

Simetría en Química

Laura Gasque
2020-1



matemáticas



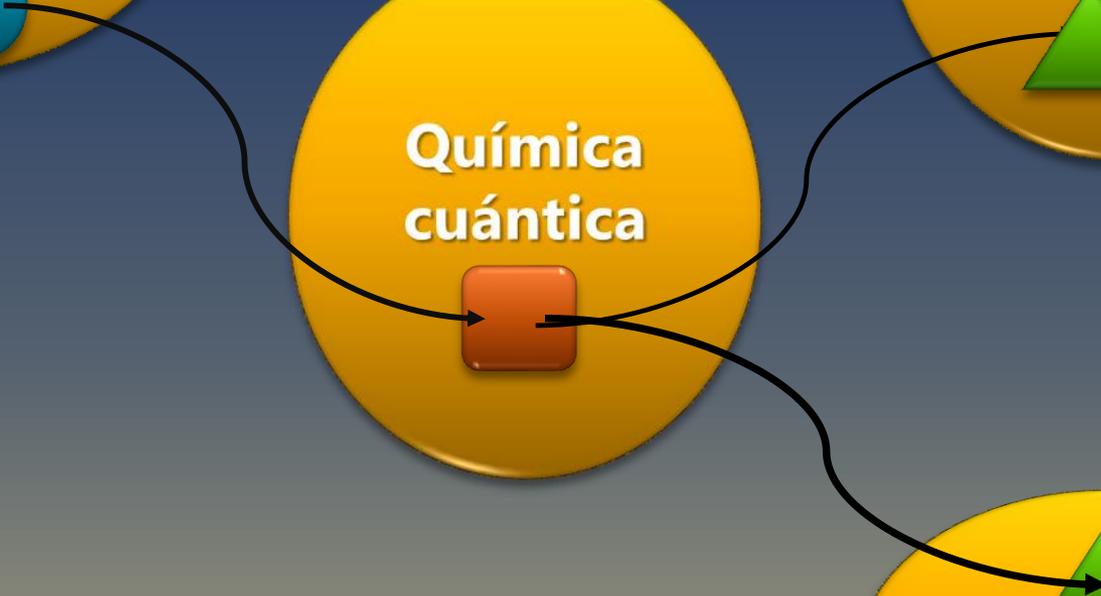
Química
cuántica



Enlace
químico
(TOM)



Espectroscopía



La solución de la ecuación de Schödinger para cualquier sistema debe ser **base** de alguna **representación irreducible** del **grupo puntual** al que pertenece la **molécula**

Lo más difícil de esta materia

¡¡ El lenguaje !!

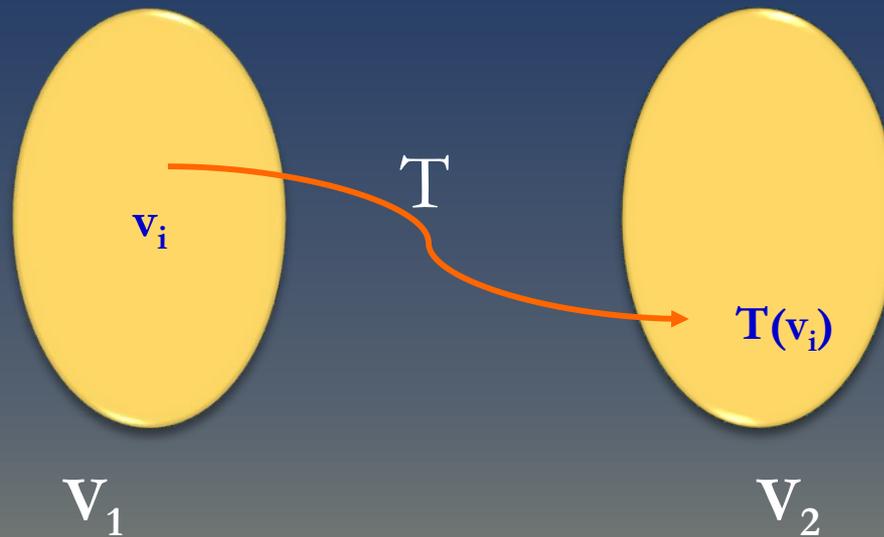
Glosario

- Los vectores forman **Espacios Vectoriales**
- Las **funciones** también son vectores
- Las Transformaciones Lineales actúan sobre **vectores**
- Es una **Transformación Lineal**

Operación de simetría

¿Qué es una Transformación Lineal?

- Una FUNCIÓN



- LINEAL

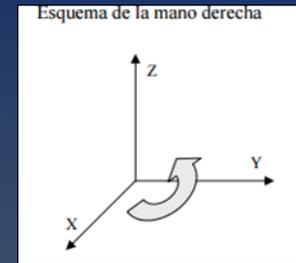
- ¿?

Ejemplo: C_4^z

(rotación de 90° alrededor del eje z (en sentido opuesto a las manecillas))

- Escribir el efecto de C_4^z sobre los vectores de la base canónica de \mathbb{R}^3

- $C_4(1, 0, 0) = (0, 1, 0)$
- $C_4(0, 1, 0) = (-1, 0, 0)$
- $C_4(0, 0, 1) = (0, 0, 1)$



- Expresar a los vectores transformados como una combinación lineal de los vectores base

- $C_4(1, 0, 0) = (0, 1, 0) = 0(1, 0, 0) + 1(0, 1, 0) + 0(0, 0, 1)$
- $C_4(0, 1, 0) = (-1, 0, 0) = -1(1, 0, 0) + 0(0, 1, 0) + 0(0, 0, 1)$
- $C_4(0, 0, 1) = (0, 0, 1) = 0(1, 0, 0) + 0(0, 1, 0) + 1(0, 0, 1)$

Matriz asociada a la transformación lineal C_4

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ z \end{pmatrix}$$

$$C_4(x, y, z) = (-y, x, z)$$

Obtener las “recetas” para las operaciones
 C_2^z , σ_{xz} , σ_{yz} y E (de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$)

- Ejercicio de clase

Obtener la “tabla de multiplicar” para las
operaciones

C_2^z , σ_{xz} , σ_{yz} y E (de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$)

Realizar todos los “productos” (composiciones) entre estas T.L.

y

Obtener la “tabla de multiplicar” para las operaciones C_2^z , σ_{xz} , σ_{yz} y E (de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$)

¿Qué es un GRUPO?

- Conjunto de elementos
- Operación binaria (entre dos elementos)
- Unas reglas para esa operación
- Las Transformaciones Lineales
- La composición
- $T(x,y,z) = (x', y', z)$
- $S(x,y,z) = (x'', y'', z'')$
- $S \cdot T(x,y,z) = S(T(x,y,z))$
 $= S(x', y', z)$

Definición de “Grupo”

- Un conjunto $G = \{g_i, g_j, g_k \dots\}$ y una operación \cdot forman un *GRUPO* si:
 - i) $\forall g_i, g_j \in G, g_i \cdot g_j = g_k$
 - **Cerradura**
 - ii) $\exists e \in G \ni \forall g_i \in G, e \cdot g_i = g_i \cdot e = g_i$
 - **Existencia del neutro o idéntico**
 - iii) $\forall g_i \in G, \exists g_j \in G \ni g_i \cdot g_j = e$
 - **Existencia de los inversos** i.e. $g_j = g_i^{-1}$
 - iv) $\forall g_i, g_j, g_k, g_i \cdot (g_j \cdot g_k) = (g_i \cdot g_j) \cdot g_k$
 - **Asociatividad**
 - v) En algunos grupos se cumple $\forall g_i, g_j, g_i \cdot g_j = g_j \cdot g_i$
 - **Conmutatividad**

A los grupos conmutativos se les llama abelianos

Las operaciones de simetría para un objeto dado, forman un grupo bajo la composición

OJO: Los elementos son las operaciones de simetría
y
la operación es la composición

Demostrarlo para $\{E, C_2^z, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}\}$

Grupo puntual C_{2v}

Ojo:

Diferencia entre

elemento de simetría y

operación de simetría

Elemento: Ente geométrico (eje, plano, punto)

Operación: Transformación lineal

GRUPOS PUNTUALES

grupos de operaciones de simetría.

Los elementos se intersectan en al menos un PUNTO

Clasificación de moléculas (y otros objetos)

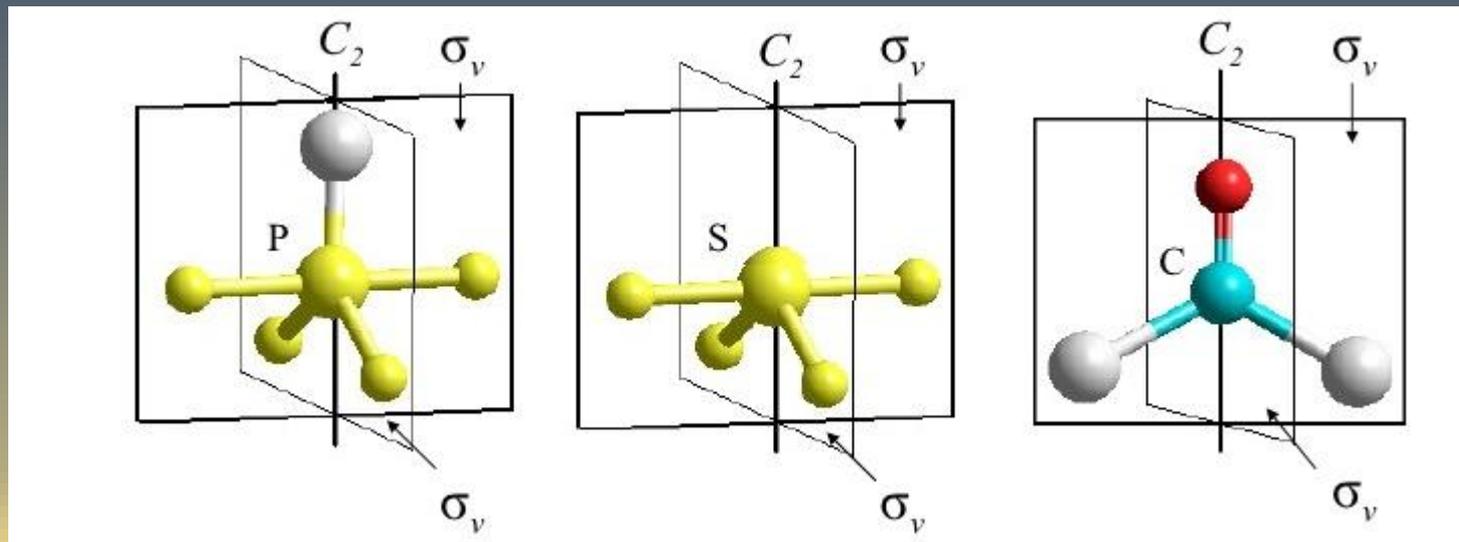
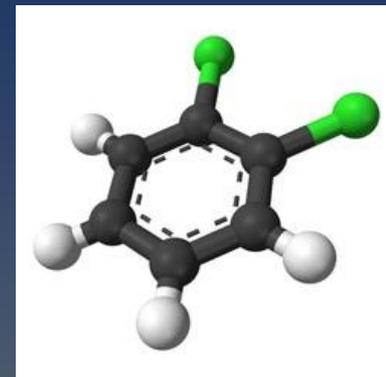
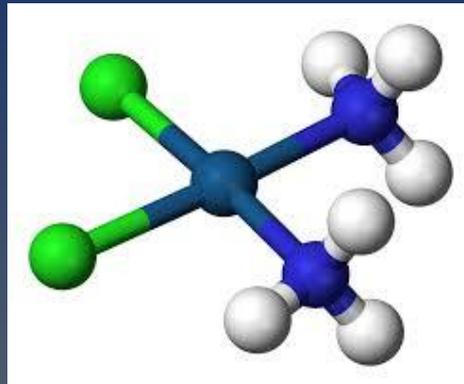
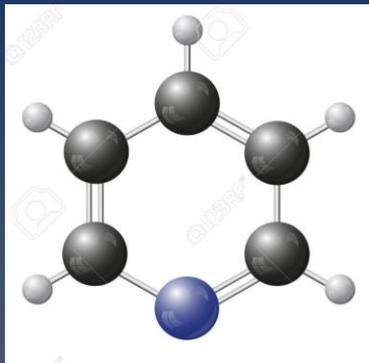
Grupos C_{nv}

- Un eje de rotación de orden n , C_n
- n planos de reflexión (σ_v) que contienen a ese eje C_n

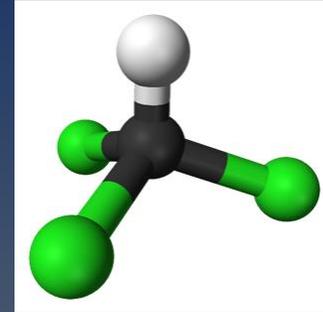
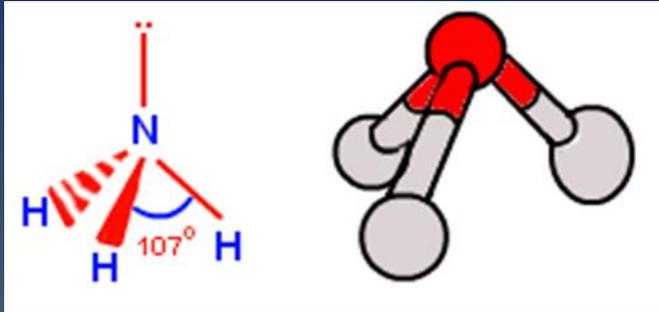
- Una rotación de orden “ n ”, C_n
- n reflexiones a través de planos (σ_v) que contienen a ese eje C_n

Si $n=2$, C_{2v}

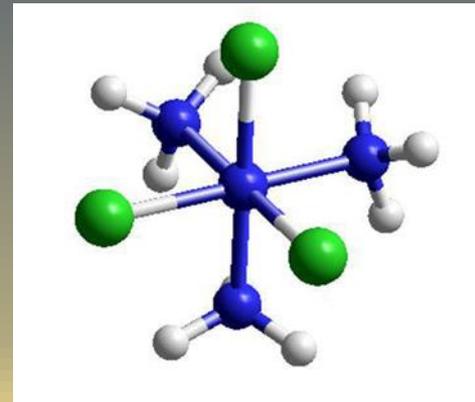
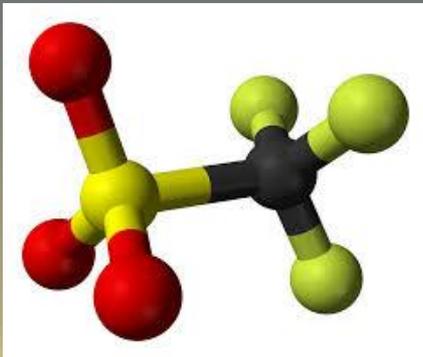
Ejemplos de moléculas de simetría C_{2v}



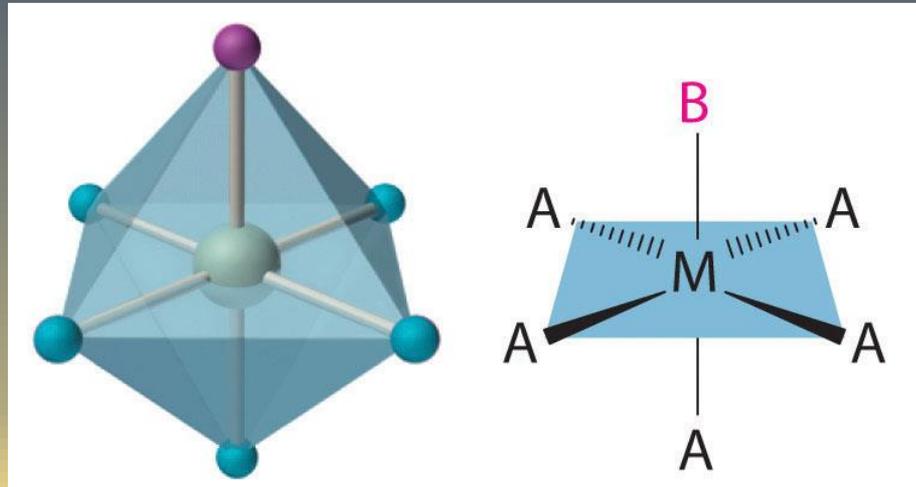
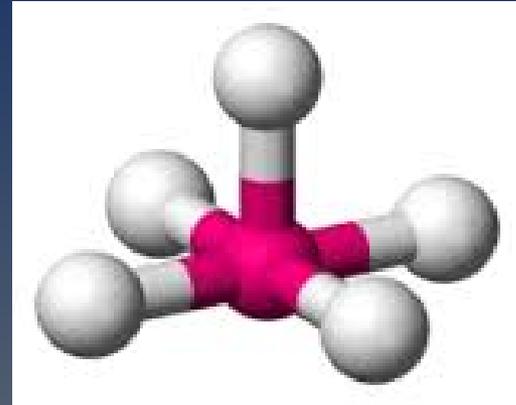
Ejemplos de moléculas de simetría C_{3v}



<https://symotter.org/gallery>



Ejemplos de moléculas u objetos de simetría C_{4v}



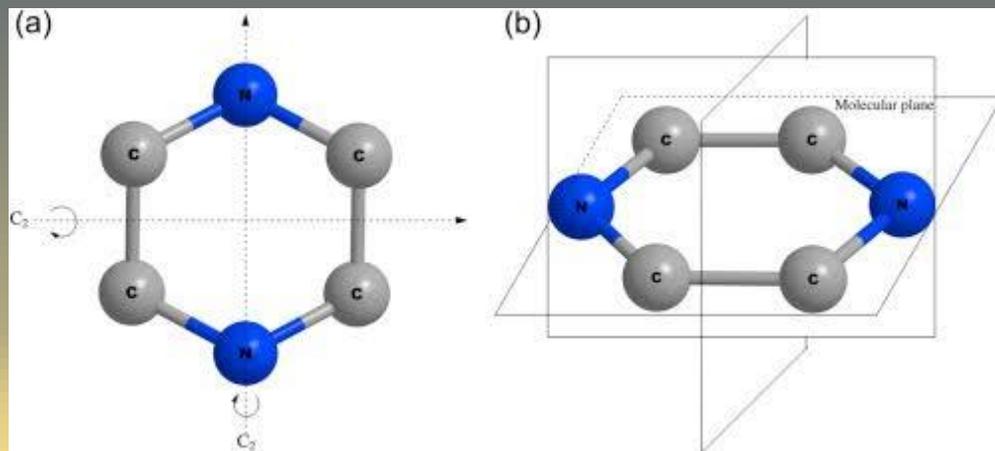
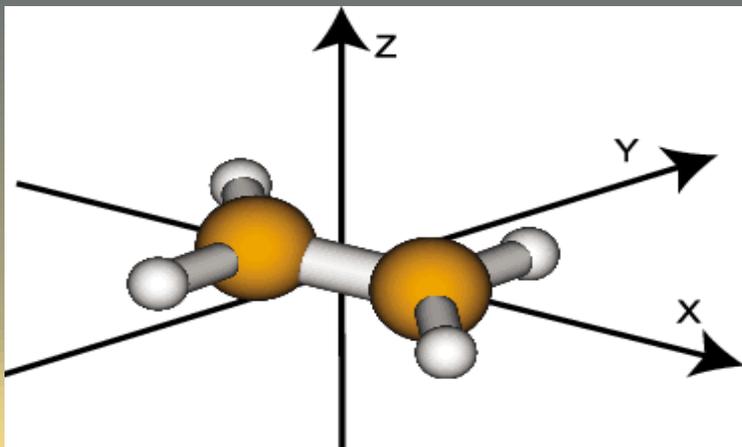
Grupos D_{nh}

- Un eje de rotación de orden n , C_n
- n ejes C_2 perpendiculares al C_n principal
- n planos de reflexión (σ_v) que contienen a ese eje C_n
- Un plano (σ_h) “HORIZONTAL” (perpendicular al C_n principal)
- Las operaciones que resulten de los productos entre las anteriores

Si $n=2$, D_{2h}

Ejemplos de moléculas de simetría D_{2h}

- 1 C_2 (principal)
- 2 C_2 perpendiculares a el
- 2 σ_v
- 1 σ_h
- $i = \sigma_h \cdot C_2$



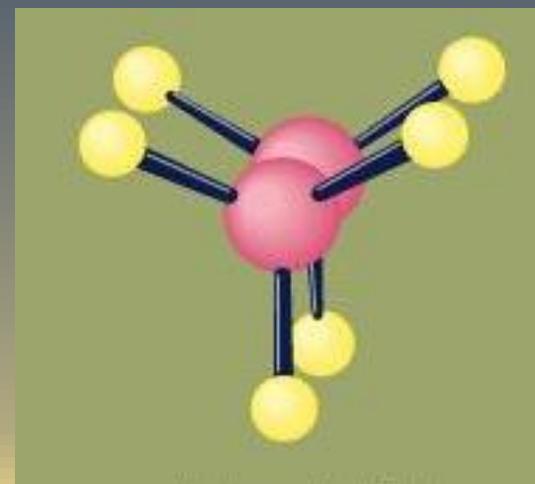
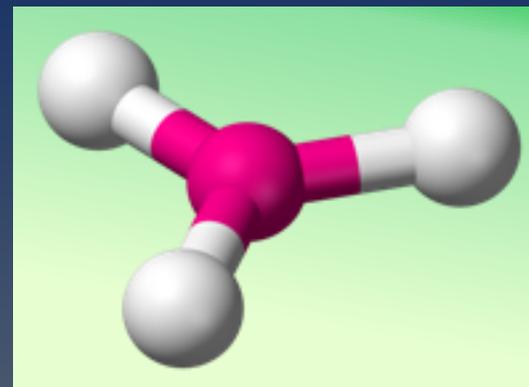
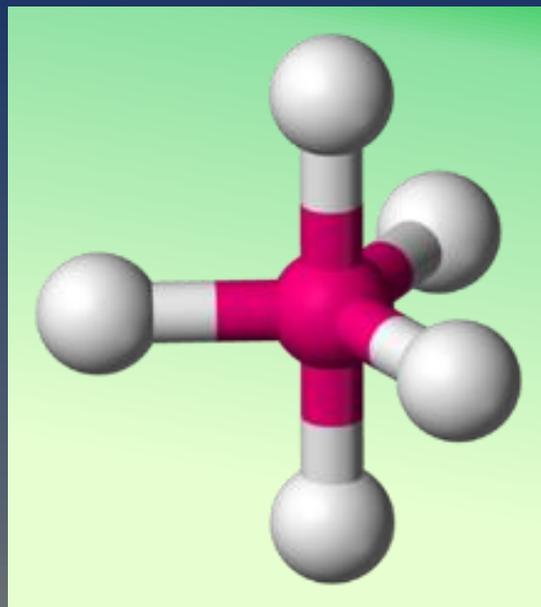
Si $n=3$, D_{3h}

Ejemplos de moléculas de simetría D_{3h}

- 1 C_3 (principal)
- 3 C_2 perpendiculares a el
- 3 σ_v
- 1 σ_h
- $S_3 = \sigma_h \cdot C_3$

Operaciones de simetría del grupo D_{3h}

E
C_3
C_3^2
C_2
C_2'
C_2''
σ_h
S_3
S_3^5
σ_v
σ_v'
σ_v''



¿ S_3 ?

¿por qué no están

todas sus

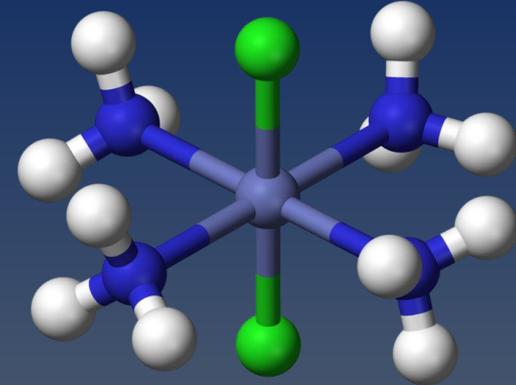
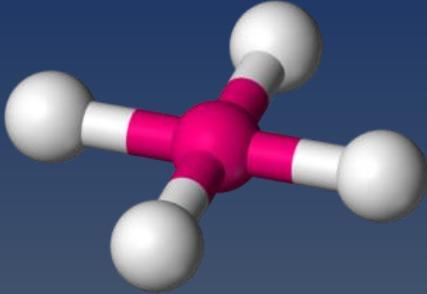
potencias?

Si $n=4$, D_{4h}

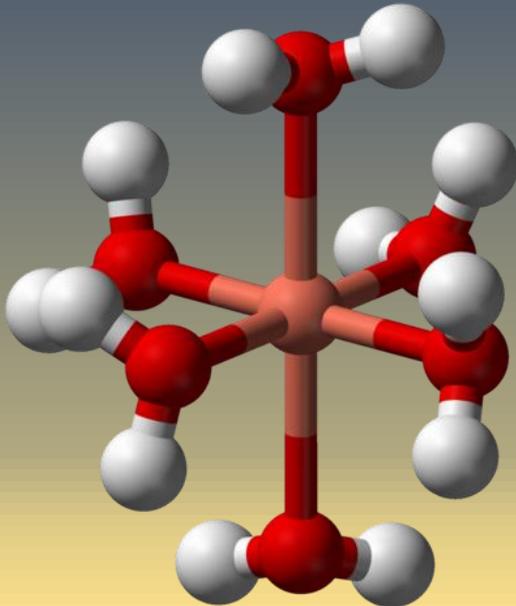
Elementos de simetría de moléculas de D_{4h}

- Eje principal de simetría C_4
- 4 C_2 perpendiculares al C_4
- 4 σ_v
- σ_h
- i
- S_4

Ejemplos de moléculas D_{4h}



Despreciando los hidrógenos

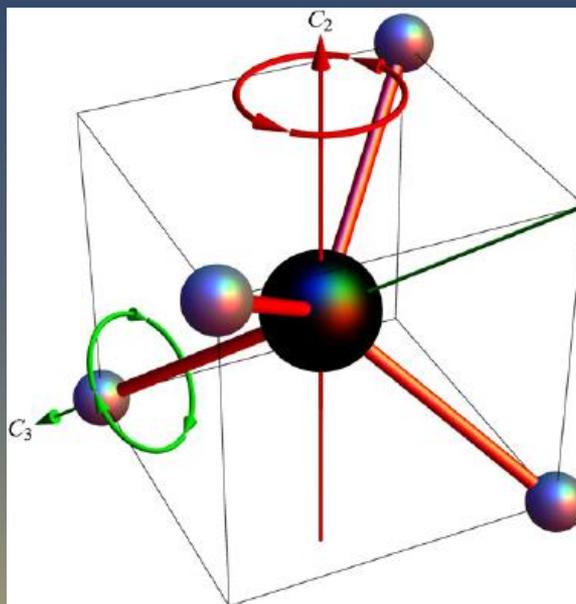


Octaedro distorsionado
(alargado o acortado)

Moléculas tetraédricas T_d

24 operaciones de simetría

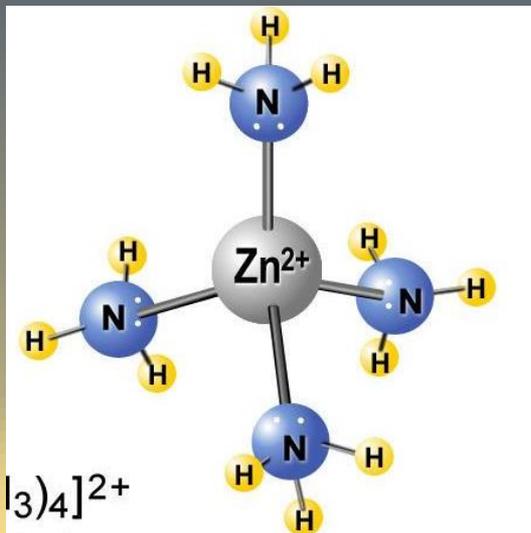
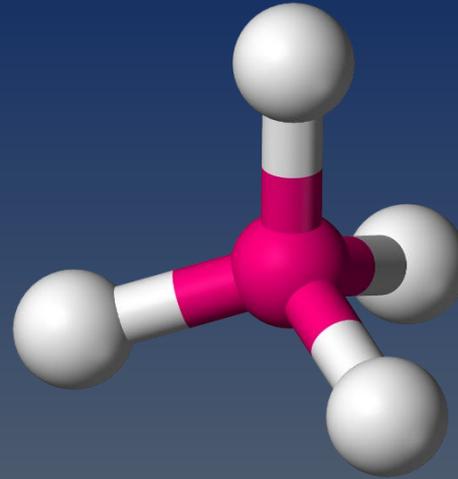
- 8 C_3
- 3 C_2
- 6 σ_d
- 6 S_4



- <https://symotter.org/tutorial/methane>

Moléculas tetraédricas

- CoCl_4^{2-}
- $\text{Ni}(\text{CO})_4$
- $\text{Zn}(\text{NH}_3)_4^{2+}$

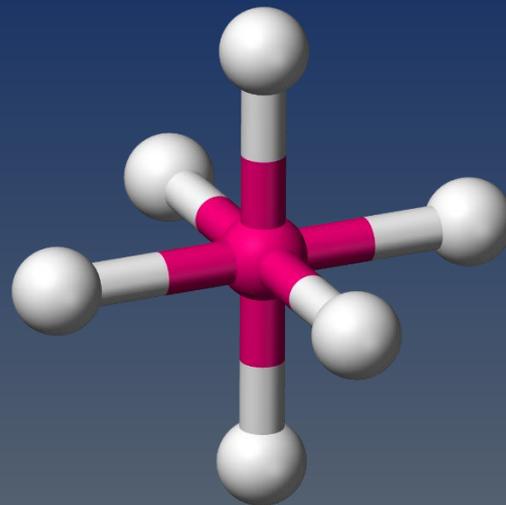


Moléculas octaédricas O_h

(48 operaciones de simetría)

- 8 C_3
- 6 C_2
- 6 C_4
- 3 C_2'
- i

- 6 S_4
- 6 S_6
- 3 σ_h
- 6 σ_d
- E



TAREA:

- Asignar el grupo puntual a las siguientes “moléculas” “tetraédricas”
 - $[\text{Co}(\text{Cl})_3(\text{CN})]^{2-}$
 - $[\text{Co}(\text{Cl})_2(\text{Br})_2]^{2-}$

- Asignar el grupo puntual a las siguientes “moléculas” “octaédricas”
 - $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$
 - *cis* - $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$
 - *trans* - $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$
 - *mer* - $[\text{Co}(\text{NH}_3)_3\text{Cl}_3]$
 - *fac* - $[\text{Co}(\text{NH}_3)_3\text{Cl}_3]$