7.4 Symmetrier av molekyler

Forsøk på definisjon

Et <u>molekyl</u> er et begrenset legeme $M \subset \mathbb{R}^3$ hvor noen "områder" er markert som "atomer".

<u>Def</u>: En <u>symmetri</u> 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.

$Sym_0(M)$ = gruppa av alle orienterings-bevarende symmetrier av M.

Def: La M være et molekyl med endelig symmetrigruppe $Sym(M)$. Dersom R er en rotasjonssymmetri av M av maksimal orden, så kalles rotasjonsaksen til R en principalakse for M.

Konvensjon Vi velger koordinatsystemet slik at origo er et fikspunkt for $Sym(M)$ og z-aksen er en principalakse.

<u>Merk</u> Hvis et molekyl M har en orienteringsreverserende symmetri σ, så er

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

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

<u>Forklaring</u>: La τ være en annen ort.rev. symmetri av M. Siden σ, τ er punktsymmetrier, kan vi skrive

$$\sigma(x) = Ax, \qquad \tau(x) = Bx \qquad (x \in \mathbb{R}^3)$$

for passende ortogonale 3×3 matriser A, B med $\det(A) = \det(B) = -1$.

La $f := \sigma^{-1} \circ \tau$. Da er

$$f(x) = A^{-1}Bx,$$

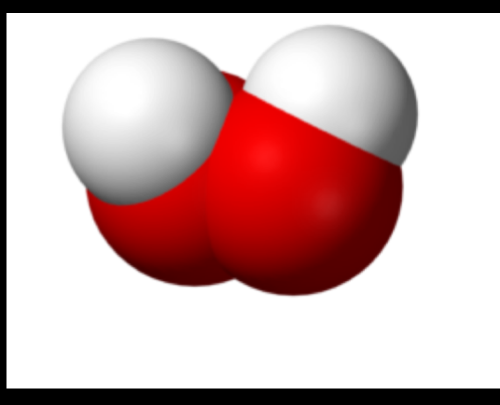
$$\det(A^{-1}B) = \det(A^{-1}) \cdot \det(B)$$
$$= \det(A)^{-1} \cdot \det(B)$$
$$= (-1) \cdot (-1) = 1$$

$\Rightarrow$ f bevarer orientering.

Vi har $\tau = \sigma \circ f \in \sigma \cdot \mathrm{Sym}_0(M)$

$$\Rightarrow \mathrm{Sym}(M) = \mathrm{Sym}_0(M) \cup \sigma \cdot \mathrm{Sym}_0(M)$$

Eksempler



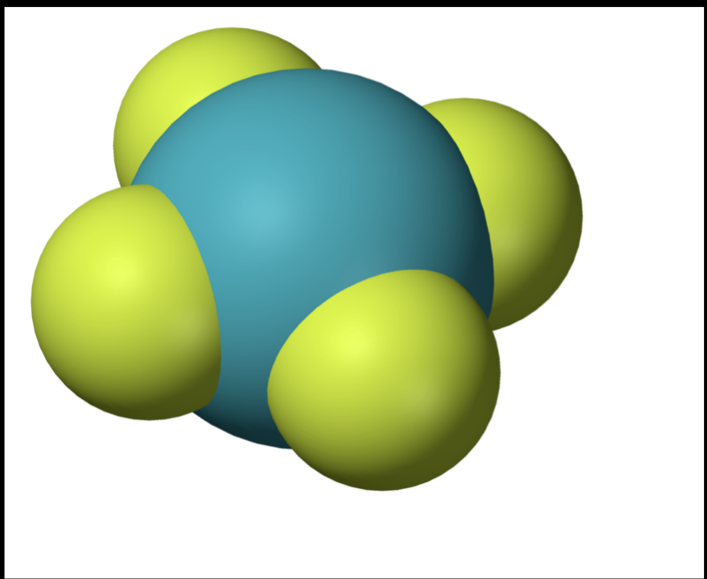
(1) Hydrogenperoksyd
H_2O_2.

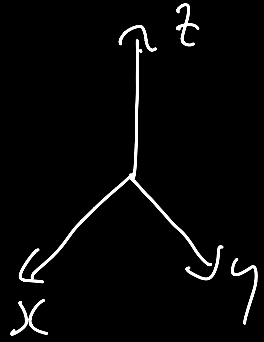
Vi har kun én ikke-triviell symmetri:

Rotasjon om z-aksen med vinkel π.

$\Rightarrow \ \mathrm{Sym}(M) = \mathrm{Sym}_0(M) = C_2$

② Xenon-tetrafluorid XeF_4





Rotasjonssymmetri av orden 4,

Akse: z-aksen (prinsipalakse)

4 rotsymmetrier av orden 2

med akse i xy-planet.

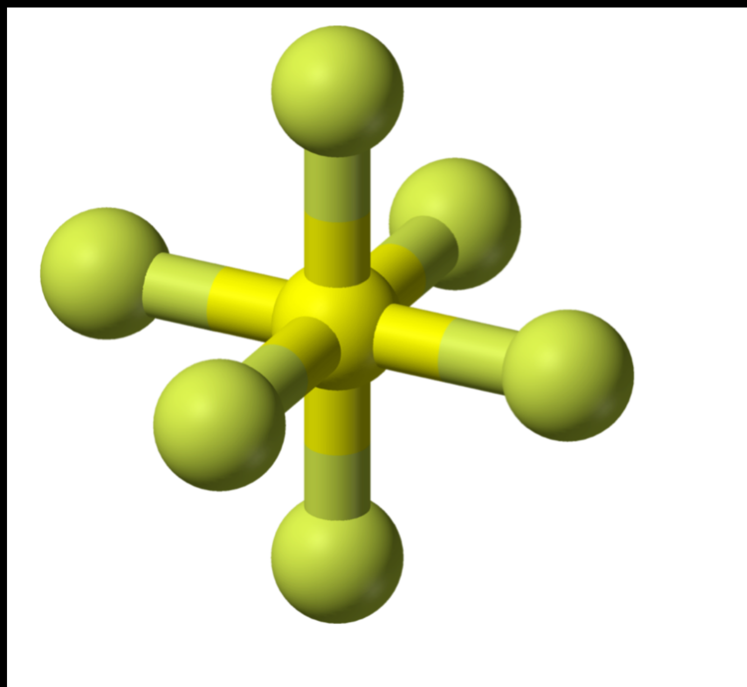
σ = Speiling i xy-planet: orient. rev. symmetri.

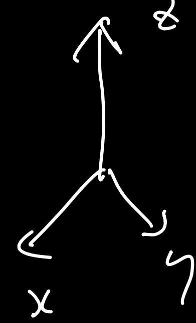
$$\mathrm{Sym}_0(M) = D_4$$

$$\mathrm{Sym}(M) = \mathrm{Sym}_0(M) \cup \sigma \cdot \mathrm{Sym}_0(M)$$

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

(3) Sulfur-hexafluorid SF_6





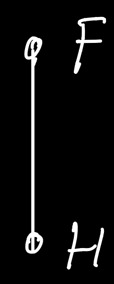
Fluoratomene danner hjørnene i et oktaeder, og

$$\text{Sym.}(M) = \text{oktaedergruppa } \mathbb{O}$$

Rotasjonssymmetrier av orden 2, 3 og 4

Speiling i xy-planet

(4) Hydrogenfluorid HF



Sym(M) består av alle isometrier m av $\mathbb{R}^3$ som holder både fluoratomet og hydrogenatomet i ro, dvs.

$$m(x) = Ax,$$

hvor

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

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

$$\Rightarrow \mathrm{Sym}(M) = O(2)$$