

Oficina: Enumeração de moléculas pelo método de Pólya-Redfield.

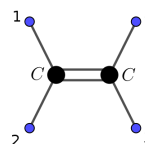
XI Biental de Matemática - UFSCar - julho 2024. Facilitador: Prof. Roberto.

Folhas de atividades do 1º dia.

Problema 1. Classificar configurações do esqueleto do eteno com os substituintes hidrogênio (*H*) ou cloro (*Cl*). (*obs: as casas (posições vacantes) são rotuladas, portanto são distinguíveis.*)

Atividade 1.1 Você pode antecipar quantas configurações existem? (Sugestão: use o Princípio Multiplicativo.)

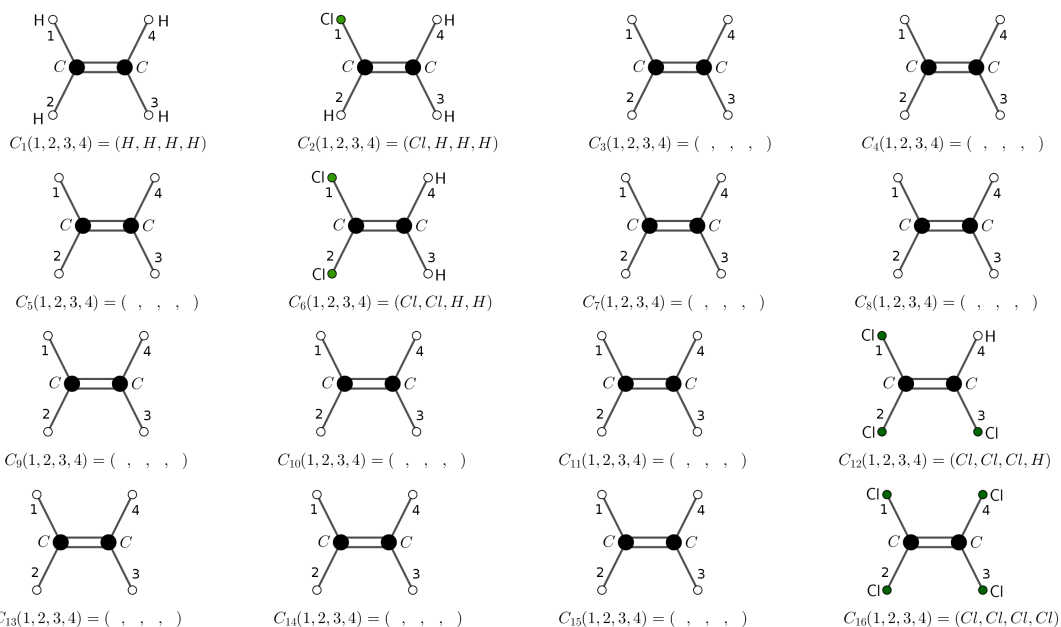
Resp: _____



Atividade 1.2 Você pode antecipar quantas configurações existem com dois átomos de hidrogênio e dois de cloro?

Resp: _____

Atividade 1.3 Complete os desenhos de todas as configurações do esqueleto do eteno com os substituintes hidrogênio (*H*) ou cloro (*Cl*). Alguns já estão completos.



Atividade 1.4 Faça um *inventário* das configurações. O que você observa? Comece com: 1 configuração com 4 átomos de hidrogênio e zero átomos de cloro;

Atividade 1.5 Como você pode expressar esse inventário através de um polinômio? O que significa cada monômio?

Atividade Extra Classe 1: Considerando ainda o esqueleto do eteno com as casas rotuladas e com os substituintes hidrogênio (*H*), cloro (*Cl*) e flúor (*F*): a) Quantas configurações existem? b) Quantas configurações existem com dois átomos de hidrogênio? c) Qual é o inventário das configurações (em forma polinomial)?

Problema 2. Classificar configurações padrões do esqueleto do eteno com os substituintes hidrogênio (H) e cloro (Cl). (*obs: as casas não são rotuladas e átomos do mesmo tipo são indistinguíveis.*)

Atividade 2.1 As configurações representam moléculas que estão soltas no espaço. Se as configurações C_i e C_j correspondem à mesma molécula, escrevemos $C_i \equiv C_j$, e dizemos que C_i e C_j estão na mesma classe. Classifique as 16 configurações do esqueleto do eteno com os substituintes H e Cl . Você observa alguma propriedade útil para essa tarefa?

C_1

$C_2 \equiv C_3 \equiv \dots$

Atividade 2.2 Escolhendo uma configuração de cada classe, elas são chamadas padrões. Faça a sua escolha e apresente um desenho de cada padrão.

Atividade 2.3 Faça um *inventário* descritivo das configurações padrões. Comece com:

1 configuração padrão com 4 átomos de hidrogênio e zero átomos de cloro;

Atividade 2.4 Usando a resposta anterior, expresse o inventário de padrões como um polinômio nas variáveis h e c . Esse polinômio pode ser fatorado no campo dos números reais? Você vislumbra alguma regra para a obtenção desse polinômio?

Atividade Extra Classe 2. Considere que no esqueleto do eteno estão sendo considerados seis substituintes, quatro átomos e dois radicais. a) Quantas são as configurações (em que as casas são rotuladas)? b) Expresse o inventário das configurações como um polinômio. c) Se o professor lhe pedir o inventário dos padrões, o que você pode fazer ou argumentar?

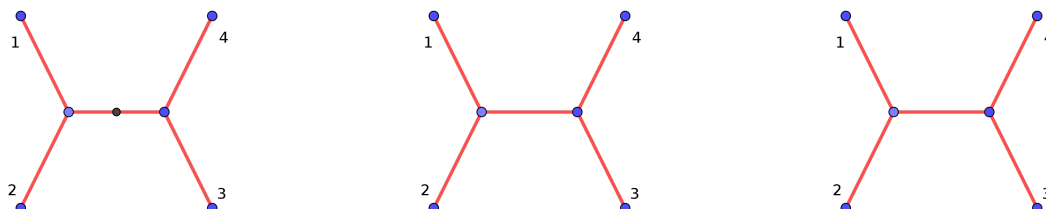
Oficina: Enumeração de moléculas pelo método de Pólya-Redfield.

XI Biental de Matemática - UFSCar - julho 2024. Facilitador: Prof. Roberto.

Folhas de atividades do 2º dia

Problema 3. Classificar os padrões do esqueleto do eteno com os substituintes hidrogênio (H) ou cloro (Cl) usando o método de Pólya-Redfield. Generalizar.

Atividade 3.1 Sabemos que movimentos (ou simetrias) que conservam figuras são essencialmente rotações e reflexões. Descreva as simetrias que conservam o esqueleto do eteno.



Resp:

Atividade 3.2 a) Descreva as simetrias como permutações do conjunto $\{1, 2, 3, 4\}$. b) Veja por que essas simetrias formam um grupo. c) Escreva os elementos desse grupo na forma de produto de ciclos disjuntos completos.

Resp:

Atividade 3.3 Seja g uma simetria, escrita como um produto completo de ciclos disjuntos. A cada ciclo de comprimento k associamos a variável x_k . Se um ciclo de comprimento k se repete j vezes em g , associamos a ele o produto $x_k x_k \dots x_k = x_k^j$. Se g tem ciclos de diferentes comprimentos k , tomamos o produto dos diversos x_k^j . Forma-se assim um monômio, que é chamado *tipo cíclico* de g . Liste os tipos cíclicos das simetrias do esqueleto do eteno.

$$e = (1)(2)(3)(4) \rightarrow$$

$$\rho = (14)(23) \rightarrow$$

$$\sigma = (12)(34) \rightarrow$$

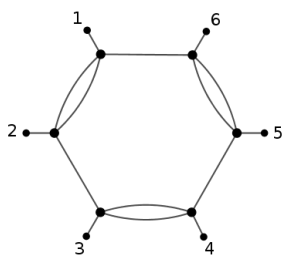
$$\tau = (13)(24) \rightarrow$$

Atividade 3.4 A média dos tipos cíclicos de um grupo é o seu *índice de ciclos*. Escreva o índice de ciclos do grupo de simetrias do esqueleto do eteno.

Atividade 3.5 Associamos a H a variável h , e a Cl a variável c . O método de enumeração de Pólya-Redfield preconiza que o inventário de padrões pode ser obtido substituindo-se, no índice de ciclos do grupo, cada variável x_i por $h^i + c^i$. Portanto x_i^j deve ser substituído por $(h^i + c^i)^j$. Calcule o inventário de padrões. Veja se é o mesmo obtido anteriormente pelo método “manual”.

Atividade 3.6 Suponhamos que no esqueleto do eteno estejam sendo considerados os substituintes hidrogênio (H), cloro (Cl) e flúor (F), representados pelas variáveis h , c e f , respectivamente. Generalizando o procedimento de Pólya-Redfield, calcule o inventário de padrões. Quantos padrões no total existem?

Atividade 3.7 O esqueleto benzênico consiste de seis átomos de carbono posicionados nos vértices de um hexágono, com seis posições vacantes, como na figura abaixo. O grupo de simetrias é o grupo diedral D_6 de 12 elementos, indicados na tabela abaixo. Complete a tabela com os tipos cíclicos $t(g)$ dos elementos g de D_6 . Escreva o índice de ciclos de D_6 .



	$g \in D_6$	$t(g)$
1.	$e = (1)(2)(3)(4)(5)(6)$	
2.	$\rho = (123456)$	
3.	$\rho^2 = (135)(246)$	
4.	$\rho^3 = (14)(25)(36)$	
5.	$\rho^4 = (153)(264)$	
6.	$\rho^5 = (165432)$	
7.	$\sigma = (12)(36)(45)$	
8.	$\rho\sigma = (13)(2)(46)(5)$	
9.	$\rho^2\sigma = (14)(23)(56)$	
10.	$\rho^3\sigma = (15)(24)(3)(6)$	
11.	$\rho^4\sigma = (16)(25)(34)$	
12.	$\rho^5\sigma = (1)(26)(35)(4)$	

Atividade 3.8 Suponha que os substituintes no esqueleto do benzeno sejam hidrogênio e cloro. Calcule seu inventário de padrões. Quantos são no total? Quantos padrões existem com dois átomos de hidrogênio?