

LQES	LQES INDEX
	<p>CLASSIFICAÇÃO DE MOLÉCULAS DE ACORDO COM O GRUPO PONTUAL DE SIMETRIA</p> <p>Editoria do LQES Website</p>

Há um procedimento sistemático para a determinação do Grupo Pontual de Simetria de qualquer molécula. O sucesso de tal empreendimento depende da habilidade que se tem de encontrar os elementos de simetria presentes em uma molécula, habilidade esta que somente pode ser desenvolvida através de uma prática continuada.

O fluxograma da Figura 1, apresentado em formato A4, na página 5, permite-nos chegar a uma decisão, através de processo adequado, quanto à atribuição do Grupo Pontual de Simetria de uma dada molécula.

Em cada ponto do fluxograma, uma questão SIM ou NÃO precisa ser respondida. A resposta a cada questão leva-nos à seguinte, até o Grupo Pontual de Simetria ser, finalmente, determinado. A primeira questão: "A molécula pertence a algum dos grupos pontuais especiais (cúbicos)?" pode – para espécies altamente simétricas -, ser desafiadora.

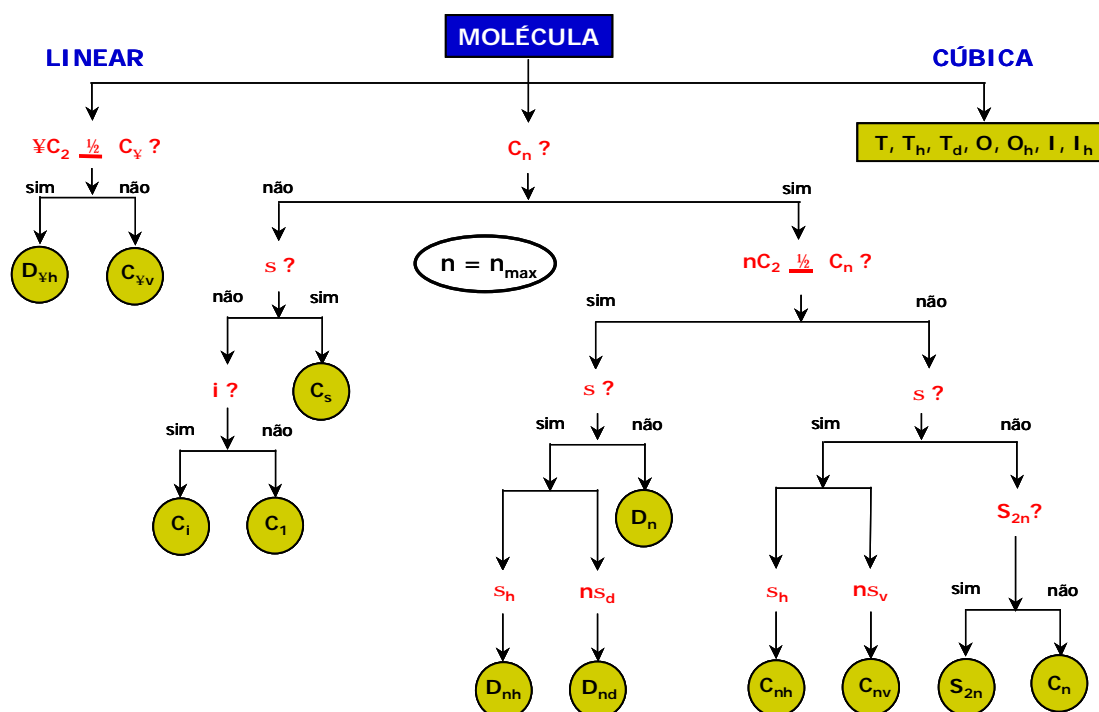


Figura 1. Fluxograma para classificação de moléculas conforme o Grupo Pontual de Simetria.

Exemplos de Utilização do Fluxograma da Figura 1.

[A] Considere a molécula H_2O (arranjo tetraédrico; geometria angular), ilustrada na Figura 2:

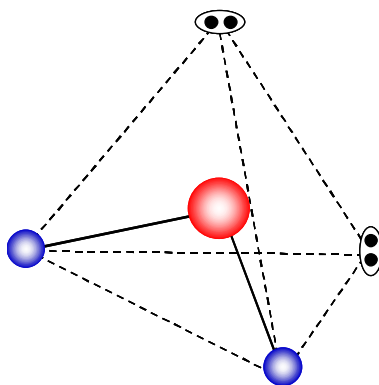
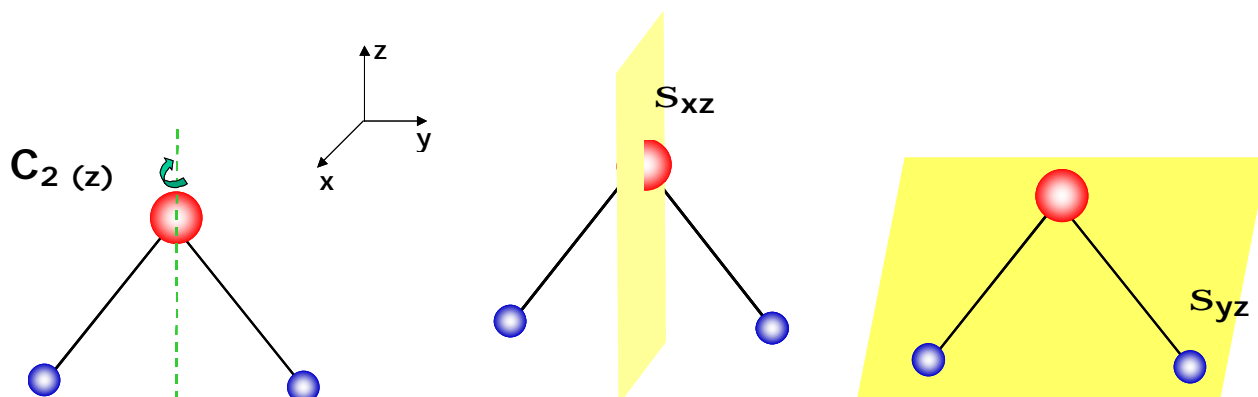


Figura 2. Molécula H_2O . (• H; • O; ◉ par de elétrons isolado).



1. A molécula H_2O não pertence a qualquer grupo linear, cúbico ou icosaédrico.
2. A molécula tem um eixo de rotação próprio, no caso, C_2 .
3. A molécula **não** tem n eixos C_2 , perpendiculares a C_n .
4. A molécula tem planos.
5. Os planos da molécula são do tipo s_v (plano vertical).
6. A molécula possui 2 planos verticais s_v .
7. A molécula H_2O pertence ao **Grupo Pontual C_{2v}** .

[B] Considere a molécula PF_5 (arranjo e geometria bipirâmide trigonal), ilustrada na Figura 3:

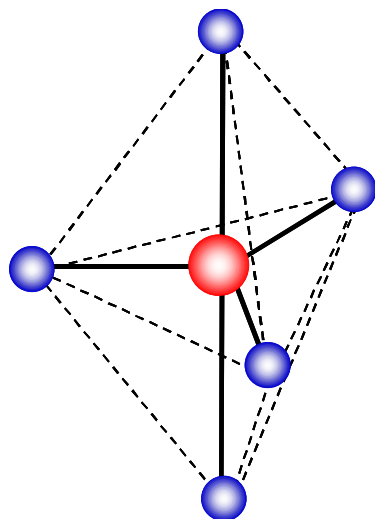
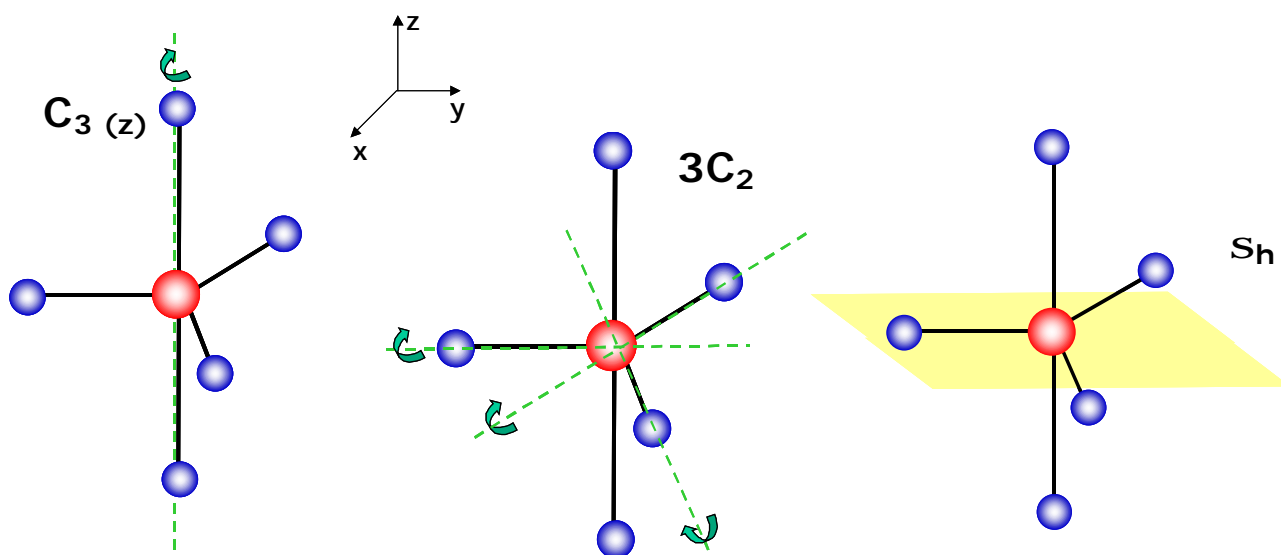


Figura 3. Molécula PF_5 . (• F; • P).



1. A molécula PF_5 não pertence a qualquer grupo especial.
2. A molécula possui um eixo C_n , de ordem 3 (C_3), que passa pelas ligações P-F axiais.
3. A molécula possui 3 eixos C_2 , perpendiculares a C_3 colineares às ligações P-F equatoriais.
4. A molécula possui plano equatorial perpendicular ao eixo de maior ordem. Logo, trata-se de um plano horizontal s_h .
5. A molécula PF_5 pertence ao Grupo Pontual D_{3h} .

[C] Considere a molécula *trans*-1-cloro-2-cianoetileno, ilustrada na Figura 4:

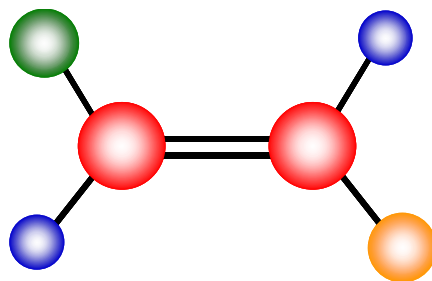
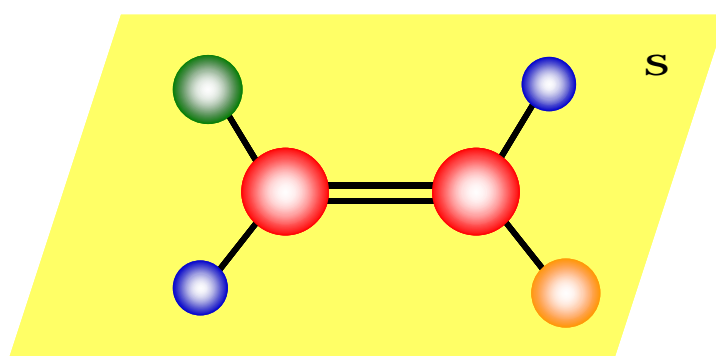


Figura 4. Molécula *trans*-1-cloro-2-cianoetileno (• H; • C; • Cl; • C≡N).



1. A molécula *trans*-1-cloro-2-cianoetileno não pertence a qualquer grupo especial.
2. A molécula não possui nenhum eixo de rotação próprio.
3. A molécula possui um plano especular (contém todos os 7 átomos).
4. A molécula *trans*-1-cloro-2-cianoetileno pertence ao Grupo Pontual C_s .

BIBLIOGRAFIA

1. E.B. Wilson, J.C. Decius and P. C. Cross, **Molecular Vibrations**, McGraw-Hill, New York (1955).
2. S.F.A. Cotton, **Chemical Applications of the Group Theory**, John Wiley & Sons, New York, (1970). (Há várias outras edições.)

