
Apunts i materials de Simetria en Química

de Josep Planelles

Alguns documents d'aquesta pàgina es troben en format PDF.

Cal tenir instal·lat a l'ordinador el programa [Adobe\(R\) Acrobat\(R\) Reader](#) .

[Perquè hem d'estudiar Simetria?](#)

En 1996 vaig escriure uns apunts sobre Simetria en Química que es van publicar en el servei de la nostra universitat i que a hores d'ara ja estan fins i tot descatalogats. Passat el temps torno a fer-me càrrec d'un curs sobre simetria i he rescatat uns fitxers vells corresponent a l'esmentat llibret, tot i que en rellegir-lo tinc intenció, a la llarga, de fer una nova versió en que es els aspectes més matemàtics s'abreugen i creixi els nombre d'exemples i aplicacions. De tota manera, aquestes notes poden servir de material base. En obrir els fitxer he vist que tenia problemes amb les fonts, cosa que m'ha obligat a retocar-los. Espero no haver introduït errades involuntàries.

- Podeu accedir als apunts punxant [ací](#)

També tenia notes i afegits als esmentats apunts que vaig fer després que es publicara el llibret, motiu pel qual no es van publicar aleshores, encara que algunes d'elles les vaig introduir al llibre que més tard vaig fer sobre espectroscòpia.

- Podeu accedir als afegits punxant [ací](#). Per al estudi de grups de Lie és essencial el concepte de funció exponencial. Un recordatori bàsic del número "e" el podeu trobar [ací](#). Un complement a les funcions d'espín com a base de representació del grup simètric i als termes espectroscòpics atòmics [està ací](#). El tema de multipols com a bases tensorials de representació el podeu trobar [ací](#).
 - [Problemes i questions](#)
-

Altres coses sobre grups que complementen els apunts anteriors:

- [Algunes definicions i criteris en Teoria de grups de simetria](#)
- [Organigrama per a la classificació de molècules segons la simetria](#)
- No hi ha un únic organigrama per a la determinació de la simetria molecular [Ací en podeu trobar un altre](#).
- [Exemples de molècules per entrenar-vos a classificar](#). Ací podeu trobar les solucions: [Solucions](#)
- [Més molècules: problema 1](#) solucions: [Solucions](#)
- Si no recordeu el model Electrostatic per a determinar la geometria molecular a partir dels parells solitaris i els parells d'electrons, podeu trobar ací un petit recordatori: [Model Electrostatic](#)
- [Point Group Tutorial](#) En aquesta direcció podeu descarregar un autoexecutable en format ZIP de 9.5 MB(cal descarregar el fitxer .zip perquè l'executable d'instal·lació sovint pot donar errors) que és un programa que permet entrenar-se en la identificació d'elements de simetria i assignar grups de simetria a molècules. Si no has pogut accedir prova en [aquesta altra direcció](#).

- [Taula de multiplicar i classes del grup C4v](#)
- [Taulas completes de grups de simetria de la Oxford \(Atkins et al.\): link a la pàgina oficial de la Oxford que permet la descàrrega lliure](#)

[Si falla el link anterior pica ací](#)

- [Taulas de caràcters](#) Pàgina web on pots trobar taules de caràcters i pots descompondre una representació com suma d'irreps.
- [Taulas de caràcters i determinació automàtica de la simetria a partir de la geometria](#) i moltes altres coses.
- [Regles generals per al càlcul de productes de representacions irreductibles](#)
- [Taulas de productes de representacions irreductibles](#)
- [Taulas de potències simetritzades de representacions irreductibles](#) Per a detalls cal acudir al paper original de Boyle, Int.J.Quantum Chem. 6 (1972) 725-746.

Atenció, en utilitzar aquestes taules he trobat un error (no se si n'hi ha algun altre!): la part antisimètrica de la tercera potència de la representació T₂ del grup O és A₂ i no A₁ que indica la taula. Per comprovar-les cal usar les fórmules de J. Planelles and C. Zicovich-Wilson, Int. J. Quantum Chem. 47 (1993) 319 -vegeu pàgines 54,55,86,87 dels [apunts](#)- Un exemple [ací](#)

- [Taulas d'alguns grups dobles i dels productes de les seues irreps](#)
 - [Taulas de reducció de simetria](#)
 - [El grup de les traslacions](#)
 - [Transformacions de simetria de l'Hamiltonià](#) Relació entre les simetries d'un sistema i les del seu Hamiltonià. Una volta llegit, pots intentar fer aquest [problema](#)
 - [Transformacions de simetria en presència de camp magnètic](#) Simetries de l'Hamiltonià en presència de camp magnètic.
 - [Terme fonamental en complexos de metalls de transició](#) determinació de la simetria espacial (completa) del terme fonamental en complexos de metalls de transició
 - [Definició de tensor esfèric i components esfèriques d'un tensor.](#)
 - [Teorema de WignerEckart.](#)
 - [Degeneració de l'Hamiltonià de Luttinger-Khon.](#)
 - [Grups dinàmics. Grups de degeneració. Degeneracions accidentals de l'àtom d'hidrogen. Vector de Runge-Lenz](#)
 - [Càlcul de l'hamiltonià k_p amb raonaments de simetria: teoria d'invariants](#)
 - [Symmetric Functions and the Symmetric Group \(by B.G.Wybourne\)](#)
 - [Teoria Huckel \(A. Alavi 2006\)](#)
 - [Huckel Periòdic](#)
-