|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA**  **PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1808** | **Teoria de Grupo e Grupos de Ponto Moleculares (45-3)** | **Eletiva** |

EMENTA:

|  |
| --- |
| Simetria como característica de objetos concretos e abstratos. Elementos de simetria e operações. Grupos de ponto e classes de simetria. Sistemática de grupos de ponto moleculares: simbologia, tipos, redução de simetria e classificação de uma molécula quanto a sua simetria de ponto. Tabela de caracteres: estruturação e aplicações na espectroscopia e orbitais moleculares envolvendo sistemas moleculares multinucleados. |

PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 - ELEMENTOS DE SIMETRIA E OPERAÇÕES  1.1 - Conceito de simetria  1.2 - Elementos de simetria e operações: Generalidades; Eixo axial (*C*p); Plano de espelhamento (*σ*); Centro de inversão (*i*); Eixo axial de rotação-espelhamento (*S*p)  1.3 - Enquadramento do objeto de análise em um sistema de coordenadas cartesianas  UNIDADE 2 - TEORIA DOS GRUPOS DE PONTO  2.1 - Propriedades gerais de grupo: Aplicação de axiomas de grupos em grupos de ponto; Tabelas de multiplicação; Grupos de ponto cíclicos; Classes de simetria  UNIDADE 3 - SISTEMÁTICA DOS GRUPOS PONTUAIS MOLECULARES.  3.1 - Simbologia  3.2 - Tipo I - Grupos não-axiais  3.3 - Tipo II - Grupos *C*  3.4 - Tipo III - Grupos *D*  3.5 - Tipo IV - Grupos poliédricos  3.6 - Tipo V - Grupos rotacionais  3.7 - Decréscimo de simetria  3.8 - Organograma para a classificação simetria de ponto molecular  UNIDADE 4 – TABELA DE CARACTERES  4.1 - Representação vetorial de graus de liberdade: Definição de grau de liberdade; Representação vetorial  4.2 - Molécula angular - AB2: Vetores de translação; Vetores rotacionais; Vetores vibracionais; Construção da tabela de caracteres; Leis da tabela de caracteres  4.3 - Molécula piramidal - AB4 |

|  |
| --- |
| 4.4 - Simbologia de Mulliken  4.5 - Formulário geral para caracteres de translação e rotação: Giro axial de um ponto; Eixo axial de rotação (*C*p); Centro de inversão(*i*); Plano de espelhamento (*σ*); Eixo axial de rotação-espelhamento (*S*p)  4.6 - Atividade vibracional: Modos vibracionais ativos no infravermelho; Modos vibracionais ativos no RAMAN; Princípio da exclusão  UNIDADE 5 - ANÁLISE VIBRACIONAL  5.1 - Formalismo da representação do somatório dos graus de liberdade moleculares  5.2 - Formalismo de redução com correlação entre grau de liberdade e espécie de simetria  5.3 - Coordenadas internas de uma molécula  5.4 - Espectro vibracional de molécula AB3 - modos vibracionais ativos no infravermelho e RAMAN: Molécula AB3 com simetria piramidal; Molécula AB3 com simetria trigonal-planar  5.5 - Espectro vibracional de molécula AB2 - modos vibracionais ativos no infravermelho e RAMAN: Molécula AB2 angulada; Moléculas AB2 linear  5.6 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula C≡O coordenada em derivado de pentacarbonila metálica  5.7 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula com simetria octaédrica regular  5.8 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula com simetria tetraédrica regular  5.9 - Modos vibracionais ativos na redução da simetria na molécula com simetria poliédrica *T*d e *O*h  UNIDADE 6 - ESPECTROS DE INFRAVERMELHO DE CARBONILAS METÁLICAS  6.1 - Carbonila metálica com simetria poliédrica *O*h e derivada: ;Tipo M(CO)6; Tipo M(CO)5X; Tipo M(CO)4X2; Tipo M(CO)3X3; Tipo M(CO)2X4  6.2 - Carbonila metálica com simetria *D*3h e derivada: Tipo M(CO)5; Tipo M(CO)4X; Tipo M(CO)3X2  6.3 - Carbonila metálica com simetria poliédrica *T*d e derivada: Tipo M(CO)4; Tipo M(CO)3X; Tipo M(CO)2X2  6.4 - Carbonilas metálicas multinucleadas: Tipo M2(CO)10; Tipo M2(CO)9  6.5 - Modos vibracionais ativos na correlação com a simetria local de uma carbonila metálica e derivada: Tipo M3(CO)12; Tipo η5-C5H5M(CO)3X; Tipo η5-C5H5M(CO)3  UNIDADE 7 - CORRELAÇÃO COM A SIMETRIA CRISTALOGRÁFICA  7.1 - Correlação da simbologia de Hermann-Mauguin com a simbologia de Mulliken  7.2 - Classes de simetria unidimensional  7.3 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais unidimensionais  7.4 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais bidimensionais  7.5 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais tridimensionais  7.6 - Simetria cristalina - grupos de ponto cristalográficos. Simbologia de Schönflies |

BIBLIOGRAFIA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR | | |
| COTTON, F. A.; **Chemical Applications of Group Theory**, 3rd Ed., John Willey & Sons, Hoboken, 1963.  COTTON, F. A.; Wilkinson, G.; **Advanced Inorganic Chemistry**, 5th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 1988.  OLIVEIRA, G. N. M.; **Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional**, Bookmann, Porto Alegre, 2009.  HAHN, T.; **International Tables for Crystallography**, Vol. A, 5th Ed., The International Union of Crystallography/Springer, New York, 2005.  KUNZE, U.; LORENZ, I.-P.; **Gruppentheorie und Molekülsymmetrie** (com tradução por solicitação de autorização aos autores).  Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. | | |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_    \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Chefe do Departamento | |