

CUPRINS

Introducere

Înțelegerea intuitivă a simetriei combinațiilor complexe	11
Considerații teoretice generale	12
Noțiunea de „simetric” – la nivel intuitiv	12
Exemple de „simetric” identificabile <i>a priori</i>	13
„Simetric”/„asimetric”	16
„Simetric” – „mai simetric” – „și mai simetric”	17
„Simetric” – „la fel de simetric”	20
Exemple de înțelegere intuitivă greșită a noțiunii de „simetric”	23
Aplicații pentru molecule oarecare	27
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	33
Exerciții rezolvate	54

PARTEA ÎNTĂI

ABORDAREA MATEMATICĂ A SIMETRIEI COMBINAȚIILOR COMPLEXE	69
---	----

Secțiunea întâi

Abordarea geometrică a simetriei combinațiilor complexe	70
---	----

Capitolul întâi

Abordarea simetriei combinațiilor complexe în geometria elementară	71
Considerații teoretice generale	72
Preliminarii necesare înțelegerii riguroase a conceptului de „simetrie”	72
Tipuri de elemente de simetrie și operații de simetrie.....	72
Identitatea ca operație de simetrie	74
Planul de simetrie și oglindirea într-un plan ca operație de simetrie	75
Axa proprie de simetrie și rotația proprie de ordinul n ca operație de simetrie	76
Axa improprie de simetrie și rotația improprie de ordinul n ca operație de simetrie	77
Centrul de inversiune și inversiunea ca operație de simetrie	78
Sintagme ambigue sau chiar <i>non-sens</i> – potențiale surse de grave confuzii	79
Aplicații pentru molecule oarecare	83
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	89
Exerciții rezolvate	94

Capitolul al doilea

Abordarea simetriei combinațiilor complexe în geometria analitică	113
Considerații teoretice generale	114
Alegerea axelor de coordonate carteziene pentru redarea efectului unei operații	114
Redarea efectului identității în geometria analitică	115
Redarea efectului unei oglindiri într-un plan în geometria analitică	116
Redarea efectului unei rotații proprii de ordinul n în geometria analitică	118
Redarea efectului unei rotații improprie de ordinul n în geometria analitică	122
Redarea efectului inversiunii în geometria analitică	124
Aplicații pentru molecule oarecare	125
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	132
Exerciții rezolvate	140

Secțiunea a doua

Abordarea algebrică a simetriei combinațiilor complexe 210

Capitolul al treilea

Descrierea matriceală a transformărilor de simetrie asupra unei baze carteziene 211

Considerații teoretice generale 212

Alegerea versorilor bazei carteziene pentru redarea efectului unei operații 212

Redarea matriceală a efectului identității asupra bazei 213

Redarea matriceală a efectului unei oglindiri într-un plan asupra bazei..... 214

Redarea matriceală a efectului unei rotații proprii de ordinul n asupra bazei 216

Redarea matriceală a efectului unei rotații improprii de ordinul n asupra bazei 220

Redarea matriceală a efectului inversiunii asupra bazei 222

Aplicații pentru molecule oarecare 223

Aplicații pentru molecule de combinații complexe 234

Exerciții rezolvate 244

Capitolul al patrulea

Descrierea matriceală a transformărilor de simetrie asupra unei baze oarecare 295

Considerații teoretice generale 296

Alegerea „vectorilor” bazei oarecare pentru redarea efectului unei operații 296

Redarea matriceală a efectului identității asupra bazei 302

Redarea matriceală a efectului unei oglindiri într-un plan asupra bazei..... 303

Redarea matriceală a efectului unei rotații proprii de ordinul n asupra bazei 305

Redarea matriceală a efectului unei rotații improprii de ordinul n asupra bazei 309

Redarea matriceală a efectului inversiunii asupra bazei 311

Aplicații pentru molecule oarecare 312

Aplicații pentru molecule de combinații complexe 322

Exerciții rezolvate 339

PARTEA A DOUA

FORMALISMUL MATEMATIC AL SIMETRIEI COMBINAȚIILOR COMPLEXE 392

Secțiunea a treia

Grupurile de simetrie corespunzătoare combinațiilor complexe 393

Capitolul al cincilea

Premisele tratării simetriei combinațiilor complexe în teoria grupurilor..... 394

Considerații teoretice generale 395

Generalități care stau la baza teoriei grupurilor 395

Proprietăți matematice ale elementelor de simetrie și ale operațiilor de simetrie 397

Structura de grup a mulțimii operațiilor de simetrie 403

Identificarea operațiilor de simetrie echivalente dintr-un grup de simetrie 419

Sistematizarea operațiilor dintr-un grup de simetrie 422

Aplicații pentru molecule oarecare 424

Aplicații pentru molecule de combinații complexe 443

Exerciții rezolvate 462

Capitolul al șaselea

Identificarea grupurilor de simetrie ale combinațiilor complexe 483

Considerații teoretice generale 484

Algoritm de identificare a simbolurilor Schönflies pentru grupurile de simetrie 484

Exemple de identificare a simbolurilor Schönflies ale grupurilor de simetrie 494

Exemple de grave confuzii generate de sintagme ambigue sau chiar *non-sens* ... 506

Aplicații pentru molecule oarecare 509

Aplicații pentru molecule de combinații complexe 516

Exerciții rezolvate 525

Secțiunea a patra	
Tratarea grup-teoretică a simetriei combinațiilor complexe	542
<i>Capitolul al șaptelea</i>	
Table Cayley aferente grupurilor de simetrie ale combinațiilor complexe	543
Considerații teoretice generale	544
Construcția unei table Cayley	544
Tabla Cayley de compunere a elementelor dintr-un grup	544
Tabla Cayley de compunere a operațiilor dintr-un grup de simetrie	545
Structura de grup a mulțimii matricelor care redau operațiile de simetrie	545
Tabla Cayley de compunere a matricelor care redau operațiile de simetrie	575
Aplicații pentru molecule oarecare	578
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	594
Exerciții rezolvate	610
<i>Capitolul al optulea</i>	
Reprezentări aferente grupurilor de simetrie ale combinațiilor complexe	643
Considerații teoretice generale	644
Reprezentări ale unui grup de simetrie generate de „vectorii” diverselor baze	644
Definirea, calculul și estimarea caracterelor reprezentărilor unui grup de simetrie	644
Reductibilitatea reprezentărilor unui grup de simetrie	671
Dimensiunile și degenerările reprezentărilor unui grup de simetrie	672
Tabelul de caractere al unui grup de simetrie	672
Descompunerea unei reprezentări a unui grup de simetrie	677
Aplicații pentru molecule oarecare	680
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	686
Exerciții rezolvate	703
PARTEA A TREIA	
CONSECINȚE ALE SIMETRIEI COMBINAȚIILOR COMPLEXE	746
<i>Secțiunea a cincea</i>	
Consecințe directe ale simetriei combinațiilor complexe	747
<i>Capitolul al nouălea</i>	
Studiul polarității combinațiilor complexe din perspectiva simetriei lor	748
Considerații teoretice generale	749
Noțiuni generale despre polaritate	749
Avantaje ale utilizării considerentelor de simetrie în stabilirea polarității	756
Influența simetriei asupra polarității	759
Polaritatea – consecință directă a identificării grupului de simetrie	764
Aplicații pentru molecule oarecare	768
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	775
Exerciții rezolvate	783
<i>Capitolul al zecelea</i>	
Studiul chiralității combinațiilor complexe din perspectiva simetriei lor	803
Considerații teoretice generale	804
Noțiuni generale despre chiralitate	804
Avantaje ale utilizării considerentelor de simetrie în stabilirea chiralității	814
Influența simetriei asupra chiralității	817
Chiralitatea – consecință directă a identificării grupului de simetrie	822
Aplicații pentru molecule oarecare	825
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	840
Exerciții rezolvate	852

Secțiunea a șasea

Consecințe indirecte ale simetriei combinațiilor complexe	867
<i>Capitolul al unsprezecelea</i>	
Studiul simetriei modurilor normale de vibrație ale combinațiilor complexe	868
Considerații teoretice generale	869
Grade de libertate ale unei molecule în ansamblu: translații și rotații	869
Grade de libertate de vibrație și moduri normale de vibrație	871
Activitatea spectroscopică a modurilor normale de vibrație	872
Studiul simetriei modurilor normale de vibrație	873
Aplicații pentru molecule oarecare	874
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	886
Exerciții rezolvate	906
<i>Capitolul al doisprezecelea</i>	
Studiul simetriei orbitalilor moleculari ai combinațiilor complexe	929
Considerații teoretice generale	930
Orbitali atomici	930
Orbitali moleculari lianți, nelianți și antilianți	931
Studiul simetriei orbitalilor moleculari	934
Aplicații pentru molecule oarecare	935
Aplicații pentru molecule de combinații complexe	949
Exerciții rezolvate	963
<i>Bibliografie și web-grafie</i>	993
Bibliografie	994
Web-grafie	997