

5930647 – Físico-Química IV
Lista 3 - Simetria Molecular

1. Explique o que se entende por um “grupo”.
2. Identifique os grupos que pertencem os seguintes objetos:
 - (a) esfera
 - (b) triângulo isósceles
 - (c) triângulo equilátero
 - (d) lápis cilíndrico sem ponta
3. As moléculas CH_3Cl e CCl_4 pertencem, respectivamente, aos grupos C_{3v} , T_d . Dê os elementos de simetria de cada grupo e localize-os nas suas respectivas moléculas.
4. Dê os elementos de simetria das seguintes moléculas e identifique o grupo de simetria a que pertencem: (a) NO_2 , (b) N_2O , (c) $\text{CH}_2=\text{CH}_2$.
5. Explique os critérios de simetria que permitem que a molécula (a) seja polar (b) seja opticamente ativa.
6. Explique como surgem as regras de seleção espectroscópicas e como elas são formuladas usando-se a teoria de grupos.
7. Identifique e liste quatro aplicações das tabelas de caracteres.
8. Com as propriedades de simetria determine se a integral $\int p_x z p_z d\tau$ é ou não necessariamente nula em um molécula com a simetria C_{4v} .
9. Mostre que a transição $A_1 \rightarrow A_2$ é proibida como transição de dipolo elétrico numa molécula C_{3v} .
10. Imagine a molécula NO_2 do C_{2v} . A combinação $p_x(A)-p_x(B)$ dos dois átomos de O (com x perpendicular ao plano), cobre A_2 . Há algum orbital do átomo de N central que possa ter sobreposição não nula com esta combinação de orbitais dos O? Como seria o problema com o SO_2 , onde estão disponíveis orbitais 3d?