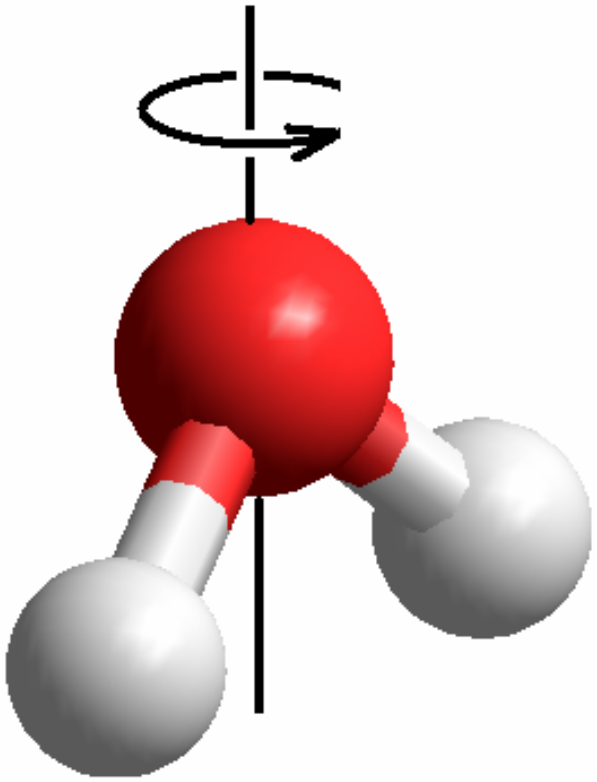
Teoría de Grupos y Simetría

Molécula de Agua



Invariancia a una transformación es un indicador de simetría

Imágenes especulares

Elementos y Operaciones de Simetría

- Identidad E
- Eje C_n

  Rotación en torno a un eje en $\Phi = 2\pi/n$
- Planos σ_v, σ_h

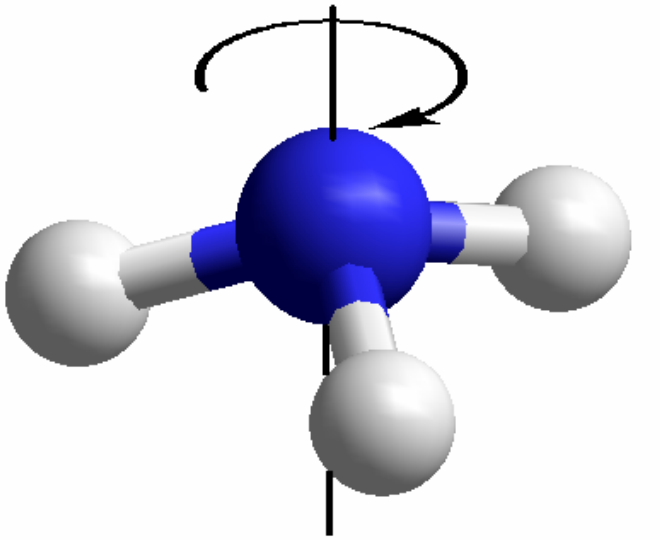
  Reflexión a través del plano
- Ejes Impropio S_n

  Operación compuesta $C_n + \sigma_h$
- Centro de inversión i

  Inversión a través del orígen

Ejes de Rotación C_n

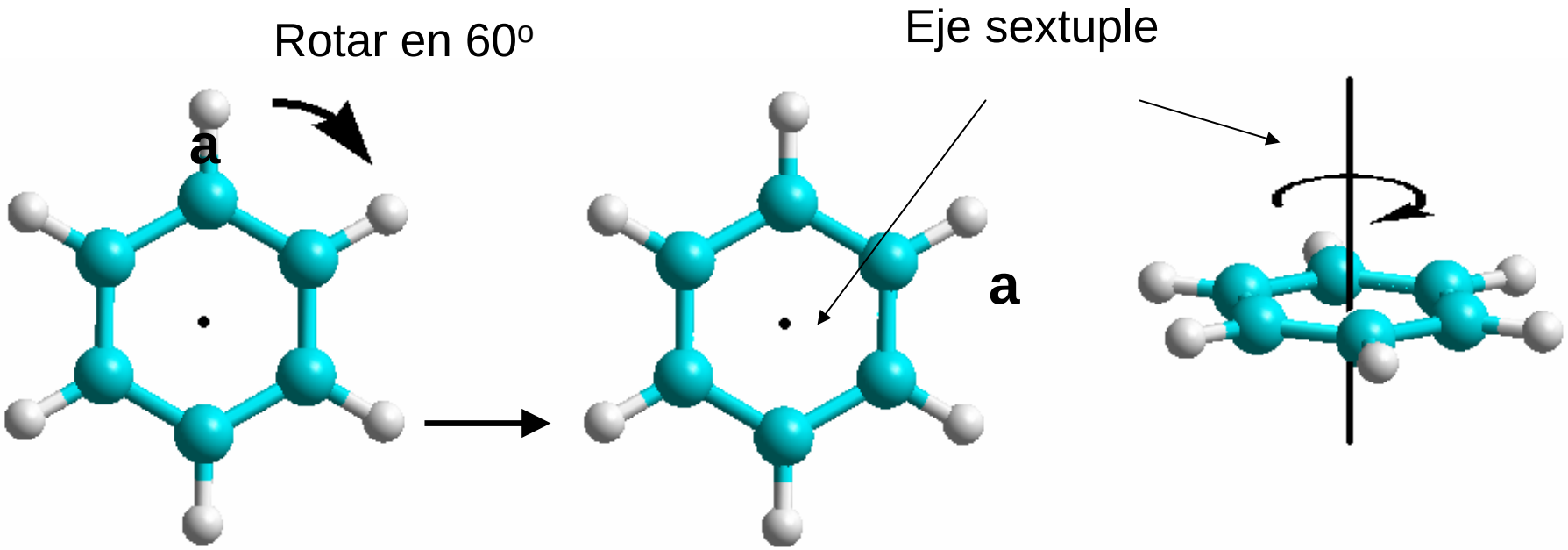
El objeto posee un eje de rotación $\boldsymbol{C_n}$ si se obtiene invariancia bajo una $\frac{2\pi}{n}$ rotación en alrededor de este eje



Eje $\boldsymbol{C_3}$ o triple de la molécula de amoníaco.
Rotacion es en 360/3 o 120º.

Ejemplo: Molécula de benceno

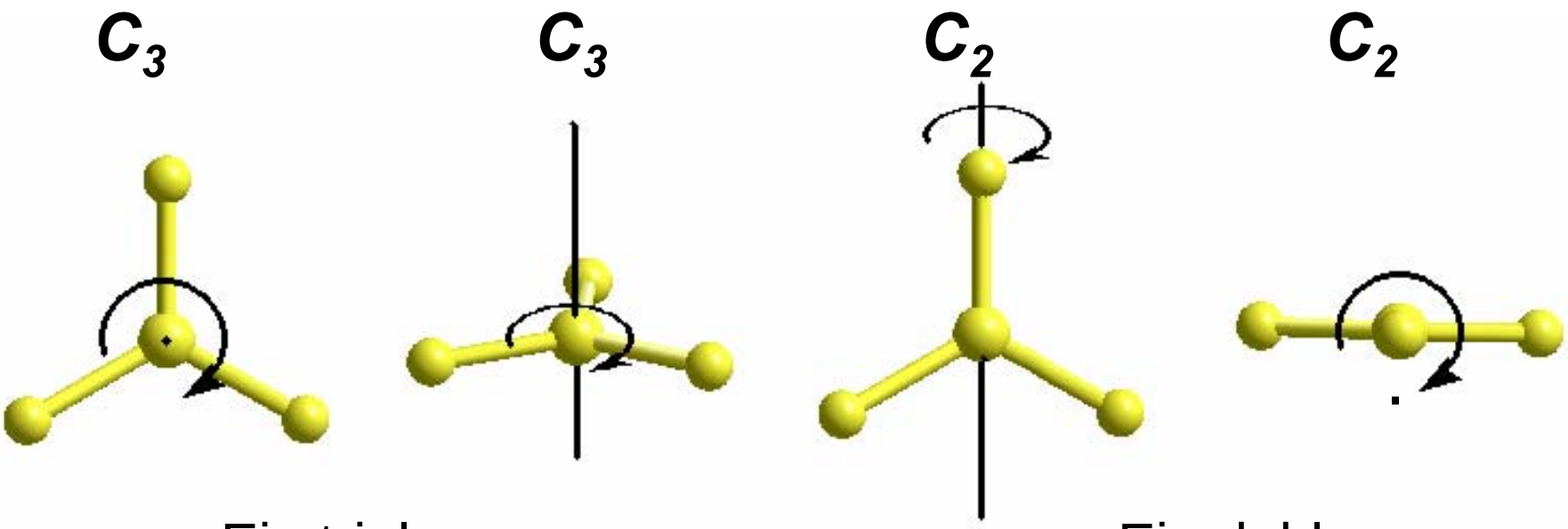
Una operación de simetría no cambia la apariencia de la molécula. Para benceno, una rotación de 60º alrededor del eje séxtuple produce una configuración indistinguible de la anterior:



Eje sextuple: se puede repetir la operación seis veces antes de volver a la configuración original de la molécula de benceno.

Ejes de rotación de BF_3

Eje principal $C_n = C_3$ (mayor valor de n)

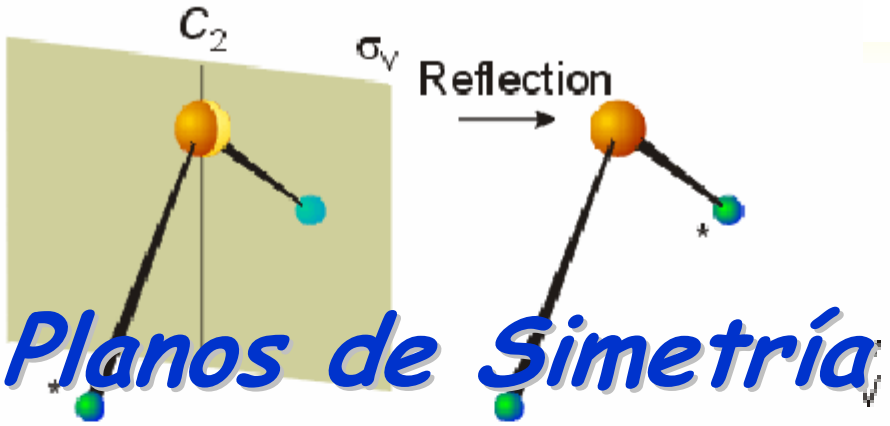


Eje triple

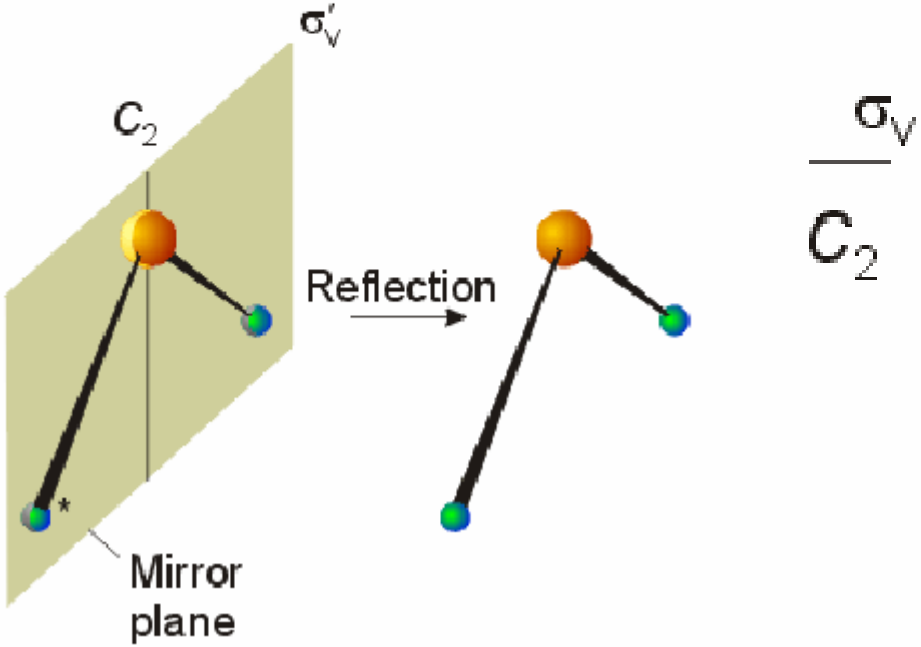
Eje doble

Hay tres ejes C_2

σ_v, σ_h : Reflexión a través del plano

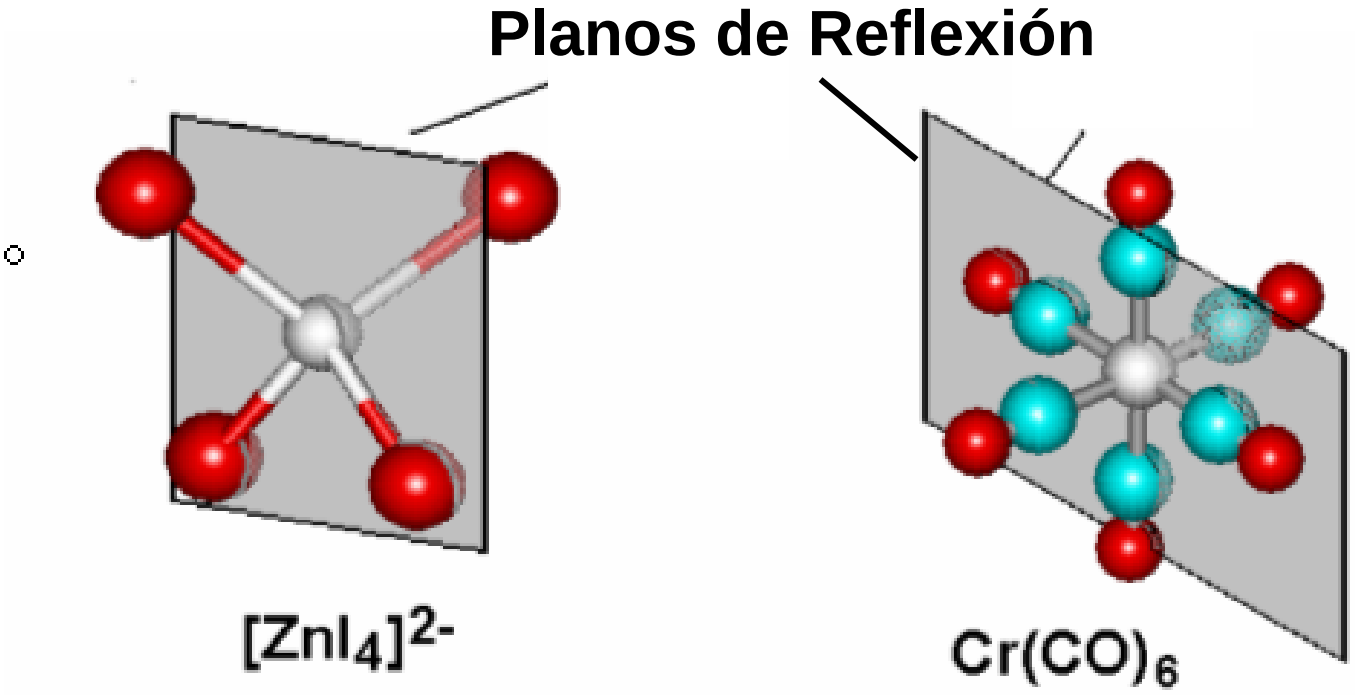


Planos de Simetría



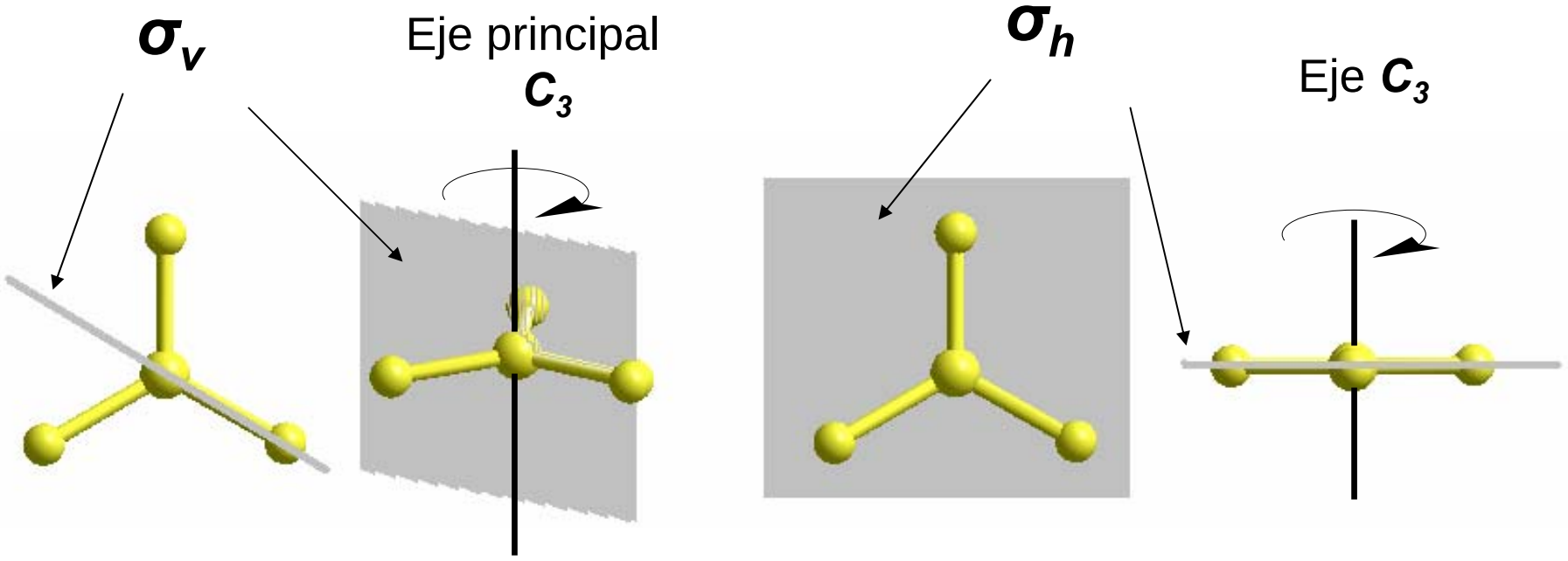
Planos de Reflexión (σ)

Simetría especular significa invariancia bajo una reflexión a través de un plano

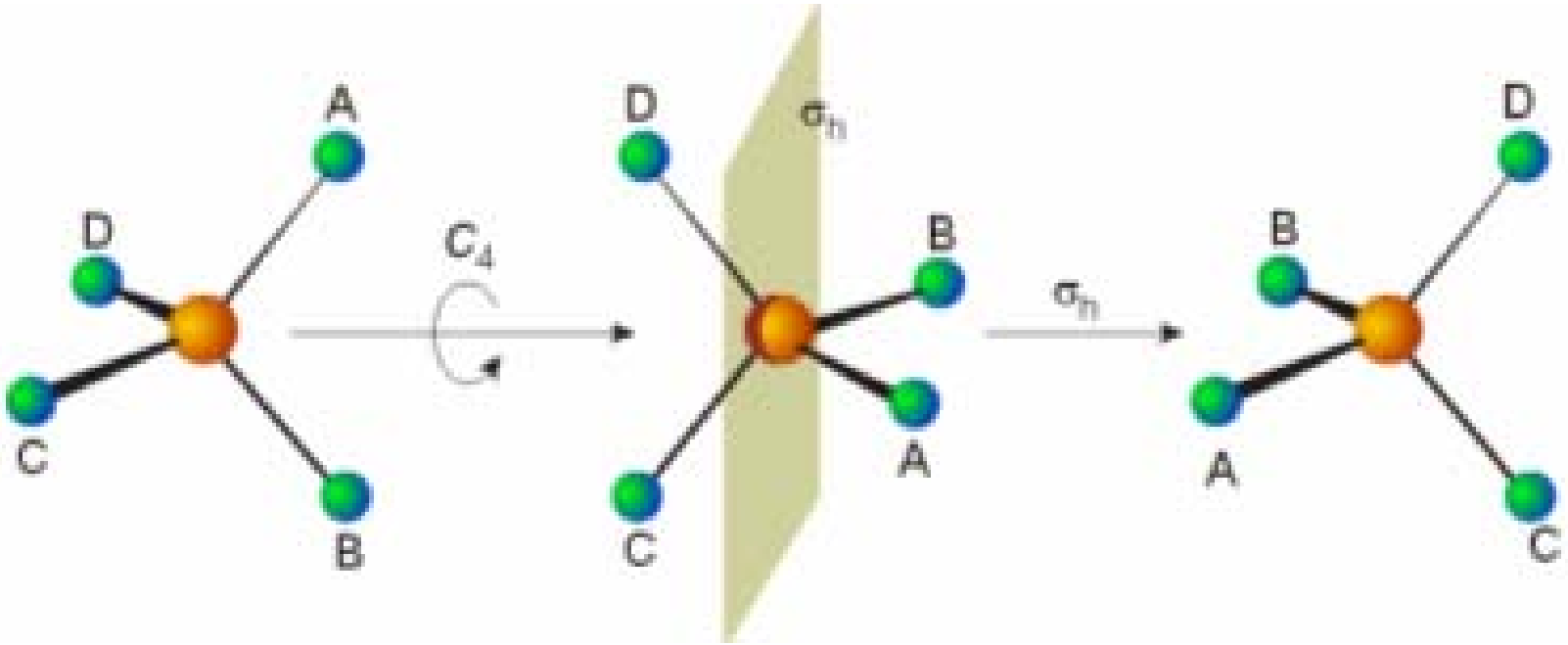


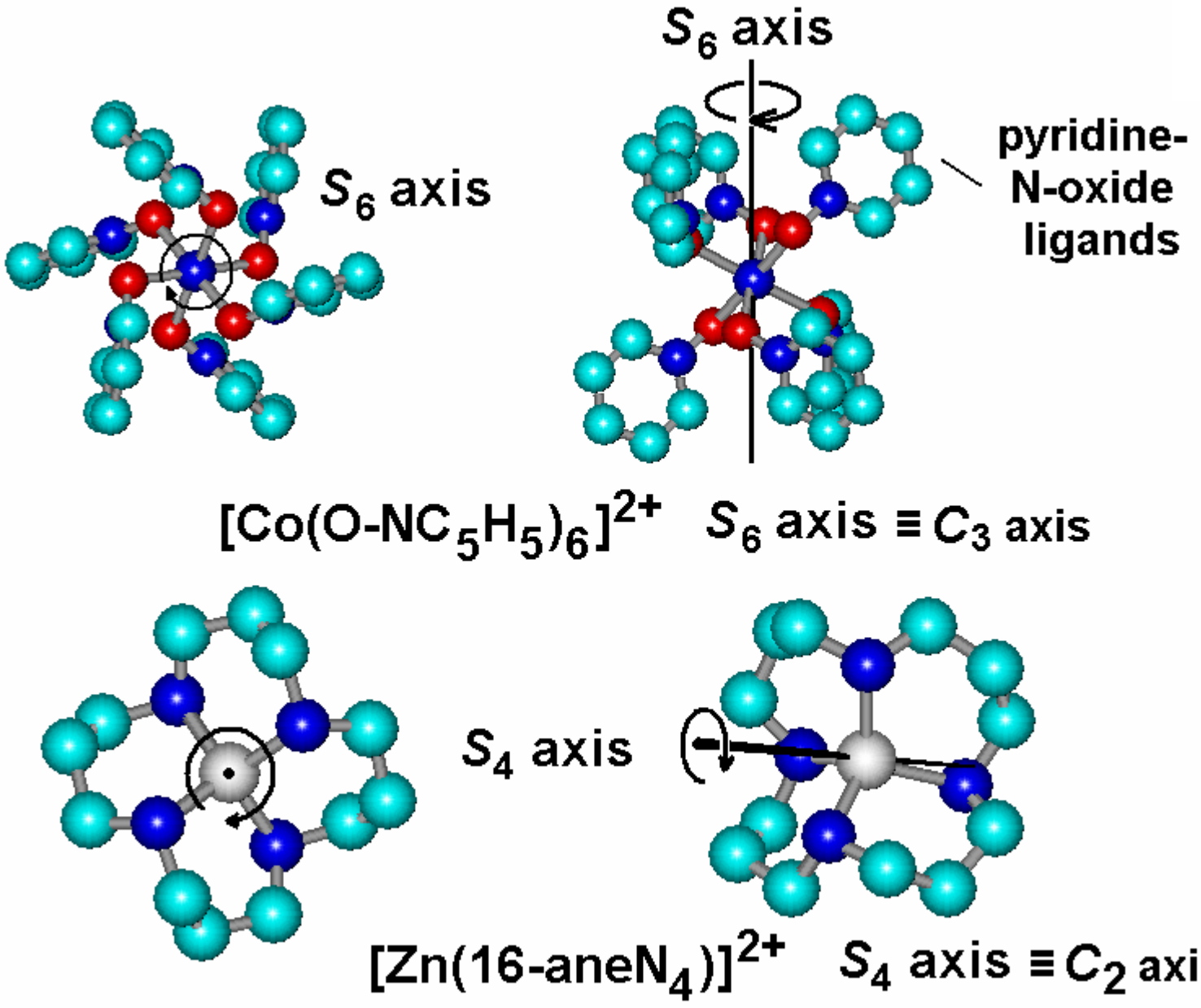
Planos de reflexión (σ) de BF_3:

Los planos pueden contener el eje principal (σ_v) o ser perpendiculares a él (σ_h). BF_3 tiene un plano σ_h y tres planos σ_v

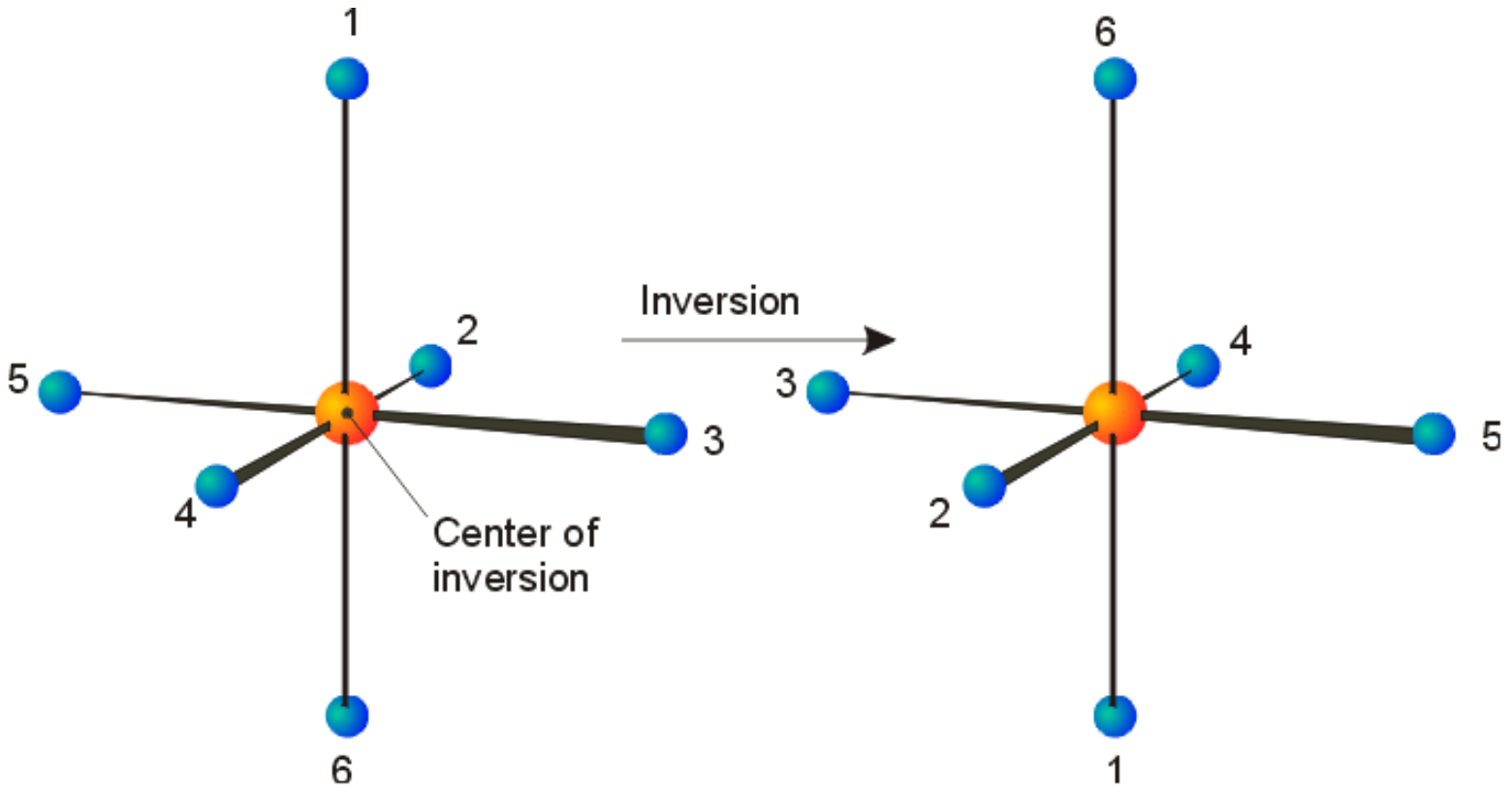


Sn : Eje impropio de rotación




S_6 axis
S_6 axis
pyridine-
N-oxide
ligands
$[Co(O\text{-}NC_5H_5)_6]^{2+}$ S_6 axis ≡ C_3 axis
S_4 axis
$[Zn(16\text{-}aneN_4)]^{2+}$ S_4 axis ≡ C_2 axis

I : Centro de Inversión o Centro de Simetría

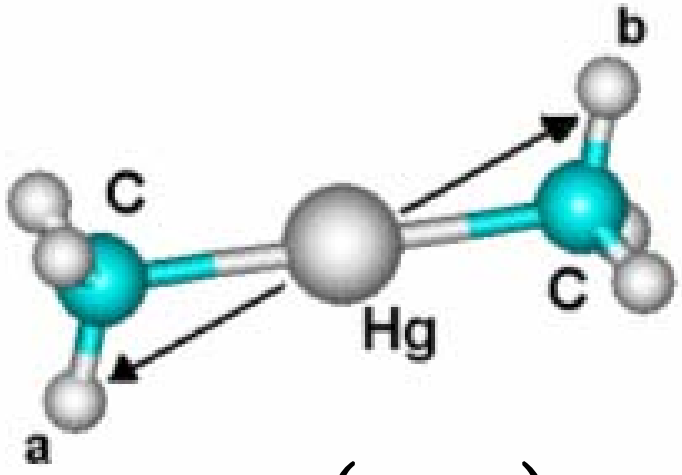


$$[x, y, z] \xrightarrow{i} [-x, -y, -z]$$

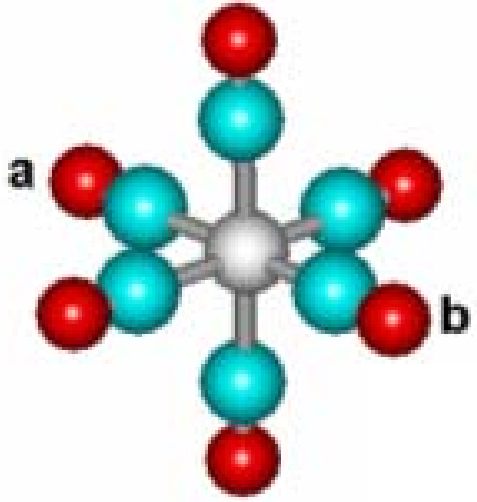
Centro de Simetría (i)

Inversión de coordenadas a través del origen

$$i(x_k, y_k, z_k) \rightarrow (-x_k, -y_k, -z_k)$$

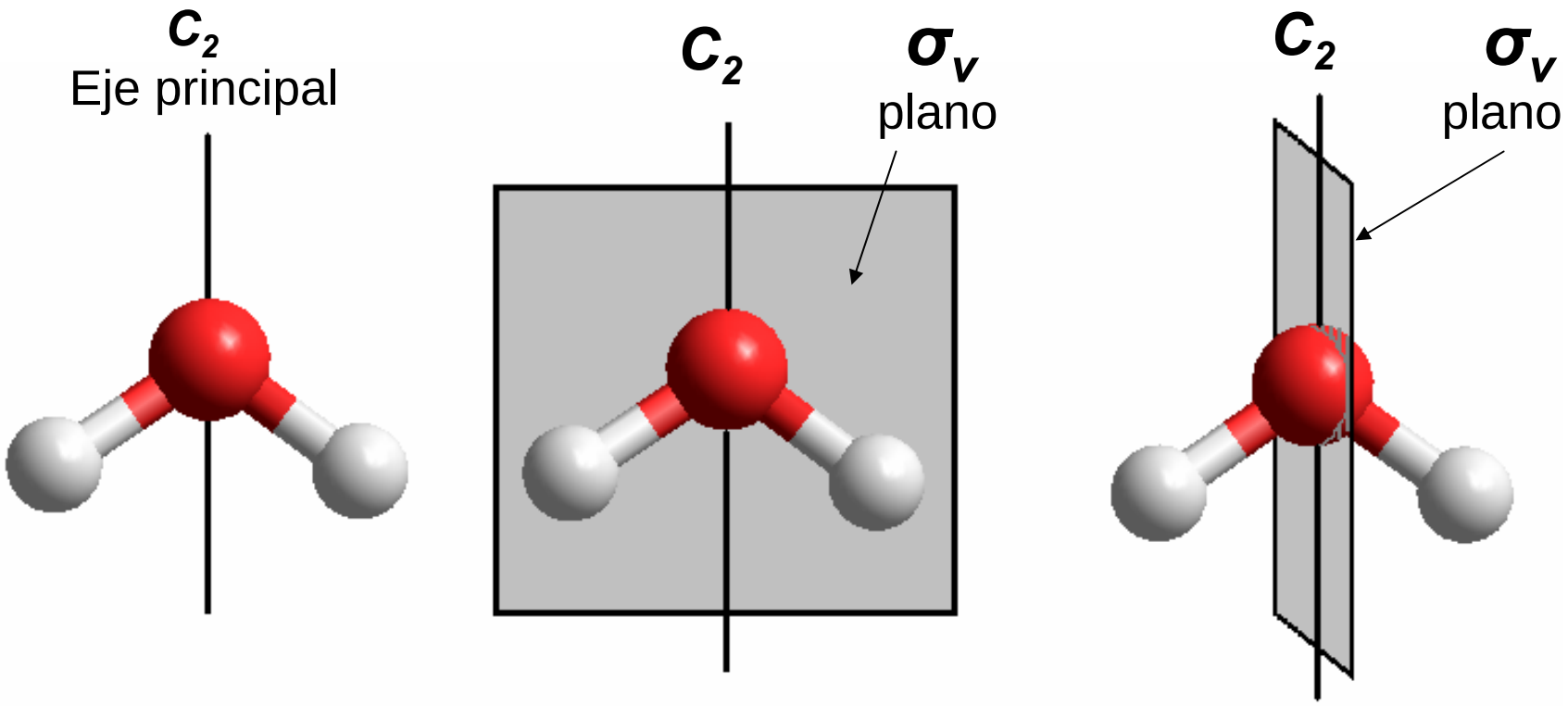


$Hg(CH_3)_2$

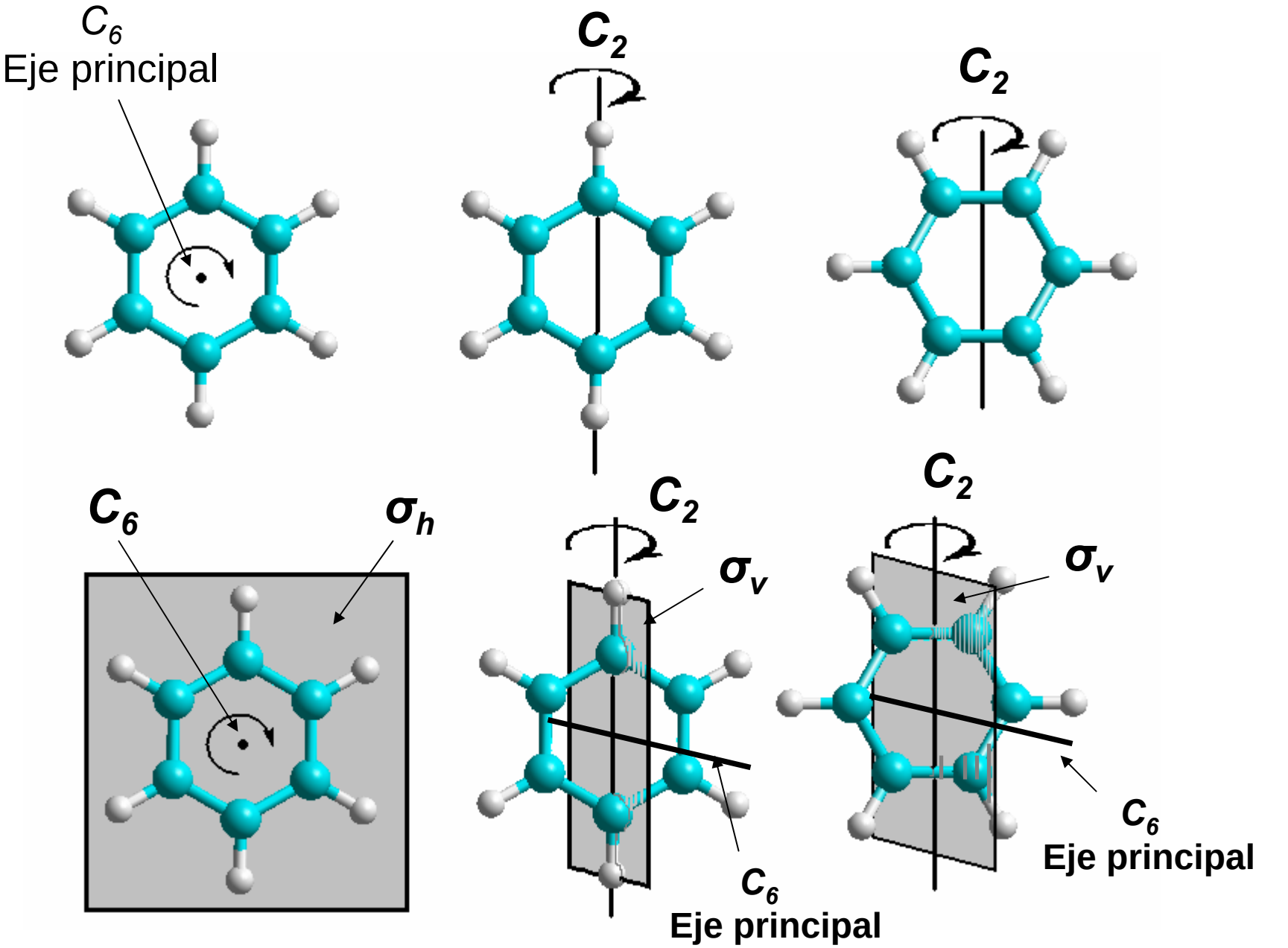


$Cr(CO)_6$

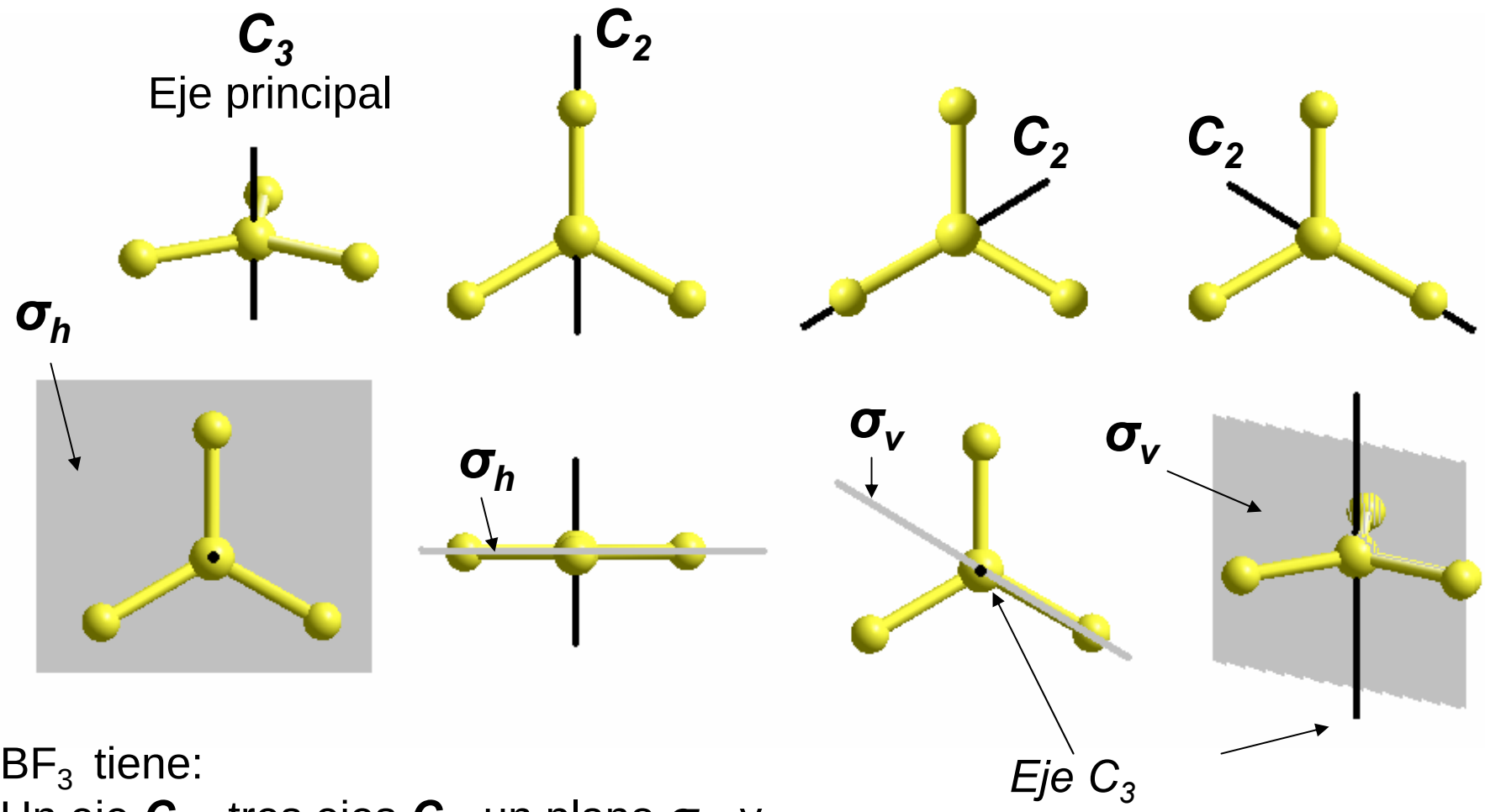
Ejemplos: Elementos de Simetría de la molécula de agua:



Ejes y planos de simetría de Benceno



Ejes y planos de trifluoruro de boro



BF_3 tiene:
Un eje C_3 , tres ejes C_2 un plano σ_h y tres planos σ_v mirror planes.

Identidad: E

Es una operación equivalente a no hacer nada, deja cualquier objeto inalterado (es necesaria por razones matemáticas).

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Inversión: i

Es una operación que traslada un punto en una línea a través del origen (centro de inversión) a una distancia igual al otro lado del origen, de modo que transforma un punto con coordenadas (x, y, z) en otro con coordenadas (-x, -y, -z).

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Rotación: C_n $\alpha=2\pi/n$

Realiza una rotación de 360°/n alrededor de un eje.

$$\begin{bmatrix} \cos\frac{2\pi}{n} & sen\frac{2\pi}{n} & 0 \\ -sen\frac{2\pi}{n} & \cos\frac{2\pi}{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Reflexión: σ

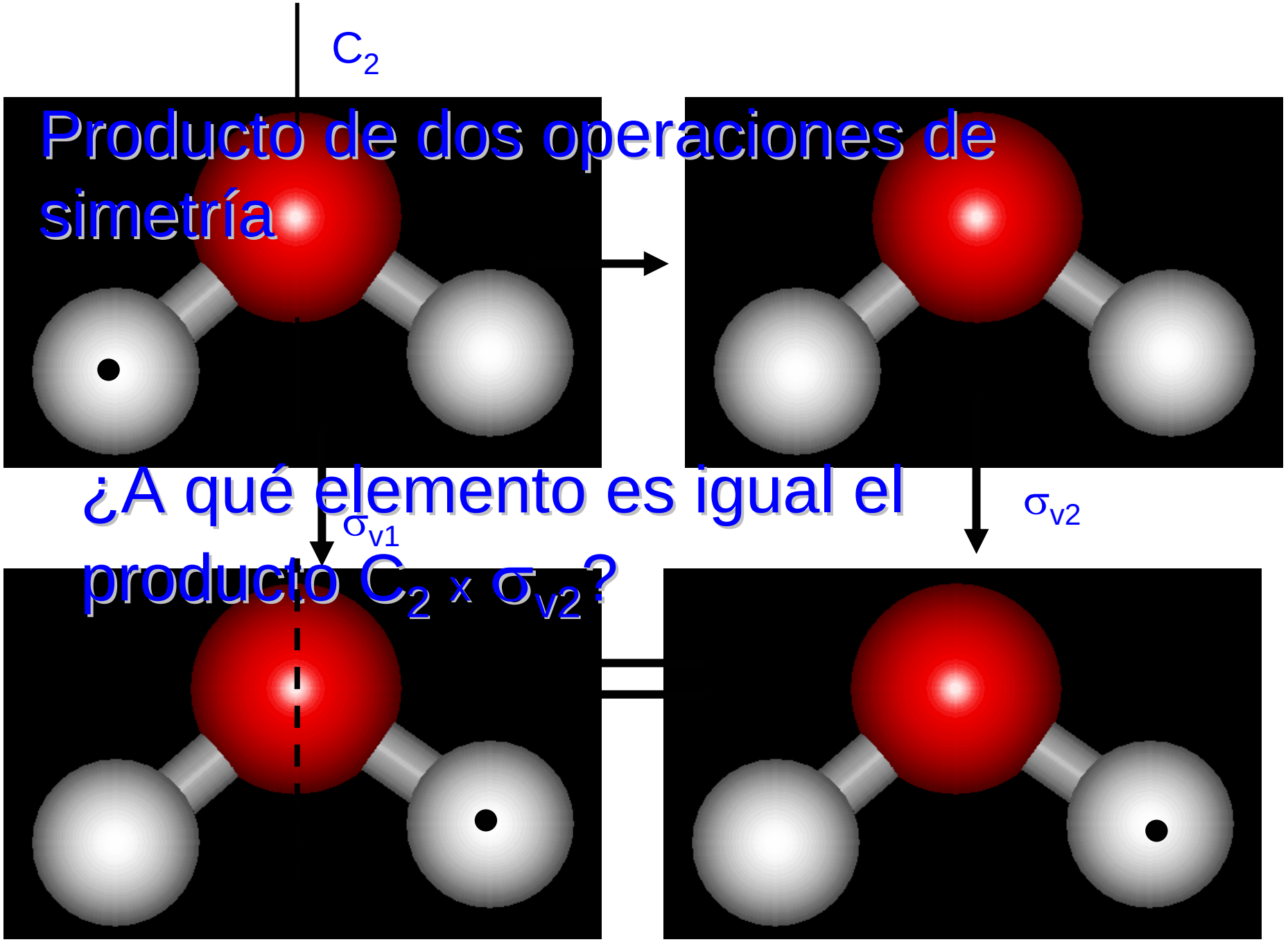
Esta operación se lleva a cabo a través de un plano (plano de simetría) que produce una imagen reflejada coincidente con el objeto original.

$$\sigma_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Rotación impropia: S_n

Esta operación consiste en una rotación de 360°/n alrededor de un eje C_n seguida de una reflexión a través del plano perpendicular a dicho eje de rotación.

$$(S_n)_z = \begin{bmatrix} \cos\frac{2\pi}{n} & \operatorname{sen}\frac{2\pi}{n} & 0 \\ -\operatorname{sen}\frac{2\pi}{n} & \cos\frac{2\pi}{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\frac{2\pi}{n} & \operatorname{sen}\frac{2\pi}{n} & 0 \\ -\operatorname{sen}\frac{2\pi}{n} & \cos\frac{2\pi}{n} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$



Producto de dos operaciones de simetría

¿A qué elemento es igual el producto $C_2 \times \sigma_{v2}$?

Características de un grupo algebraico:

1)El "producto" de dos elementos es otro elemento del grupo.

2) Existe un elemento del grupo que es la identidad E

3) Para cada elemento R del grupo existe un inverso R^{-1} tal que R x R^{-1} = E

Grupo C_{2v}

Tabla de Multiplicación

	E	C_2	σ_{v1}	σ_{v2}
E	E	C_2	σ_{v1}	σ_{v2}
C_2	C_2	E	σ_{v2}	σ_{v1}
σ_{v1}	σ_{v1}	σ_{v2}	E	C_2
σ_{v2}	σ_{v2}	σ_{v1}	C_2	E

$A = A^{-1}$

Grupos puntuales de simetría

Axiales

Diédricos

No axiales	C_1	C_s	C_i				
C_n	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7	C_8
C_{nv}	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{5v}	C_{6v}	C_{7v}	C_{8v}
C_{nh}	C_{2h}	C_{3h}	C_{4h}	C_{5h}	C_{6h}		
D_n	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
D_{nh}	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{5h}	D_{6h}	D_{7h}	D_{8h}
D_{nd}	D_{2d}	D_{3d}	D_{4d}	D_{5d}	D_{6d}	D_{7d}	D_{8d}
S_n	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	$C_{\infty v}$	$D_{\infty h}$					

Algunos conceptos importantes:

Orden del grupo: ($h(\mathcal{G})$ ó h) número de operaciones de simetría que pertenecen al grupo. Existen grupos de orden finito y también de orden infinito.

Tabla de multiplicar: (también tabla de Cayley o producto cartesiano) cuadro $h \times h$ que contiene todos los productos de cada elemento del grupo por todos los demás:

	$\hat{a}$	$\hat{b}$	$\hat{c}$	$\ldots$
$\hat{a}$	$\hat{a}\hat{a}$	$\hat{a}\hat{b}$	$\hat{a}\hat{c}$	$\ldots$
$\hat{b}$	$\hat{b}\hat{a}$	$\hat{b}\hat{b}$	$\hat{b}\hat{c}$	$\ldots$
$\hat{c}$	$\hat{c}\hat{a}$	$\hat{c}\hat{b}$	$\hat{c}\hat{c}$	$\ldots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

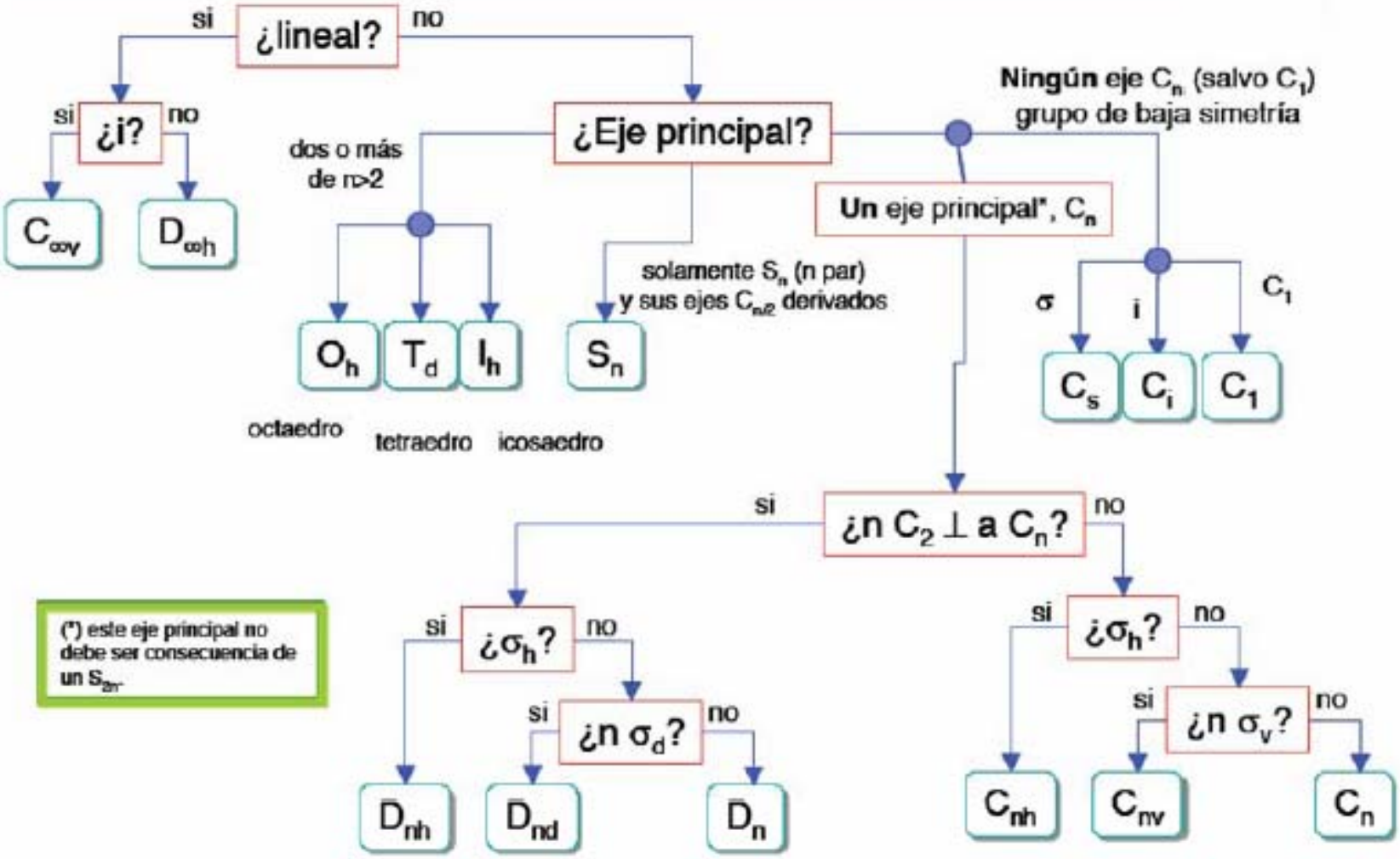
Grupos isomorfos: Dos grupos son isomórficos cuando existe una correspondencia biunívoca entre ambos de tal modo que al sustituir las operaciones de un grupo por las correspondientes en el otro grupo las tablas de multiplicar de ambos son idénticas.

Subgrupos: Un grupo $\mathcal{H}$ se dice *subgrupo* de otro $\mathcal{G}$, $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$, si todos los elementos de $\mathcal{H}$ están contenidos en $\mathcal{G}$ y $\mathcal{H}$ cumple las propiedades de grupo. El teorema de Cayley establece que un subconjunto $\mathcal{H}$ del grupo $\mathcal{G}$ es un subgrupo si: (a) $\mathcal{H}$ es cerrado; y (b) $\mathcal{H}$ contiene el inverso de todos sus elementos.

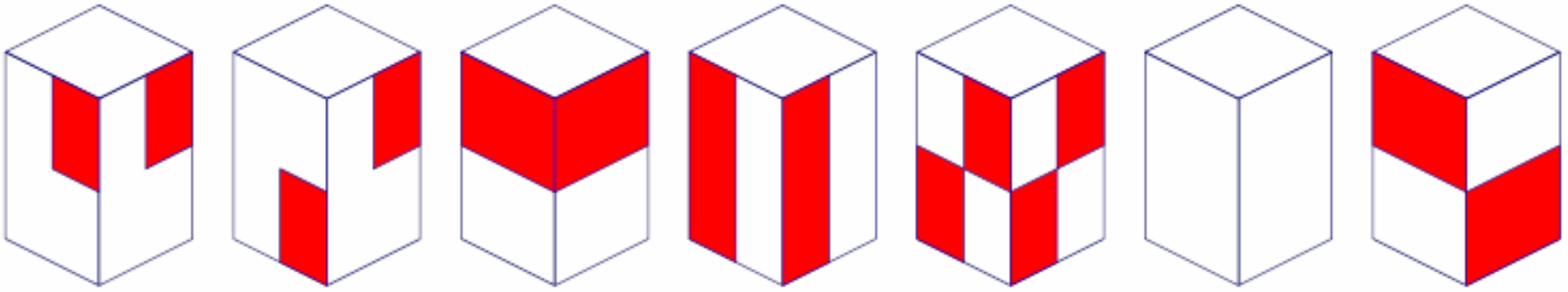
Grupos puntuales

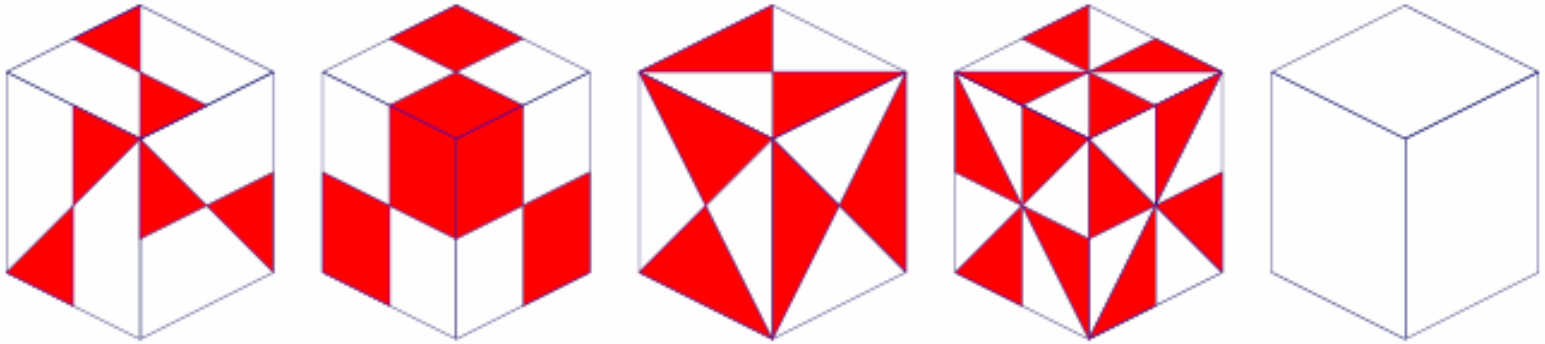
Grupo	Elementos característicos	Grupos puntuales
C_n	Sólo un eje de orden n	C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, C_7, C_8
S_n	Sólo un eje impropio de orden n. n es siempre par.	$S_2(=C_i)$, S_4, S_6, S_8, S_{10}, S_{12}
C_{nh}	Un eje de orden n y un plano perpendicular	C_{1h} $(=C_s)$, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{5h}, C_{6h}
C_{nv}	Un eje de orden n, n planos de reflexion σ_v que lo contienen	C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{5v}, C_{6v}, C_{7v}, C_{8v}
D_n	Un eje de orden n, n ejes binarios perpendiculares	D_2, D_3, D_4, D_5, D_6, D_7, D_8
D_{nh}	Los mismos que el D_n más un plano σ_h perpendicular al eje principal	D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{5h}, D_{6h}, D_{7h}, D_{8h}
D_{nd}	Los mismos que el D_n más n planos σ_d bisecando a los ejes binarios.	D_{2d}, D_{3d}, D_{4d}, D_{5d}, D_{6d}, D_{7d}, D_{8d}
Cúbicos		T, T_h, T_d, O, O_h, I, I_h
Lineales		$C_{\infty v}$, $D_{\infty h}$

Asignación del grupo puntual de simetría

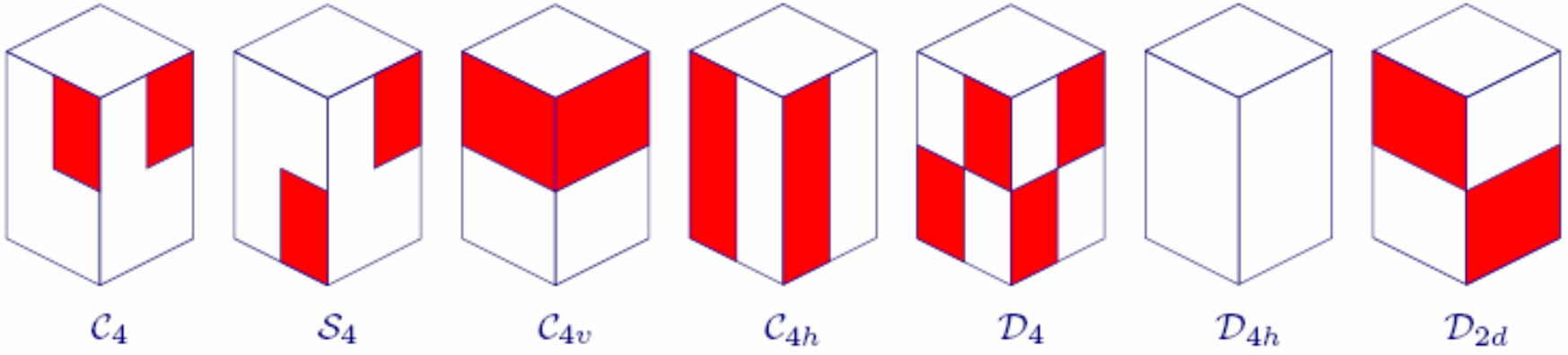


Ejemplo: poliedros decorados

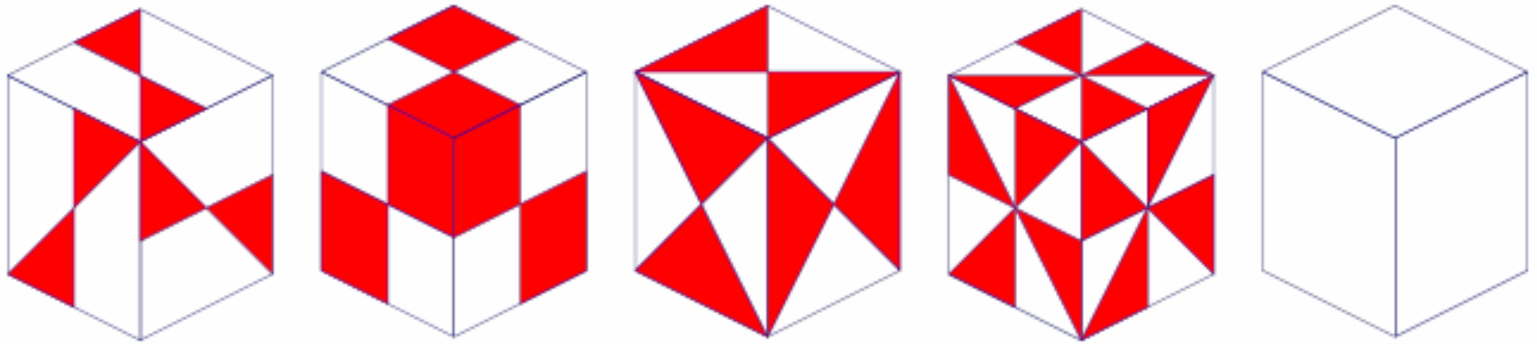




Ejemplo: poliedros decorados

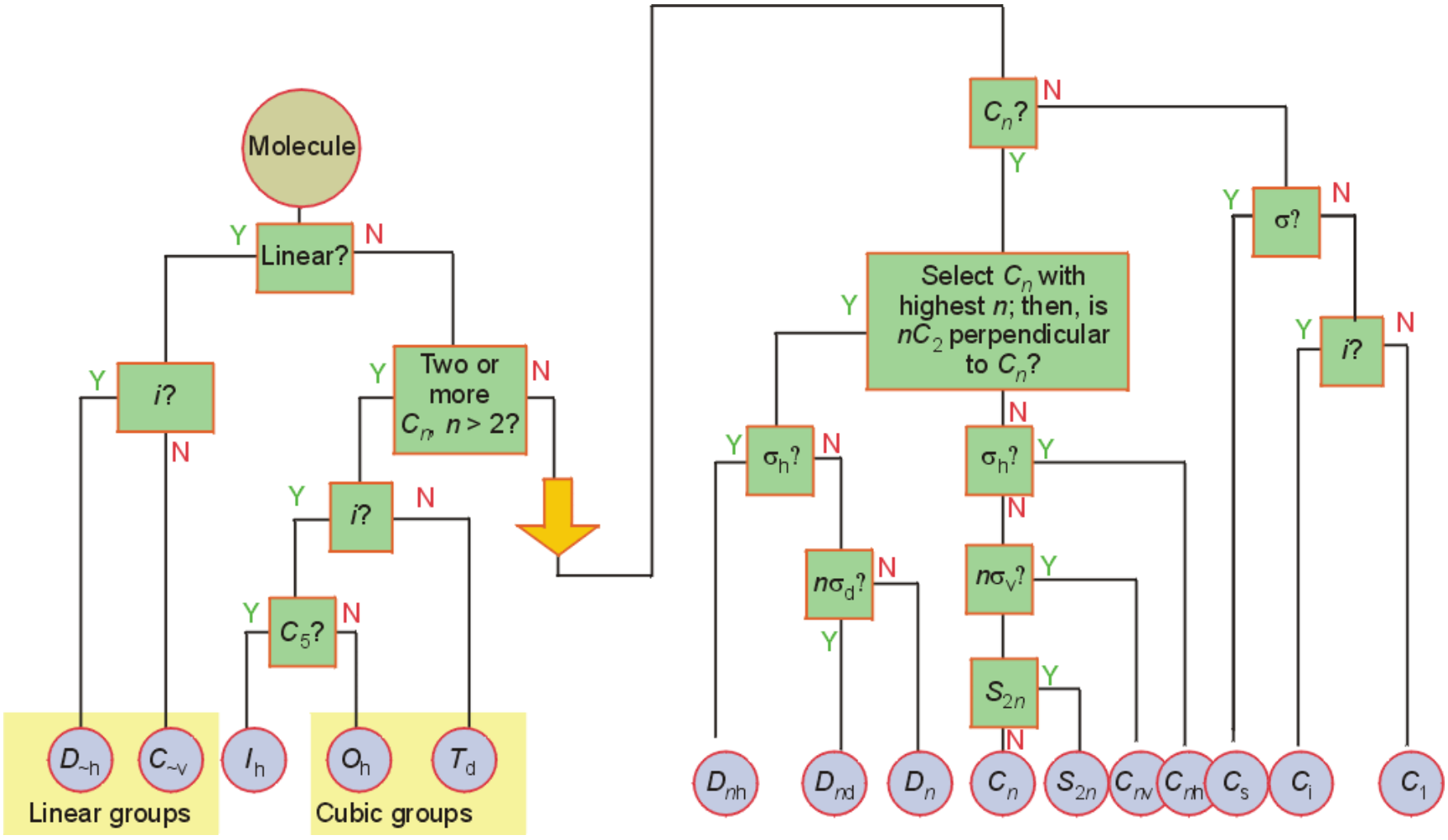


$\mathcal{C}_4$ $\mathcal{S}_4$ $\mathcal{C}_{4v}$ $\mathcal{C}_{4h}$ $\mathcal{D}_4$ $\mathcal{D}_{4h}$ $\mathcal{D}_{2d}$



$\mathcal{T}$ $\mathcal{T}_d$ $\mathcal{T}_h$ $\mathcal{O}$ $\mathcal{O}_h$

¿A qué grupo?


Molecule
Linear?
Y
N
i?
Y
N
Two or more C_n, $n > 2$?
Y
N
i?
Y
N
C_5?
Y
N
$D_{\infty h}$
$C_{\infty v}$
I_h
O_h
T_d
Linear groups
Cubic groups
C_n?
Y
N
Select C_n with highest n; then, is nC_2 perpendicular to C_n?
Y
N
σ_h?
Y
N
$n\sigma_d$?
Y
N
σ_h?
Y
N
$n\sigma_v$?
Y
N
S_{2n}?
Y
N
σ?
Y
N
i?
Y
N
D_{nh}
D_{nd}
D_n
C_n
S_{2n}
C_{nv}
C_{nh}
C_s
C_i
C_1