



# Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας

Ενότητα # (1): Συμμετρία και Χημεία

Σιγάλας Μιχάλης  
Τμήμα Χημείας



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.





# Συμμετρία και Χημεία



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ  
*επένδυση στην κοινωνία της γνώσης*

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ  
2007-2013  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Περιεχόμενα ενότητας

---

1. Γενικά περί συμμετρίας
2. Μοριακή συμμετρία και θεωρία ομάδων



# Σκοποί ενότητας

Μετά την ολοκλήρωση της μελέτης του κεφαλαίου αυτού θα μπορείτε να ...

- αναφέρετε τη διττή σημασία της έννοιας της συμμετρίας από την αρχαία Ελλάδα μέχρι και σήμερα.
- αναφέρετε παραδείγματα από τον ανθρώπινο πολιτισμό όπου η ύπαρξη της συμμετρίας είναι εμφανής.
- αναφέρετε παραδείγματα ύπαρξης της συμμετρίας στη φύση, τα έμβια όντα και τα ανόργανα φυσικά υλικά.
- αναφέρετε μερικά από τα επιστημονικά πεδία στα οποία βρίσκει εφαρμογή η συμμετρία.
- αναφέρετε μερικές από τις φυσικοχημικές ιδιότητες των μορίων που μπορούν να μελετηθούν με βάση τη συμμετρία τους.
- αναγνωρίζετε την ανάγκη μιας συστηματικής περιγραφής της συμμετρίας ενός μορίου.





ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

---

# 1. Γενικά περί συμμετρίας

# Συμμετρία στη φύση

... στην καθημερινή ζωή

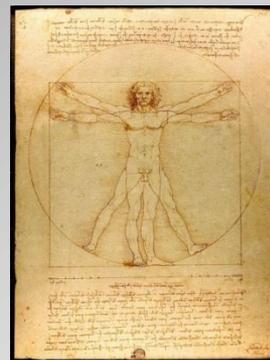


Εικόνα 1.  
Αμφίπλευρη συμμετρία (πεταλούδα).



Εικόνα 2.  
Μικροκρύσταλλοι νερού.

... στην τέχνη



Εικόνα 3.  
Ο άνθρωπος του Βιτρούβιου,  
Leonardo da Vinci.

Συμμετρία  $\approx$  καλές αναλογίες, ομορφιά, αρμονία, ιδιαίτερη ισορροπία πολλών μερών που συγκροτούν ένα σύνολο

... στη φιλοσοφία

Το «μέσον μέτρον» ... το σκοπό για τον οποίο αγωνίζεται ο ενάρετος με τις πράξεις του ..., *Αριστοτέλης, «Ηθικά Νικομάχεια»*  
«Σύμμετρον όπερ εκατέρου των άκρων απέχει» *Γαληνός, «Περί κράσεων».*

# Η συμμετρία είναι παντού

*«Η συμμετρία επαληθεύει μια γελοία αλλά και υπέροχη συγγένεια μεταξύ φαινομενικά άσχετων αντικειμένων, φαινομένων και θεωριών: το γήινο μαγνητισμό, τα πέπλα των γυναικών, το πολωμένο φως, τη φυσική επιλογή, τη θεωρία ομάδων, τις σταθερές και τους μετασχηματισμούς, τις συνήθειες εργασίας των μελισσών στην κυψέλη, τη δομή του χώρου, τη σχεδίαση των βάζων, την κβαντική φυσική, τους σκαραβαίους, τα πέταλα των λουλουδιών, τις αποτυπώσεις της περίθλασης των ακτίνων-Χ, τη διαίρεση των κυττάρων στους θαλάσσιους αχινούς, τις θέσεις ισορροπίας στους κρυστάλλους, τους καθεδρικούς ναούς, τις νιφάδες χιονιού. τη μουσική, τη θεωρία της σχετικότητας.»*

**J. R. Newman (ed.), *The World of Mathematics*, Simon and Schuster, New York, 1956, Vol. 1, p.670.**



## 2. Μοριακή συμμετρία και θεωρία ομάδων

# Μοριακή συμμετρία και Θεωρία ομάδων

Η συμμετρία των μορίων διαδραματίζει καθοριστικό ρόλο στη Χημεία.

Κάποια μόρια είναι εμφανώς πιο συμμετρικά από άλλα. Υπάρχει ή όχι διαφορά στη χημική συμπεριφορά τους; Στο ερώτημα αυτό απαντά η μελέτη της **μοριακής συμμετρίας**.

Το αντικείμενο της **μοριακής συμμετρίας** συνίσταται στη συστηματική μελέτη της συμμετρίας των μορίων και των χημικών συστημάτων γενικότερα στα πλαίσια του μαθηματικού υποβάθρου της **Θεωρίας ομάδων**.

Η μελέτη της μοριακής συμμετρίας συνίσταται:

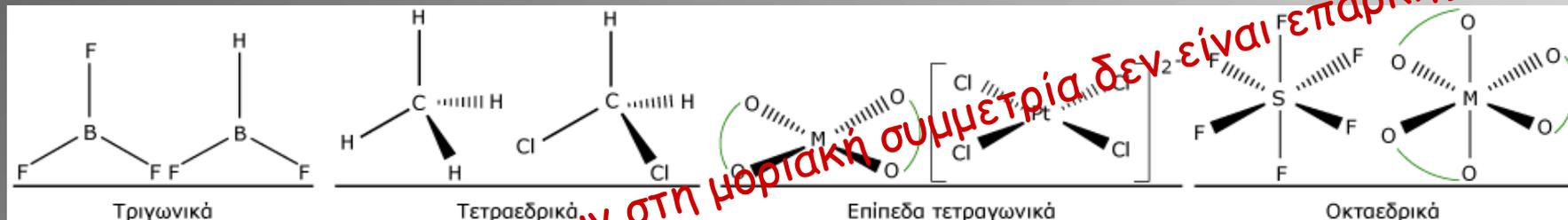
- στη συστηματική περιγραφή της συμμετρίας ενός μορίου
- στην πρόβλεψη ή ερμηνεία των χημικών ή φυσικοχημικών του ιδιοτήτων με τη χρήση των μεθοδολογιών της Θεωρίας των ομάδων.

Η γνώση της μοριακής συμμετρίας επιτρέπει:

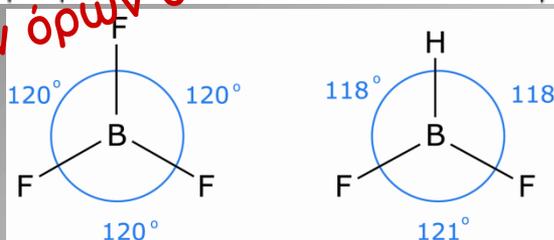
- την πρόβλεψη της πολικότητας και της οπτικής ενεργότητας ενός μορίου
- την περιγραφή και οπτικοποίηση των μοριακών τροχιακών του μορίου
- την πρόβλεψη των αποτελεσμάτων της αλληλεπίδραση του μορίου με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (φασματοσκοπικές ιδιότητες).

# Μοριακή συμμετρία και θεωρία ομάδων

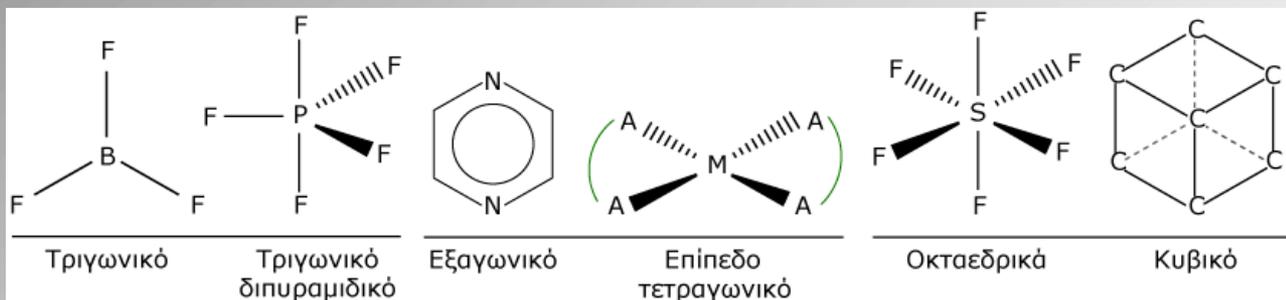
Γενική περιγραφή συμμετρίας



Η χρήση περιγραφικών όρων στη μοριακή συμμετρία δεν είναι επαρκής



Ανάγκη για αυστηρή (μαθηματική) περιγραφή της συμμετρίας του μορίου



Υπάρχουν μόρια με σημαντικά διαφορετική διάταξη των πυρήνων στο χώρο και με διαφορετική γενική περιγραφή της στερεοχημείας τους, που έχουν τις ίδιες ιδιότητες συμμετρίας.

Η ομαδοποίηση των μορίων και η μελέτη τους με βάση τη συμμετρία του αποτελεί το αντικείμενο της **μοριακής συμμετρίας**.

# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (1/3)

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

- Εικόνα 1: Αμφίπλευρη συμμετρία (πεταλούδα). Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported license.  
[https://en.wikipedia.org/wiki/File:Blue\\_morpho\\_butterfly.jpg](https://en.wikipedia.org/wiki/File:Blue_morpho_butterfly.jpg).
- Εικόνα 2: Μικροκρύσταλλοι νερού. Creative Commons Attribution-ShareAlike License.  
<http://snowflakebentley.com/snowflakes.htm>
- Εικόνα 3: Ο άνθρωπος του Βιτρούβιου, Leonardo da Vinci. Public domain work of art.  
[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Da\\_Vinci\\_Vitruve\\_Luc\\_Viatour.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Da_Vinci_Vitruve_Luc_Viatour.jpg)



# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (2/3)

## Βιβλία

- Bishop, D., *Group Theory and Chemistry*, Clarendon Press, Oxford, 1973.
- Carter, R. L., *Molecular Symmetry and Group Theory*, Wiley, New York, 1998.
- Cotton, F., *Chemical Applications of Group Theory*, 3<sup>rd</sup> Ed., Wiley, New York, 1989.
- Dmitriev, I. S., *Symmetry in the World of Molecules*, Mir Publishers, Moscow, 1979.
- Dorain, P., *Symmetry in Inorganic Chemistry*, Addison-Wesley, New York, 1965.
- Ferraro, J. R. & Ziomek J. S., *Introductory Group Theory*, Plenum Press, New York, 1969.
- Hollas, J., *Symmetry in Molecules*, Chapman and Hall, 1972.
- Jaffé, H. H. & Orchin M., *Symmetry in Chemistry*, Wiley, New York, 1965.
- Kettle, S. F. K., *Symmetry and Structure*, 2<sup>nd</sup> Ed., Wiley, New York, 1995.
- Lesk, A.M., *Introduction to Symmetry and Group Theory for Chemists*, Kluwer, New York, 2004.
- Odgen, J. S., *Introduction to Molecular Symmetry*, Oxford University Press, Oxford, 2001.
- Rotman, J. J., *An Introduction to the Theory of Groups*, 4<sup>th</sup> Ed., Springer-Verlag, New York, 1999.



# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (3/3)

## Βιβλία

- Vincent, A., *Molecular Symmetry and Group Theory*, Wiley, New York, 1977.
- Weyl, H., *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, 1931, English transl., Dover Publications, 1931.
- Worrall, I. J., *Molecular Symmetry*, Royal Institute of Chemistry Lecture Series, no. 2, 1967.
- Τσίπης, Κ. Α., *Εισαγωγή στην Κβαντική Χημείας, Τόμος II: Μοριακή Δομή*, Γ. Δεδούσης, Θεσσαλονίκη, 1993.

## Εκπαιδευτικό Λογισμικό

- *3DMolSym*: <http://www.molwave.com/software/3dmolsym/3dmolsym.htm>
- *Symmetry Resources at Otterbein College*: <http://symmetry.otterbein.edu/index.html>



# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Σιγάλας Μιχάλης.  
«Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας. Συμμετρία και Χημεία».  
Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:  
<http://eclass.auth.gr/courses/OCRS424/>



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Μη Εμπορική Χρήση - Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>





# Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Ιππολύτη Γκουντενούδη - Εσκιτζή  
Θεσσαλονίκη, Ιούλιος 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ