



# ***QUÍMICA DE COORDINACIÓN***

***Martha E. Sosa Torres***

***mest@unam.mx***

# SIMETRIA Y TEORIA DE GRUPOS

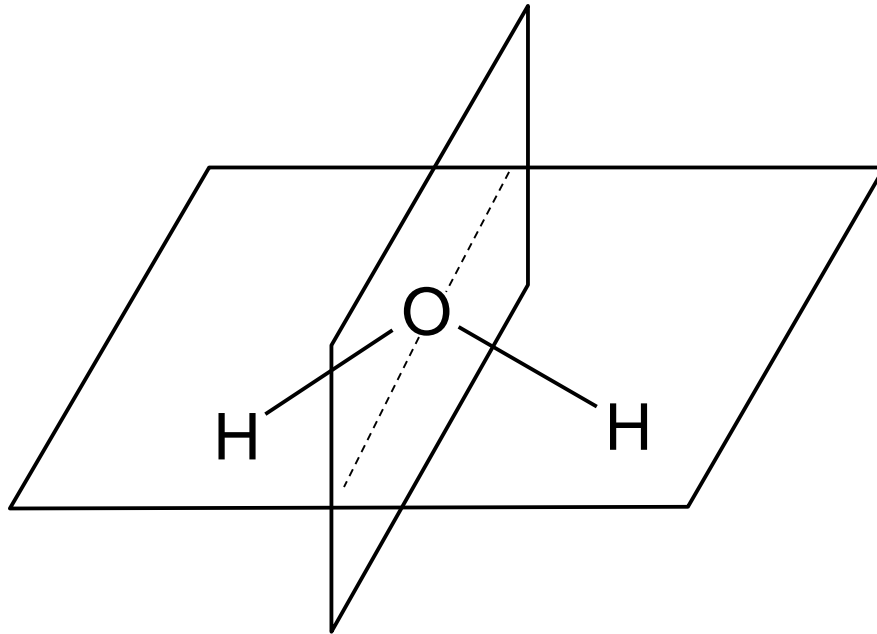
## Operaciones de Simetría y Elementos de Simetría

Una operación de simetría una operación que se realiza sobre una molécula que la deja en una posición indistinguible de la posición original. Por ej. moverla alrededor de un eje, un punto, o un plano.

Así las moléculas pueden tener como elementos de simetría :  
**ejes de simetría, centro de simetría y/o planos de simetría**

## *Planos de reflexión, $\sigma$*

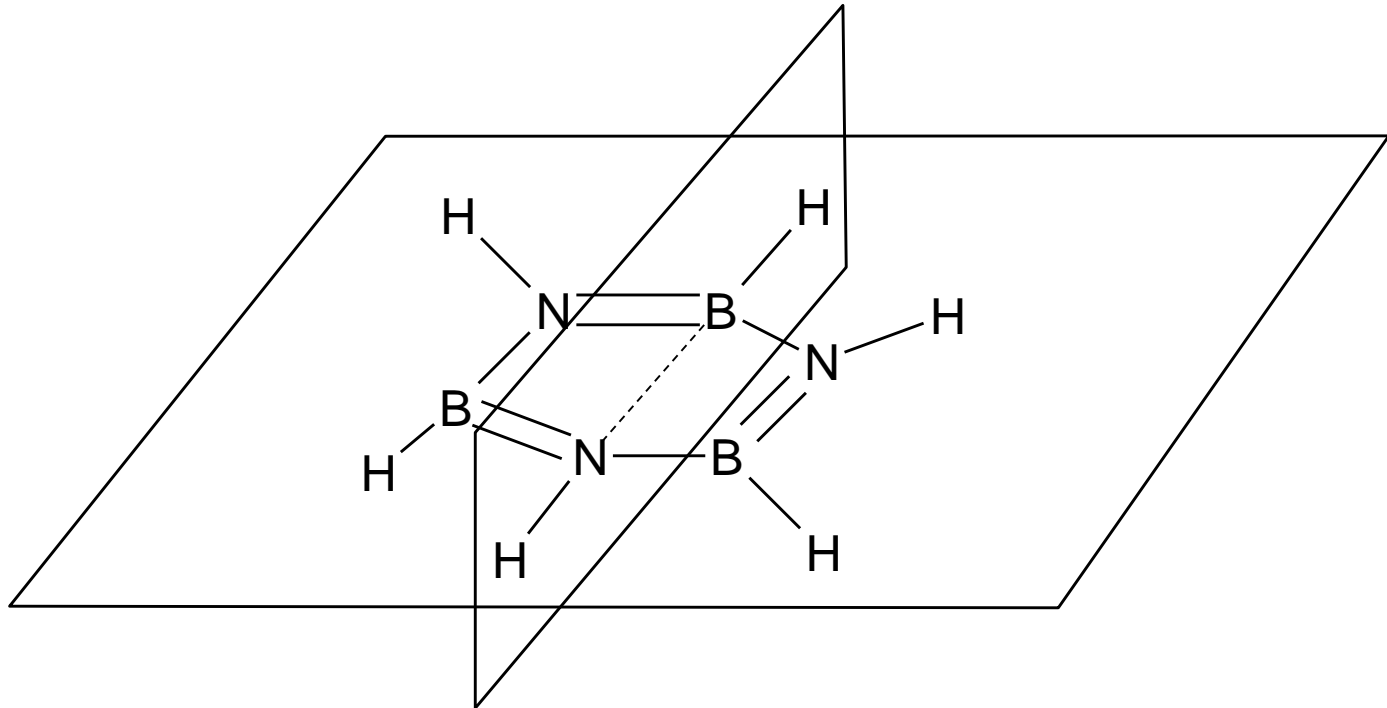
es una reflexión de la molécula en el plano del espejo .



- Por ej.: el  $\text{H}_2\text{O}$  tiene dos planos de reflexión

# *Planos de reflexión, $\sigma$*

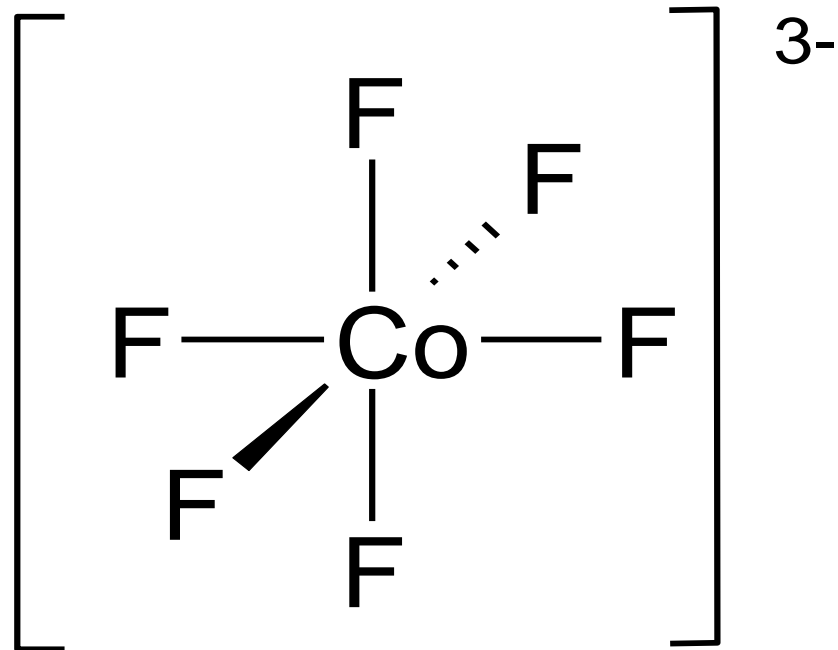
La borazina



tiene 4 planos de reflexión

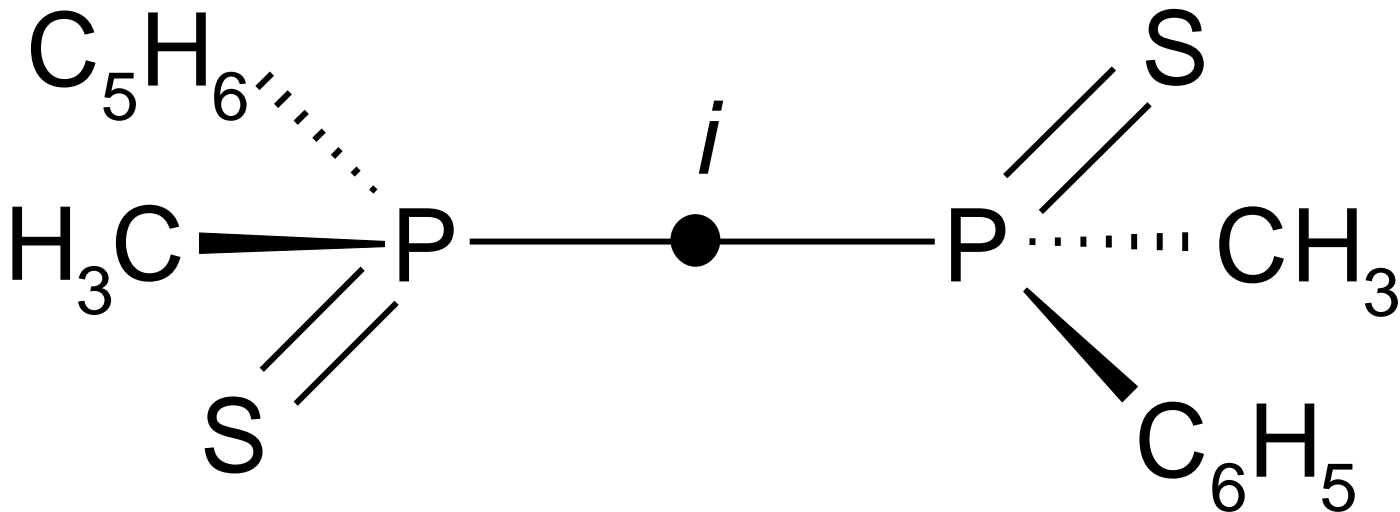
# Centro de simetría o centro de inversión , *i*

Una molécula tiene un centro de simetría o centro de inversión si es posible mover un punto a través de una línea recta desde cualquier átomo, hacia un átomo idéntico a la misma distancia del otro lado del centro.



*ion hexafluorocobaltato*

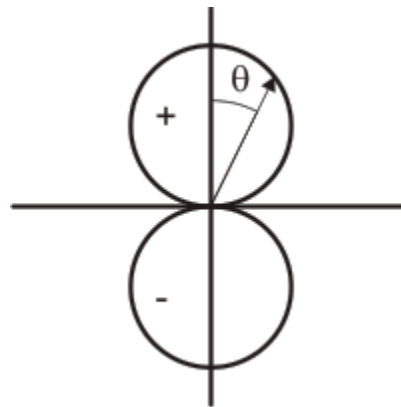
**Centro de simetría  
o centro de inversión , *i***



*1,2-dimetil-1,2-difenildifosfinadisulfuro*

# ***Centro de simetría o centro de inversión , i***

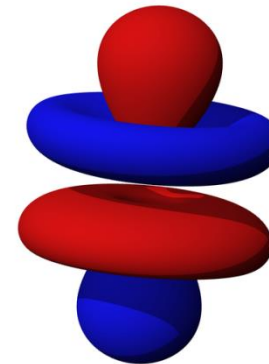
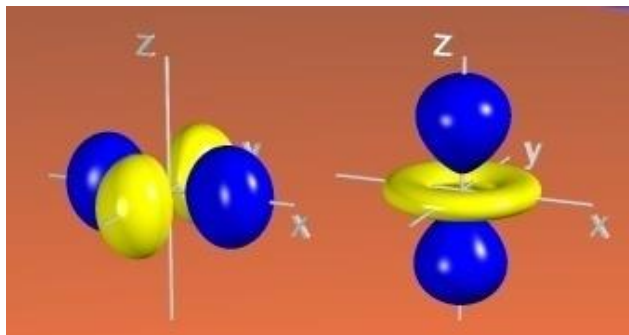
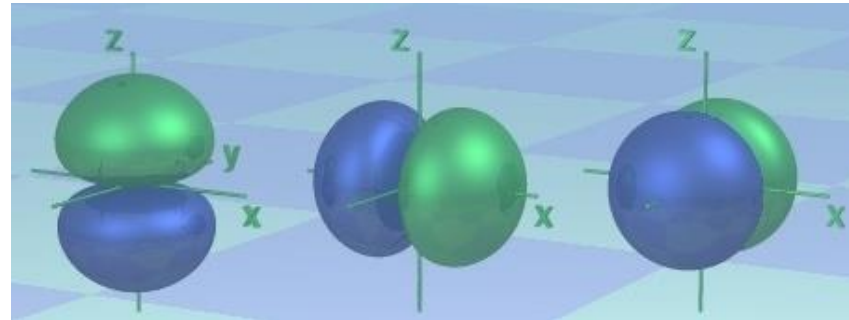
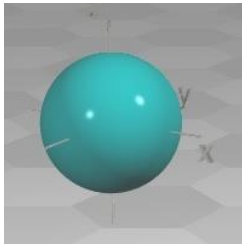
Centro de inversión en los orbitales atómicos,  
simetría *gerade* y *ungerade*.



**Orbital p**

# Centro de simetría o centro de inversión, $i$

Orbitales atómicos, simetría *gerade* y *ungerade*.



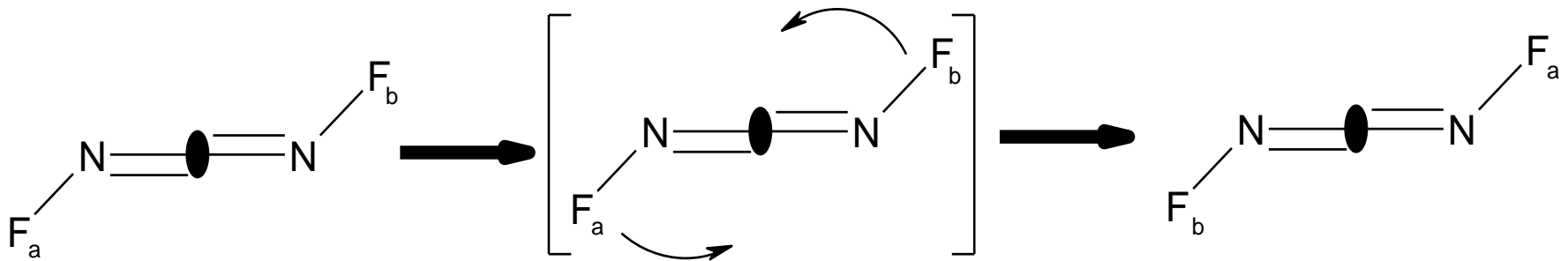


## ***Centro de simetría o centro de inversión , i***

Las *representaciones irreducibles* también pueden ser *gerade* y *ungerade* si la molécula tienen un centro de simetría.

# Ejes de rotación, $C_n$

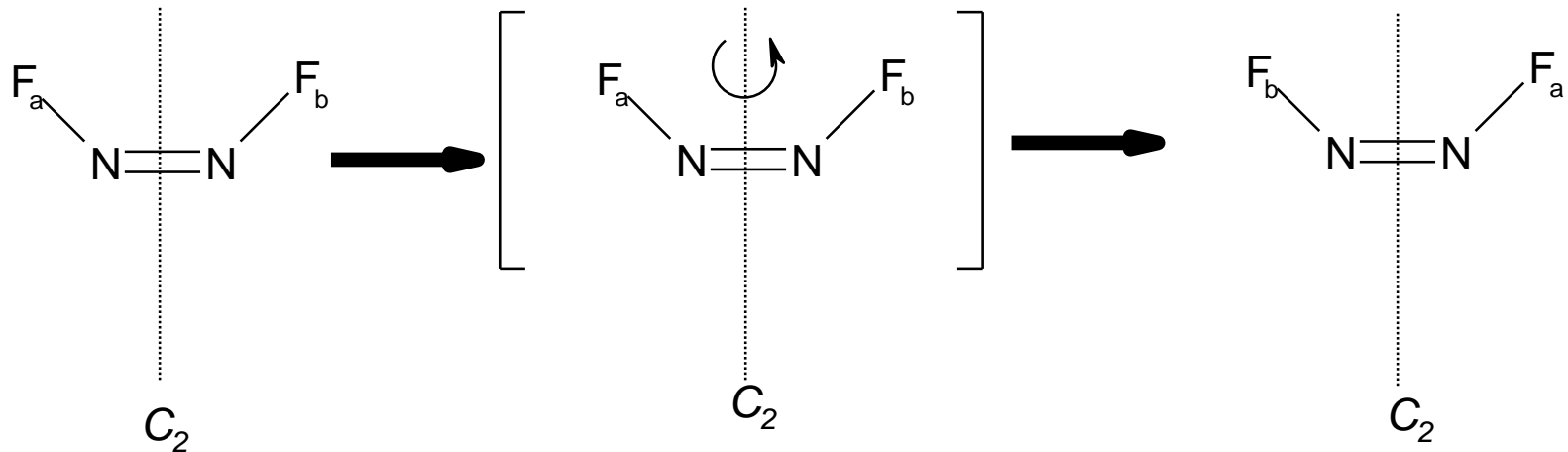
Si la rotación de  $360/n$  resulta en una configuración indistinguible, la molécula se dice que tiene un eje rotacional *nésimo*



*trans*-difluoruro de dinitrógeno

Si construimos un eje perpendicular al plano del papel y a la mitad entre los átomos de nitrógeno, podemos rotar la molécula  $180^\circ$  y obtener una configuración idéntica. Entonces la rotación de  $180^\circ$  es una operación de simetría. Se dice que tiene un eje rotacional  $C_2$

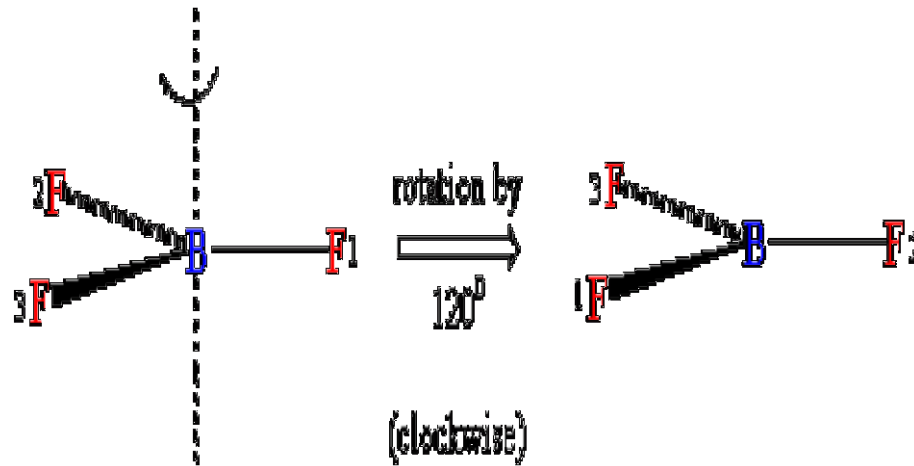
## Ejes de rotación, $C_n$



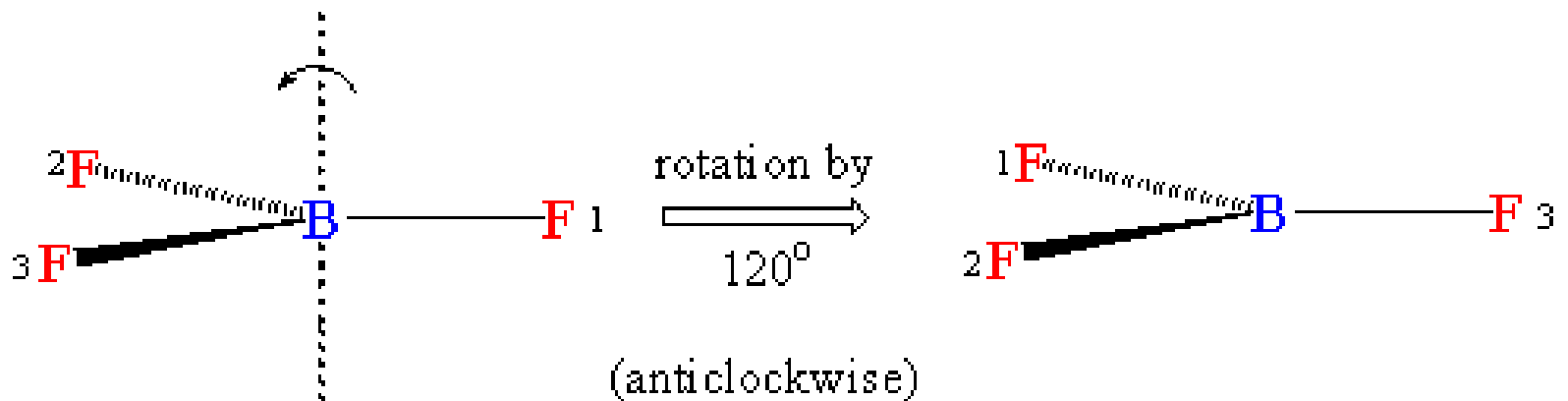
*cis*-difluoro de dinitrógeno

No posee ejes perpendiculares al plano de la molécula que permita la rotación. Sin embargo, es posible dibujar un eje en el plano de la molécula equidistante entre los dos átomos de nitrógeno y también equidistante entre los dos átomos de flúor. Este es también un eje  $C_2$ .

La molécula  $\text{BF}_3$  permanece inalterada por una rotación de  $120^\circ$  alrededor de un eje perpendicular al plano de la molécula, entonces posee un eje de simetría  $C_3$

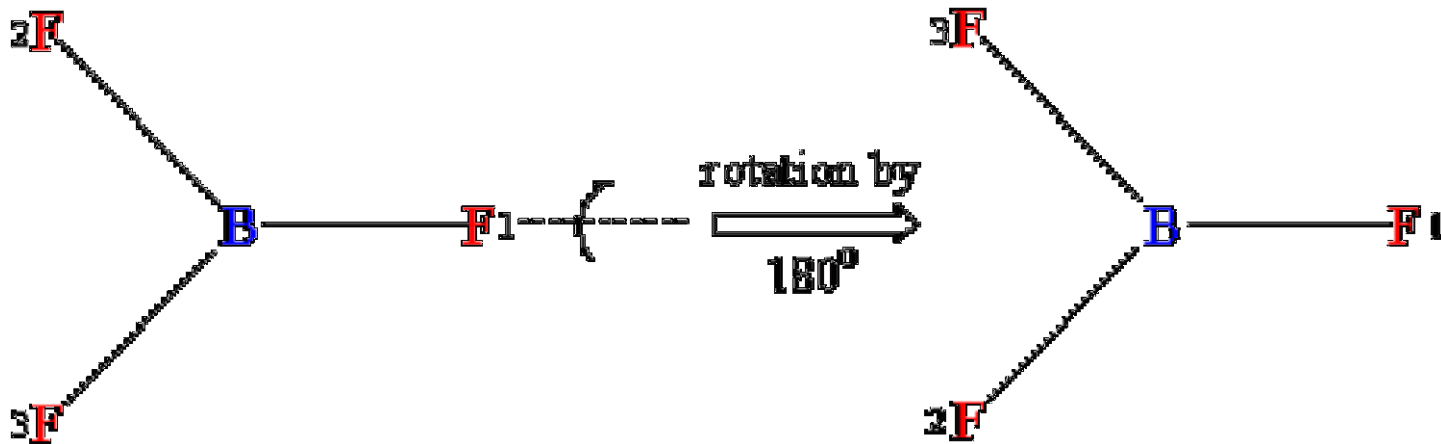


La operación es una rotación  $C_3$  sobre un eje. El elemento de simetría es un eje de rotación  $C_3$ . De hecho son posibles dos rotaciones sobre este eje, en sentido de las manecillas de reloj y en contra de las manecillas del reloj:  $2C_3$ .



Cualquier eje de rotación con  $n > 2$  genera dos ejes de rotación.

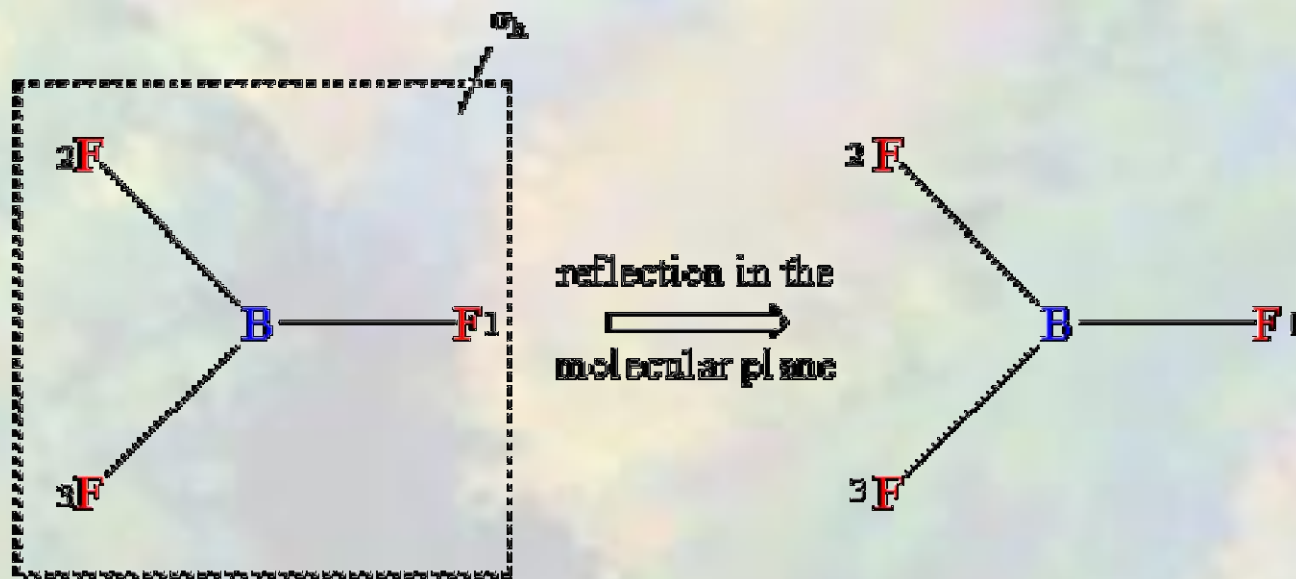
El  $\text{BF}_3$  también posee ejes  $C_2$ . Nótese que la rotación de  $180^\circ$  en el sentido de las manecillas del reloj así como al contrario es la misma., sólo es un  $C_2$ .



Tiene un eje  $C_2$  equivalente a lo largo de cada enlace, así que posee tres ejes  $C_2$ ,  $3C_2$ .

El  $C_3$  es el eje de rotación *principal* dado que tiene el mayor valor de  $n$ .

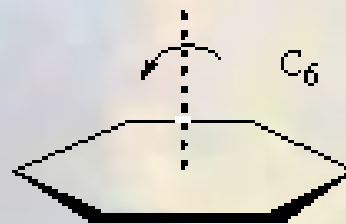
**Ejemplo 6:** El plano molecular de la molécula  $\text{BF}_3$  es un plano de espejo 'horizontal',  $\sigma_h$ :



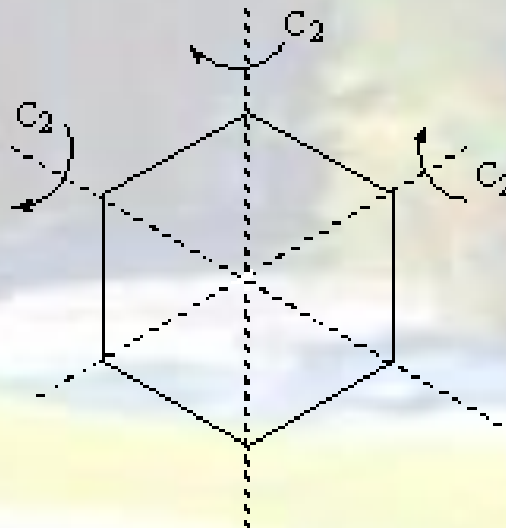
Nuevamente, el tipo de etiqueta se puede entender mirando bajo un eje de rotación. La molécula  $\text{BF}_3$  posee un eje  $C_3$  y  $2C_2$ . La etiqueta se refiere a la relación entre el plano y el eje principal ( $C_3$ ):

**Ejemplo 7:** Existe un tipo adicional de plano de espejo, planos dihedros o  $\sigma_d$ . Éstos bisectan dos ejes  $C_2$ .

El eje de rotación principal de la molécula de benceno es un  $C_6$ , perpendicular a la molécula.

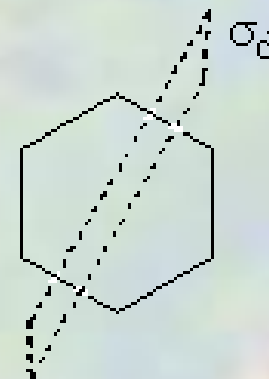
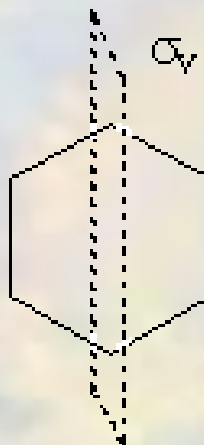


También posee  $3C_2$  que pasan por átomos de C opuestos:





El benceno posee tres tipos de planos de espejo:

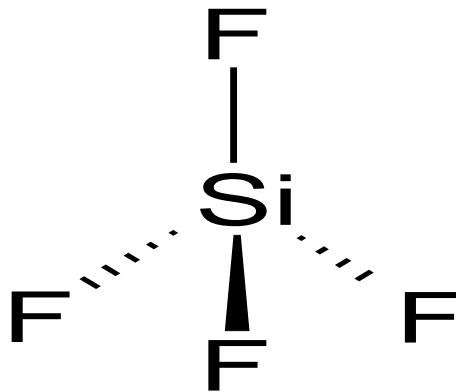


Un plano perpendicular al eje principal ( $C_6$ ):  $\sigma_h$  plane.

Los otros dos tipos de planos de reflexión son verticales a los ejes  $C_6$ . Es importante hacer notar que el que se encuentra la derecha corta dos ejes  $C_2$  y se llama plano dihedral:  $\sigma_d$ .

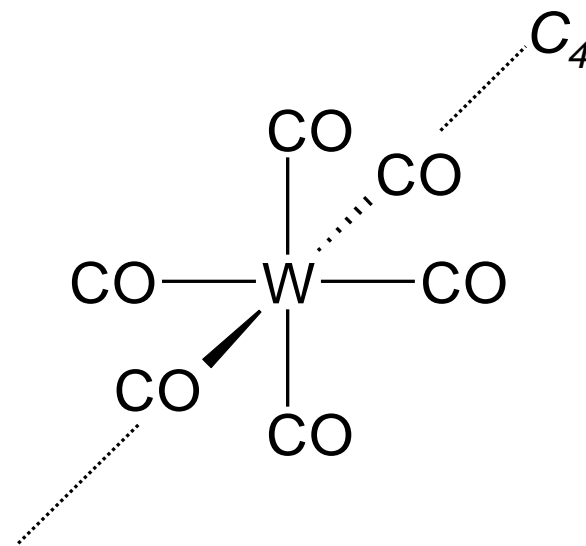
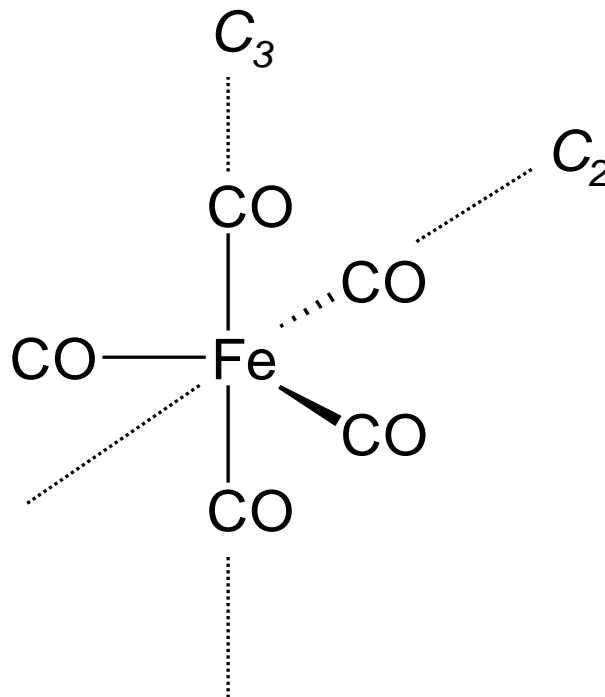
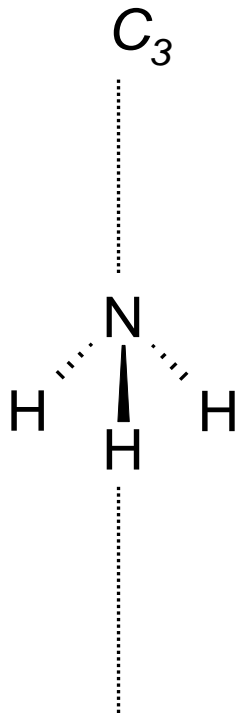
Las moléculas que poseen al menos un plano de reflexión o de espejo no son quirales.

## *Ejes de rotación, $C_n$*

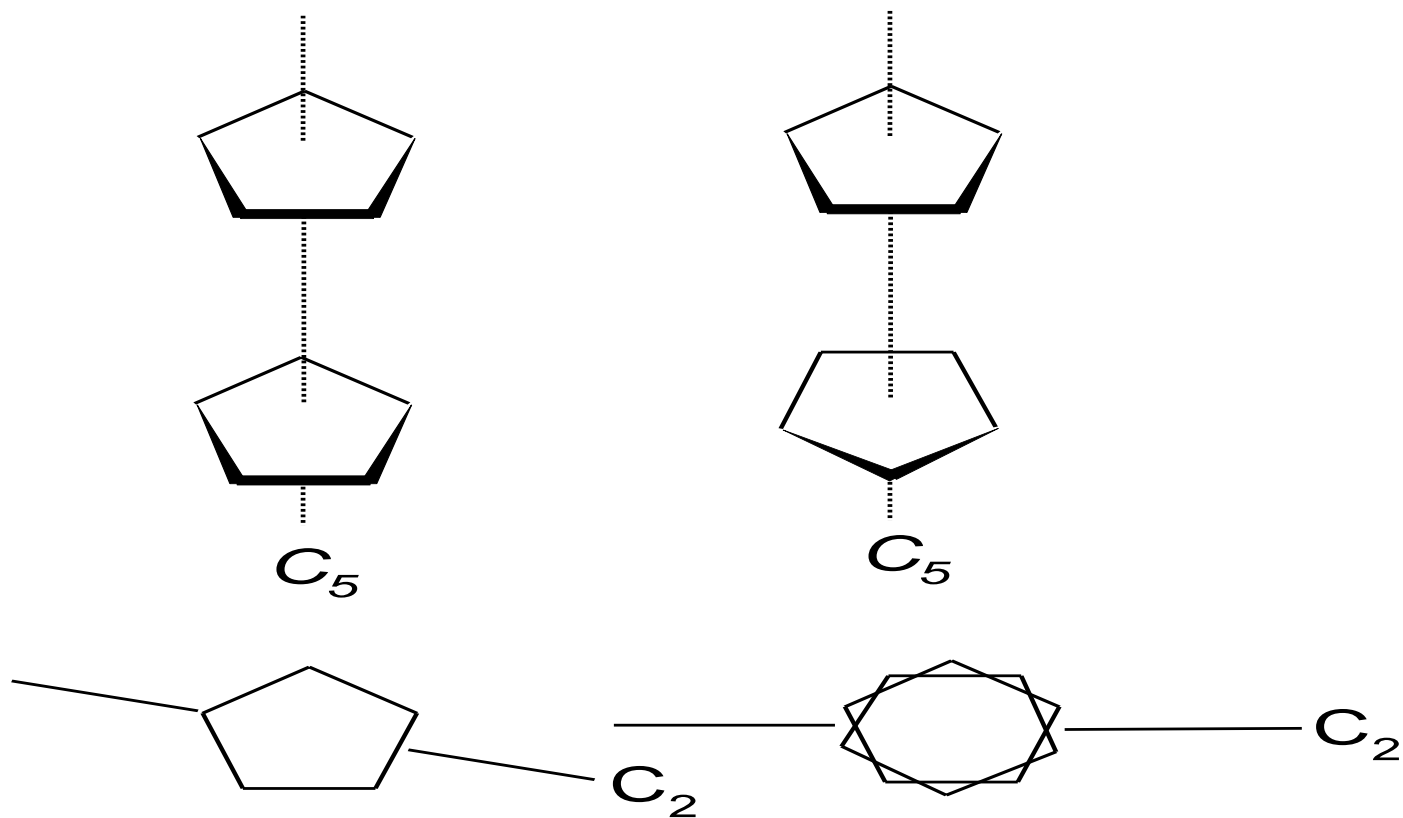


Tiene cuatro ejes triples  $C_3$  cada uno a lo largo del enlace Si-F.

# Ejes de rotación, $C_n$



# Ejes de rotación, $C_n$



El ferroceno eclipsado o alternado, tienen ejes  $C_5$

# Ejes $C_n$ y planos $\sigma_n$

Muchas moléculas tienen más de un eje de simetría  $C_n$ . En aquellos casos con más de un eje de simetría, el de mayor orden es el llamado *eje principal* y normalmente está sobre el eje z. Los planos que contienen a los ejes principales se llaman **planos verticales  $\sigma_v$**

Y un plano de reflexión (espejo) perpendicular al eje principal se llama **plano horizontal  $\sigma_h$**

## Ejes de rotación impropios, $S_n$

Un eje  $C_n$  frecuentemente es llamado un “eje de rotación propio” y la rotación alrededor es llamada una rotación propia.

Una **rotación impropia** ocurre en dos pasos: una rotación de  $360^\circ/n$  seguida por una reflexión perpendicular al eje de rotación.

Ni el eje de rotación, ni el plano de reflexión necesitan ser elementos de simetría reales de la molécula.

Ej. El  $\text{SiF}_4$  no tiene ejes de  $C_4$ . No obstante, tiene tres ejes  $S_4$ , uno a través de cada par de las caras opuestas del cubo.

# Grupos Puntuales y Simetría Molecular

El conjunto de elementos de simetría de una molécula forman un grupo de simetría o un **grupo puntual**.

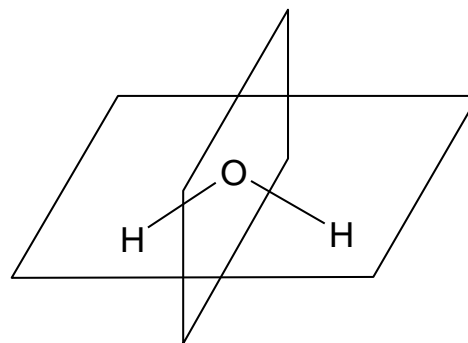
Por ej. El  $\text{H}_2\text{O}$  posee:

E

1  $\text{C}_2$

2 planos verticales: 2  $\sigma_v$

**$\text{C}_{2v}$**



# Grupos Puntuales y Simetría Molecular

Por ej. El  $\text{PF}_5$  posee:

E

2  $C_3$

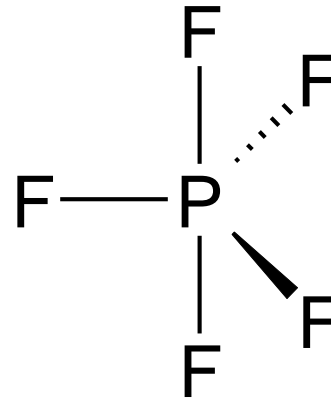
3  $C_2$

3  $\sigma_v$

1  $\sigma_h$

2  $S_3$

**$D_{3h}$**





# Grupos Puntuales y Simetría Molecular

Por ej. El  $\text{PtCl}_4$  posee:

E

2  $C_4$

$C_2$

2  $C'_2$

2  $C''_2$

$i$

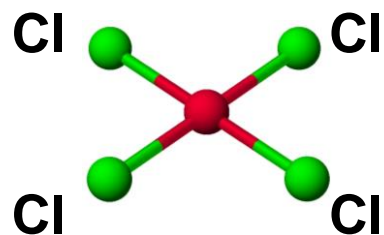
2  $S_4$

$\sigma_h$

2  $\sigma_v$

2  $\sigma_d$  (planos que bisectan dos ejes  $C_2$ )

**$D_{4h}$**



# Grupos Puntuales y Simetría Molecular

Por ej. El  $\text{SiF}_4$  posee:

E

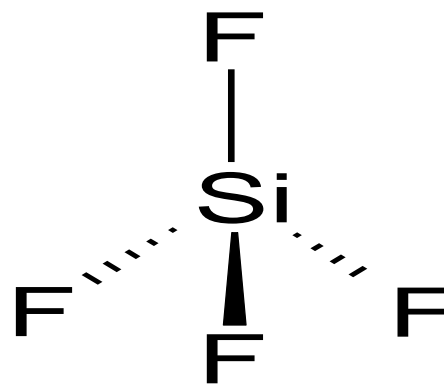
8  $C_3$

3  $C_2$

6  $S_4$

6  $\sigma_d$  (planos que bisectan dos ejes  $C_2$ )

$T_d$



# Grupos Puntuales y Simetría Molecular

Por ej. El  $[\text{CoF}_6]^{3-}$  posee:

E

8  $C_3$

6  $C_2$

6  $C_4$

3  $C_2 (=C_4^2)$

*i*

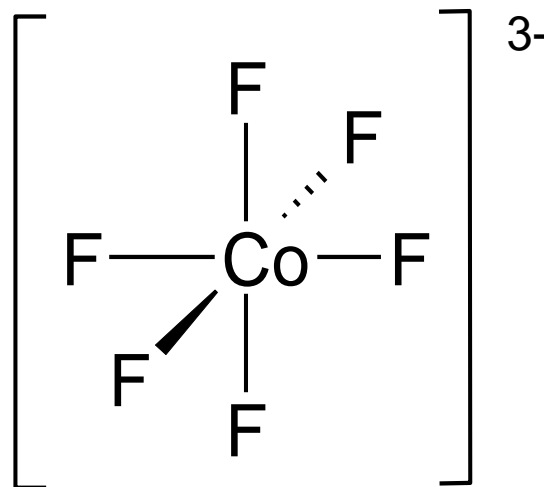
6  $S_4$

8  $S_6$

3  $\sigma_h$

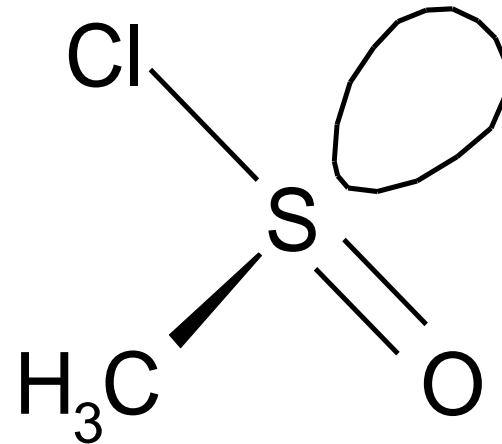
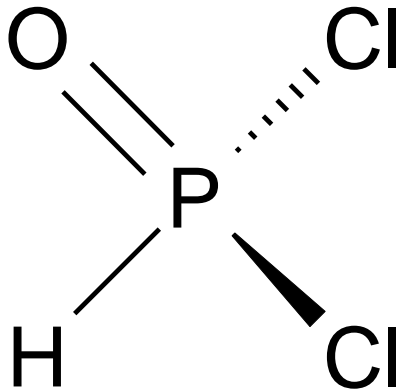
3  $\sigma_d$

**$O_h$**



## *Planos de reflexión, $\sigma$*

Oxido de diclorofosfina



Cloruro de metil sulfinil