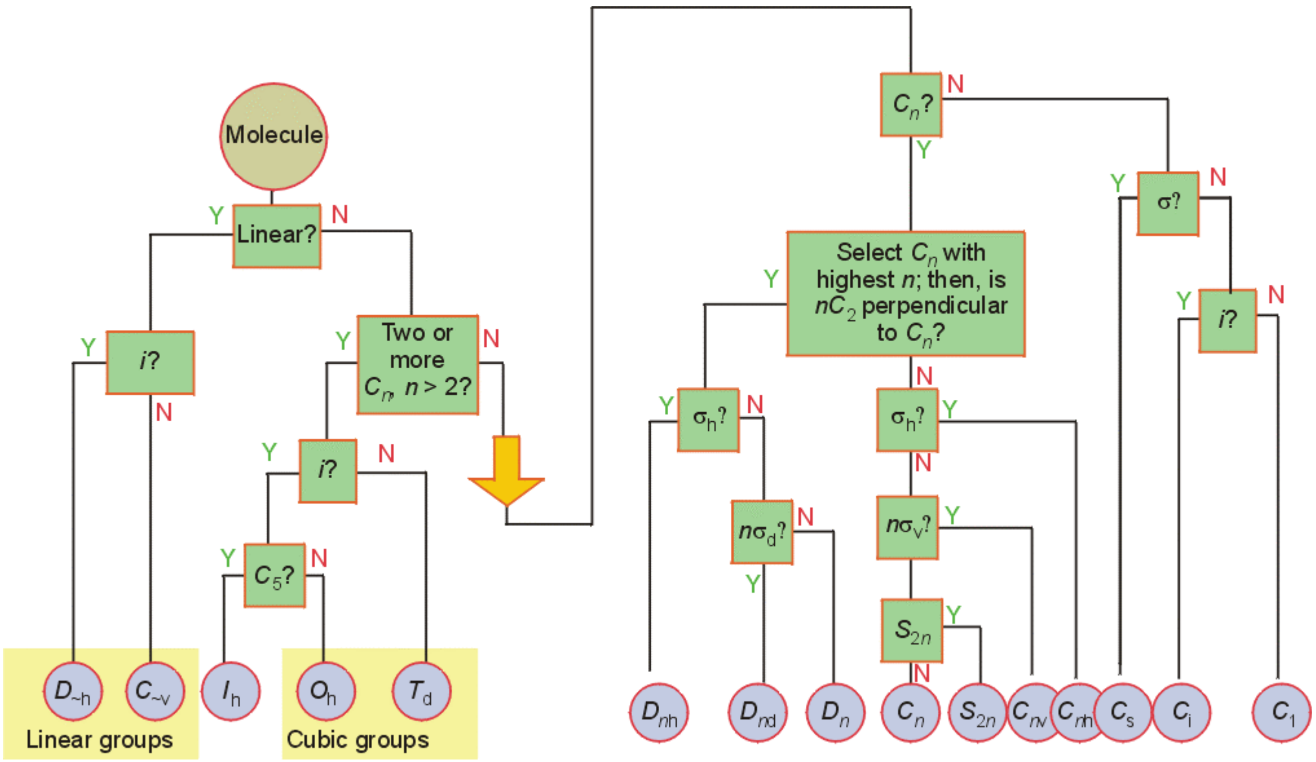
Grupos puntuales de simetría

	No axiales	C_1	C_s	C_i				
Axiales	**Cn**	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7	C_8
Axiales	**Cnv**	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{5v}	C_{6v}	C_{7v}	C_{8v}
Axiales	**Cnh**	C_{2h}	C_{3h}	C_{4h}	C_{5h}	C_{6h}		
Diédricos	**Dn**	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
Diédricos	**Dnh**	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{5h}	D_{6h}	D_{7h}	D_{8h}
Diédricos	**Dnd**	D_{2d}	D_{3d}	D_{4d}	D_{5d}	D_{6d}	D_{7d}	D_{8d}
	Sn	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{10}	S_{12}	
	Platónicos	T	T_h	T_d	O	O_h	I	I_h
	Lineales	$C_{\infty v}$	$D_{\infty h}$					

http://www.mpip-mainz.mpg.de/~gelessus/group.html

Grupos puntuales

Diagrama de flujo para determinarla simetría de grupo puntual de una molécula



Teoría de grupos

- Cada molécula posee un conjunto de operaciones de simetría. El conjunto de operaciones de simetría recibe el nombre de **grupo puntual de simetría** de la molécula. Varias propiedades de las moléculas se pueden predecir empleando la teoría de grupos. En sentido matemático, un grupo es un conjunto de operaciones que cumplen las siguientes reglas:
  1. El producto de dos operaciones cualquiera debe ser una operación del grupo. (Se dice que un grupo es cerrado respecto a la multiplicación).
  2. Cada operación debe tener su inversa.
  3. Cada grupo debe tener la operación identidad, E, ya que el producto de una operación y su inversa es la identidad.
  4. Todas las operaciones del grupo deben ser asociativas (AB)C = A(BC).
  5. Si presentan la propiedad conmutativa se dice que el grupo es abeliano.

Grupos puntuales de simetría

Cada grupo puntual de simetria que presentan las moléculas tiene una designación particular y viene descrito mediante un símbolo que consta de:

→ Una letra mayúscula: C, D, T, I, O, S

→ Subíndice: número, letra minúscula o una combinación alfanumérica

Tabla de caracteres

- Una **tabla de caracteres** contiene, de una forma altamente simbólica, información sobre como algo que nos interese (un orbital, un enlace,.) se ve afectado por las operaciones de un grupo puntual determinado.
- Cada grupo puntual viene descrito por una única tabla de caracteres que tiene forma de matriz.

Símbolo del grupo puntual

Clases y operacionesde simetría

Bases para las representaciones

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	Funciones lineales, rotaciones	Funciones cuadráticas
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	(x, y) (R_x, R_y)	$(x^2 - y^2, xy)$ (xz, yz)

Símbolos Mulliken

Caracteres de las representaciones irreducibles

http://www-theory.mpip-mainz.mpg.de/~gelessus/group.html
http://www.chemistry.nmsu.edu/studntres/chem639/cgi-bin/group1.cgi

Propiedades de la tabla de caracteres C_{3v}

	Propiedad	C_{3v}
1	Orden	6 (6 operaciones de simetría)
2	Clases	3 clases: E $2\ C_3$ $3\ \sigma_v$
3	Número de representaciones irreducibles	3 (A_1, A_2, E)
4	Suma de los cuadrados (caracteres bajo E)	$1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$
5	Suma de los cuadrados	E $2\ C_3$ $3\ \sigma_v$ A_1: $1^2 + 2(1^2) + 3(1^2) = 6$ A_2: $1^2 + 2(1^2) + 3(-1^2) = 6$ E: $2^2 + 2(-1^2) + 3(0^2) = 6$
6	Representaciones ortogonales	La suma de los productos de dos representaciones cualquiera es igual a 0: A_2xE: $(1)(2) + 2(1)(-1) + 3(-1)(0) = 0$
7	Representación totalmente simétrica	A_1 con todos los caracteres igual a 1

Símbolos Mulliken (2)

Dimensiones de la representación	Caracteres bajo: E	C_n	i	σ_h	$C_2(\perp) / \sigma_v$	Símbolos
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1			A_g B_g E_g T_g
			-1			A_u B_u E_u T_u
				1		A' B'
				-1		A'' B''
					1	A_1 B_1
					-1	A_2 B_2

Símbolos Mulliken

- Todas las representaciones monodimensionales se designan por A o B; las bidimensionales por E y las tridimensionales por T (a veces por F).
  - A, B: $\chi(E) = 1$ E: $\chi(E) = 2$ T: $\chi(E) = 3$
- Las representaciones monodimensionales que son simétricas con respecto a la rotación $2\pi/n$ alrededor del eje principal C_n [simétricaa significa: $\boldsymbol{\chi(C_n) = 1}$] se designan A, mientras que las antisimétricas [$\boldsymbol{\chi(C_n) = -1}$] se designan B.
- Los subíndices **1** y **2** se emplean generalmente junto con A y B para designar aquellas repesentaciones que son, respectivamente, simétricas o antisimétricas con respecto a un C_2 perpendicular al eje de rotación principal, si faltara tal eje C_2, a un plano vertical de simetría.
- Las primas y dobles primas se unen a todas las letras, cuando convenga, para indicar aquellas que son, respectivamente, simétrica y antisimétrica con respecto a σ_h.
- En los grupos con centro de inversión, el subíndice **g** (del alemán *gerade*) se coloca a las representaciones que son simétricas copn respecto a la inversión y el subíndice **u** (del aleman *ungerade*) se coloca a las repesentaciones antisimétricas con respecto a la inversión.

Divisiones que aparecen en la Tabla de caracteres

I	II		
IV	III	V	VI

Índices de Mulliken

Símbolos de Mulliken para orbitales atómicos y moleculares	Significado
a	Orbital no degenerado, simétrico respecto al eje principal C_n
b	Orbital no degenerado, antisimétrico respecto al eje principal C_n
e	Orbital doblemente degenerado
t	Orbital triplemente degenerado
g(subíndice)	Simétrico respecto al centro de inversión
u(subíndice)	Antisimétrico respecto al centro de inversión
1(subíndice)	Simétrico con respecto a un C_2 perpendicular al eje principal C_n
2(subíndice)	Antisimétrico con respecto a un C_2 perpendicular al eje principal C_n
‘(superíndice)	Simétrico con respecto a un plano horizontal $_h$
“(superíndice)	Antisimétrico con respecto a un plano horizontal $_h$

Propiedades de las representaciones irreducibles

1. **El número total de operaciones de simetría en un grupo se llama orden (h).**
   Para determinar el orden de un grupo basta simplemente sumar el número total de operaciones indicadas en la parte superior de la tabla de caracteres.
2. **Las operaciones de simetría se ordenan en clases de simetría.**
   Todas las operaciones de una clase tienen idénticos caracteres para sus matrices de transformación y vienen agrupados en la misma columna de la tabla de caracteres.
3. **El número de representaciones irreducibles es igual al número de clases de simetría. Esto significa que la tabla de caracteres es cuadrada.**
4. **La suma de los cuadrados de las dimensiones (caracteres debajo de E) de las representaciones irreducibles es igual al orden del grupo.**
   $$h = \sum_i [\chi_i(E)]^2$$
5. **Para cualquier representación irreducible, la suma de los cuadrados de los caracteres es igual al orden del grupo.**
   $$h = \sum_R [\chi_i(R)]^2 \cdot n_R$$
6. **Las representaciones irreducibles son ortogonales.**
   La suma de los productos de sus caracteres para cada operación de cualquier par de representaciones irreducibles es cero.
   $$\sum_R \chi_i(R)\,\chi_j(R) \cdot n_R = 0 \qquad i \neq j$$
7. **Una representación totalmente simétrica aparece en todos los grupos.**
   Se caracteriza por tener todos los caracteres igual a 1.