

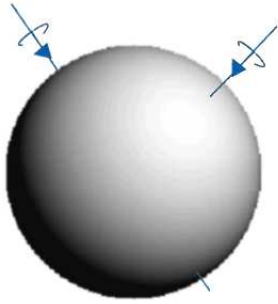
Simetria Molecular

- A simetria dos objectos
- Operações e elementos de simetria
- Classificação das moléculas por simetria

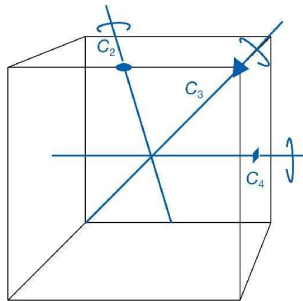
A simetria dos objectos

Simetria – é a propriedade que os objectos possuem de se apresentarem indistinguíveis em duas ou mais diferentes disposições no espaço

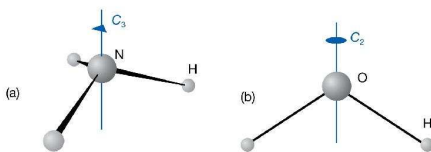
Uns objectos têm mais simetria do que outros pois podem sofrer uma maior diversidade de alterações da sua configuração espacial (operações de simetria) que os deixam indistinguíveis da configuração inicial



A esfera pode ser rodada por uma infinidade de ângulos em torno de uma infinidade de eixos, permanecendo indistinguível



Um cubo permanece indistinguível apenas após rotações de 90° , 180° ou 270° em torno dos eixos que atravessam os centros de faces opostas, e rotações de 120° ou 240° em torno de eixos que passem através de vértices opostos



Uma molécula de NH_3 tem mais simetria do que uma molécula de H_2O pois permanece indistinguível após rotações de 120° ou 240° em torno do eixo que passa em N e é perpendicular ao plano dos Hs, enquanto que a de H_2O apenas pode ser rodada por ângulos de 180°

⇒ A simetria dos objectos pode ser tratada de uma forma rigorosa e sistemática recorrendo à **teoria de grupos**

Permite-nos:

- classificar as moléculas de acordo com as suas propriedades de simetria
- discutir, com base na sua simetria, algumas das propriedades moleculares sem ser necessário recorrer a cálculos detalhados (por ex., polaridade, quiralidade)
- selecção de combinações lineares de orbitais atómicas para a construção de orbitais moleculares de simetria adequada
- determinação as regras de selecção que condicionam as intensidades das transições espectroscópicas

⇒ A teoria proporciona em muitos casos um método directo, simples e rápido para se chegar a conclusões úteis com o mínimo de cálculos

Operações e elementos de simetria

Uma **operação de simetria** é uma transformação geométrica que, efectuada sobre um objecto, o deixa indistinguível do seu estado anterior à transformação

A cada **operação de simetria** está associado um **elemento de simetria**: um ponto, linha ou plano em relação ao qual se efectua a operação de simetria

Existem 5 tipos de operações de simetria e 5 tipos de elementos de simetria que deixam pelo menos um ponto inalterado, dando origem aos **grupos pontuais**

Operação de simetria	Elemento de simetria	
Identidade	Objecto inteiro	E
Rotação	Eixo de rotação	C_n
Reflexão	Plano de simetria ou plano de reflexão	σ (σ_v , σ_h , σ_d)
Inversão	Centro de simetria ou centro de inversão	i
Rotação imprópria ou rotação-reflexão	Eixo de rotação imprópria ou eixo de rotação-reflexão	S_n

Existem também os **grupos espaciais** que incluem operações de simetria que envolvem translações e são aplicáveis, por ex., a cristais

⇒ As moléculas podem ser classificadas identificando quais os elementos de simetria que possuem

Classificação das moléculas por simetria

As moléculas podem ser classificadas de acordo com a sua simetria agrupando-se as moléculas de acordo com o conjunto de elementos de simetria que possuem em comum

Existem 2 sistemas de notação diferentes:

- **sistema de Schoenflies** (mais comum na classificação de moléculas individuais, como é o caso presente)
- **sistema de Hermann-Mauguin** ou **sistema internacional** (quase exclusivo da discussão da simetria de cristais)

Grupos C_1 , C_i e C_s

C_1 apenas possuem E (é o grupo de mais baixa simetria)

C_i possuem apenas E e i

C_s possuem apenas E e σ

Grupos C_n , C_{nv} e C_{nh}

C_n possuem E e um eixo C_n (C_n tem um triplo significado: nome do grupo, operação de simetria e elemento de simetria)

C_{nv} possuem E , um eixo C_n e n planos σ_v

C_{nh} possuem E , um eixo C_n e um plano σ_h

Grupos D_n , D_{nh} e D_{nd}

D_n possuem E , 1 eixo principal C_n e n eixos C_2 perpendiculares ao eixo principal C_n

D_{nh} possuem todos os elementos de D_n e também um plano σ_h

D_{nd} possuem todos os elementos de D_n e também n planos σ_d

Grupo S_n

S_n não pertencem a nenhum dos grupos anteriores e possui 1 eixo S_n (são raros os grupos S_n com $n > 4$; lembrar ainda que $S_2 \equiv i$ portanto, moléculas com o elemento S_2 pertencem ao grupo C_i)

Grupos cúbicos

- grupos tetraédricos

T_d tetraedro regular

T possuem a simetria rotacional do tetraedro mas não os planos de reflexão

T_h T com centro de inversão i

- grupos octaédricos

O_h octaedro regular

O possuem a simetria rotacional do octaedro mas não os planos de reflexão

- grupo icosaédrico I

Grupo de rotação completa R_3

R_3 possuem ∞ eixos C_∞ (esfera)

A identificação do grupo de simetria a que pertence uma molécula é simplificada seguindo um diagrama de fluxo em que se vai seguindo um caminho de acordo com os elementos de simetria que a molécula possui até se chegar à identificação do grupo