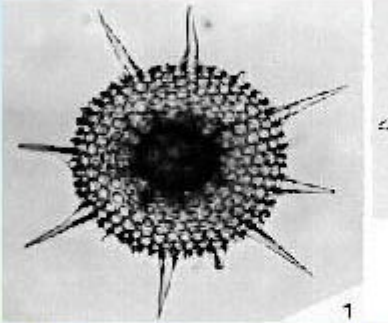


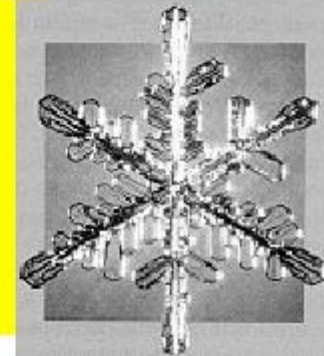
Simetría: (Gr. συμμετρία)

Proporción adecuada de las partes de un todo entre sí y con el todo mismo.

Regularidad en la disposición de las partes o puntos de un cuerpo o figura, de modo que posea un centro, un eje o un plano de simetría.



- Clasificar las estructuras de las moléculas
- Clasificar los orbitales moleculares
- Predecir el desdoblamiento de los niveles electrónicos
- Construir orbitales híbridos
- Clasificar los estados electrónicos de las moléculas
- Clasificar los modos normales de vibración
- Predecir las transiciones permitidas en los espectros



Simetría

Objetivo

Introducir al estudiante en los conceptos de simetría puntual:

- Elementos de simetría
- Operaciones de simetría

Concepto

Se dice que un objeto es simétrico cuando posee al menos dos orientaciones indistinguibles. Al intercambiarlas no se genera un cambio con respecto a la orientación original. Para intercambiarlas el objeto se puede rotar, reflejar o invertir.

Elementos de simetría

Elemento de simetría a través de los cuales se puede llevar a cabo una o más operaciones de simetría. Los elementos de simetría son:

Centro de inversión i (punto)

Eje de rotación propio C_n (línea)

Plano de reflexión σ (plano)

Eje de rotación impropio S_n (línea y plano)

Operación de simetría:

Movimiento de una molécula u objeto en relación con cierto elemento de simetría de forma que cada átomo en la molécula, antes de que se realice la operación, coincida con un átomo (o punto del objeto) equivalente (o el mismo) después de la operación.

Rotación propia: al rededor de un eje C_n

Rotación impropia: rotación alrededor de un eje de simetría y reflexión sobre el plano perpendicular al eje C_n

Inversión: a través de un centro de simetría i

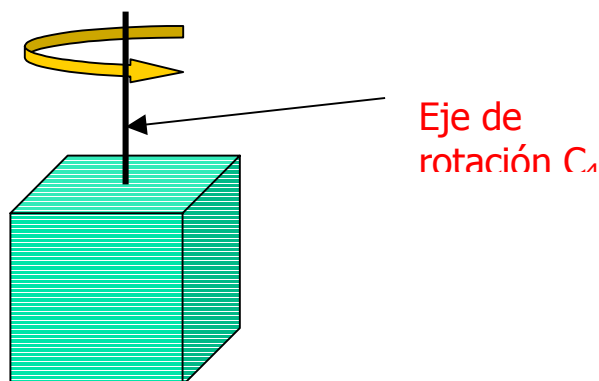
Reflexión: sobre un plano de simetría σ .

Identidad: no se realiza ningún cambio en la molécula. Se produce una orientación idéntica.

Rotación propia:

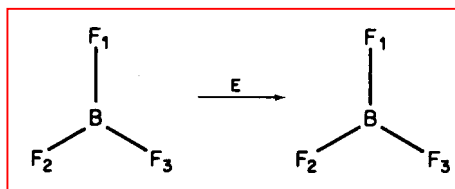
Rotación simple alrededor de un eje que pase por la molécula, con un ángulo $2\pi/n$ ($360^\circ/n$). Donde n es el número de veces que hay que rotar la molécula para volver a la posición original.

Se denomina C_n

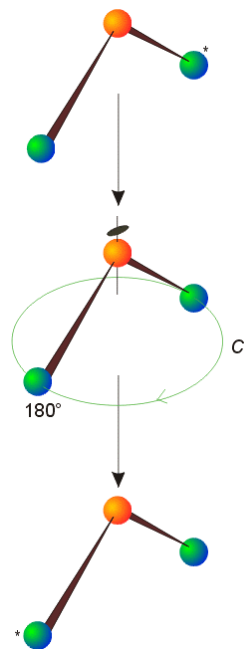


Identidad:

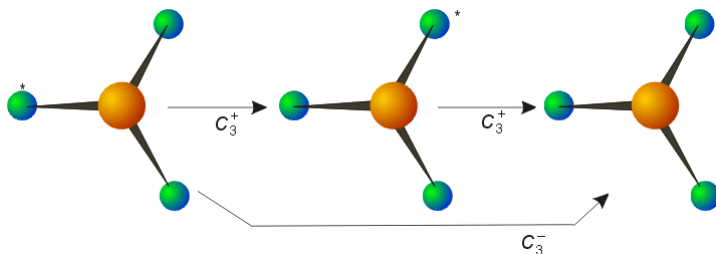
La operación C_1 , consiste en una rotación de 360° , lo que implica el objeto no ha intercambiado su posición, a esta operación se le denomina la identidad. Se denomina identidad y utiliza el símbolo E . Cuando se ejecuta n veces una operación C_n se obtiene la identidad.



Ejemplos de Rotación propia: Eje C_2

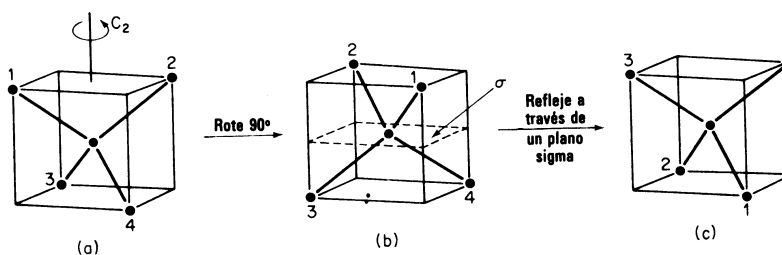


Ejemplos de Rotación propia: Eje C_3

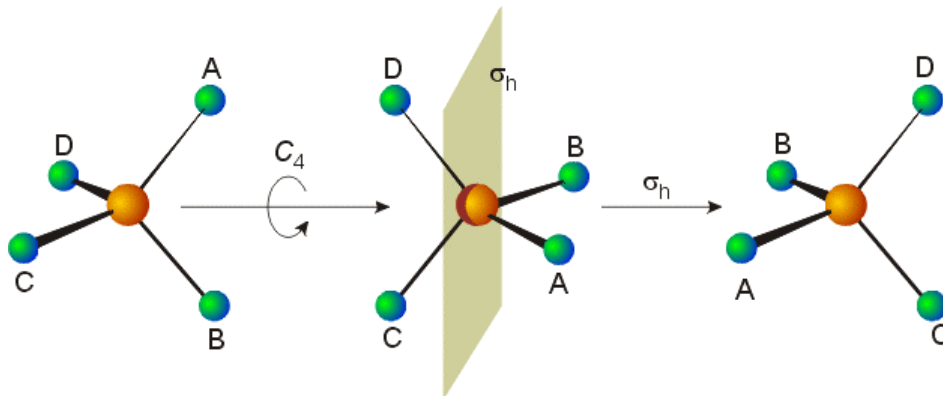


Rotación impropia (rotación –reflexión):

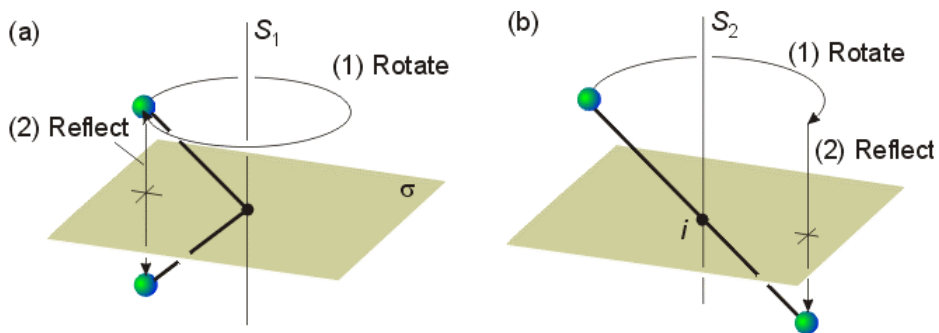
Una rotación impropia consiste de una rotación alrededor de un eje C_n seguida por una reflexión en un plano σ perpendicular a C_n . Ambos la operación y el elemento de simetría se representan por S_n .



Ejemplos de Rotación impropia: S_4



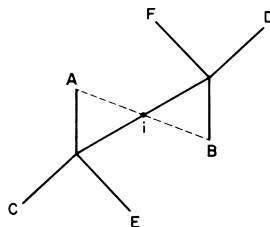
Ejemplos de Rotación impropia: S_1 y S_2



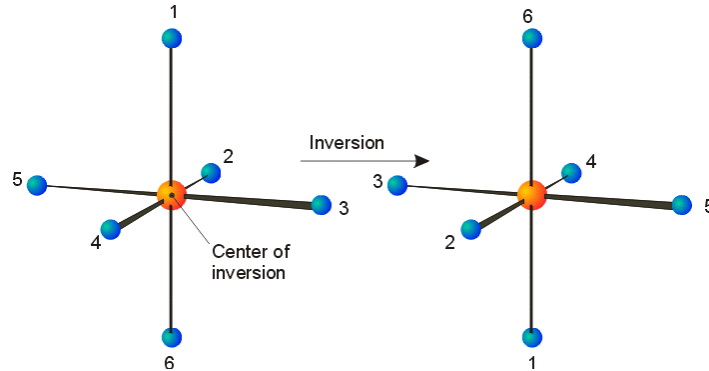
Note que una rotación S_1 equivale a una reflexión y que una rotación S_2 equivale a un centro de inversión

Inversión

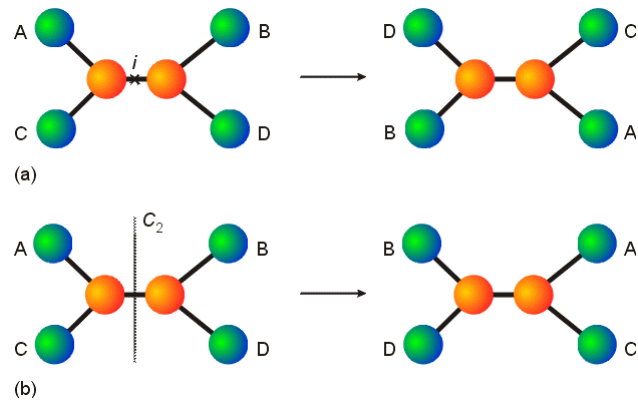
La operación inversión toma un punto sobre una línea a través del origen y lo traslada al otro lado a la misma distancia.



Ejemplo de inversión

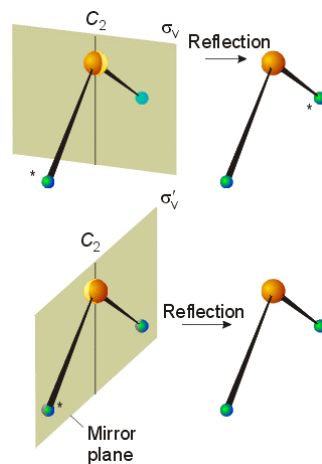


Inversión y Rotación



Reflexión

La operación reflexión produce una imagen especular al otro lado del plano de simetría. Los planos perpendiculares al plano de la molécula se designan σ_v y los perpendiculares al eje principal sobre el plano de la molécula σ_h



Elementos de simetría (1)

Eje de rotación

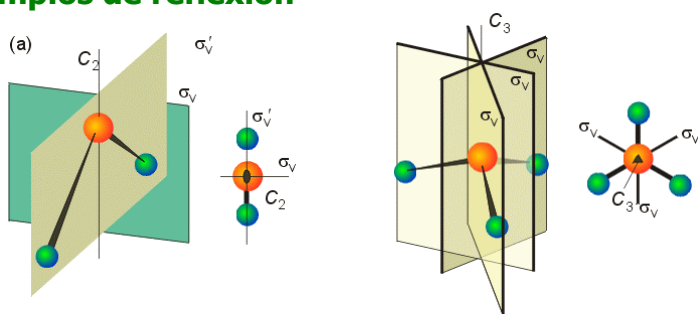
Es una línea imaginaria, una rotación (en el sentido de las agujas del reloj) alrededor de él relaciona dos o más posiciones equivalentes de un objeto.

Cuando existen dos o más ejes de rotación, uno de ellos suele ser el de mayor orden y se dispone perpendicular al resto, recibe el nombre de **eje de rotación principal** (conviene alinearlo de tal manera que coincida con el eje de coordenadas z)

Eje de rotación	n	ángulo de giro	símbolo
Binario	2	180	C_2
Ternario	3	120	C_3
		240	C_3^2
Cuaternario	4	90	C_4
		180	$C_4^2 = C_2$
		270	C_4^3
Orden 5	5	72	C_5
		144	C_5^2
		216	C_5^3
		288	C_5^4
Senario	6	60	C_6
		120	$C_6^2 = C_3$
		180	$C_6^3 = C_2$
		240	C_6^4
		300	C_6^5

$$C_n^n = C_1$$

Ejemplos de reflexión



Grupos puntuales

Un grupo puntual es el conjunto de operaciones de simetría que describen la simetría total de un objeto.

C_n	D_n	S_n
C_{nh}	D_{nh}	Grupos lineales
C_{nv}	D_{nd}	$C_{\infty v}$ y $D_{\infty v}$

Grupos C_n , C_{nh} , C_{nv}

Grupos generados por repetición de una operación C_n . Un grupo C_n posee n operaciones C_n .

Un grupo C_{nh} contiene además de los ejes C_n un plano σ_h .

Un grupo C_{nv} si además de los ejes C_n hay un plano de σ_v que contiene el eje C_n . El plano σ_v puede ser reproducido n veces.

Grupos D_n , D_{nh} y D_{nd} :

Si en la molécula existen además del eje C_n n ejes C_2 perpendiculares a este se genera un grupo diedro D_n . Contiene un total de $2n$ elementos de simetría. Adicionando un plano σ_h a D_n se obtiene un grupo D_{nh} . Contiene un total de $4n$ elementos de simetría.

Adicionando un plano vertical que pase entre los ejes C_2 , se genera un grupo D_{nd} . A este plano se le denomina σ_d .

Grupo S_n : la existencia de la operación S_n determina el grupo S_n .

Si n es impar el grupo S_n es equivalente a C_{nh} .

Si n es par se pueden generar grupos S_{2n} que no están en el esquema planteado.