou de ordem 2) perpendiculares ao eixo principal C_n . **Exemplo:** $n = 2 \Rightarrow$ eixo principal é C_2 , mas como o grupo é D_2 , existem 2 eixos C_2 que são perpendiculares ao eixo principal $\Rightarrow$ grupo D_2 tem três eixos C_2 mutuamente ortogonais. Grupos de ordem $2n$.
6. $D_{nd} \Rightarrow$ elementos de D_n mais planos diagonais de reflexão σ_d , bissetores dos eixos duplos perpendiculares ao eixo principal de rotação de maior ordem. Grupos de ordem $4n$.
7. $D_{nh} \Rightarrow$ elementos de D_n mais a reflexão num plano horizontal $\sigma_h \Rightarrow D_{nh}$ possui o dobro de elementos de simetria em relação a D_n . Grupos de ordem $4n$.



Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Grupos Pontuais

➤ Grupos de alta simetria (notação de Schoenflies)

1. $T \Rightarrow$ 12 rotações próprias que levam um tetraedro regular em si. É o menor dentre os grupos de alta simetria.
2. $T_d \Rightarrow$ elementos de T mais reflexões $\Rightarrow$ 24 operações. *Exemplo:* CH_4 .
3. $T_h \Rightarrow$ elementos de T mais reflexões e centro de inversão, resultando em 24 operações $\Rightarrow$ formado pelo produto direto do grupo T com o grupo C_i .
4. $O \Rightarrow$ 24 rotações próprias que levam um cubo ou um octaedro regular em si.
5. $O_h \Rightarrow$ elementos de O mais reflexões e centro de inversão, resultando em 48 operações $\Rightarrow$ formado pelo produto direto do grupo O com o grupo C_i . É o maior dentre os grupos pontuais.

Obs.: preste atenção que alguns dos grupos pontuais compartilham seus nomes com operações de simetria.

➤ Grupos das moléculas lineares (notação de Schoenflies)

1. $C_{\infty v} \Rightarrow$ completa simetria rotacional sobre o eixo molecular e simetria de reflexão em qualquer plano vertical contendo o eixo molecular.
2. $D_{\infty h} \Rightarrow$ tem os elementos de $C_{\infty v}$ mais um plano de reflexão horizontal e eixos C_2 contidos nele, que passam pelo centro da molécula (inversão). *Exemplos:* moléculas diatômicas homonucleares e moléculas lineares centro-simétricas.

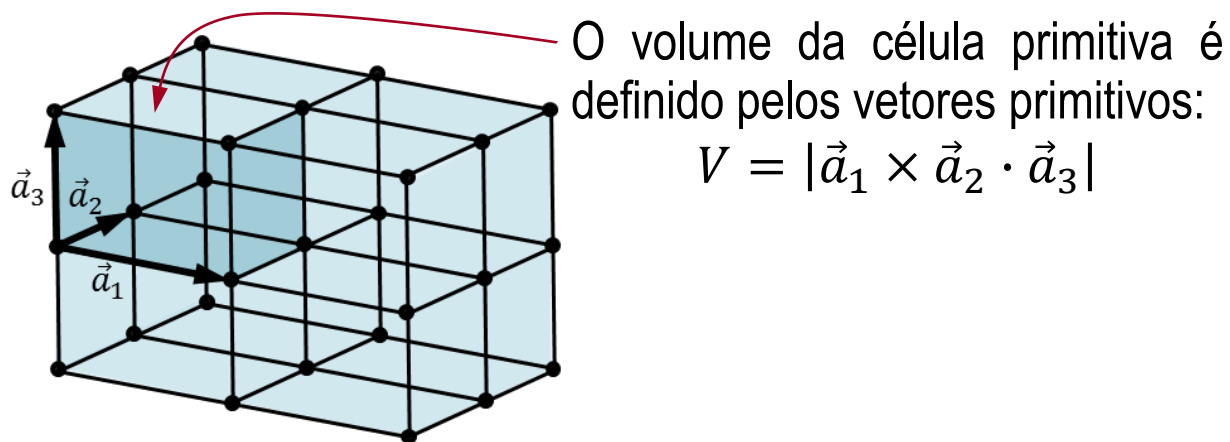


Sólidos ideais: rede e vetores de translação

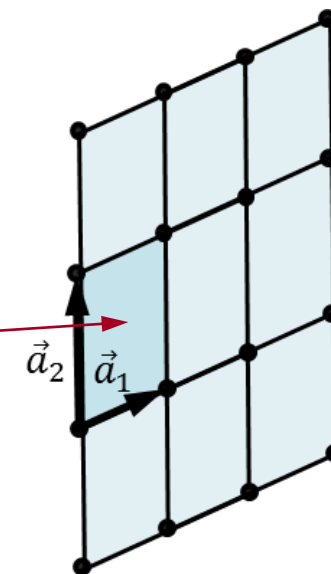
A definição dos vetores primitivos de translação $\{\vec{a}_i\}$ garante que não existe nenhuma célula com volume (área) menor que o definido por estes vetores, que poderia servir como bloco elementar para a construção da rede.

Em três (duas) dimensões os vetores de translação primitivos formam um paralelepípedo (paralelograma), chamado **célula primitiva**. Uma translação da rede é definida como uma operação que desloca o paralelepípedo (paralelograma) paralelamente a si mesmo, através dos vetores de translação da rede, preenchendo todo o espaço:

$$\left. \begin{array}{l} 2D \Rightarrow \vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 \\ 3D \Rightarrow \vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \end{array} \right\} n_1, n_2, n_3 = \text{n}^{\text{os}} \text{ inteiros}$$



A área da célula primitiva é definida pelos vetores primitivos:

$$A = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$$




Sólidos ideais: rede e vetores de translação



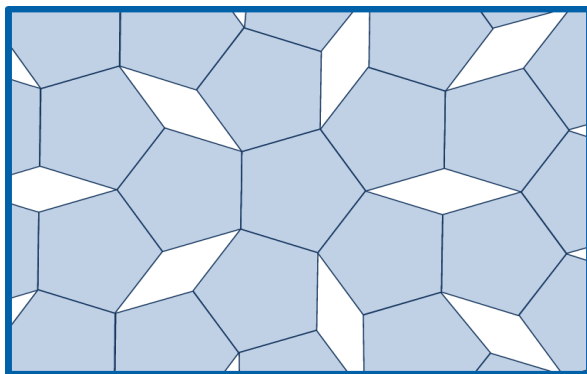
As redes matemáticas definidas pelos vetores

$$\left. \begin{array}{l} 2D \Rightarrow \vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 \\ 3D \Rightarrow \vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \end{array} \right\} n_1, n_2, n_3 = \text{n}^{\text{os}} \text{ inteiros}$$

são chamadas **Redes de Bravais**.

Além das operações de simetria de translação, que transformam as redes nelas mesmas, existem as operações de simetria pontuais: rotações, inversões e reflexões. Em torno de certos pontos especiais, no interior da célula primitiva, é possível a aplicação de operações de simetria pontuais que transformam a rede de pontos nela mesma.

Obrigando que essa simetria rotacional esteja associada com a simetria translacional da rede, obtemos que as possíveis rotações que são compatíveis com as translações e passíveis, portanto, de pertencer às redes cristalinas, são as rotações de $2\pi/n$, $n = 1, 2, 3, 4, 6$. Elas dão origem a figuras geométricas com simetrias de 3ª ordem (triângulos), 4ª ordem (quadrados e retângulos) e de 6ª ordem (hexágonos). Simetrias de 5ª e 7ª ordens não podem ser combinadas com a periodicidade translacional da rede.



Um eixo de simetria de 5ª ordem não pode existir em uma rede porque não é possível preencher todo o espaço da rede mediante uma arrumação contínua de pentágonos



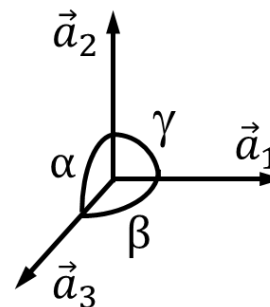
7 sistemas cristalinos e 14 tipos de redes de Bravais em três dimensões

Sistema Cristalino	Número de redes	Símbolo da rede	Relação Axial	Ângulos Interaxiais
Cúbico	3	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorrômbico	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	1	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Monoclínico	2	P, C	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Trigonal (Romboedral)	1	R	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Triclínico	1	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

$$|\vec{a}_1| = a, |\vec{a}_2| = b \text{ e } |\vec{a}_3| = c$$

As relações entre os vetores primitivos $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ e os ângulos α, β e γ são:

$$\angle a, b = \gamma, \angle a, c = \beta \text{ e } \angle b, c = \alpha$$

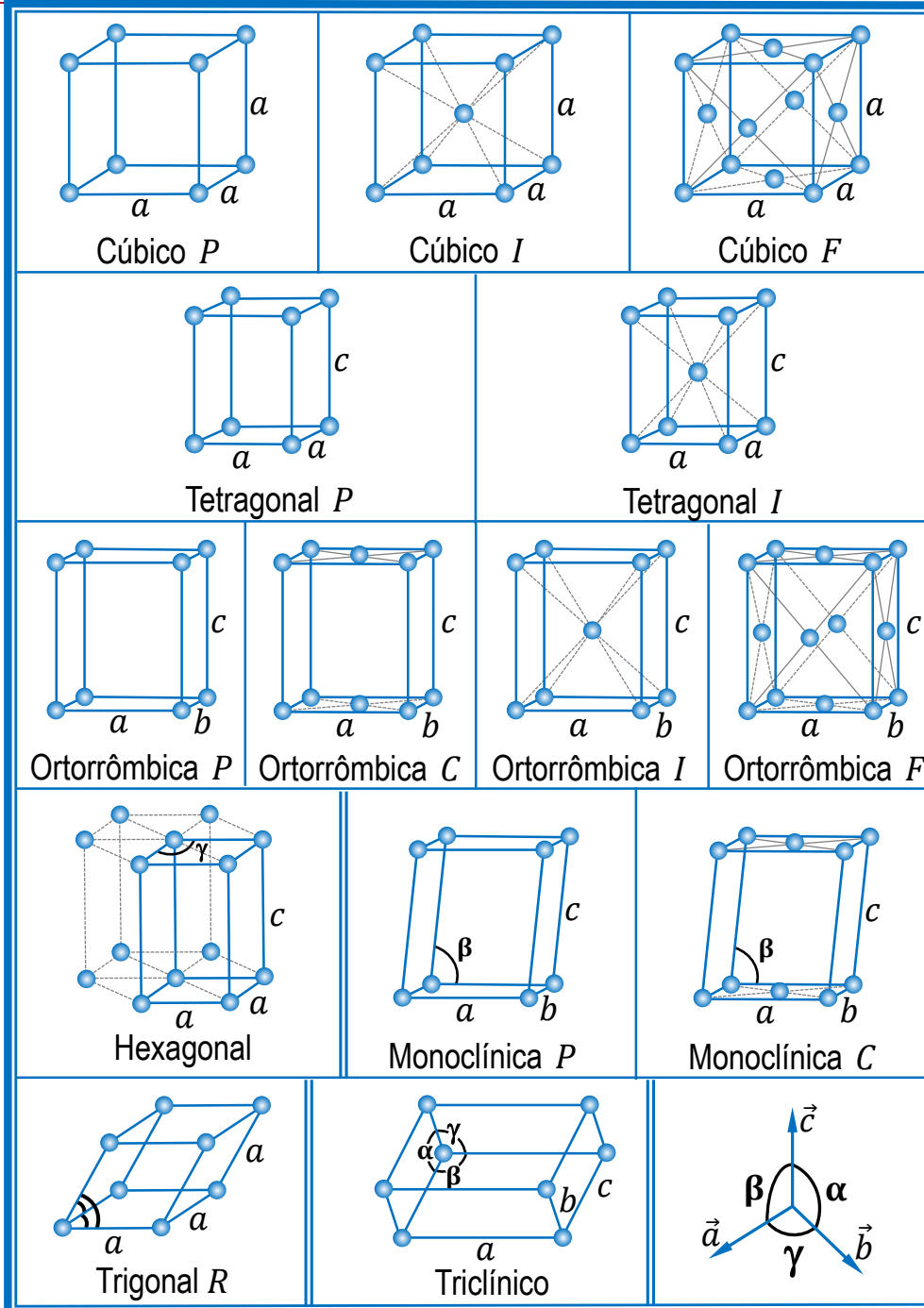


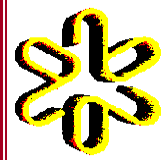


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



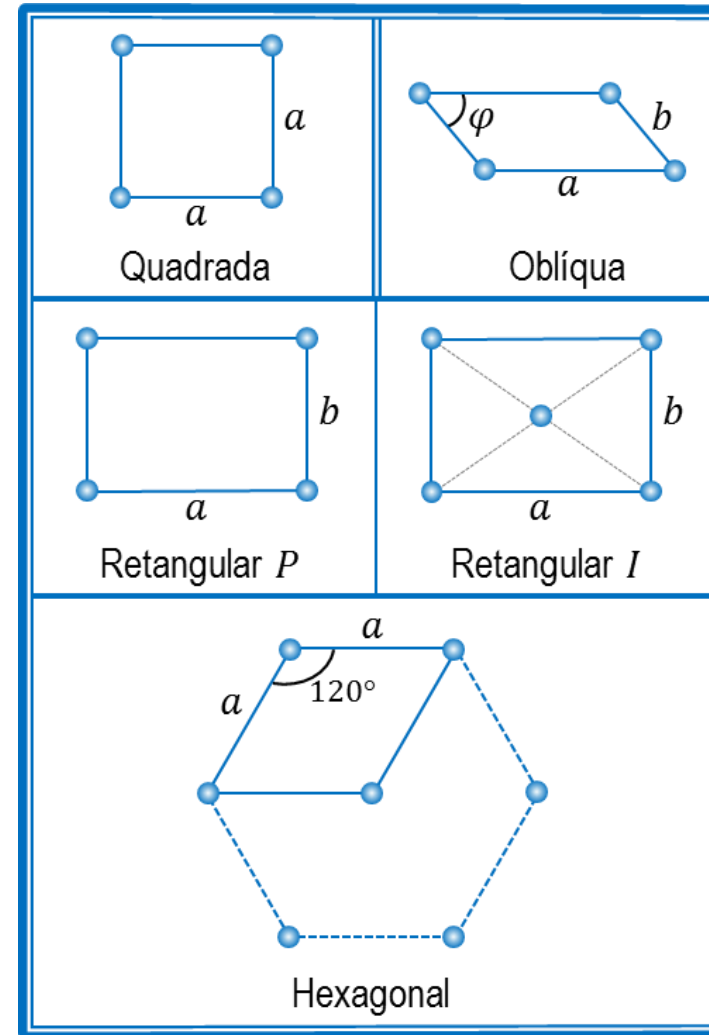
14 redes de Bravais em três dimensões





Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

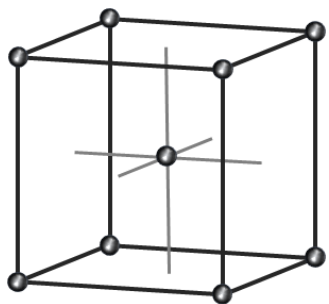
*5 redes de Bravais
em duas dimensões*





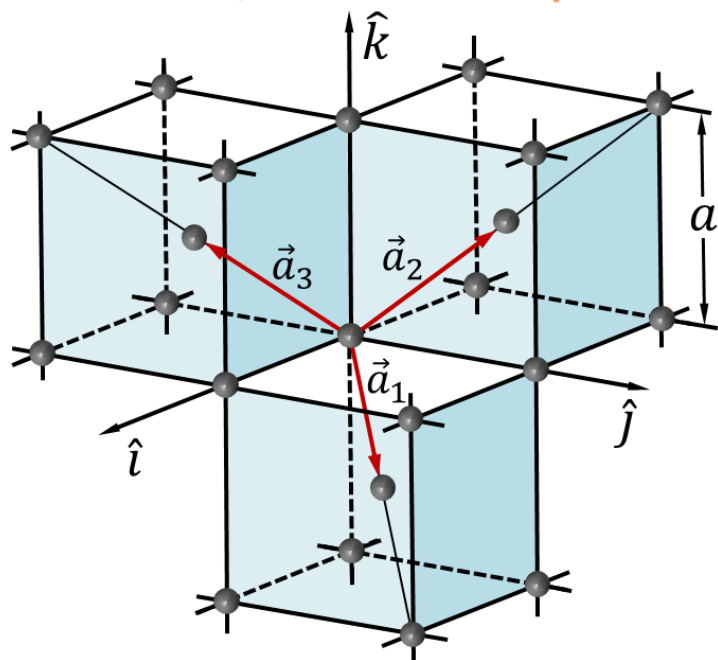
Sólidos ideais: estrutura cristalina

Rede de Bravais CCC



1/8 de ponto em cada um dos 8 vértices do cubo está na célula: $1/8 \times 8 = 1$ ponto. 1 ponto central totalmente contido na célula $\therefore 1 + 1 = 2$ pontos/célula $\Rightarrow$ célula convencional $\neq$ célula primitiva, que deve ter a metade do volume do cubo

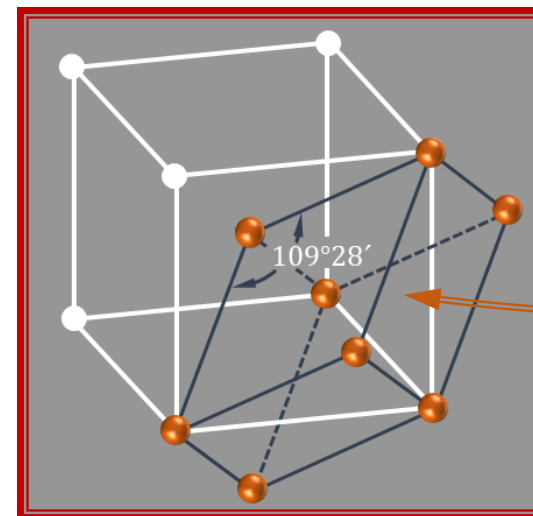
Construção da célula primitiva



Vetores primitivos

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a/2 (+\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \\ \vec{a}_2 = a/2 (-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \\ \vec{a}_3 = a/2 (+\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}) \end{cases}$$

$$V = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3| = a^3/2$$



célula primitiva

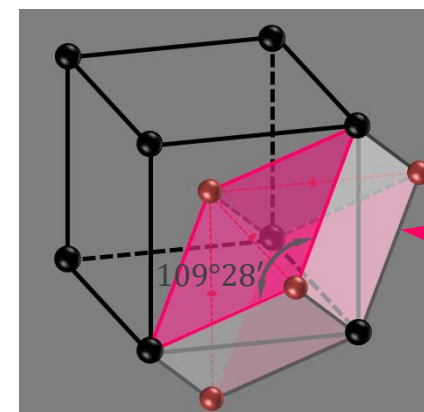


Sólidos ideais: estrutura cristalina



Rede de Bravais CCC

Elemento	a (Å)	Elemento	a (Å)
Ba	5,02	Na	4,23
Cr	2,88	Nb	3,30
Fe	2,87	Rb	5,59
K	5,23	Ta	3,31
Li	3,49	Eu	4,58
Mo	3,15	V	3,02
W	3,16	Cs	6,05

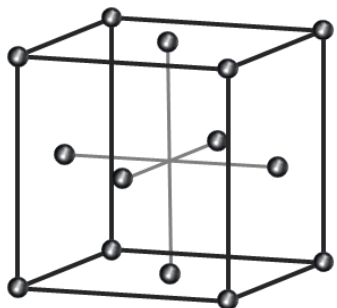


célula primitiva



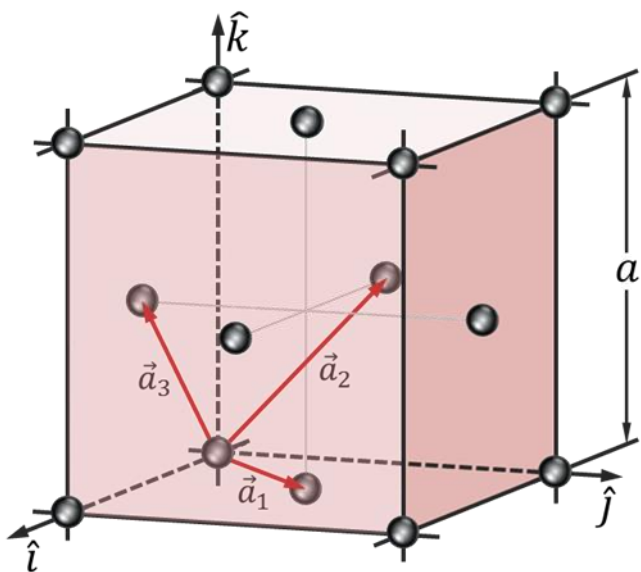
Sólidos ideais: estrutura cristalina

Rede de Bravais CFC



1/8 de ponto em cada um dos 8 vértices do cubo está na célula: $1/8 \times 8 = 1$ ponto. 1/2 ponto em cada uma das faces do cubo: $1/2 \times 6 = 3$ pontos $\therefore 1 + 3 = 4$ pontos/célula $\Rightarrow$ célula convencional $\neq$ célula primitiva

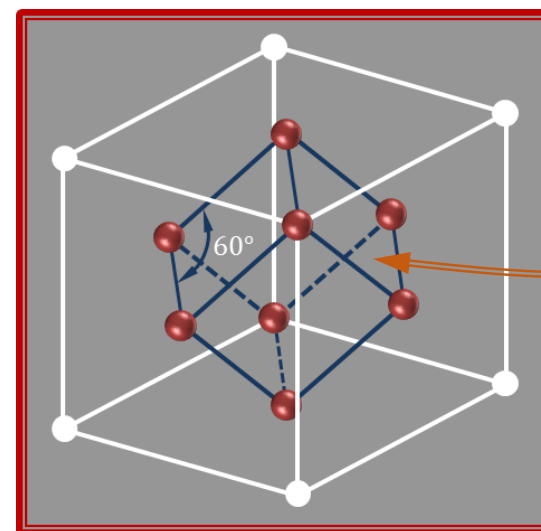
Construção da célula primitiva



Vetores primitivos

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a/2 (\hat{i} + \hat{j}) \\ \vec{a}_2 = a/2 (\hat{j} + \hat{k}) \\ \vec{a}_3 = a/2 (\hat{i} + \hat{k}) \end{cases}$$

$$V = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3| = a^3/4$$



célula primitiva

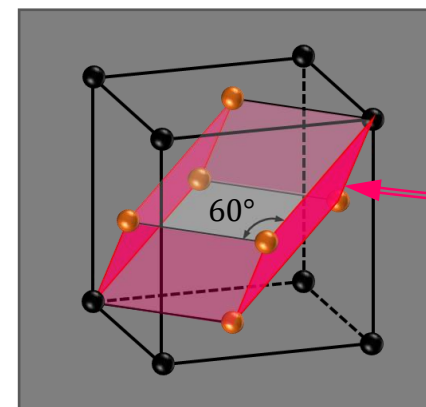


Sólidos ideais: estrutura cristalina



Rede de Bravais CFC

Elemento	$a(\text{\AA})$	Elemento	$a(\text{\AA})$
Ar	5,26	Ni	3,52
Ag	4,09	Pd	3,89
Al	4,05	Pt	3,92
Au	4,08	Rh	3,80
Ca	5,58	Pb	4,95
Ce	5,16	Sr	6,08
Ir	3,84	Th	5,08
Kr	5,72	Yb	5,49
Cu	3,61	Ac	5,31



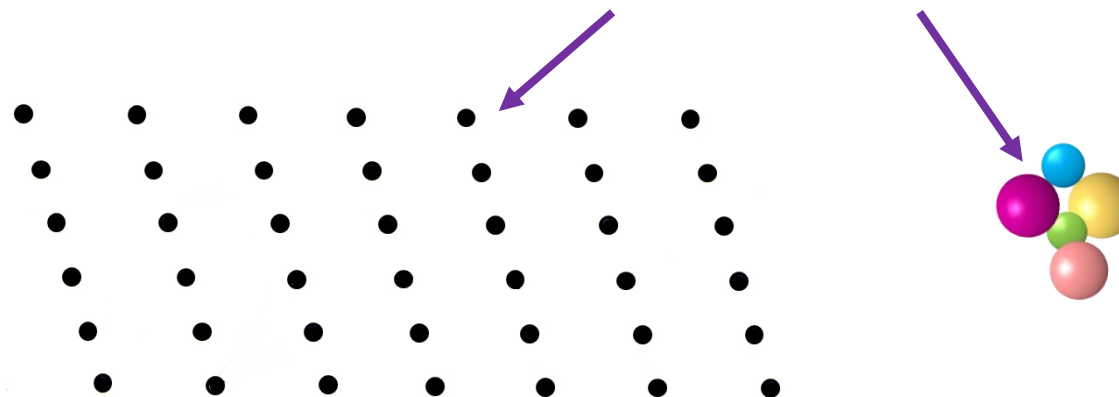
célula primitiva



Sólidos ideais: estrutura cristalina



Estrutura Cristalina = rede + base

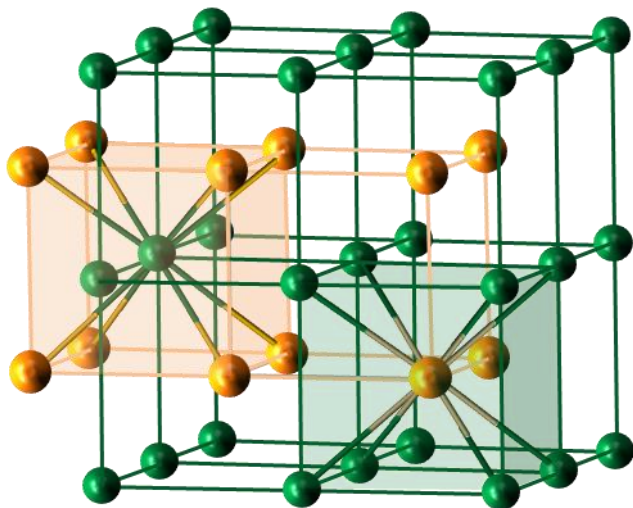


A base primitiva, associada à célula primitiva, deve conter o menor número possível de átomos, ou seja, nenhuma base pode conter um número de átomos menor do que o número de átomos contido na base primitiva



Sólidos ideais: estrutura cristalina

Estrutura Cristalina do Cloreto de Césio (CsCl)



Cada átomo de uma espécie se encontra no centro de um cubo formado por átomos da espécie oposta. A estrutura cristalina do CsCl pode ser imaginada como duas redes **CS**, de parâmetro de rede a , deslocadas de metade da diagonal do cubo, cada uma delas com átomos de uma espécie em seus vértices.

Vetores primitivos $\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = a\hat{i}, \vec{a}_2 = a\hat{j}, \vec{a}_3 = a\hat{k} \end{array} \right.$

Coordenadas dos átomos da base $\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_{\text{Cl}^-} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \\ \vec{r}_{\text{Cs}^+} = (n_1 + \frac{1}{2})\vec{a}_1 + (n_2 + \frac{1}{2})\vec{a}_2 + (n_3 + \frac{1}{2})\vec{a}_3 \end{array} \right.$

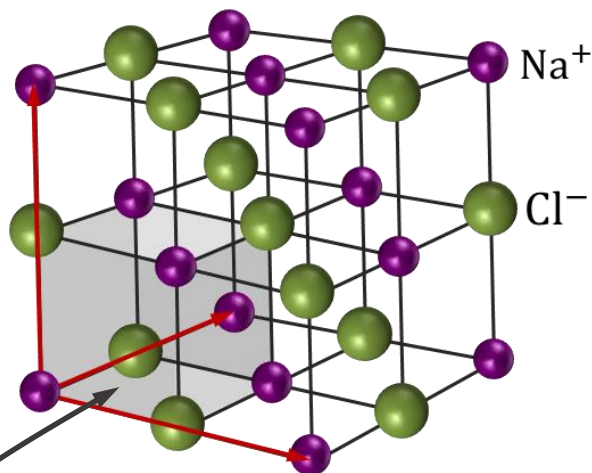
Cristal	a (Å)	Cristal	a (Å)
BeCu	2,70	AlNi	2,88
CuZn	2,94	CuPd	2,99
AgMg	3,28	LiHg	3,29
NH ₄ Cl	3,87	TlBr	3,97
CsCl	4,11	TlI	4,20



Sólidos ideais: estrutura cristalina



Estrutura Cristalina do Cloreto de Sódio (NaCl)



A rede de Bravais do cloreto de sódio não é **CS**, pois $\text{Cl}^- \neq \text{Na}^+$. Cada íon de Na^+ tem como primeiros vizinhos, na rede, 6 íons de Cl^- , posicionados nos vértices de um octaedro regular, enquanto que cada íon de Cl^- tem como primeiros vizinhos, na rede, 6 íons de Na^+ .

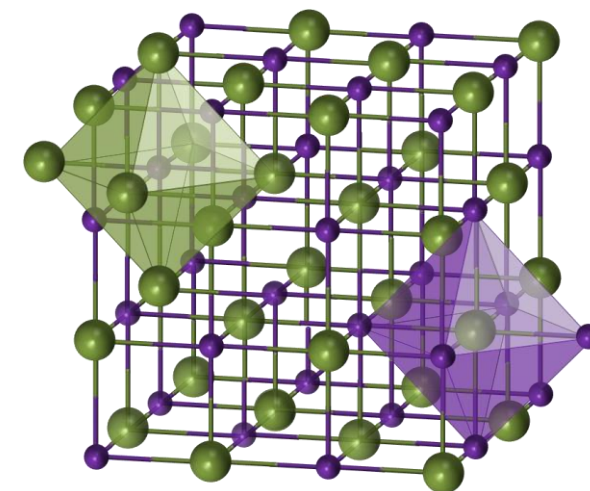
Esta estrutura pode ser imaginada como duas redes **CFC**, de parâmetro de rede a , deslocadas de metade da diagonal do cubo, cada uma delas com átomos de uma espécie em seus pontos de rede. A célula convencional **CS** possui 8 átomos na base.

Vetores primitivos

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{k} + \hat{i}) \end{cases}$$

Coordenadas dos átomos da base

$$\begin{cases} \vec{r}_{\text{Cl}^-} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \\ \vec{r}_{\text{Na}^+} = (n_1 + \frac{1}{2}) \vec{a}_1 + (n_2 + \frac{1}{2}) \vec{a}_2 + (n_3 + \frac{1}{2}) \vec{a}_3 \end{cases}$$



Cristal	a (Å)	Cristal	a (Å)
LiH	4,08	MgO	4,20
MnO	4,43	NaCl	5,63
AgBr	5,77	PbS	5,92
KCl	6,29	KBr	6,59



Sólidos ideais: estrutura cristalina



Estrutura Cristalina do Cloreto de Sódio (NaCl)

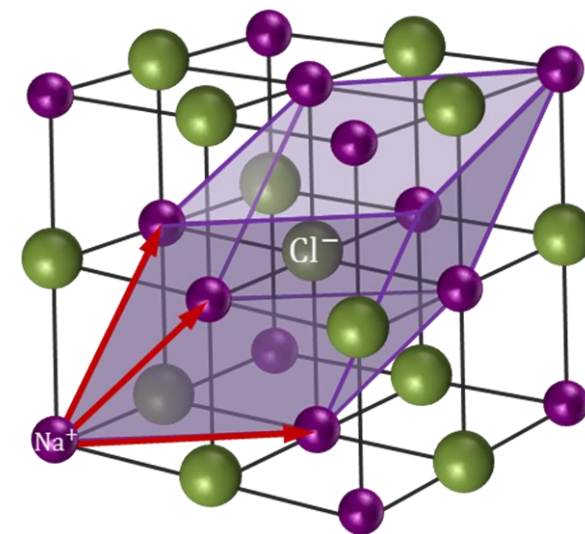
A célula primitiva **CFC** possui 2 átomos na base, um íon de Na^+ na posição $(0, 0, 0)$ e um íon de Cl^- na posição $(1/2, 1/2, 1/2)a$.

Vetores primitivos

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{k} + \hat{i}) \end{cases}$$

Coordenadas dos átomos da base

$$\begin{cases} \vec{r}_{\text{Na}^+} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \\ \vec{r}_{\text{Cl}^-} = (n_1 + \frac{1}{2})\vec{a}_1 + (n_2 + \frac{1}{2})\vec{a}_2 + (n_3 + \frac{1}{2})\vec{a}_3 \end{cases}$$





Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Procedimento sistemático para classificar as simetrias pontuais de moléculas e sólidos

Para classificar as simetrias corretamente devemos seguir as seguintes etapas:

Etapas 1 – Verificar se a molécula é linear ou não:

- Se linear e não contém inversão, então pertence ao grupo $C_{\infty v}$. Se contém inversão pertence ao grupo $D_{\infty h}$.
- Se o sistema não é linear e tem 2 ou mais eixos C_n com $n > 2$, então pertence aos grupos de alta simetria $\Rightarrow$ Os grupos T, T_d, T_h, O, O_h possuem quatro eixos C_3 , enquanto os grupos I e I_h possuem dez eixos C_3 e seis C_5 . Basta verificar se as moléculas podem ser superpostas num tetraedro, cubo, octaedro, dodecaedro ou icosaedro (sólidos platônicos):





Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Procedimento sistemático para classificar as simetrias pontuais de moléculas e sólidos

Etapa 2 – Se o sistema não pertencer a nenhum dos grupos especiais, *procurar por eixos próprios ou impróprios de rotação*. Se não tem eixos de rotação, de nenhum tipo, *procurar planos ou centro de simetria*.

- Se somente um plano de simetria for encontrado, então, o grupo é C_s (também chamado C_{1h}).
- Se somente um centro de inversão estiver presente, o grupo é C_i (também chamado de S_2).
- Se não houver nenhum elemento de simetria, o grupo contém somente a operação identidade e é o grupo C_1 .
- Se somente o eixo S_n (n par) for encontrado, o grupo é $S_n \Rightarrow S_4, S_6, S_8$, etc.

Etapa 3 – Se o sistema não pertencer a nenhum dos grupos anteriormente considerados, *procurar pelos eixos C_n que não são consequência de S_{2n}* . Uma vez encontrado o eixo C_n de mais alta ordem, *procurar por eixos C_2 que sejam perpendiculares ao C_n* :

a) *Se nenhum eixo C_2 perpendicular a C_n for encontrado*, então o grupo será ou C_n ou C_{nv} ou C_{nh} .

- Se existir apenas o eixo C_n então o grupo é C_n ;
- Se, além disso, forem encontrados n planos verticais (σ_v) interseccionando em C_n , o grupo é C_{nv} ;
- Se existir um plano horizontal (σ_h), em vez dos planos σ_v , o grupo é C_{nh} .

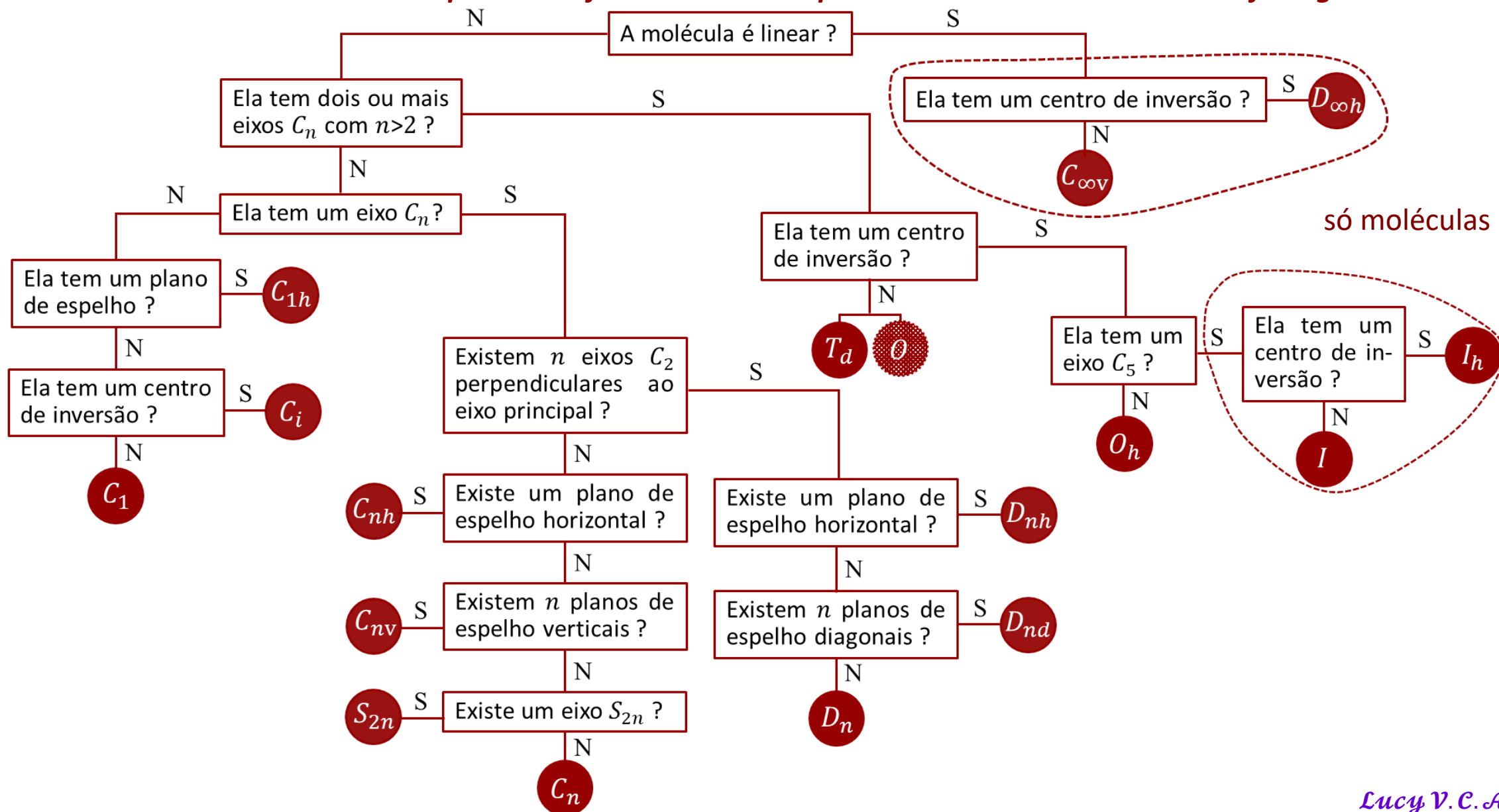
b) *Se, além do eixo C_n , existirem n eixos C_2 contidos num plano perpendicular ao C_n* , o grupo da molécula é D_n ou D_{nh} ou D_{nd} :

- Se houver apenas o eixo C_n e os n eixos C_2 perpendiculares a C_n , o grupo é D_n ;
- Se existir também um plano horizontal (σ_h), o grupo é D_{nh} ;
- Se houver n planos verticais bissecionando os n eixos C_2 (planos σ_d) e não existir plano σ_h , o grupo é D_{nd} .



Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Procedimento sistemático para classificar as simetrias pontuais de moléculas e sólidos: fluxograma



só moléculas

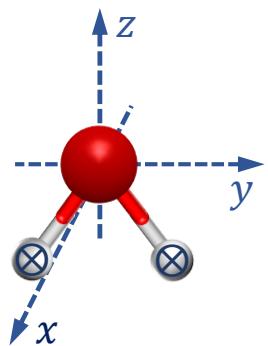
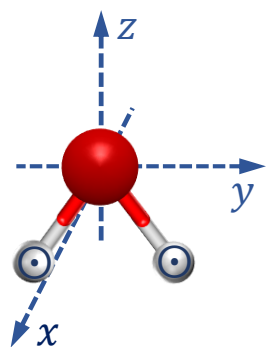


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Exemplo: C_{nv}

$\Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



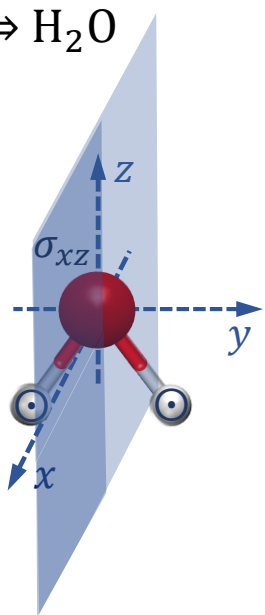
➤ Rotação própria $2\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$



Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo: C_{nv}

$\Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



- Rotação própria $2\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$
- Rotação própria $4\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow$ nada (identidade)

- Reflexão no plano $xz \Rightarrow \sigma_{xz}$ (nada)

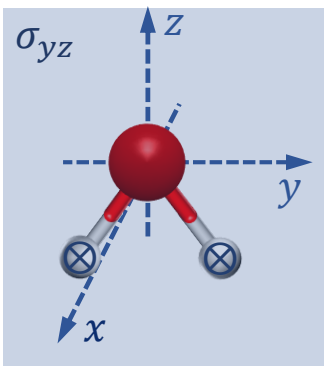
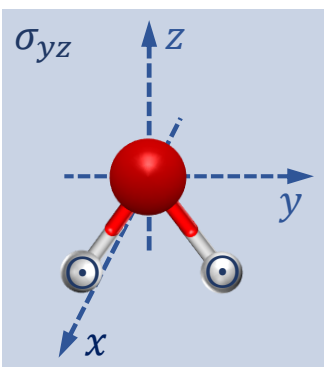


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Exemplo: C_{nv}

Grupo $C_{2v} \Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



Reflexão no plano $yz \Rightarrow \sigma_{yz} \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$

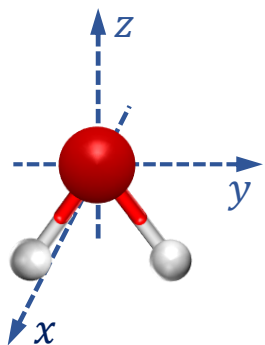


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Exemplo:

$\Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



- Rotação própria $2\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes (C_2)$
- Rotação própria $4\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow$ nada (identidade) (E)
- Reflexão no plano $xz \Rightarrow \sigma_{xz}$ (nada)
- Reflexão no plano $yz \Rightarrow \sigma_{yz} \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$ } 2 planos verticais contendo C_2
- Não centro-simétrica
- Sem eixo impróprio

- Se, além do eixo C_n , forem encontrados n planos verticais (σ_v) interseccionando em C_n , o grupo é $C_{nv} \Rightarrow n = 2$
- O grupo é de ordem $2n \Rightarrow 4$

Grupo de ordem 4: $E, C_2, \sigma_{xz}, \sigma_{yz} \Rightarrow$ Grupo C_{2v}

Tabela de multiplicação?

Cíclico?

Abeliano?

Subgrupos?

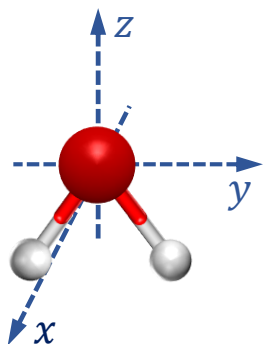
Classes?



Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo:

$\Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



- Rotação própria $2\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes (C_2)$
- Rotação própria $4\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow$ nada (identidade) (E)
- Reflexão no plano $xz \Rightarrow \sigma_{xz}$ (nada)
- Reflexão no plano $yz \Rightarrow \sigma_{yz} \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$ } 2 planos verticais contendo C_2
- Não centro-simétrica
- Sem eixo impróprio

- Se, além do eixo C_n , forem encontrados n planos verticais (σ_v) interseccionando em C_n , o grupo é $C_{nv} \Rightarrow n = 2$
- O grupo é de ordem $2n \Rightarrow 4$

Grupo de ordem 4: $E, C_2, \sigma_{xz}, \sigma_{yz} \Rightarrow$ Grupo C_{2v}

Cíclico? não ($\nexists$ um elemento gerador)

Abeliano? sim

Tabela de multiplicação

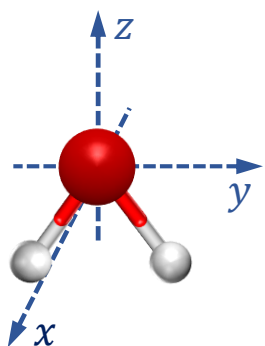
C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
E	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	E	σ_{yz}	σ_{xz}
σ_{xz}	σ_{xz}	σ_{yz}	E	C_2
σ_{yz}	σ_{yz}	σ_{xz}	C_2	E



Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo:

$\Rightarrow \text{H}_2\text{O}$



- Rotação própria $2\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes (C_2)$
- Rotação própria $4\pi/2$ em torno de $z \Rightarrow$ nada (identidade) (E)
- Reflexão no plano $xz \Rightarrow \sigma_{xz}$ (nada)
- Reflexão no plano $yz \Rightarrow \sigma_{yz} \Rightarrow \odot \leftrightarrow \otimes$ } 2 planos verticais contendo C_2
- Não centro-simétrica
- Sem eixo impróprio

- Se, além do eixo C_n , forem encontrados n planos verticais (σ_v) interseccionando em C_n , o grupo é $C_{nv} \Rightarrow n = 2$
- O grupo é de ordem $2n \Rightarrow 4$

Grupo de ordem 4: $E, C_2, \sigma_{xz}, \sigma_{yz} \Rightarrow$ Grupo C_{2v}

Cíclico? não ($\nexists$ um elemento gerador)

Abeliano? sim

Classes? 4 classes (cada elemento é o seu próprio conjugado)

Subgrupos? $5 \Rightarrow \begin{cases} 2 \text{ impróprios: } \{E\}, C_{2v} \\ 3 \text{ próprios: } \{E, C_2\}, \{E, \sigma_{xz}\}, \{E, \sigma_{yz}\} \end{cases}$

Tabela de multiplicação

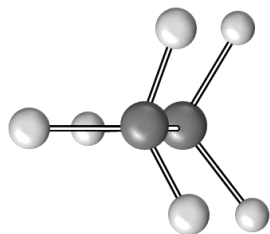
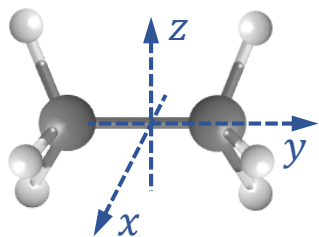
C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
E	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	E	σ_{yz}	σ_{xz}
σ_{xz}	σ_{xz}	σ_{yz}	E	C_2
σ_{yz}	σ_{yz}	σ_{xz}	C_2	E



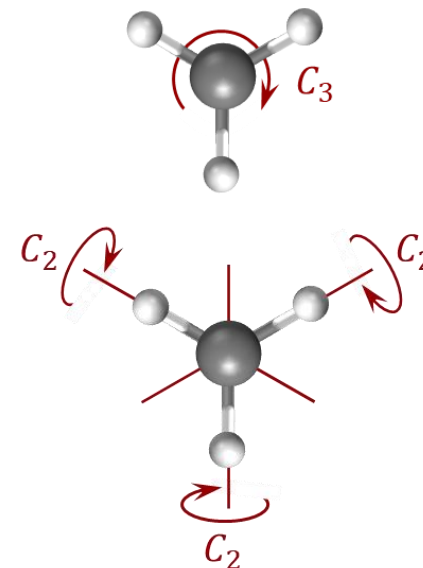
Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo:

$\Rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ (etano eclipsado)



- Rotação própria de $2\pi/3$ em torno de y
- Rotação própria de $2(2\pi/3)$ em torno de y
- Rotação própria de $3(2\pi/3)$ em torno de $y \Rightarrow$ identidade
- Rotação própria de $2\pi/2$ em torno de 3 eixos $C_2 \perp y$

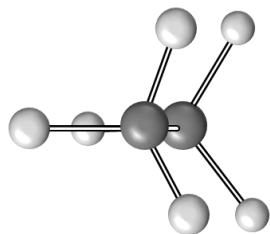
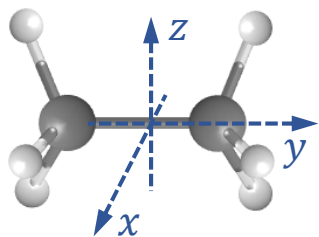




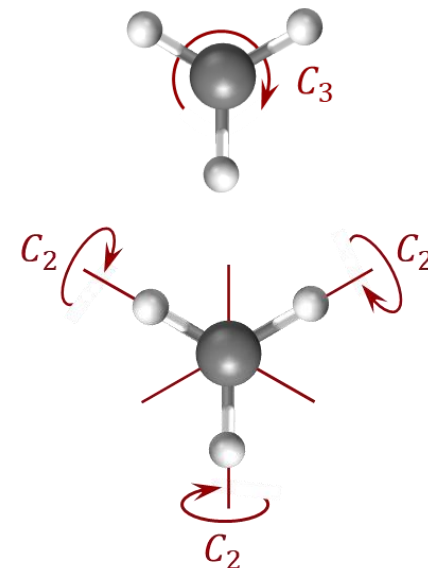
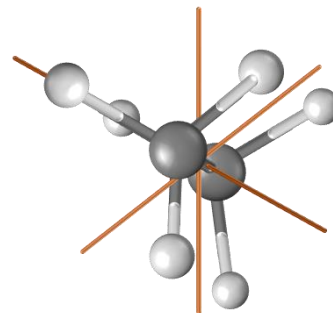
Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo:

$\Rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ (etano eclipsado)



- Rotação própria de $2\pi/3$ em torno de y
- Rotação própria de $2(2\pi/3)$ em torno de y
- Rotação própria de $3(2\pi/3)$ em torno de $y \Rightarrow$ identidade
- Rotação própria de $2\pi/2$ em torno de 3 eixos $C_2 \perp y$



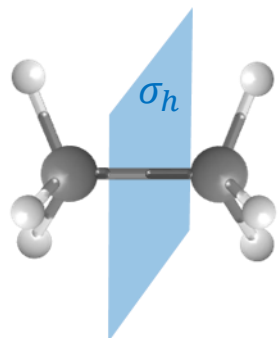
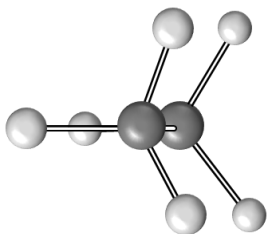
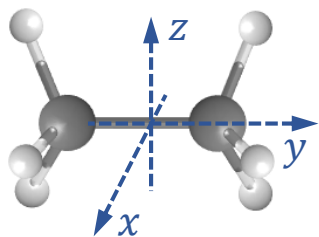


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Exemplo:

$\Rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ (etano eclipsado)

Grupo D_{3h} $\Rightarrow$ grupo de ordem 12 ($4n$)

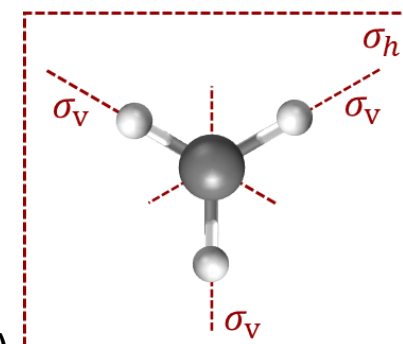
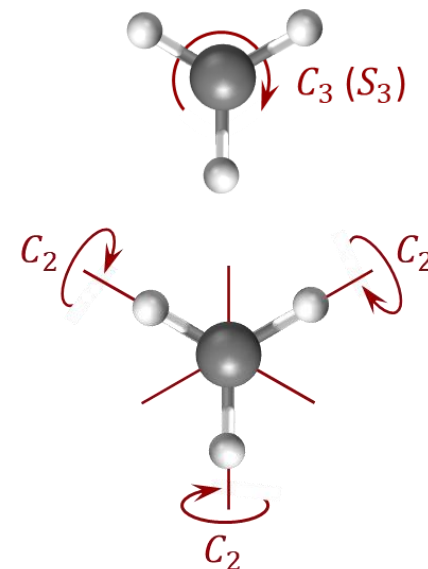


- Rotação própria de $2\pi/3$ em torno de y
- Rotação própria de $2(2\pi/3)$ em torno de y
- Rotação própria de $3(2\pi/3)$ em torno de $y \Rightarrow$ identidade

- Rotação própria de $2\pi/2$ em torno de 3 eixos $C_2 \perp y$

- Reflexão no plano $xz \Rightarrow \sigma_h$
- Reflexão nos 3 planos $\text{H} - \text{C} - \text{C} - \text{H} \Rightarrow \sigma_v$

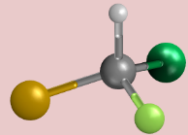
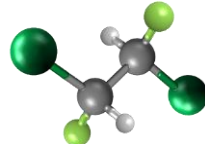
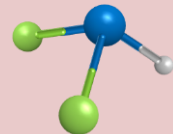
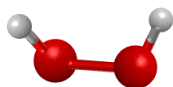
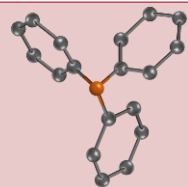
- Rotação de $2\pi/3$ em torno de y seguida da reflexão σ_h (plano xz)
- Rotação de $2(2\pi/3)$ em torno de y seguida da reflexão σ_h (plano xz)





Simetria e grupos de simetria

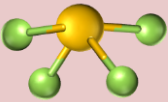
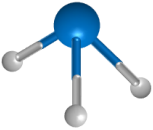
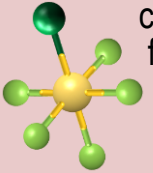
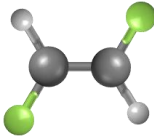


Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
C_1	E	1	 bromo-cloro-fluorometano <chem>HCFCBrCl</chem>
$C_i (S_2)$	E, i	2	 1,2-dicloro-1,2-difluoroetano <chem>C2H2F2Cl2</chem>
$C_s (C_{1h})$	E, σ_h	2	 difluoro-amina <chem>NHF2</chem>
C_2	E, C_2	2	 peróxido de hidrogênio <chem>H2O2</chem>
C_3	E, C_3, C_3^2	3	 trifenil-fosfina <chem>P(C6H5)3</chem>
C_n	E, $C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}$	n	simetrias C_4 e C_6 são extremamente raras

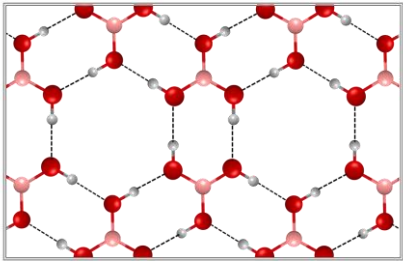


Simetria e grupos de simetria



Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
C_{2v}	$E, C_2, 2\sigma_v$	4	tetrafluoreto de enxofre  SF_4
C_{3v}	$E, C_3, C_3^2, 3\sigma_v$	6	amônia  NH_3
C_{nv}	$E, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, n\sigma_v$	$2n$	simetrias C_{4v} e C_{6v} são raras  cloro-pentafluoreto de enxofre SF_5Cl
C_{2h}	E, C_2, σ_h, i	4	 1,2-difluoretileno $C_2H_2F_2$
C_{3h}	$E, C_3, C_3^2, \sigma_h, S_3, S_3^5$	6	ácido bórico  H_3BO_3

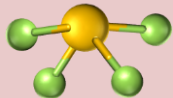
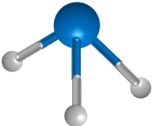
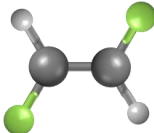
O ácido bórico é frequentemente usado como anti-séptico, inseticida, retardador de chamas, absorvedor de nêutrons ou precursor de outros compostos químicos. Tem a fórmula química H_3BO_3 , às vezes escrita como $B(OH)_3$, e existe na forma de cristais incolores ou um pó branco que se dissolve em água. Quando ocorre como mineral, é denominado sassolita.





Simetria e grupos de simetria

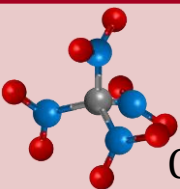
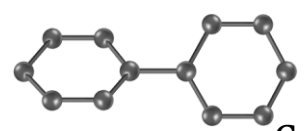
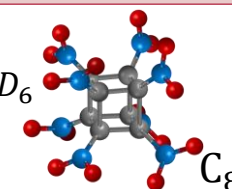
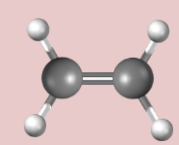
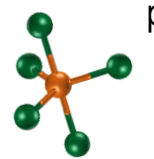


Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
C_{2v}	$E, C_2, 2\sigma_v$	4	tetrafluoreto de enxofre  SF_4
C_{3v}	$E, C_3, C_3^2, 3\sigma_v$	6	 amônia NH_3
C_{nv}	$E, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, n\sigma_v$	$2n$	simetrias C_{4v} e C_{6v} são raras  cloro-pentafluoreto de enxofre SF_5Cl
C_{2h}	E, C_2, σ_h, i	4	 1,2-difluoretileno $C_2H_2F_2$
C_{3h}	$E, C_3, C_3^2, \sigma_h, S_3, S_3^5$	6	ácido bórico  $B(OH)_3$
C_{nh}	$E, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, \sigma_h, S_n, i, S_n^3, \dots, S_n^{n-1}$	$2n$	simetrias C_{3h} , C_{4h} e C_{6h} são muito raras



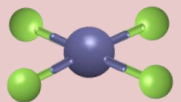
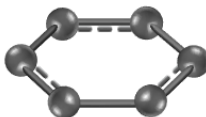
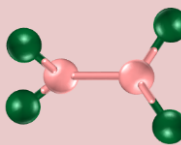
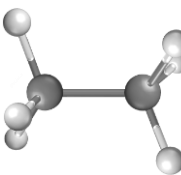
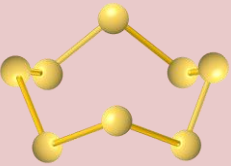
Simetria e grupos de simetria



Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
S_n (n par)	$E, S_n, S_n^2, \dots, S_n^{n-1}$	n	simetrias S_4 e S_6 são muito raras  tetranitro- metano $C(NO_2)_4$
D_2	$E, C_2, 2C_2' (\perp C_2)$	4	 bifenil $C_{12}H_{10}$
D_3	$E, C_3, C_3^2, 3C_2 (\perp C_3)$	6	ácido oxálico  D_n $C_2H_2O_4$
D_n	$E, C_n, \dots, C_n^{n-1}, nC_2 (\perp C_n)$	$2n$	simetrias D_4 e D_6 são muito raras  Octanitro- cubano $C_8(NO_2)_8$
D_{2h}	$E, C_2, 2C_2' (\perp C_2), \sigma_h, \sigma_h C_2, 2C_2' \sigma_h$	8	 etileno C_2H_4
D_{3h}	$E, C_3, C_3^2, 3C_2 (\perp C_3), \sigma_h, \sigma_h C_3, \sigma_h C_3^2, 3C_2 \sigma_h$	12	 pentacloreto de fósforo PCl_5



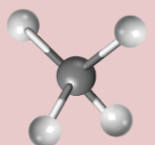
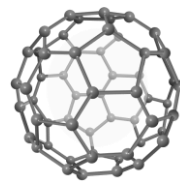
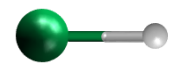
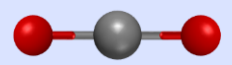
Simetria e grupos de simetria

Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
D_{4h}	$E, C_4, C_4^2, C_4^3, 4C_2 (\perp C_4), \sigma_h, \sigma_h C_4, \sigma_h C_4^2, \sigma_h C_4^3, 4C_2 \sigma_h$	16	 tetrafluoreto de xenônio XeF_4
D_{6h}	$E, C_6, C_6^2, \dots, C_6^5, 6C_2 (\perp C_6), \sigma_h, \sigma_h C_6, \dots, \sigma_h C_6^5, 6C_2 \sigma_h$	24 (4n)	 benzeno C_6H_6
D_{2d}	$E, C_2, 2C_2' (\perp C_2), 2\sigma_d, 2S_4$	8	 tetracloreto de diboro B_2Cl_4
D_{3d}	$E, C_3, C_3^2, 3C_2 (\perp C_3), 3\sigma_d, i, 2S_6$	12	 etano estrelado C_2H_6
D_{4d}	$E, C_4, C_2, C_4^3, 4C_2' (\perp C_4), 4\sigma_d, 2S_8, 2S_8^3$	16	 enxofre na estrutura de coroa S_8
D_{nd}	$E, C_n, \dots, C_n^{n-1}, nC_2 (\perp C_n), n\sigma_d, S_{2n}, S_{2n}^2, \dots, S_{2n}^{2n-1}$	4n	simetrias D_{4d} e D_{6d} são muitíssimo raras



Simetria e grupos de simetria



Grupo pontual	Elementos de Simetria	Ordem	Exemplo
T_d	$E, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d$	24	 metano CH_4
O_h	$E, 6C_4, 3C_4^2, 8C_3, 6C_2, i, 6S_4, 3\sigma_h, 8S_6, 6\sigma_d$	48	 hexafluoreto de enxofre SF_6
I_h	$E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2, i, 12S_{10}, 12S_{10}^3, 20S_6, 15\sigma$	120	 fulereno C_{60}
$C_{\infty v}$	$E, 2C_\phi, \infty\sigma_v$	∞	 ácido clorídrico HCl
$D_{\infty h}$	$E, 2C_\phi, \infty\sigma_v, i, 2iC_\phi, \infty C_2$	∞	 dióxido de carbono CO_2

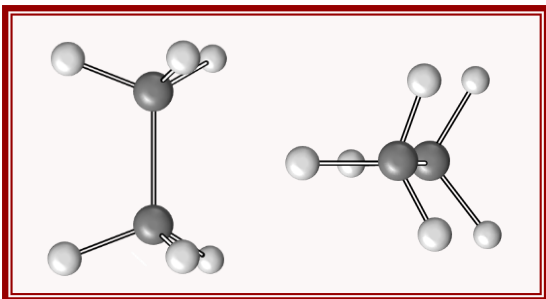


Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria



Exercício 2:

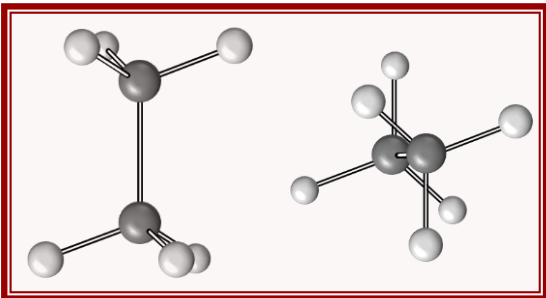
$\Rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ (etano eclipsado) $\Rightarrow$ Grupo D_{3h} Construir a tabela de multiplicação



Cíclico? Abeliano? Classes? Subgrupos?

O grupo D_{3h} tem oito subgrupos próprios (não triviais) distintos de sete tipos diferentes: D_3 , C_{3h} , C_{3v} , C_3 , C_{2v} , C_2 , C_s (o subgrupo C_s aparece em duas orientações diferentes).

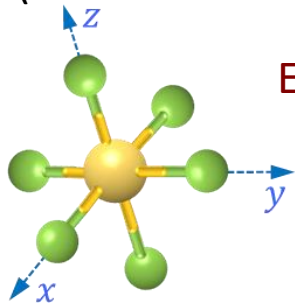
$\Rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ (etano estrelado) $\Rightarrow$ Grupo ???? Construir a tabela de multiplicação



Cíclico? Abeliano? Classes? Subgrupos?

O grupo D_{3d} tem oito subgrupos próprios (não triviais): S_6 , D_3 , C_{3v} , C_3 , C_{2h} , C_2 , C_s , C_i . Cada um deles aparece em apenas uma orientação, o que, no entanto, não é em todos os casos a orientação padrão para esse grupo.

$\Rightarrow \text{SF}_6$ (hexafluoreto de enxofre) $\Rightarrow$ Grupo O_h



Encontrar os 48 elementos de simetria

Entregar até terça-feira dia 25 de abril