Universidade de São Paulo
Instituto de Física
Aluna: Nara Avila Moraes
Nro. USP: 5716734

1o. semestre, 2025
Exercício 01 - 28/03

PGF5261/IFUSP: Teoria de Grupos Aplicada a Sólidos e Moléculas. Prof.: Lucy Assali

Questão 1. Considere as simetrias da molécula de amônio NH_3 e responda os seguintes ítems:

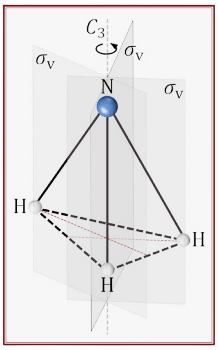


Figure 1: Molécula de Amônio

(1.1) Identifique o **grupo** de simetria da molécula.

(1.2) Qual é a **ordem** desse grupo?

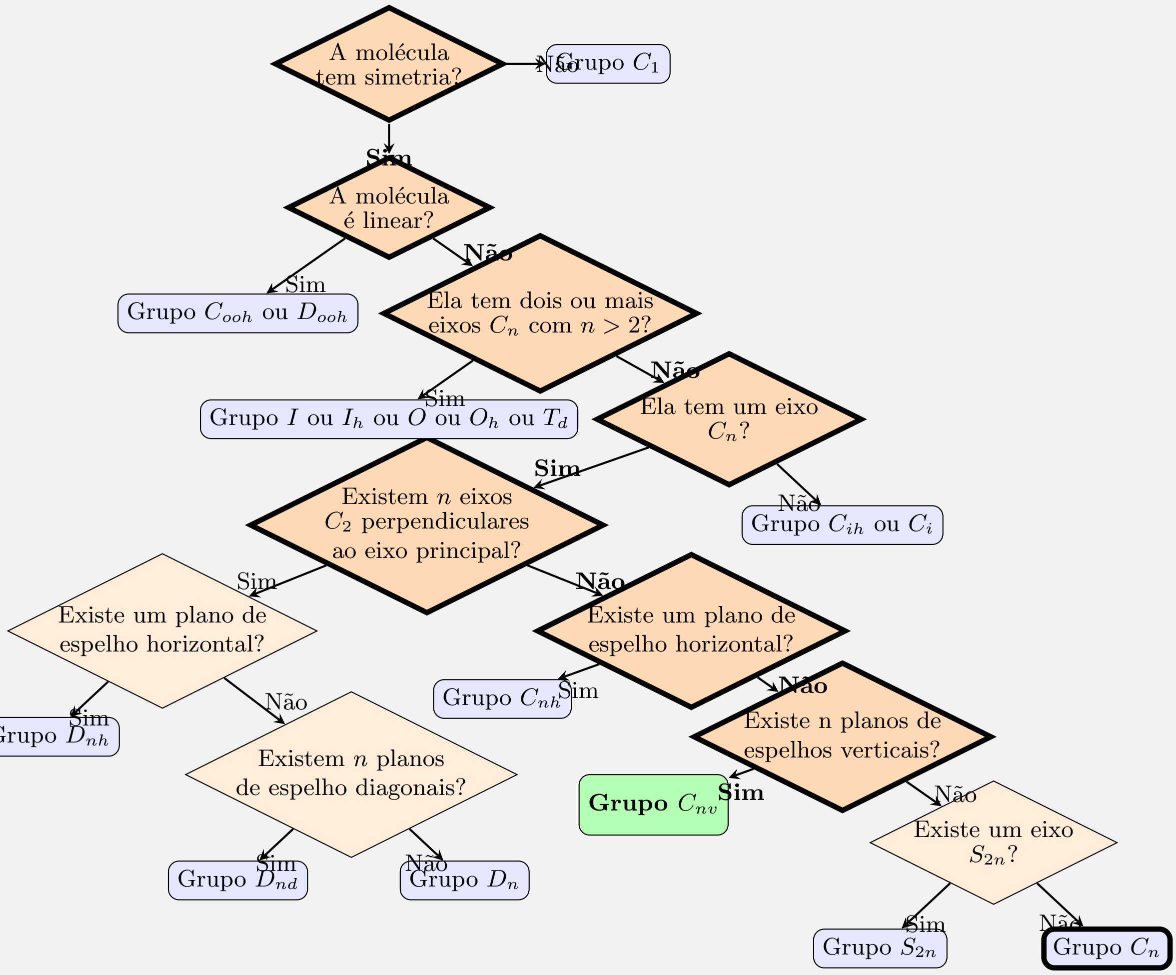
(1.3) Apresente a **tabela de multiplicação**.

(1.4) Esse grupo é **cíclico**? Justifique.

(1.5) O grupo é **abeliano**? Justifique.

(1.6) Quais são as **classes** desse grupo?

Resposta para o Ítem 1.1 - Grupo



Conforme ilustrado na **Figura 1**, a molécula de NH_3 possui:

- Um eixo de rotação (C_n) passando pelo átomo de nitrogênio e o centro do triângulo formado pelos hidrogênios "da base", com simetria de rotação de 120°(C_3);
- Três planos de reflexão verticais, que contêm o eixo C_3, (σ_v) que passa por cada hidrogênio e segue pela

bisetriz do angulo $\hat{O}_{HH}$ do triângulo da base referido acima, com também 120°entre eles.

De acordo com as simetrias citadas e conforme ilustrado pelo fluxograma o grupo de simetria da molécula de amônia é o C_{3v}:

Resposta para o Ítem 1.2 - Ordem

A ordem de um grupo é o número total de elementos de simetria. O grupo C_{3v} contém:

- 1 identidade (E);
- 2 rotações: C_3 e C_3^2, 120°e 240°;
- 3 reflexões em planos verticais que passam por H_1 - N, H_2 - N e H_3 - N $(\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v'')$.

Logo, a ordem do grupo é 6.

$$\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$$

Resposta para o Ítem 1.3 - Tabela de Multiplicação

Aplicando as operações duas a duas entre os elementos do grupo de simetria, obtemos todas as 36 combinações possíveis. Em cada caso, a operação resultante também pertence ao grupo, o que evidencia a propriedade de fechamento, uma das exigências fundamentais para a definição de grupo. A tabela de multiplicação do grupo C_{3v} resultante abaixo foi obtida aplicando a operação dos elementos da linha como operadores aplicados à esquerda, ou seja primeiro e os operadores da coluna depois ($M_{ij} = g_i \circ g_j$, onde g_i é o primeiro elemento da **linha** i e g_j é o primeiro elemento da **coluna**) j, já que essa operação não necessariamente comuta:

Tabela de multiplicação resultante:

$\cdot$	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v'	σ_v''	σ_v
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v''	σ_v	σ_v'
σ_v	σ_v	σ_v''	σ_v'	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v'	σ_v	σ_v''	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v''	σ_v'	σ_v	C_3	C_3^2	E

Resposta para o Ítem 1.4 - Cíclico

Um grupo cíclico é gerado por potências de um único elemento. Para o grupo C_{3v}, os elementos de reflexão não podem ser gerados a partir das potências de C_3. Portanto, o grupo não é cíclico.

Resposta para o Ítem 1.5 - Abeliano

O grupo C_{3v} não é abeliano, pois a ordem da composição importa, ou seja, este grupo não tem a propriedade adicional de comutatividade. Por exemplo, $C_3 \cdot \sigma_v \neq \sigma_v \cdot C_3$. Observando a tabela de multiplicação, caso o grupo fosse abeliano teriamos uma simetria em relação à diagonal, que seria composta apenas de transformações/elemento E, o que não é o caso.

Resposta para o Ítem 1.6 - Classes

As classes sumarizam as simetrias do grupo, agrupando operações diferentes mas que são fisicamente equivalentes, e que podem nos ajudar a reduzir o problema estudado permitindo uma resposta unica do problema para cada classes de simetrias. As classes de conjugação do grupo C_{3v} são:

$$\{E\}, \quad \{C_3, C_3^2\}, \quad \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$$