



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

**Programa de Pós-Graduação em Química
Departamento de Química**

Disciplina QUIM7007 – ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ELETRÔNICA

TEORIA DE GRUPOS: Introdução

Prof. Dr. João Batista Marques Novo

Sumário

Disciplina QUIM7007 – ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ELETRÔNICA.....	1
TEORIA DE GRUPOS: Introdução.....	1
Prof. Dr. João Batista Marques Novo.....	1
TEORIA DE GRUPOS: Introdução.....	3
Grupos.....	3
Propriedades do grupo.....	3
Subgrupo.....	3
Transformações de similaridade.....	4
Classe.....	4
REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	4

TEORIA DE GRUPOS: Introdução

Grupos

Conjunto com elementos A, B, C, G, J, T:

Tabela de multiplicação do grupo: Leitura : 2º operador . 1º operador = J.A = T

		1º operador					
		B	C	T	A	G	J
2º operador	B	B	C	T	A	G	J
	C	C	B	J	G	A	T
	T	T	G	B	J	C	A
	A	A	J	G	B	T	C
	G	G	T	A	C	J	B
	J	J	A	C	T	B	G

Propriedades do grupo

- 1) Existe operador identidade (E) que comuta com todos os outros operadores e os deixa inalterados:
B = operador identidade pois $B.X = X.B = X$
- 2) O produto de dois operadores deve ser também membro do grupo:
Ex: $T.C = G$; $C.T = J$ (obs: não é comutativo aqui)
- 3) A multiplicação é associativa:
 $A.(G.J) = A.B = A$; $(A.G).J = T.J = A \rightarrow A.(G.J) = (A.G).J$
(obs: apesar da multiplicação ser associativa, ela não é necessariamente comutativa)
- 4) Existe um inverso ou recíproco para cada operador Z tal que:
 $Z.Z^{-1} = Z^{-1}.Z = E$ (operador identidade) Obs: deve comutar!
Ex:

$$\begin{aligned} B \text{ é o operador identidade } &\rightarrow B^{-1} = B \\ C.Z^{-1} = B = Z^{-1}.C &\rightarrow Z^{-1} = C \rightarrow C^{-1} = C \\ T.Z^{-1} = B = Z^{-1}.T &\rightarrow Z^{-1} = T \rightarrow T^{-1} = T \\ A.Z^{-1} = B = Z^{-1}.A &\rightarrow Z^{-1} = A \rightarrow A^{-1} = A \\ G.Z^{-1} = B = Z^{-1}.G &\rightarrow Z^{-1} = J \rightarrow G^{-1} = J \\ J.Z^{-1} = B = Z^{-1}.J &\rightarrow Z^{-1} = G \rightarrow J^{-1} = G \end{aligned}$$

Subgrupo

- É um grupo menor dentro do grupo.
- Todo subgrupo deve obedecer às regras de grupo

- A ordem do subgrupo deve ser um divisor inteiro da ordem do grupo principal

Exemplos:

Subgrupo de ordem 3

	B	G	J
B	B	G	J
G	G	J	B
J	J	B	G

Subgrupos de ordem 2

	B	C
B	B	C
C	C	B

	B	A
B	B	A
A	A	B

	B	T
B	B	T
T	T	B

Transformações de similaridade

$Z^{-1} \cdot X \cdot Z = Y$ (válido para qualquer operação do grupo, com $X \neq Z$, Z^{-1}) \rightarrow X e Y são **conjugados**

Exemplos:

$$\begin{aligned} \text{G e J são conjugados: } T^{-1} \cdot G \cdot T &= T \cdot A = J \\ T^{-1} \cdot J \cdot T &= T \cdot C = G \\ C^{-1} \cdot J \cdot C &= C \cdot A = G \\ C^{-1} \cdot G \cdot C &= C \cdot T = J \end{aligned}$$

Classe

É um conjunto completo de operadores que são conjugados entre si (“têm o mesmo comportamento”). A ordem da classe deve ser um divisor inteiro da ordem do grupo.

Exemplos:

- G e J formam uma classe
- C, T e A também formam uma classe
- O operador identidade sempre forma uma classe.

Lista de exercícios: Livro do Harris, cap. 1, 1-1, 1-2 e 1-3

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci, Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Dover, 1989.