

1- Determine o grupo de ponto para as seguintes moléculas:

- a) Metano b) Clorometano c) Diclorometano
d) Dicloroetano (eclipsado) e) Dicloroetano (estrelado – anti)
f) Naftaleno g) 1,8-dicloronaftaleno h) 1,5-dicloronaftaleno

2- Determine o grupo de ponto para os seguintes compostos de coordenação:

- a) Cis-platina b) trans-Platina c) tetracloroplatinato de potássio
d) Ferroceno (eclipsado))

3- Determine o grupo de ponto para os seguintes orbitais

- a) px b) dxy c) dz² d) fxyz

4- O Etileno pertence ao grupo de ponto D_{2h}:

- a) Liste todas as operações de simetria desta molécula
b) Monte as matrizes de transformação para cada molécula que representam o efeito da operação nas coordenadas x,y e z.
c) Use o caráter de matriz (traço), para obter as representações redutíveis das matrizes.
d) Mostre que as representações irreduzíveis do grupo de ponto são ortogonais.

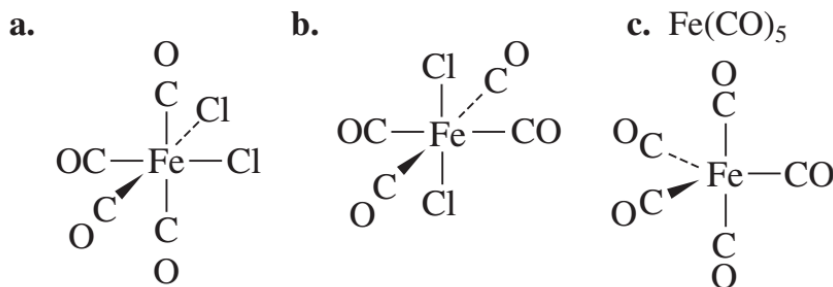
5- Reduza as representações redutíveis abaixo a suas representações irreduzíveis.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_1	6	3	2
Γ_2	5	-1	-1

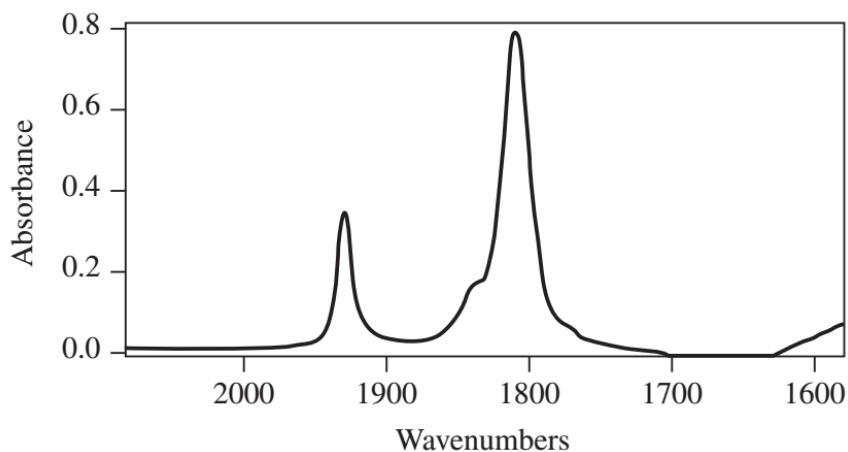
O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ	6	0	0	2	2	0	0	0	4	2

6- Para o grupo de ponto D_{4h}, use um desenho do orbital dxy para mostrar que ele possui uma simetria B_{2g} e o dx²-y² possui uma simetria B_{1g}.

7- Para as moléculas abaixo, determine o número de bandas ativas no IR, relativas ao estiramento da banda CO.



8- A reação do $[\text{Ti}(\text{CO})_6]^{2-}$ com o clorotrifetilmetano, resulta na rápida oxidação do $[\text{Ti}(\text{CO})_6]^{2-}$ para gerar o composto $[\text{Ti}(\text{CO})_4(\text{Tritil})]^{1-}$. A partir de espectro de IR ($\nu(\text{CO}) = 1932, 1810 \text{ cm}^{-1}$) apresentado abaixo, este complexo deve apresentar um arranjo quadrado planar ou pirâmide de base quadrada em relação a orientação dos quatro ligantes carbonil ao átomo de titânio? Este espectro de IR é compatível com alguma destas estruturas

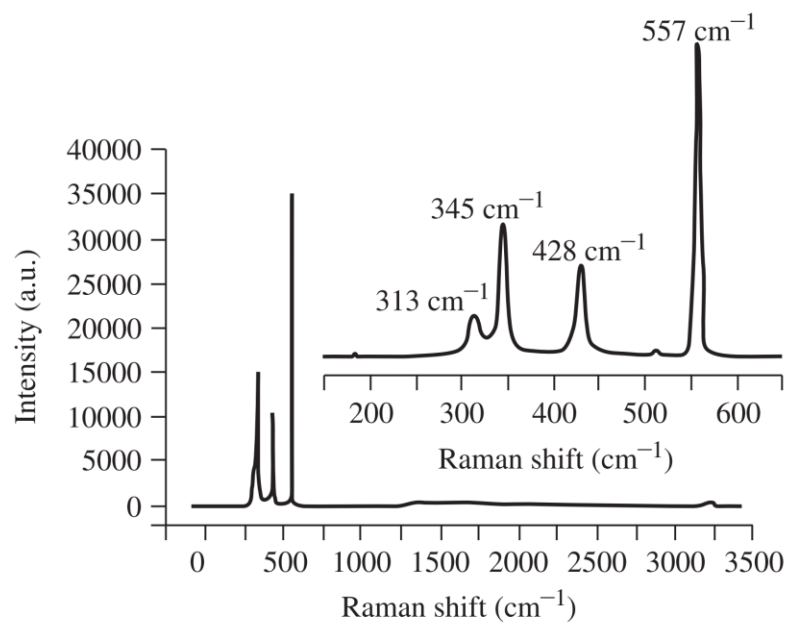


9- XeOF_4 tem uma das estruturas mais interessantes entre os compostos de gases nobres. Com base em sua simetria:

a. Obtenha uma representação redutível baseada em todos os movimentos dos átomos em XeOF_4 . b. Reduza esta representação às suas representações irredutíveis. c. Classifique essas representações, indicando quais são para movimento translacional, rotacional e vibracional. d. Determine a representação irredutível que corresponde à vibração de estiramento xenônio-oxigênio. Esta vibração IR está ativa?

10- O fósforo elementar branco consiste em moléculas tetraédricas de P_4 e é uma importante fonte de fósforo para a síntese. Em contraste, As_4 (arsênico amarelo) o tetraédrico, é instável e se decompõe em um alótropo cinza as com uma estrutura de folha. No entanto, o AsP_3 , anteriormente observado apenas em alta temperatura na fase gasosa, foi isolado à temperatura ambiente como um sólido branco, onde um átomo de As substitui um vértice do tetraedro.

a. O espectro Raman de AsP_3 , mostrado a seguir, exibe quatro absorções. Isso é consistente com a estrutura proposta?



11- Determine o grupo de ponto para as estruturas "square" e "corner":

