7.4 Symmetrier av molekyler

Forsøk på definisjon

Et molekyl er et begrenset legeme $M \subset \mathbb{R}^3$ hvor noen "områder" er merket som "atomer".

Def: En symmetri av et molekyl M er en isometri $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ som sender mengden M på seg selv og avbilder hvert atom i M på et atom av samme type.

$\mathrm{Sym}(M)$ = gruppa av alle symmetrier av M.

$\mathrm{Sym}_+(M)$ = gruppa av alle orienterings-bevarande symmetrier av M.

Def: La M vara ett molekyl med endelig symmetrigrupp $\mathrm{Sym}(M)$. Dessan R är en rotasjonssymmetri av M av maksimal orden, så kallen rotasjonsaksen til R en <u>prinsipalakse</u> for M.

<u>Konvensjon</u> Vi velger koordinatsystemet slik at origo er et fikspunkt for $\mathrm{Sym}(M)$ og z-aksen er en prinsipalakse.

Merk Hvis et molekyl M har en orienteringsreverserende symmetri σ, så er

$$\mathrm{Sym}(M) = \mathrm{Sym}_0(M) \cup \underbrace{\sigma \cdot \mathrm{Sym}_0(M)}_{\text{restklasse}}$$

$\Rightarrow$ Det er nok å angi $\mathrm{Sym}_0(M)$ og σ.

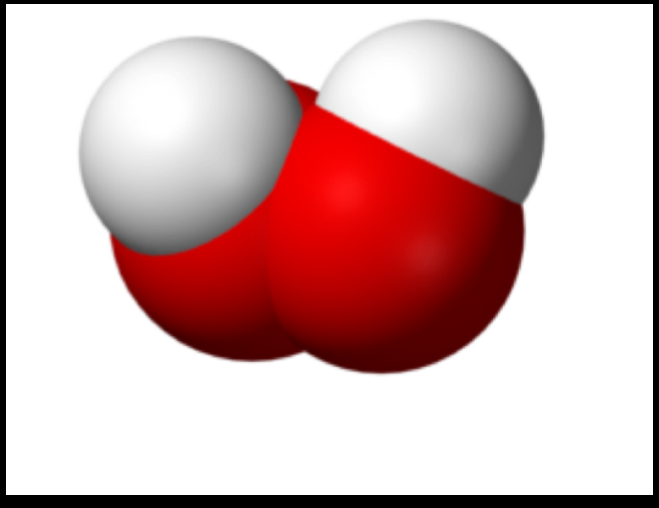
Forklaring: La τ være en annen ort.rev. symmetri av M. Da er

$$\sigma^{-1}\tau \in \mathrm{Sym}_0(M)$$

$$\Rightarrow \quad \tau \in \sigma \cdot \mathrm{Sym}_0(M).$$

Eksempler

① Hydrogenperoksid H_2O_2

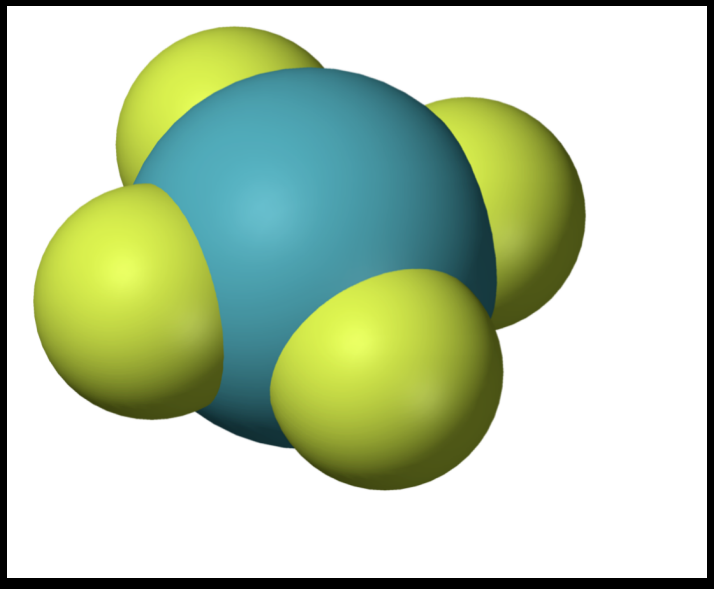


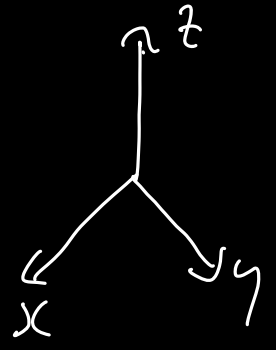
Vi har kun in ikke-triviell symmetri:

Rotasjon om z-aksen med vinkel π.

$\Rightarrow$ $Sym(M) = Sym_v(M) = C_2$

② Xenon-tetrafluorid XeF_4





Rotasjonssymmetri av orden 4 om z-aksen (prinsipalakse)

4 rotasjonssymmetrier av orden 2 med akser i xy-planet.

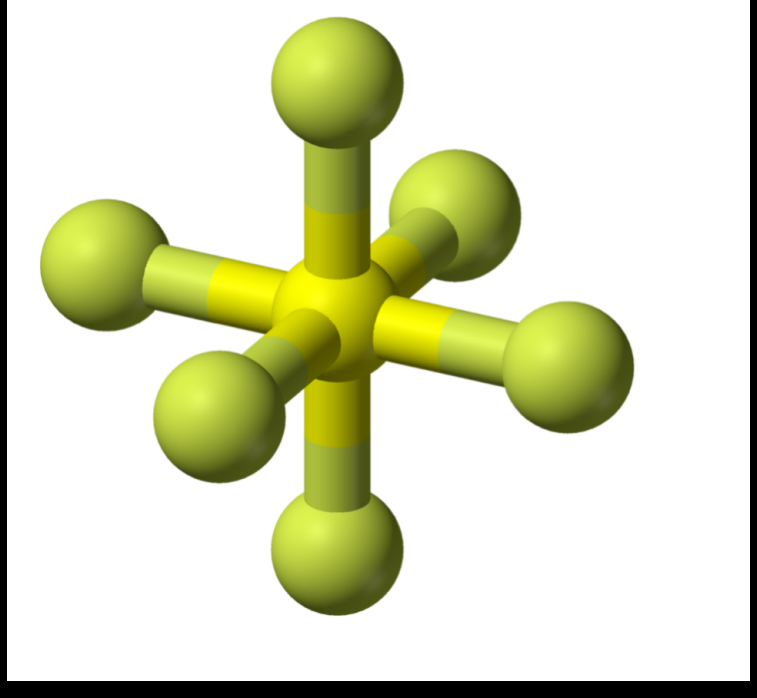
σ = Speiling i xy-planet: orient. mv. symmetri.

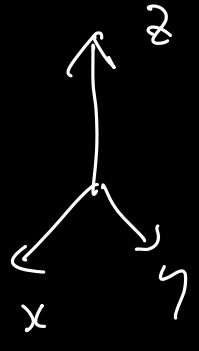
$$Sym_+(M) = D_4$$

$$Sym(M) = Sym_+(M) \cup \sigma \cdot Sym_+(M)$$

$$= D_{4h} \quad \text{(kjemiker-notasjon)}$$

(3) Sulfur-hexafluorid SF_6





Fluoratomene danner hjørnene i et oktaeder, og

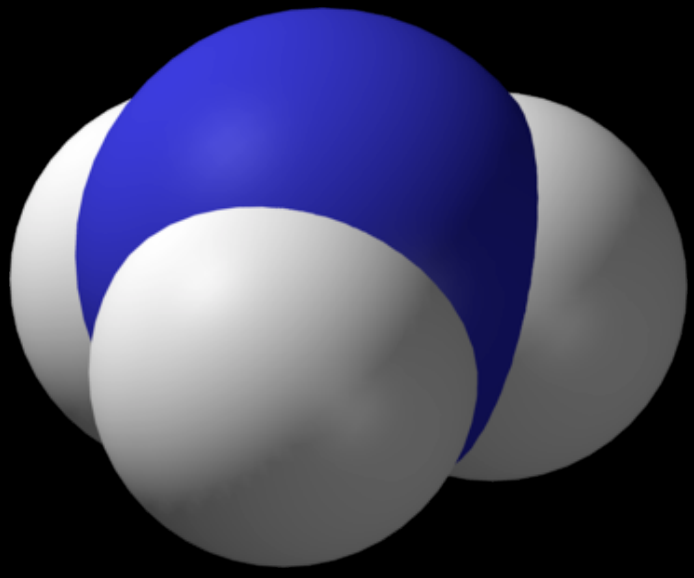
$Sym_+(M)$ = oktaedergruppa $\mathbb{O}$

Rotasjonssymmetrier av orden 2, 3 og 4

σ = speiling i xy-planet

$Sym(M) = \mathbb{O} \cup \sigma \cdot \mathbb{O}$

(4) Ammoniakk NH_3



Rotasjonssymmetri p av orden 3 om z-aksen (prinsipalakse),

$$Sym_0(M) = C_3 = \{Id, \rho, \rho^2\}.$$

σ: speiling i et vertikalt plan som går gjennom N-atomet og ett av H-atomene.

$Sym(M) = D_3$ (diedergruppe)

$= C_{3v}$ (kjemikernotasjon)

(5) Hydrogenfluorid HF



Sym(M) består av alla isometrier av $\mathbb{R}^3$ som håller fluoratomen och hydrogenatomen i ro, dvs.

$$m(x) = Ax,$$

där

$$A = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

och $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in O(2)$

$\Rightarrow$ Sym(M) = O(2)