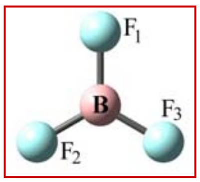
Grupos Puntuales de Simetría

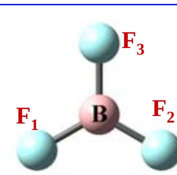
Operación de Simetría: Transformación de la posición de un cuerpo tal que la posición final y es físicamente indistinguible de la inicial y las distancias entre todas las parejas de puntos del cuerpo se mantienen iguales

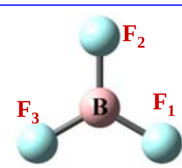
Elemento de Simetría: entidad geométrica (punto, recta, plano) con respecto al cual se efectúa una operación de simetría

Eje de simetría de orden n* (*Cn*):** si una ***rotación **(*Ĉn*)** de 360/*n* grados da como resultado una configuración indistinguible de la original (donde *n* es un número entero)

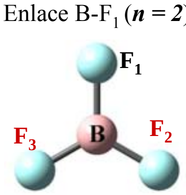


Eje de rotación:
⊥ al plano molecular
Pasando por el átomo de B
(***n*** = ***3***)

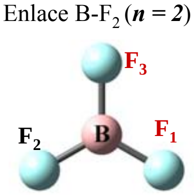




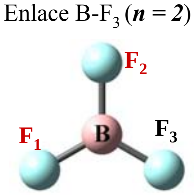
Eje de rotación:
Enlace B-F_1 (***n*** = ***2***)



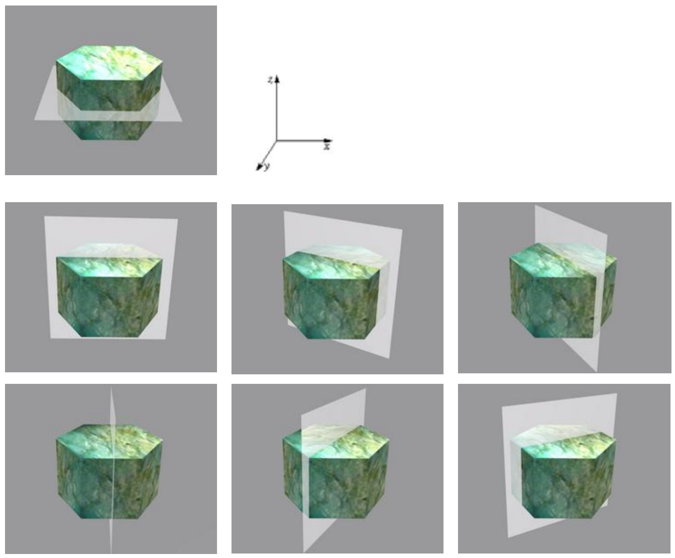
Eje de rotación:
Enlace B-F_2 (***n*** = ***2***)

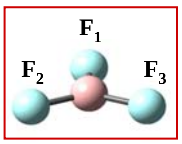


Eje de rotación:
Enlace B-F_3 (***n*** = ***2***)

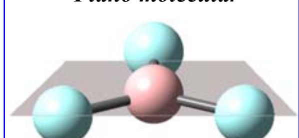


Plano de simetría (σ): si la ***reflexión*** ($\hat{\sigma}$)de todos los puntos con respecto a ese plano da una configuración físicamente indistinguible de la original

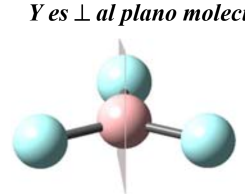




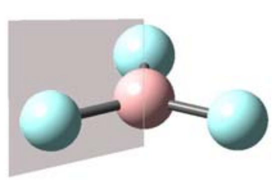
Plano molecular



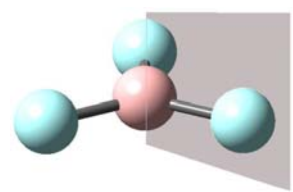
Plano que pasa por los núcleos B y F_1 Y es ⊥ al plano molecular



Plano que pasa por los núcleos B y F_2 Y es ⊥ al plano molecular

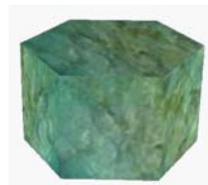


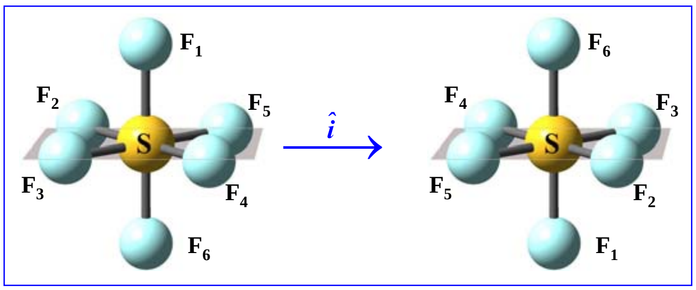
Plano que pasa por los núcleos B y F_3 Y es ⊥ al plano molecular



Centro de simetría (i): si la ***inversión*** **($\hat{\imath}$)** todos los puntos del cuerpo con respecto al centro conlleva a una configuración indistinguible de la original **(x, y, z)→ (-x, -y, -z)**



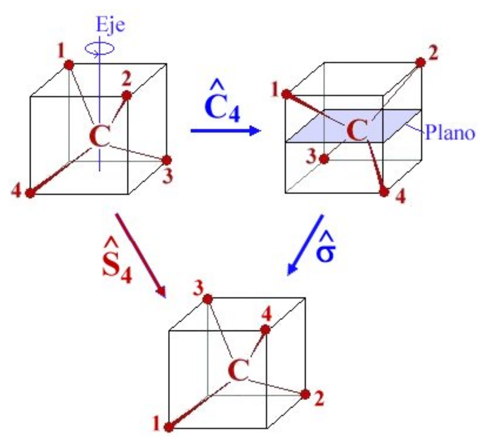




Eje Alternante de simetría de orden n,
Eje impropio
Eje de rotación reflexión (Sn)

$$\hat{S}_n = \hat{\sigma} \cdot \hat{C}_n$$

Un cuerpo tiene un eje ***Sn***, si la rotación de (360/n) grados alrededor de un eje, seguida de una reflexión en un plano ⊥ al mismo, conlleva a una conformación indistinguible de la original.



Productos de Operaciones de Simetría

Las operaciones de simetría son operadores que transforman el la posición de in cuerpo en el espacio tridimensional.

El producto de dos de estos operadores representa la aplicación sucesiva de los mismos, aplicando primero el operador de la derecha

$\hat{C}_3 \cdot \hat{C}_3 = \hat{C}_3^2$ Rota la molécula 240º

$\hat{C}_3 \cdot \hat{C}_3 \cdot \hat{C}_3 = \hat{C}_3^3$ Rota la molécula 360º (posición original)

$\therefore \hat{C}_3^3 = \hat{E}$

$\boxed{\hat{C}_n^n = \hat{E}}$

$\hat{C}_6^2 = \hat{C}_3$ Rotan la molécula 120º

$\hat{C}_6^3 = \hat{C}_2$ Rotan la molécula 180º

Un eje ***Cn*** es también un eje ***Cm***
Si ***n***/***m*** = # entero

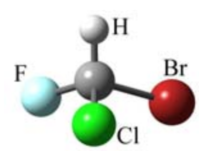
Dos reflexiones sucesivas o
Dos inversiones sucesivas
Regresan el sistema a su posición original

p par	*p* impar
$\hat{\sigma}^p = \hat{E}$	$\hat{\sigma}^p = \hat{\sigma}$
$\hat{i}^p = \hat{E}$	$\hat{i}^p = \hat{i}$

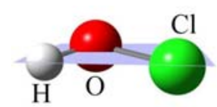
Grupos Puntuales de Simetría

Grupos de Baja Simetría

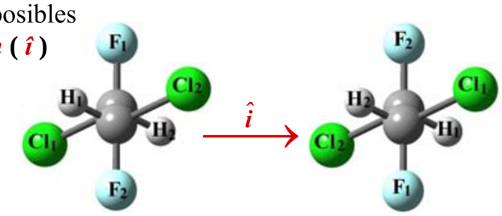
C_1: No tiene elementos de simetría
La única operación de simetría posible es la operación **identidad** ($\hat{E}$)



C_s: Sólo 1 plano de simetría
Operaciones de simetría posibles
identidad ($\hat{E}$) y ***reflexión*** ($\hat{\sigma}$)



C_i: Sólo 1 centro de simetría
Operaciónes de simetría posibles
identidad ($\hat{E}$) e ***inversión*** ($\hat{i}$)

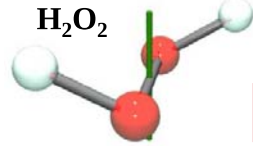


Grupos Puntuales de Simetría

Grupos con 1 solo eje de simetría

C_n (n =2, 3, 4,…): Sólo 1 eje de simetría
Operaciónes de simetría posibles
$\hat{C}_n$, $\hat{C}_n^{\,2}$, …, $\hat{C}_n^{\,n\text{-}1}$, $\hat{E}$

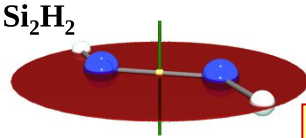
H_2O_2



C_2

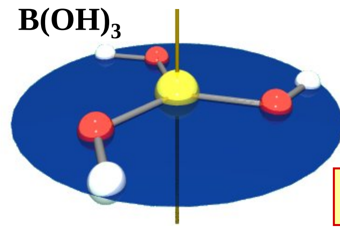
C_{nh} (n =2, 3, 4,…): 1 eje y 1 plano
Operaciónes de simetría posibles
$\hat{\sigma}$, $\hat{C}_n$, $\hat{C}_n^{\,2}$, …, $\hat{C}_n^{\,n\text{-}1}$, $\hat{E}$
y como $\hat{\sigma}_h \hat{C}_n = \hat{S}_n$
el eje C_n es también un eje S_n
y si n es par también hay $\hat{\imath}$
$\hat{\sigma}_h \hat{C}_2 = \hat{S}_2 = \hat{\imath}$

Si_2H_2



C_{2h}

$B(OH)_3$

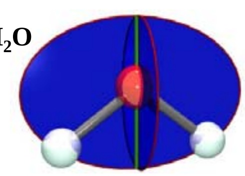


C_{3h}

Grupos con 1 solo eje de simetría

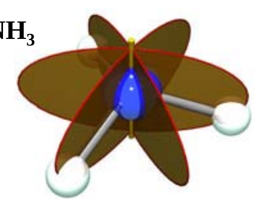
C_{nv} (n =2, 3, 4,…): ***1 eje*** y ***n planos*** que contienen al eje

H_2O



C_{2v}

NH_3

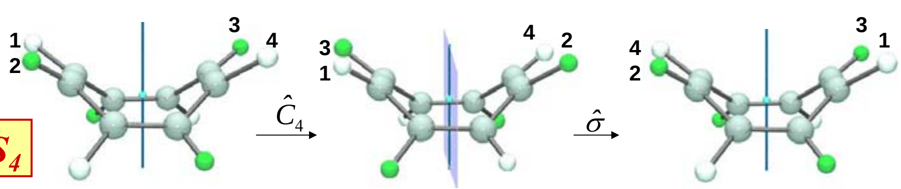


C_{3v}

S_n (n =2, 3, 4,…): ***1 eje impropio*** $\boxed{\hat{S}_n = \hat{\sigma} \cdot \hat{C}_n}$

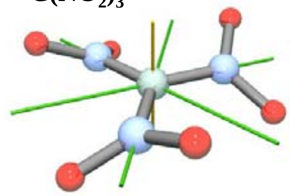
$C_2H_4F_4$

S_4



Grupos con 1 eje C_n y n ejes C_2

$C(NO_2)_3^-$

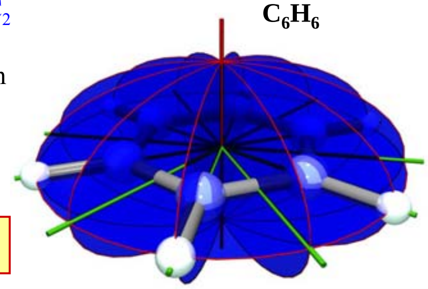


D_n (n =2, 3, 4,…): 1 eje C_n y n ejes C_2
⊥ al eje Cn (sin plano de simetría)
Ej: grupo D_2, 3 ejes C_2 ⊥
Operaciónes de simetría posibles
$\hat{C}_x^2$, $\hat{C}_y^2$, $\hat{C}_z^2$, $\hat{E}$

D_3

D_{nh} (n =2, 3, 4,…): 1 eje C_n , n ejes C_2
y 1 plano ⊥ al eje Cn
∴ el eje Cn es también un eje Sn

C_6H_6

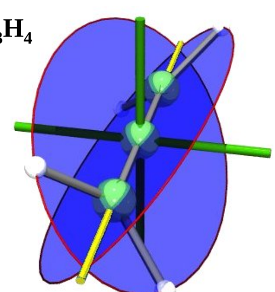


D_{6h}

Grupos con 1 eje C_n y n ejes C_2

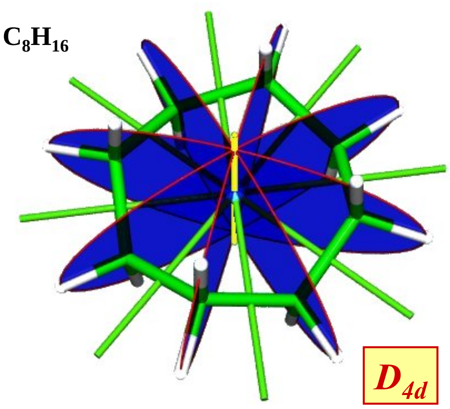
D_{nd} (n =2, 3, 4,…): 1 eje C_n , n ejes C_2 y
n planos conteniendo al eje Cn
Estos planos se llaman planos
diagonales y se simbolizan como σ_d

C_3H_4



D_{2d}

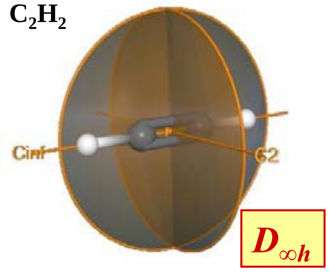
C_8H_{16}



D_{4d}

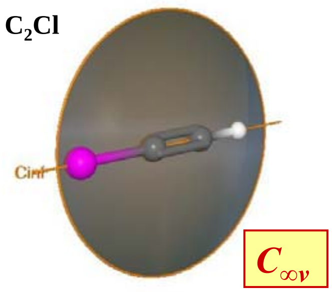
Moléculas Lineales

C_2H_2



$D_{\infty h}$: Moléculas con 2 mitades idénticas
1 eje C_∞ , ∞ ejes C_2 ,
∞ planos conteniendo al eje C_∞
1 plano $\perp$ al eje C_∞

C_2Cl



$C_{\infty v}$: Moléculas con 2 mitades diferentes
1 eje C_∞ ,
∞ planos conteniendo al eje C_∞

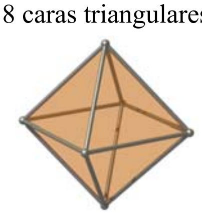
Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

Estos grupos están relacionados con las propiedades de simetría de los sólidos formados por polígonos regulares (*sólidos platónicos*)

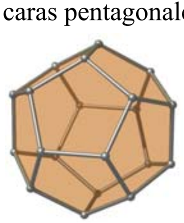
Tetrahedro:
4 caras triangulares

Cubo:
6 caras cuadradas

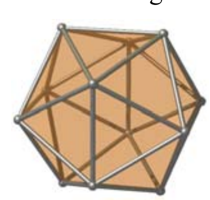
Octahedro:
8 caras triangulares



Dodecahedro:
12 caras pentagonales



Icosahedro:
20 caras triangulares



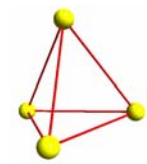
Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

T_d: Pertenecen a este grupo las moléculas que presentan los mismos elementos de simetría que un ***tetraedro regular***

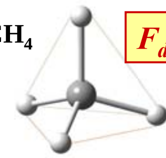
4 ejes C_3, pasan por el centro y un vértice

3 ejes C_2, pasan por el centro y un vértice

6 planos, conteniendo pares de ejes C_3

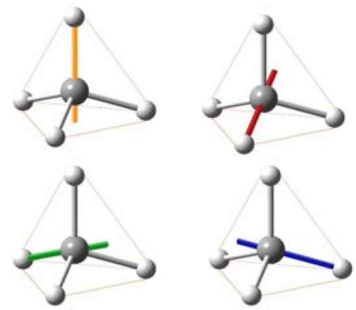


CH_4

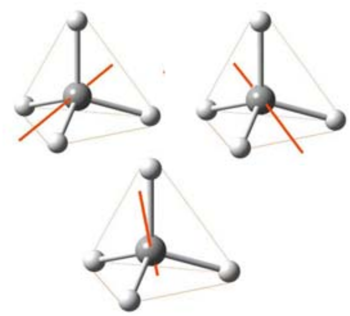


F_d

4 Ejes de simetría C_3

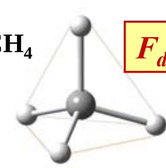


3 Ejes de simetría C_2



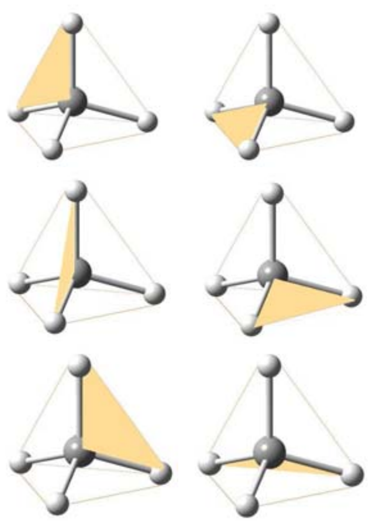
Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

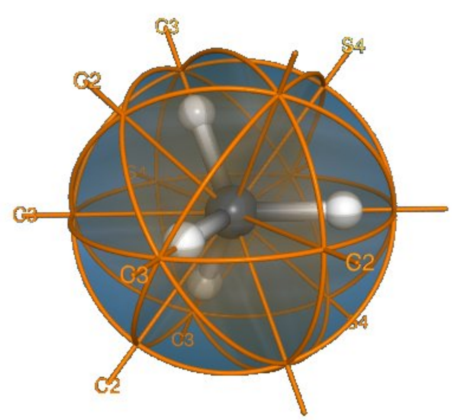
CH_4



F_d

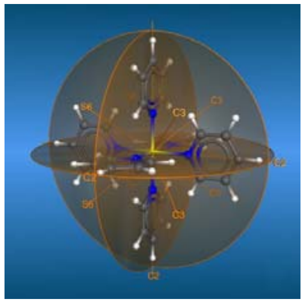
6 Planos de simetría



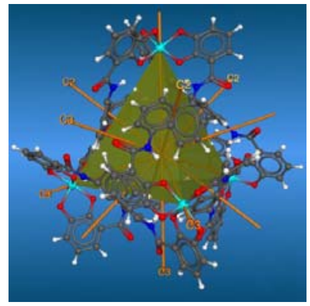


Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

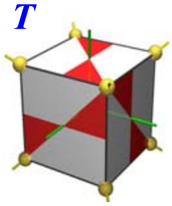
T_h: 4 ejes C_3, 3 ejes C_2, 2 planos



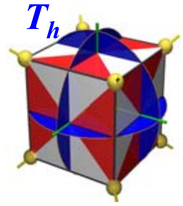
T: 4 ejes C_3, 3 ejes C_2



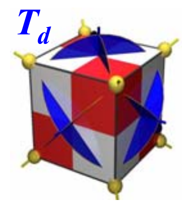
T



T_h



T_d



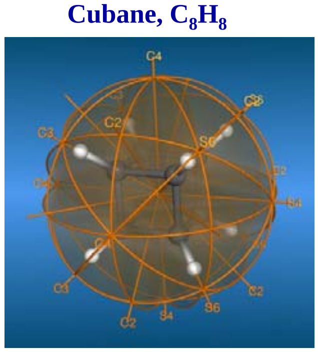
Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

O_h : Pertenecen a este grupo las moléculas que presentan los mismos elementos de simetría que un ***cubo*** y un ***octahedro regular***

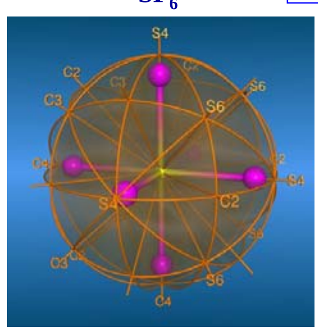
3 ejes C_4, pasan por los centros de las caras opuestas del cubo
4 ejes C_3, pasan por los vertices opuestos del cubo
6 ejes C_2, conectan los puntos medios de las aristas opuestas
3 planos, paralelos a las caras opuestas
6 planos, pasan por las aristas opuestas y ***1 centro***

$O = O_h$,
sin reflexiones,
ni rotaciones impropias

Cubane, C_8H_8



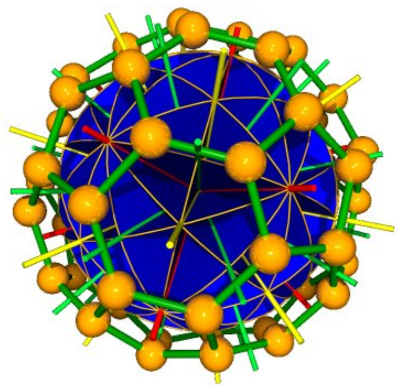
SF_6



Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

I_h : Pertenecen a este grupo las moléculas que presentan los mismos elementos de simetría que un ***dodecaedro*** y un ***icosahedro***
6 ejes C_5, centros de caras opuestas (D), vértices opuestos (I)
10 ejes C_3, vertices opuestos (D), centros de caras opuestas (I)
15 ejes C_2, conectan los puntos medios de las aristas opuestas
15 planos, contienen unpar de C_2 ó C_5 y ***1 centro***

$I = I_h$,
sin reflexiones,
ni rotaciones impropias



Fullereno, C_{60}

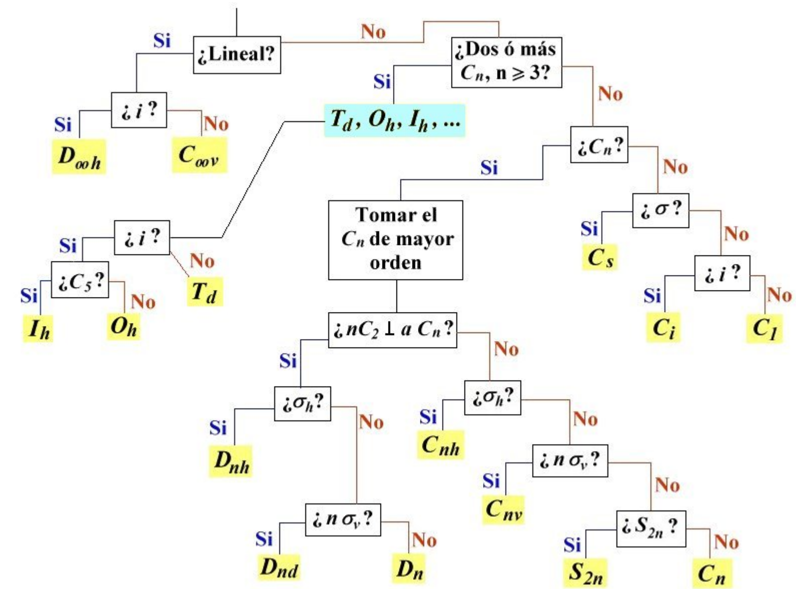
Grupos con varios ejes C_n *(Grupos de Alta simetría)*

K_h: Simétría de la esfera
Sólo los átomos pertenecen a este grupo

Números de Simetría

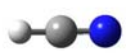
Grupo	σ	Grupo	σ	Grupo	σ
C_1, C_i, C_s, $C_{\infty v}$	1	$D_{\infty h}$	2	T, Td	12
C_n, C_{nv}, C_{nh}	n	S_n	n/2	O_h	24
D_n, D_{nd}, D_{nh}	2n			I_h	60

Esquema para determinar el grupo puntual de simetría de una molécula



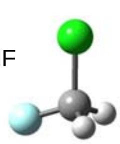
Ejercicios

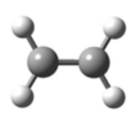
1. Cite los elementos de simetría de las siguientes moléculas:

a) HCN 

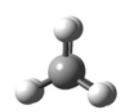
b) H_2S 

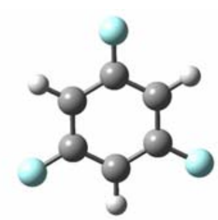
c) CH_3F 

d) CH_2ClF 

e) C_2H_4 

f) C_3H_6 alternado 

g) C_3H_6 eclipsado 

h) 1,3,5-$C_6H_3F^3$ 

2. Diga a qué grupo puntual de simetría pertenecen.