

Nome da disciplina: Simetria em Química

Carga horária: 30 horas

EMENTA:

Definições e teoremas da teoria de grupo. Elementos e operações de simetria. Convenções para os eixos cartesianos. Grupos de pontos de simetria. Classificação sistemática da simetria das moléculas. Classes de operações de simetria. Representação matricial das operações de simetria. Representação matricial dos grupos de operações de simetria e as tabelas de caracteres. Orbitais atômicos como base para representações irredutíveis. Técnica do operador projeção para a construção de orbitais moleculares de moléculas pequenas. Teoria do operador projeção de orbitais moleculares separados em sistemas sigma e pi. Técnica do operador projeção para a construção de orbitais híbridos. Regras de seleção para transições eletrônicas. Bandas de transferência de carga. Aplicação de simetria na classificação das vibrações moleculares. Regras de seleção para transições vibracionais.

Bibliografia:

1. COTTON, F. A. *Chemical Applications of Group Theory*. 3ª ed. Wiley-Interscience, 1990.
2. HARRIS, D. C.; BERTOLUCCI, M. D. *Symmetry and Spectroscopy. An introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*. Dover Publications, Inc., 1989. Reedição com correções da edição original de 1978 da Oxford University Press, Inc.
3. KETTLE, S. F. A. *Symmetry and Structure. Readable Group Theory for Chemists*. 3ª ed. John Wiley & Sons, 2007.
4. ORCHIN, M.; JAFFÉ, H. H. *Symmetry, Orbitals and Spectra*. Wiley-Interscience, 1971.
5. TSUKERBLAT, B. S. *Group Theory in Chemistry and Spectroscopy. A Simple Guide to Advanced Usage*. Academic Press, 1994.