Grupos $\boldsymbol{C_n}$

Si los únicos elementos del grupo son un eje derotación y sus potencias ***C_n,C_n^2,…E, se le llama grupo cíclico, y como en estos grupos todos los*** elementos conmutan, se les conoce como ***grupos abelianos***
Para diferenciarlos empleamos un subíndice al que
se llama el orden del grupo ***n.***

C_1: E

C_i: $E\ i$

C_2: $E\ C_2$

C_3: $E\ C_3\ C_3^2$

C_4: $E\ C_4\ C_2\ C_4^2$

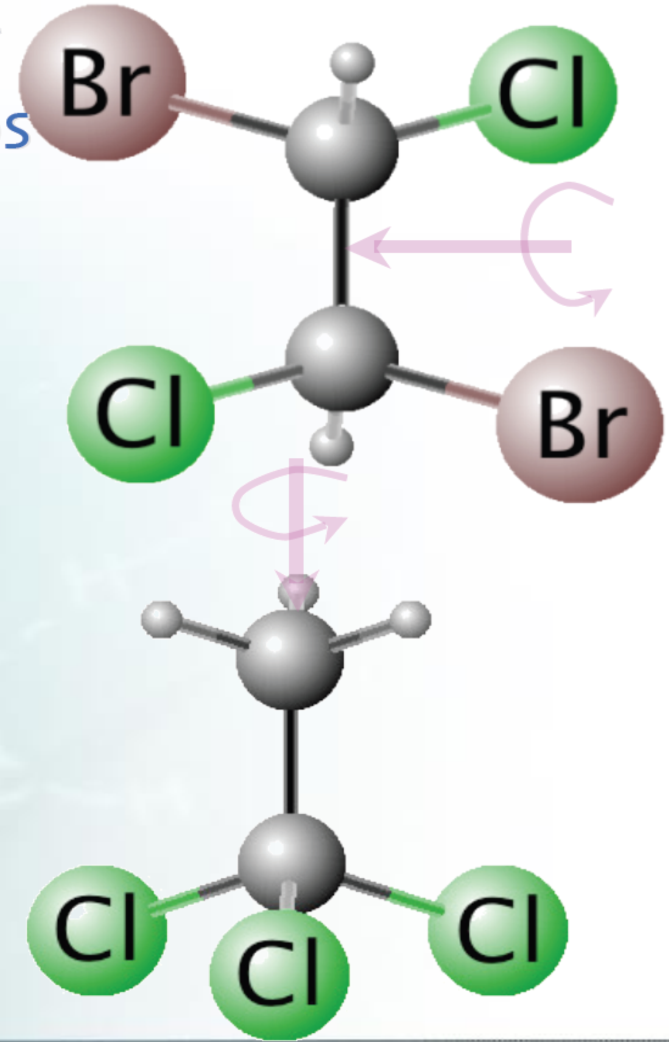
Grupos C_n

La molécula de BrClCH-CHClBr tiene únicamente los elementos de simetría: C_2 y E.

Esta molécula pertenece al grupo C_2

En tanto que en la molécula CH_3-CCl_3, se tienen los siguientes elementos: C_3, C_3^2 y E.

Y pertenece al grupo C_3



Grupos C_{nh}

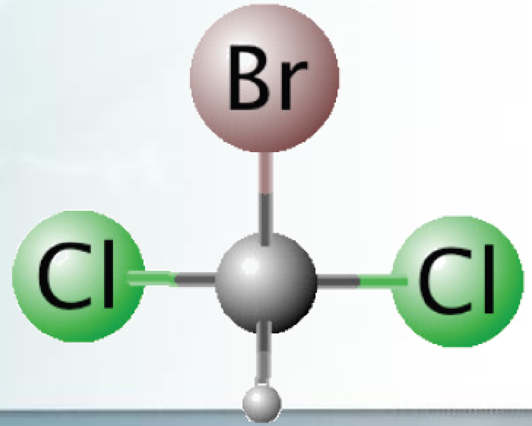
Tienen un eje de rotación C_n y además tienen un plano especular perpendicular al eje de rotación y además un eje de rotación impropio

Si $n = 1$, los únicos elementos de simetría observados serán C_1 y E

A este grupo en particular se le llama C_s.

- C_s — $E \;\; \sigma_h$
- C_{2h} — $E \;\; C_2 \;\; i \;\; \sigma_h$
- C_{3h} — $E \; C_3 \; C_3^2 \; \sigma_v \; S_3 \; S_3^5$
- C_{4h} — $E \;\; C_4 \;\; C_2 \; C_4^3 \; i \; S_4 \; \sigma_h \; S_4^3$

La molécula $CHCl_2Br$ pertenece al grupo C_s

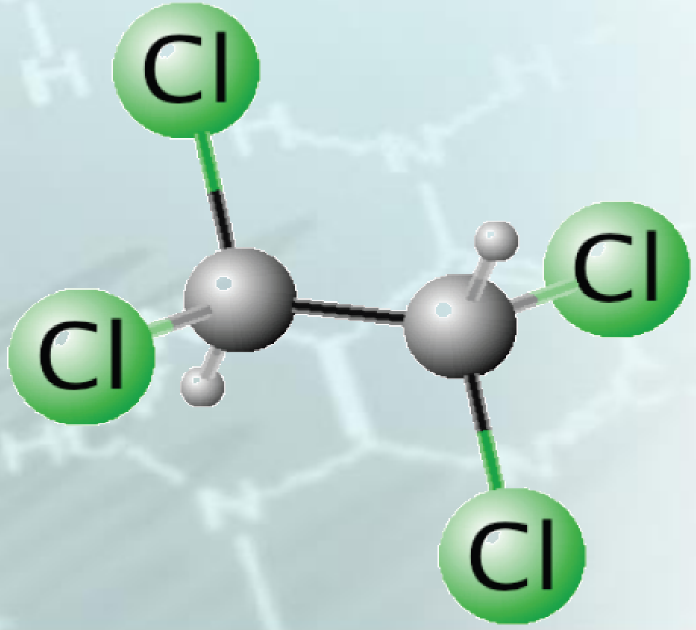


Grupos C_{nh}

La configuración ***trans*** de la molécula de Cl_2CH-$CHCl_2$ tiene los siguientes elementos de simetría

C_2, σ_h, i y E

Por tanto pertenece al grupo C_{2h}



Grupos C_{nv}

Tienen un eje C_n y además n planos especulares σ_v

Cuando $n = 1$, hay un solo plano y esto hace que

$C_{1v} = C_{1h} = C_s$.

Estos grupos tienen un orden de $2n$

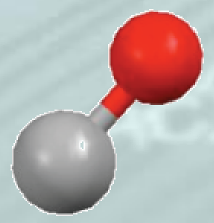
- C_{2v} $\quad E \quad C_2 \quad \sigma_{v(xy)} \quad \sigma_v'{}_{(xz)}$
- C_{3v} $\quad E \quad 2C_3 \quad 3\sigma_v$
- C_{4v} $\quad E \quad 2C_4 \quad C_2 \quad 2\sigma_v \quad 2\sigma_d$
- C_{5v} $\quad E \quad 2C_5 \quad 2C_5^2 \quad 5\sigma_v$
- C_{6v} $\quad E \quad 2C_6 \quad 2C_3 \quad C_2 \quad 3\sigma_v \quad 3\sigma_d$

Grupos C_{nv}

El grupo $C_{\infty v}$ es muy importante pues todas las moléculas lineales que no tienen un plano especular perpendicular al eje de la molécula pertenecen a este grupo.

El eje principal es C_{∞} pues cualquier rotación la deja igual.

Entre las moléculas que tienen la simetría $C_{\infty v}$ están CO y HCN:



Grupos S_n

Los elementos de estos grupos se generan aplicando un eje S_n. Un eje S_1 es idéntico a un plano σ_h.

Esto significa que $S_1 = C_s$.

El eje S_2 es idéntico a un centro de inversión y el grupo que tiene E e i como únicos elementos se llama C_i.

Cuando n es impar, los grupos S_n y C_{nh} son equivalentes y usamos la segunda notación.

La otra notación S_n la emplearemos cuando n es par.

Al grupo S_6 se le llama C_{3i} en algunas ocasiones (tiene un eje C_3 y un centro de inversión i.

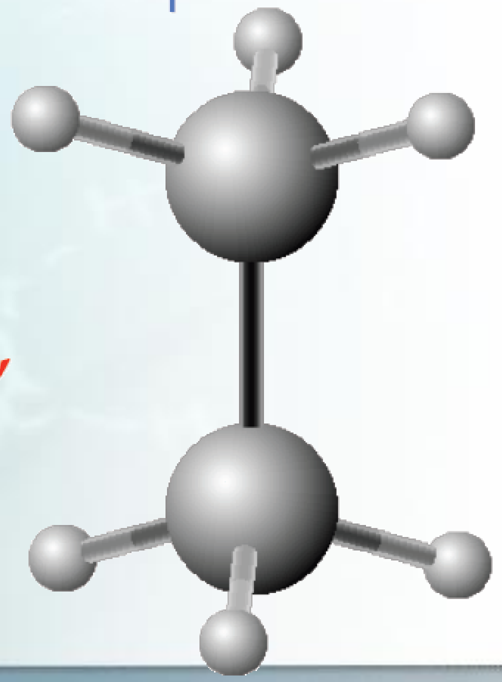
- S_4 $E \;\; S_4 \;\; C_2 \;\; S_4^3$
- S_6 $E \;\; C_3 \;\; C_3^2 \;\; i \;\; S_6^5 \;\; S_6$

Grupos D_n

Las clases C_n, C_{nh}, C_{nv}, y S_n, son las únicas donde hay un solo eje de rotación.

Cuando además se cuenta n ejes C_2 perpendiculares a un eje C_n, se les conoce con el nombre de D_n y se les designa también con un subíndice que corresponde al número de ejes perpendiculares C_2

- D_2: $E \quad C_2(x) \quad C_2(y) \quad C_2(z)$
- D_3: $E \quad 2C_3 \quad 3C_2$
- D_4: $E \quad 2C_4 \quad C_2{=}C_4^2 \quad 2C_2' \quad 2C_2''$



El etano es un ejemplo de D_3, siempre y cuando no esté alternado.

Grupos D_{nh}

Además de los ejes C_n y los n ejes C_2, estos grupos tienen un plano especular perpendicular al eje C_n

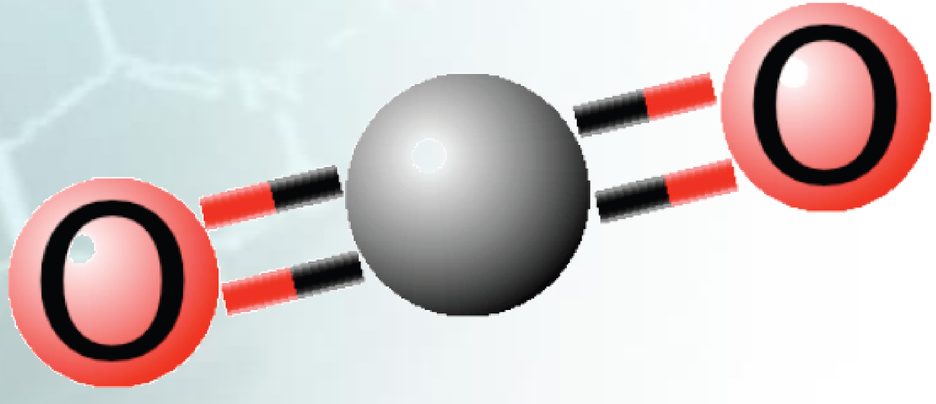
Las moléculas lineales que tienen un plano especular perpendicular al eje molecular o principal son $D_{\infty h}$

- D_{2h} $E \;\; C_{2(x)} \;\; C_{2(y)} \;\; C_{2(z)} \;\; i \;\; \sigma_{v(xy)} \;\; \sigma_{v(xz)} \;\; \sigma_{v(yz)}$
- D_{3h} $E \;\; 2C_3 \;\; 3C_2 \;\; \sigma_h \;\; 2S_3 \;\; 3\sigma_v$
- D_{4h} $E \;\; 2C_4 \;\; 2C_2 \;\; 2C_2' \;\; 2C_2'' \;\; i \;\; 2S_4 \;\; \sigma_h \;\; 2\sigma_v \;\; 2\sigma_d$
- D_{5h} $E \;\; 2C_5 \;\; 2C_5^2 \;\; 5C_2 \;\; \sigma_h \;\; 2S_5 \;\; 2S_5^3 \;\; 5\sigma_v$
- D_{6h} *etc*

Grupos $\boldsymbol{D_{nh}}$

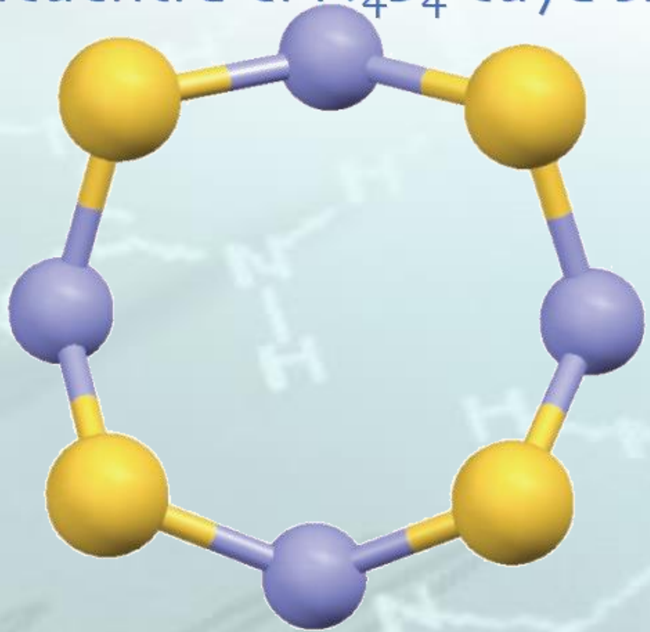
Las moléculas lineales que tienen un plano especular perpendicular al eje molecular o principal son $D_{\infty h}$

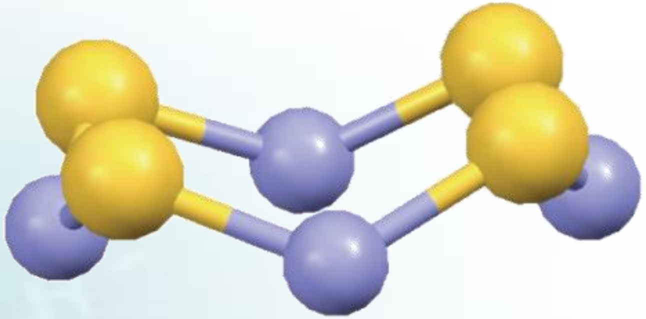
Moléculas lineales que tienen la simetría $D_{\infty h}$



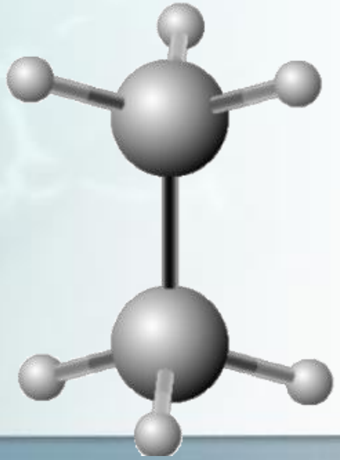
Grupo D_{nh}

Entre las moléculas que tienen esta simetría, se encuentra el N_4S_4 cuya simetría es D_{2h}:





Por otro lado el etano en su configuración alternada tiene la simetría D_{3h}:



Grupos cúbicos

Todos tienen en común una característica distintiva del cubo, al menos cuatro ejes C_3 que se intersecan

Los grupos cúbicos son: T, T_h, T_d, O y O_h.

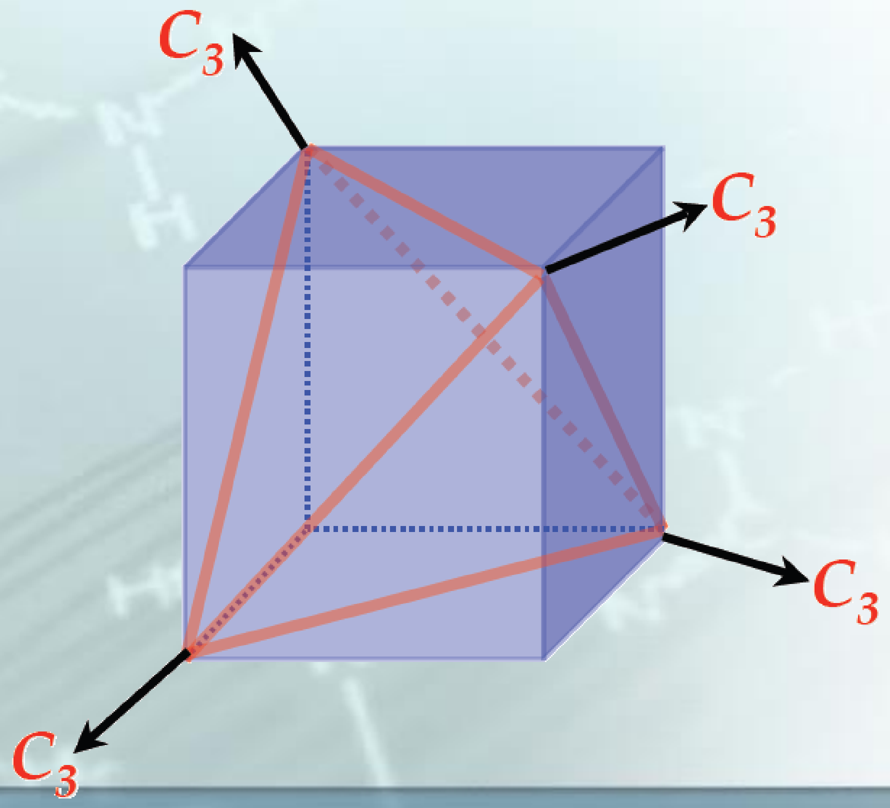
Las operaciones de simetría (elementos del grupo) son las siguientes.

- T — $E\ 4C_3\ 4C_3^2\ 3C_2$
- T_h — $E\ 4C_3\ 4C_3^2\ 3C_2\ i\ 4S_6\ 4S_6^5\ 3\sigma_h$
- T_d — $E\ 8C_3\ 3C_2\ 6S_4\ 6\sigma_d$
- O — $E\ 8C_3\ 3C_2\ 6C_4\ 6C_2$
- O_h — $E\ 8C_3\ 6C_2\ 6C_4\ 3C_2\ i\ 6S_4\ 8S_6\ 3\sigma_h\ 6\sigma_d$

El grupo T tiene los mismos elementos de simetría rotacional que un tetraedro regular.

Grupos cúbicos

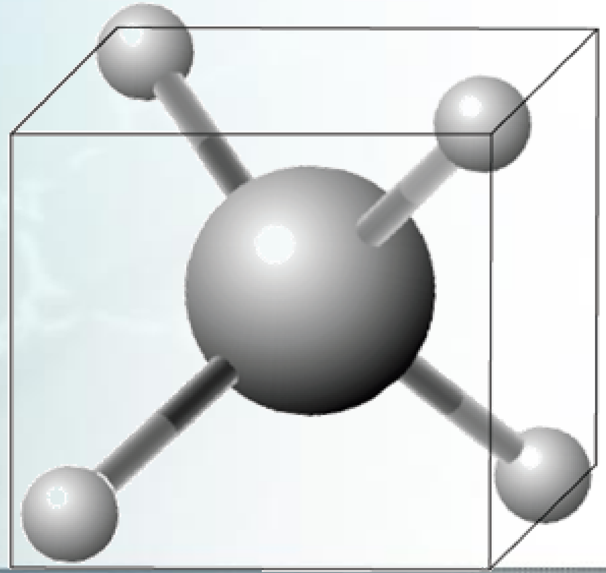
Al inscribir un tetraedro en un cubo notamos que cada un de las cuatro diagonales del cubo corresponde a un eje C_3



Grupos cúbicos

Además de estos ejes triples,
el grupo tiene tres ejes C_2 paralelos a las aristas del cubo bisecando las aristas opuestas del tetraedro.
El grupo T_h tiene además un centro de inversión.
El grupo T_d además de los elementos del grupo T, tiene tres ejes S_4.

Las moléculas como el CH_4 pertenecen a este grupo



Grupos cúbicos

El grupo O es de orden 24.

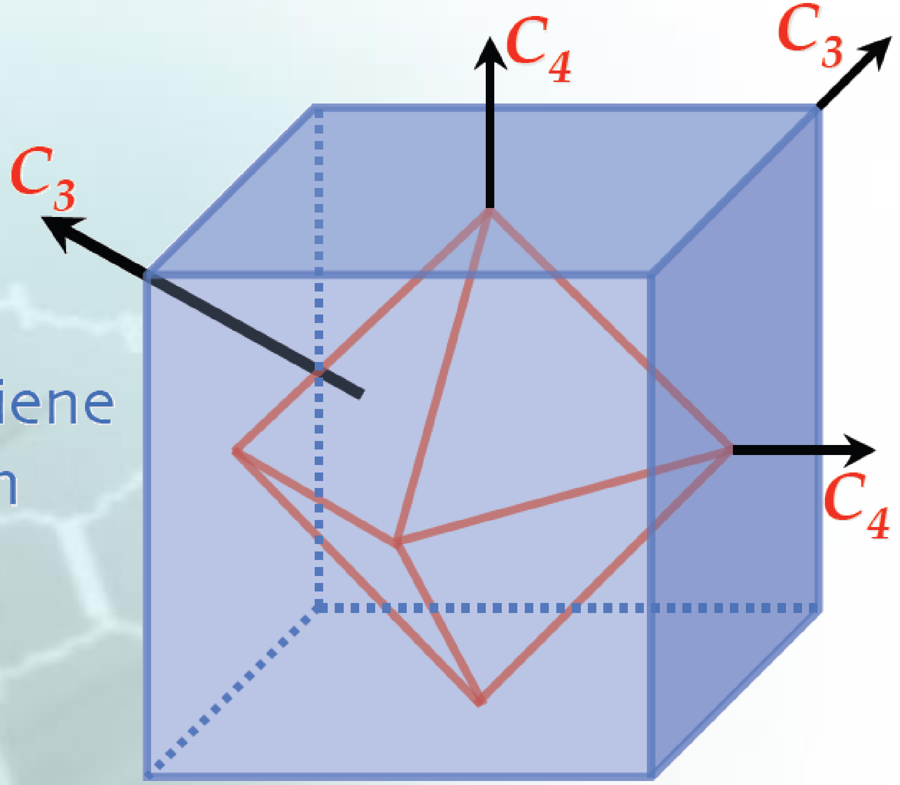
Tiene todas las rotaciones propias de un octaedro regular, estas son:

cuatro ejes C_3

tres ejes C_4

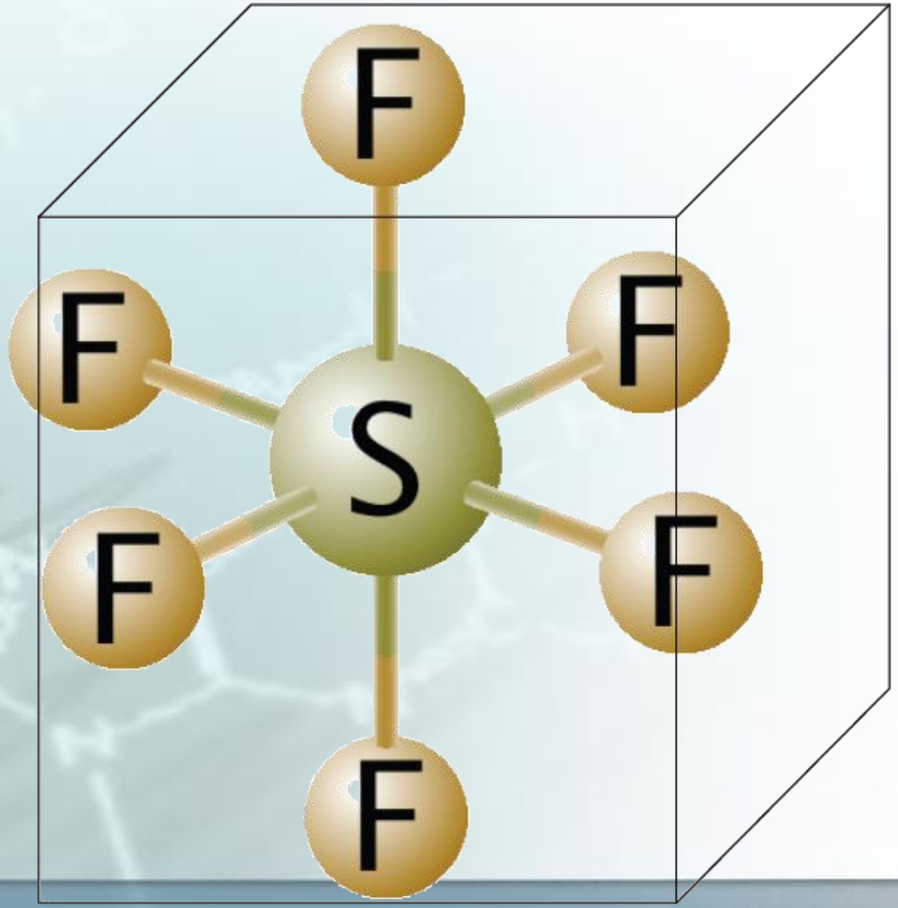
seis ejes C_2.

El grupo O_h además tiene un centro de inversión



Grupos cúbicos

Las moléculas octaédricas como el SF_6 sienen la misma simetría que el O_h



Grupos Icosaédricos

Se llaman I e I_h

El grupo I tiene todas las rotaciones de un icosaedro regular es decir:

- *seis ejes* C_5,
- *diez ejes* C_3,
- *quince ejes* C_2.

El grupo I_h además tiene un ***centro de inversión***

Determinación del grupo puntual

Para determinar el grupo puntual de un objeto se requiere inspeccionarlo cuidadosamente. Las siguientes reglas permiten hacerlo sistemáticamente.

1. Si la molécula es lineal, pertenece al grupo $C_{\infty v}$ o al $D_{\infty h}$, si además tiene un plano especular perpendicular al eje principal.
2. Si la molécula tiene la gran simetría de los grupos cúbicos, será sencillo encontrar los cuatro ejes C_3 y la búsqueda cuidadosa de otros elementos permitirá distinguir entre T, T_h, T_d, O y O_h. La gran simetría que presentan los grupos icosaédricos los hace fácilmente reconocibles.

Determinación del grupo puntual

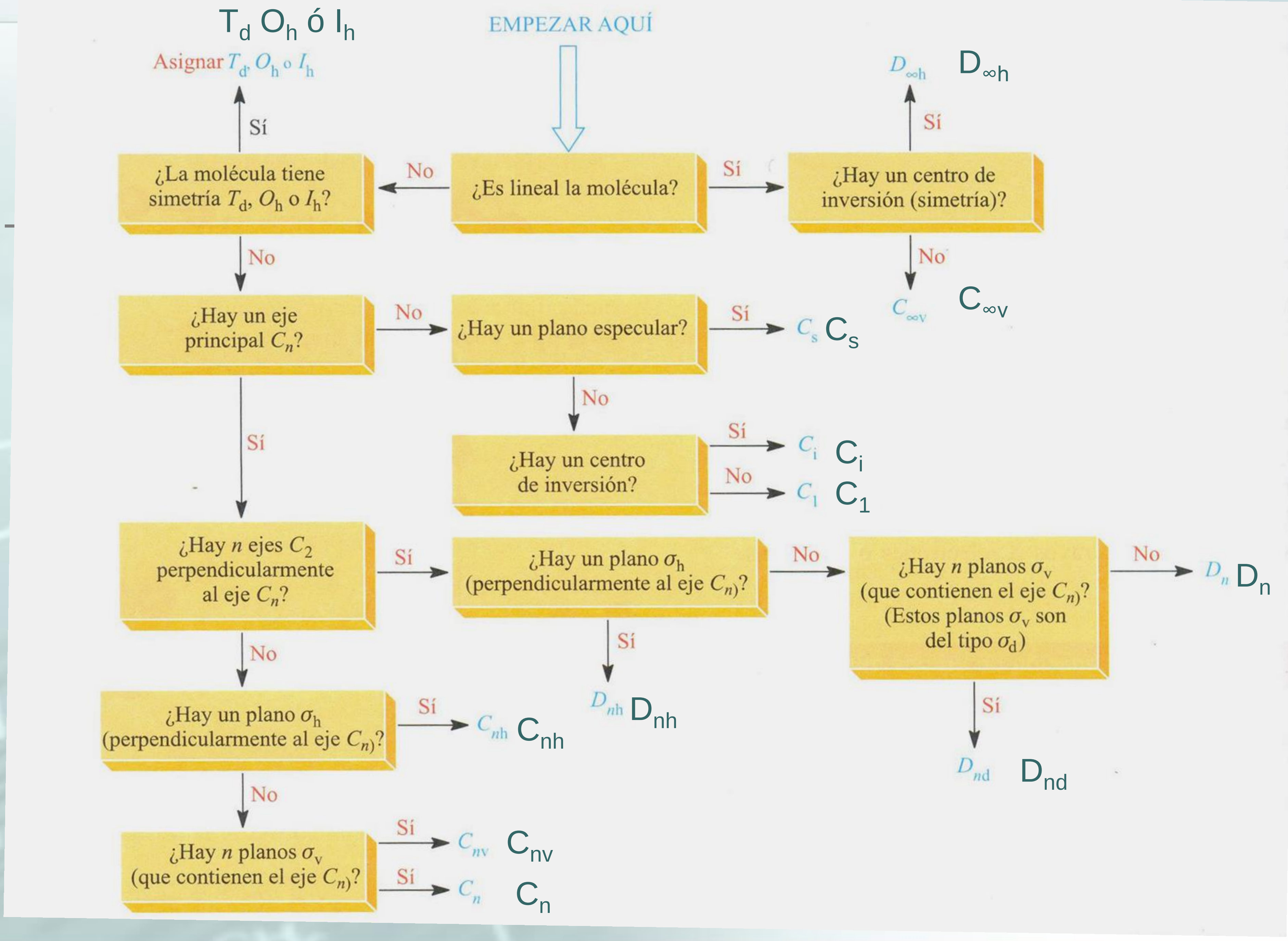
Después de eliminar a los grupos de gran simetría, buscaremos ejes propios de rotación si no hay ninguno el grupo es C_s, C_i, o C_1.

Si hay más de un eje de rotación propio, buscamos el de mayor orden, este será único excepto cuando haya tres ejes C_2. Ahora determinamos si este eje único es propio (C_n) o en realidad es un eje impropio (S_{2n}). Si es S_{2n} y no encontramos más elementos de simetría el grupo es S_{2n}.

Determinación del grupo puntual

Si el eje único no es S_{2n} o si hay otros elementos de simetría, buscamos la presencia de n ejes C_2 perpendiculares al eje único C_n. Si no hay ninguno, el grupo es C_n, si no tiene planos especulares; C_{nv}, si tiene un plano vertical o C_{nh}, si tiene un plano horizontal.

Si hay n ejes C_2 perpendiculares al eje único, el grupo debe ser D_n si no tiene planos especulares, D_{nd} si hay n planos σ_d que bisecan los ángulos entre los ejes C_2 y finalmente será D_{nh} si hay un plano especular horizontal.



T_d O_h ó I_h
EMPEZAR AQUÍ
Asignar T_d, O_h o I_h
Sí
¿La molécula tiene simetría T_d, O_h o I_h?
No
¿Es lineal la molécula?
Sí
¿Hay un centro de inversión (simetría)?
Sí
$D_{\infty h}$
$D_{\infty h}$
No
$C_{\infty v}$
$C_{\infty v}$
No
¿Hay un eje principal C_n?
No
¿Hay un plano especular?
Sí
C_s
C_s
No
¿Hay un centro de inversión?
Sí
C_i
C_i
No
C_1
C_1
Sí
¿Hay n ejes C_2 perpendicularmente al eje C_n?
Sí
¿Hay un plano σ_h (perpendicularmente al eje C_n)?
No
¿Hay n planos σ_v (que contienen el eje C_n)? (Estos planos σ_v son del tipo σ_d)
No
D_n
D_n
Sí
D_{nd}
D_{nd}
Sí
D_{nh}
D_{nh}
No
¿Hay un plano σ_h (perpendicularmente al eje C_n)?
Sí
C_{nh}
C_{nh}
No
¿Hay n planos σ_v (que contienen el eje C_n)?
Sí
C_{nv}
C_{nv}
Sí
C_n
C_n