ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

ΑΝΟΙΚΤΑ
ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΑ
ΜΑΘΗΜΑΤΑ

Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας

Ενότητα # (2): Στοιχεία και Διεργασίες Συμμετρίας

Σιγάλας Μιχάλης
Τμήμα Χημείας

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στοιχεία και Διεργασίες Συμμετρίας

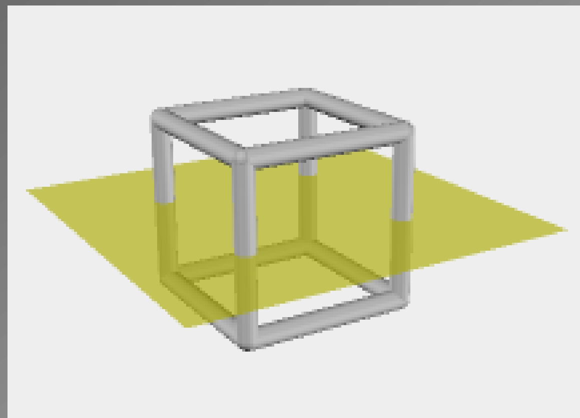
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοποί ενότητας

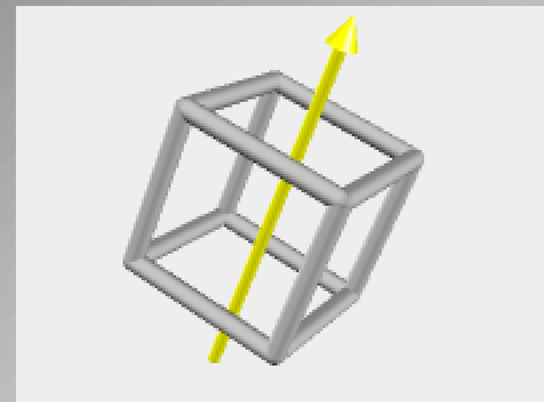
Μετά την ολοκλήρωση της μελέτης του κεφαλαίου αυτού θα μπορείτε να ...

- διακρίνετε την έννοια του στοιχείου και της διεργασίας συμμετρίας
- αναγνωρίζετε την ύπαρξη των αξόνων περιστροφής, των επιπέδων κατοπτρισμού, του κέντρου συμμετρίας και των αξόνων στροφοκατοπτρισμού σε ένα μόριο
- προβλέπετε το αποτέλεσμα μιας διεργασίας συμμετρίας σε ένα μόριο
- προβλέπετε τη διεργασία που προκύπτει από το συνδυασμό δύο ή περισσότερων διεργασιών συμμετρίας και των αντιστρόφων διεργασιών συμμετρίας
- διακρίνετε τις γενεσιουργές και τις παράγωγες διεργασίες συμμετρίας
- περιγράφετε τη συμμετρία ενός μορίου με βάση το σύνολο των στοιχείων και των διεργασιών συμμετρίας.

Διεργασία συμμετρίας και στοιχείο συμμετρίας



Κατοπτρισμός



Περιστροφή

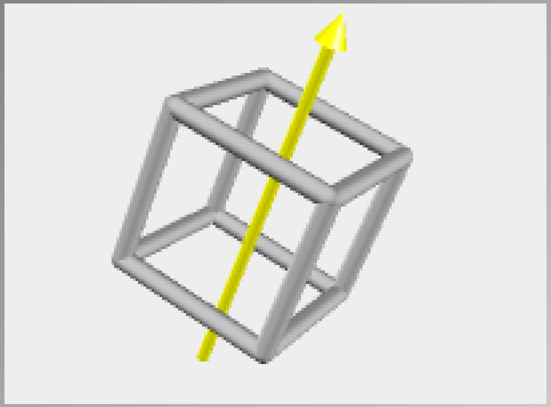
Διεργασία συμμετρίας είναι μια *εσωτερική* κίνηση ενός αντικειμένου ως προς ένα σημείο, γραμμή ή επίπεδο τέτοια ώστε η θέση και η διάταξη στο χώρο του αντικειμένου πριν και μετά τη διεργασία να *ταυτίζονται*.

Στοιχείο συμμετρίας είναι μια *φανταστική* γεωμετρική οντότητα (ένα σημείο, γραμμή ή επίπεδο) ως προς την οποίαν εκτελείται μια διεργασία συμμετρίας.

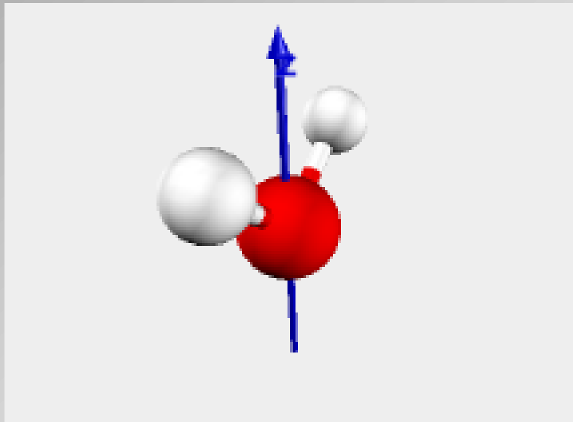
Υπάρχει μια μονοσήμαντη αντιστοιχία μεταξύ κάθε *διεργασίας συμμετρίας* και ενός *στοιχείου συμμετρίας*.

Διεργασία συμμετρίας και στοιχείο συμμετρίας

Πότε μια διεργασία είναι διεργασία συμμετρίας και πότε όχι;



Περιστροφή κύβου

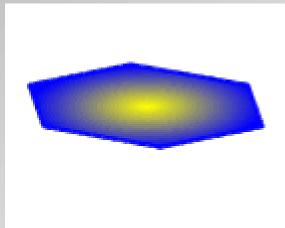


Περιστροφή μορίου νερού

Διεργασία συμμετρίας και στοιχείο συμμετρίας

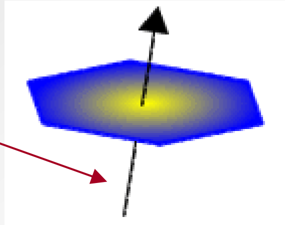
Διεργασία συμμετρίας

Περιστροφή



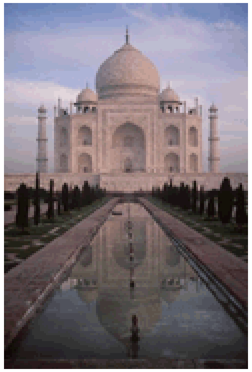
Στοιχείο συμμετρίας

Άξονας περιστροφής
ή άξονας συμμετρίας

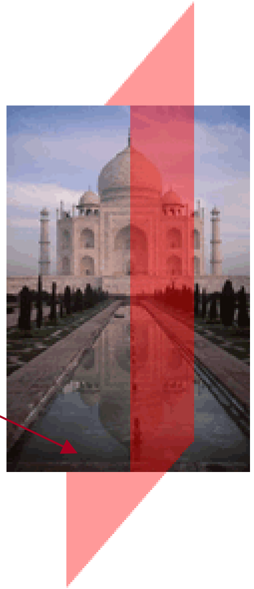


Διεργασία συμμετρίας και στοιχείο συμμετρίας

Διεργασία συμμετρίας — **Κατοπτρισμός**



Στοιχείο συμμετρίας — **Επίπεδο κατοπτρισμού ή επίπεδο συμμετρίας**



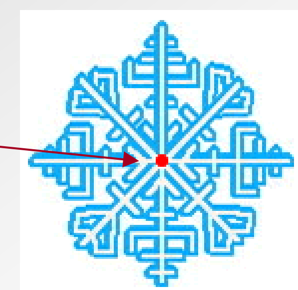
Διεργασία συμμετρίας και στοιχείο συμμετρίας

Διεργασία συμμετρίας

Αντιστροφή

Στοιχείο συμμετρίας

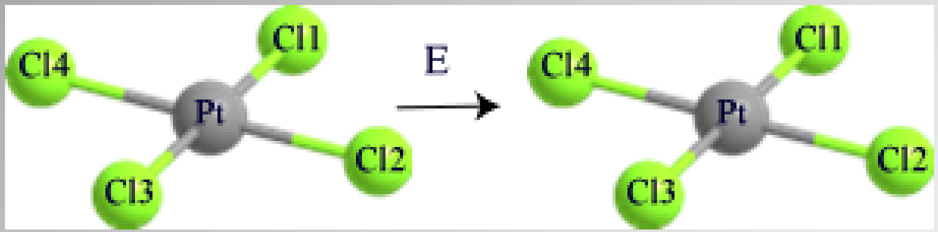
Σημείο αντιστροφής ή κέντρο συμμετρίας



Ταυτότητα	Όλο το αντικείμενο – μόριο
Διεργασία	Στοιχείο συμμετρίας

Ε

Καμία αλλαγή
Όλα τα μέρη του μορίου παραμένουν στην ίδια θέση.
Υπάρχει σε κάθε αντικείμενο – μόριο.



Τα μόρια που έχουν μόνον την ταυτότητα καλούνται ασυμμετρικά.

Περιστροφή

Διεργασία

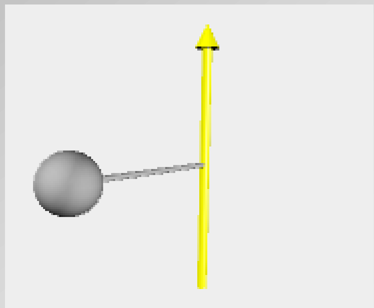
Άξονας περιστροφής n τάξης

Στοιχείο συμμετρίας

C_n n = 1, 2, 3, …

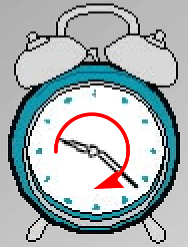
Περιστροφή κατά 2π/n rad (360°/n)

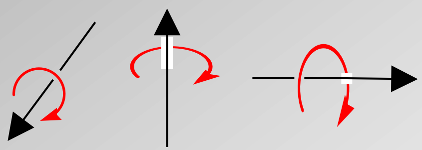
n: τάξη άξονα



Κανονική (proper) διεργασία

Περιστροφή κατά τη φορά των δεικτών του ρολογιού





Περιστροφή

Διεργασία

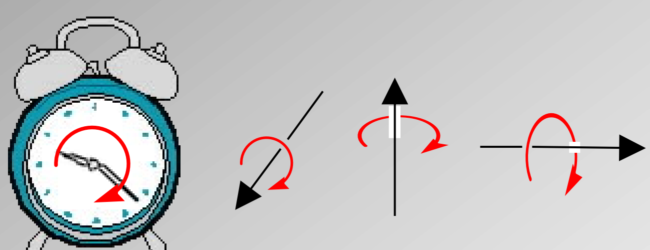
C_n n = 1, 2, 3, …

Περιστροφή κατά 2π/n rad (360°/n)

n: τάξη άξονα

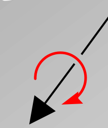
Κανονική (proper) διεργασία

Περιστροφή κατά τη φορά των δεικτών του ρολογιού

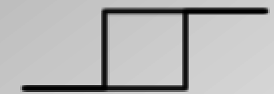


Άξονας περιστροφής n τάξης

Στοιχείο συμμετρίας



C_2, n=2, φ=π=180°



C_3, n=3, φ=2π/3=120°

C_4, n=4, φ=π/2=90°

C_5, n=5, φ=2π/5=72°

C_6, n=6, φ=π/3=60°

Περιστροφή

Διεργασία

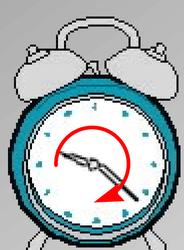
C_n n = 1, 2, 3, ...

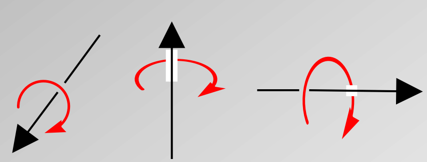
Περιστροφή κατά $2\pi/n$ rad ($360°/n$)

n: τάξη άξονα

Κανονική (proper) διεργασία

Περιστροφή κατά τη φορά των δεικτών του ρολογιού

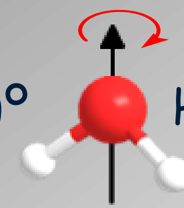




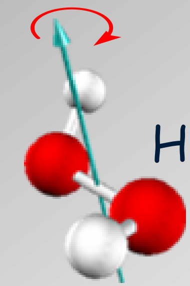
Άξονας περιστροφής τάξης

Στοιχείο συμμετρίας

C_2, n=2, $\varphi=\pi=180°$

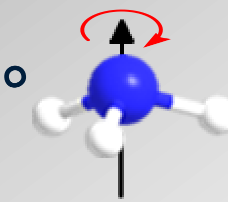


H_2O



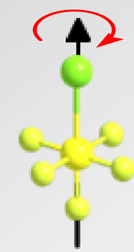
H_2O_2

C_3, n=3, $\varphi=2\pi/3=120°$



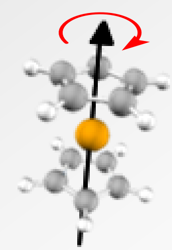
NH_3

C_4, n=4, $\varphi=\pi/2=90°$



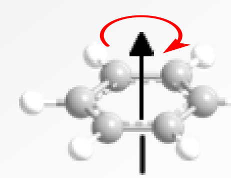
SF_6Cl

C_5, n=5, $\varphi=2\pi/5=72°$



Φεροκένιο

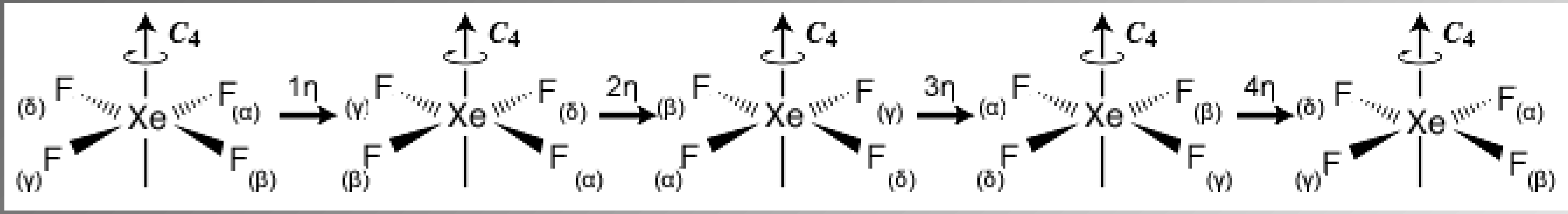
C_6, n=6, $\varphi=\pi/3=60°$

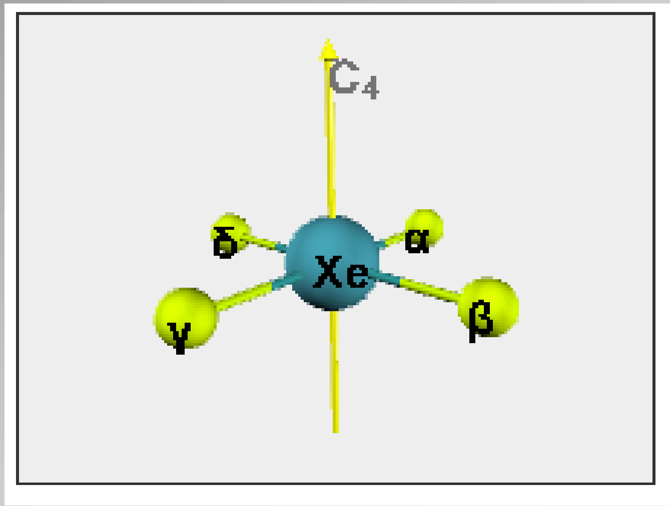


Βενζόλιο

Περιστροφή

Άξονας περιστροφής n τάξης

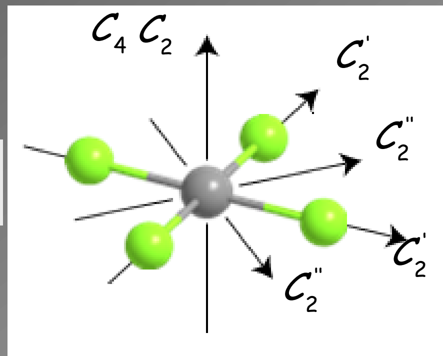




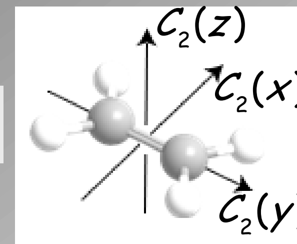
Περιστροφή — Άξονας συμμετρίας n τάξης

Περισσότεροι του ενός άξονες συμμετρίας

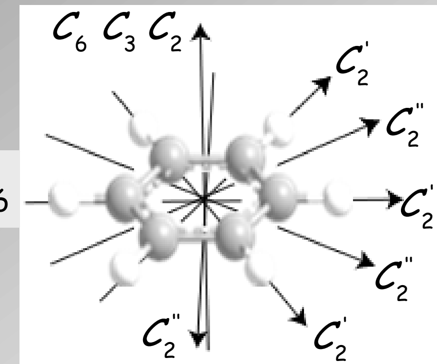
$[PtCl_4]^{-2}$



$H_2C = CH_2$



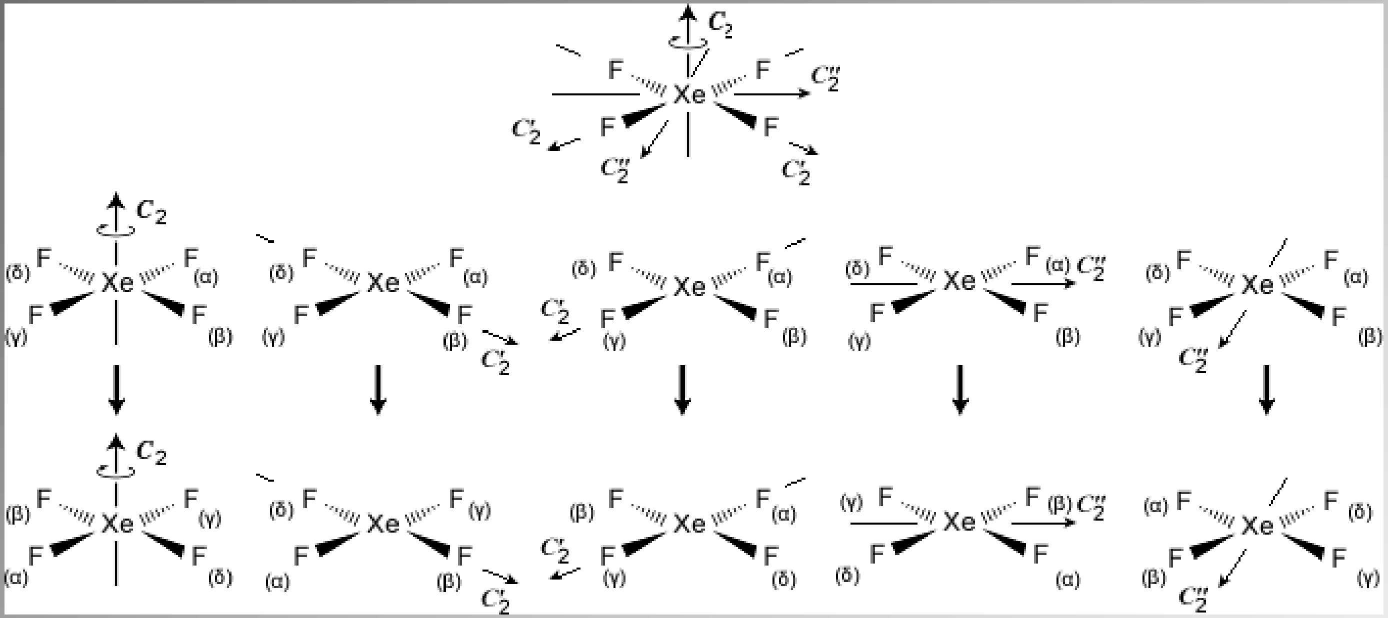
C_6H_6

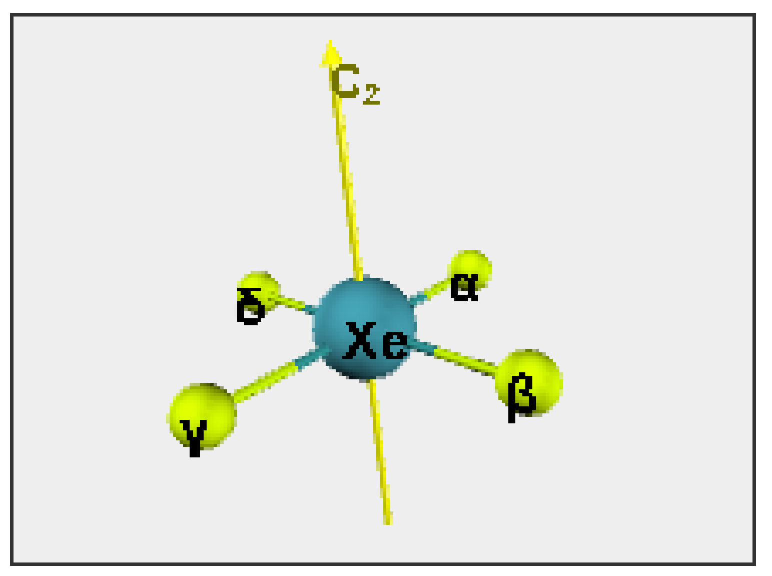


- Όταν υπάρχουν περισσότεροι του ενός άξονες, αυτός με τη μεγαλύτερη τάξη καλείται κύριος άξονας, ορίζει την κατακόρυφο (vertical) διεύθυνση και ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα z.
- Όταν υπάρχουν περισσότεροι του ενός κύριοι άξονες προς διάκρισή τους συμβολίζονται ως $C_2(x)$, $C_2(y)$ και $C_2(z)$
- Όταν υπάρχουν περισσότεροι του ενός δευτερεύοντες άξονες με την ίδια τάξη προς διάκρισή τους συμβολίζονται ως:
  - C_n ο άξονας που συμπίπτει με τον κύριο άξονα
  - C_n' ο άξονας που είναι κάθετος στον κύριο άξονα και διέρχεται από το μέγιστο αριθμό ατόμων
  - C_n'' ο άξονας που είναι κάθετος στον κύριο άξονα και διέρχεται από τα λιγότερα άτομα

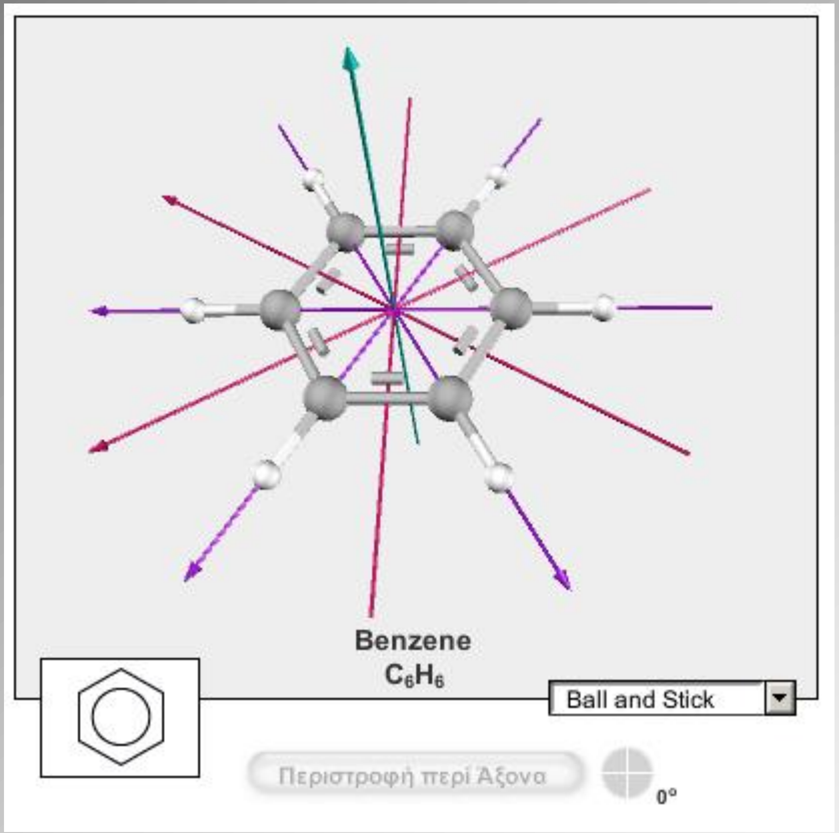
Περιστροφή Άξονας συμμετρίας n τάξης

Περισσότεροι του ενός άξονες συμμετρίας



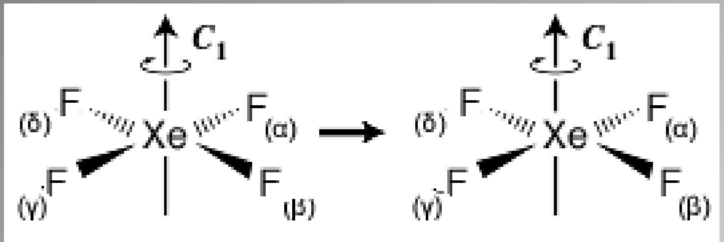


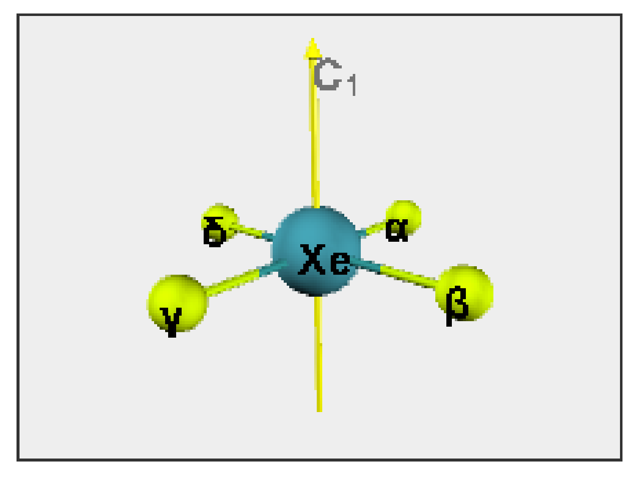
Παραδείγματα αξόνων κατάλληλης περιστροφής



Περιστροφή Άξονας συμμετρίας n τάξης

$C_1 = E$

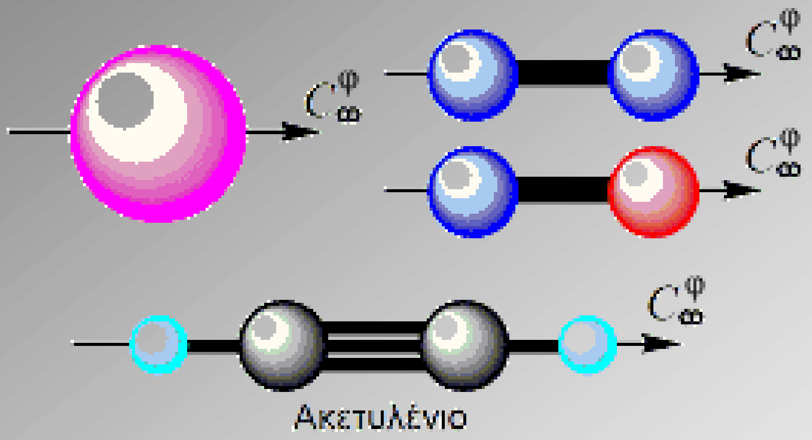




Περιστροφή

Άξονας συμμετρίας η τάξης

C_∞^{φ}

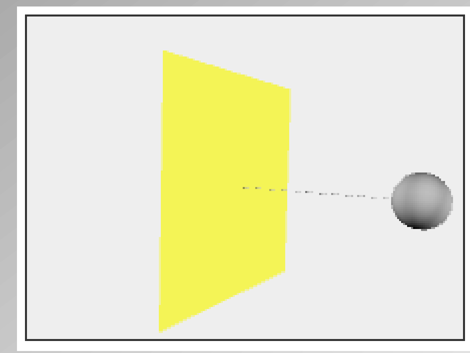


Κατοπτρισμός
Διεργασία

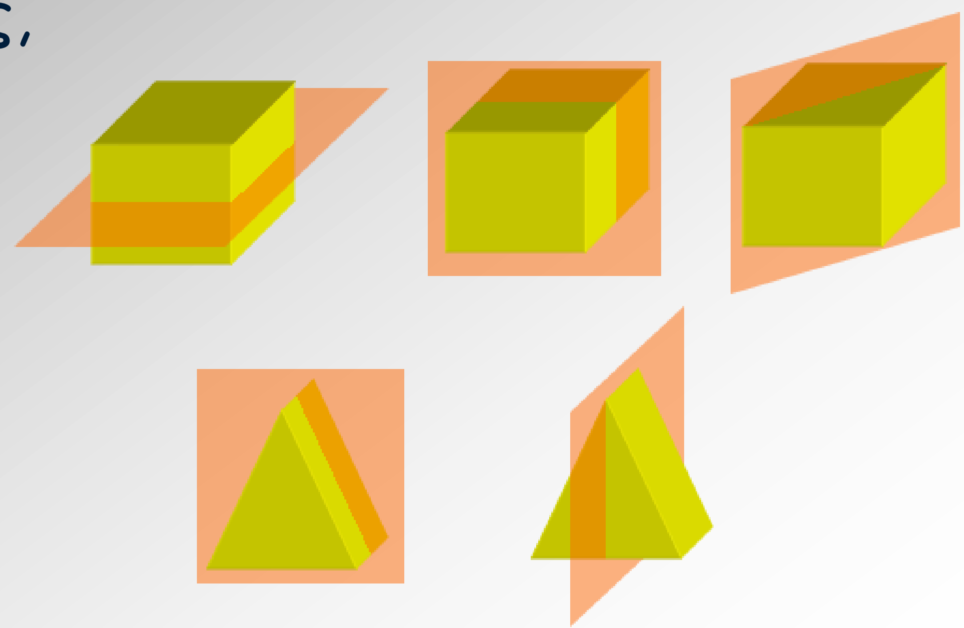
Επίπεδο συμμετρίας
Στοιχείο συμμετρίας

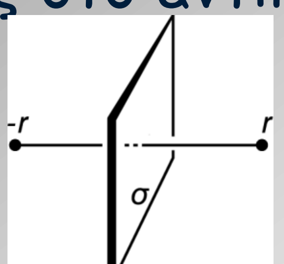
σ_α α = -, h, v, d …

Αμφίπλευρη διεργασία κατοπτρισμού ως προς ένα επίπεδο



Αν σε ένα αντικείμενο - μόριο υπάρχει επίπεδο συμμετρίας, σ, για κάθε σημείο του αντικειμένου r, υπάρχει ένα άλλο σημείο, -r, που ανήκει επίσης στο αντικείμενο.





Κατοπτρισμός

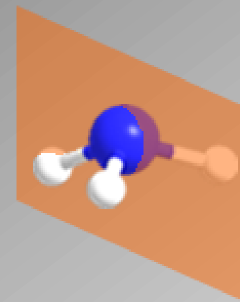
Διεργασία

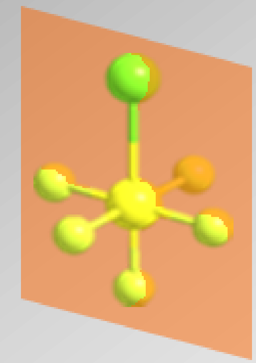
Επίπεδο συμμετρίας

Στοιχείο συμμετρίας

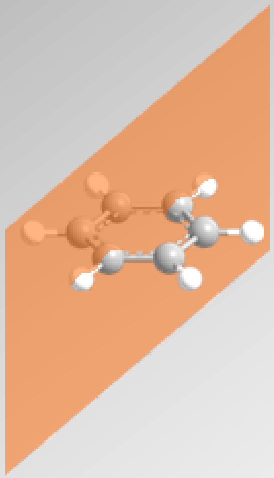
σ_a a = -, h, v, d …

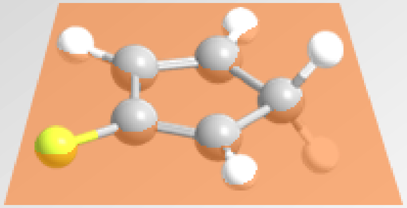
Αμφίπλευρη διεργασία κατοπτρισμού ως προς ένα επίπεδο

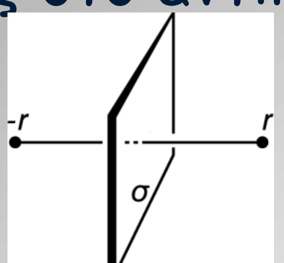


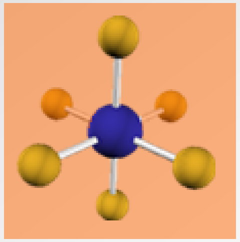


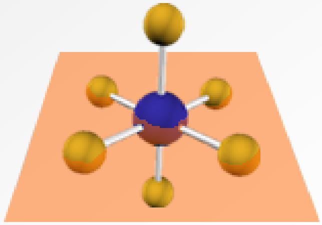
Αν σε ένα αντικείμενο – μόριο υπάρχει επίπεδο συμμετρίας, σ, για κάθε σημείο του αντικειμένου r, υπάρχει ένα άλλο σημείο, -r, που ανήκει επίσης στο αντικείμενο.









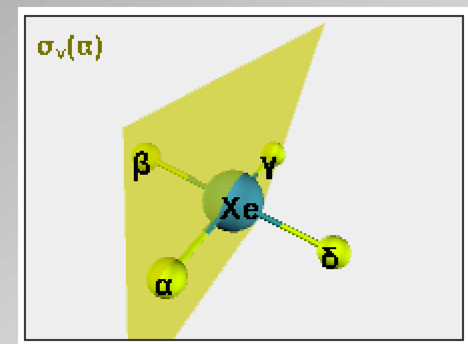


Μη κανονική (improper) διεργασία

Κατοπτρισμός Επίπεδο συμμετρίας

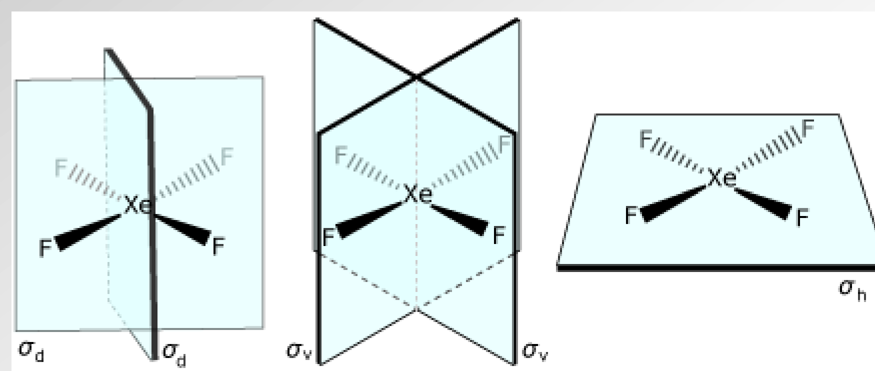
Συμβολισμός

σ_h: Επίπεδο συμμετρίας κάθετο στον κύριο άξονα (horizontal). Αν δεν υπάρχει άξονας ως σ_h ορίζεται το επίπεδο του μορίου



σ_v, σ_d: Επίπεδα συμμετρίας που περιέχουν τον κύριο άξονα (vertical, dihedral)

Αν υπάρχουν περισσότερα του ενός επίπεδα κάθετα στον κύριο άξονα ως σ_v συμβολίζονται αυτά που περιέχουν τα περισσότερα άτομα.

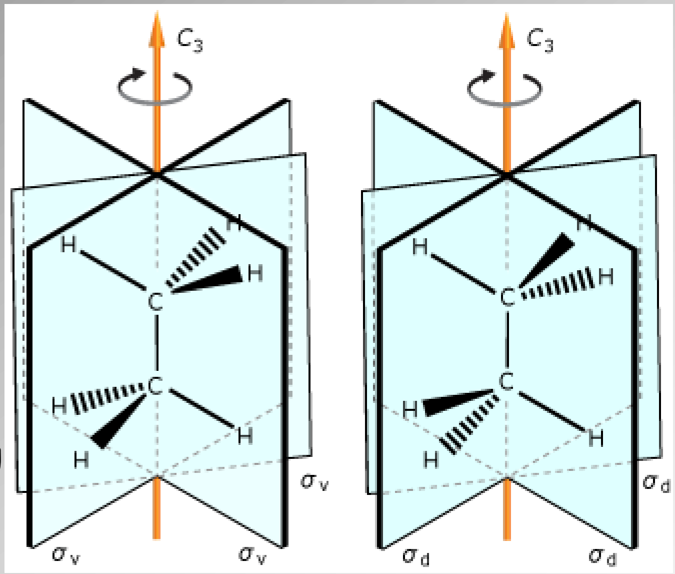


Κατοπτρισμός — Επίπεδο συμμετρίας

Συμβολισμός

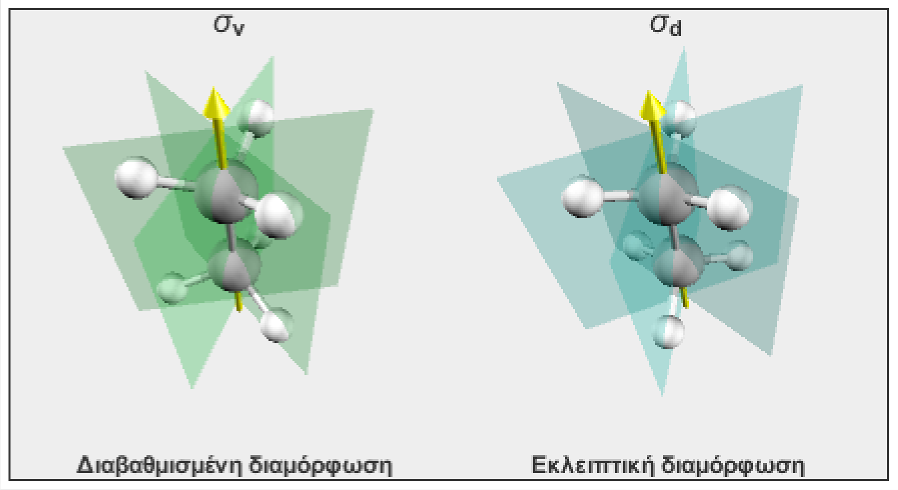
σ_h: Επίπεδο συμμετρίας κάθετο στον κύριο άξονα (horizontal). Αν δεν υπάρχει άξονας ως σ_h ορίζεται το επίπεδο του μορίου

σ_v, σ_d: Επίπεδα συμμετρίας που περιέχουν τον κύριο άξονα (vertical, dihedral)

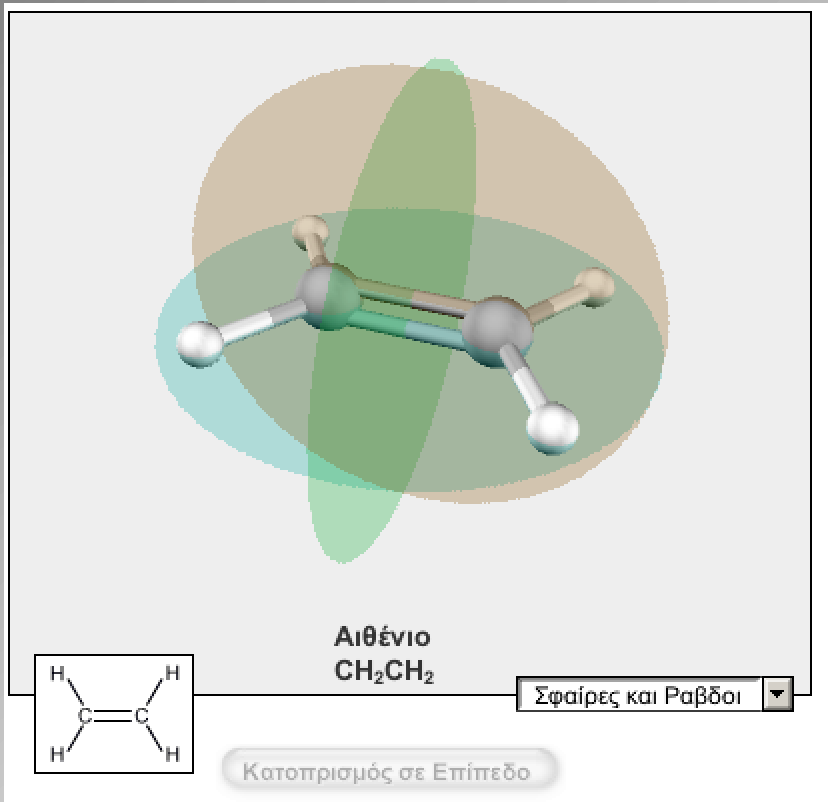


Αν υπάρχουν περισσότερα του ενός επίπεδα κάθετα στον κύριο άξονα ως σ_v συμβολίζονται αυτά που περιέχουν τα περισσότερα άτομα.

Σε άλλη περίπτωση εξαρτάται από τη συνολική συμμετρία του μορίου.



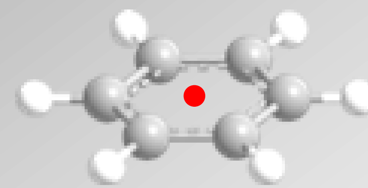
Παραδείγματα επιπέδων κατοπτρισμού



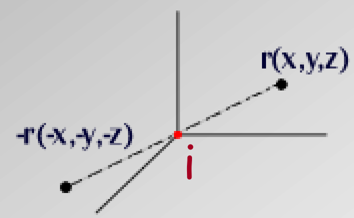
Αναστροφή Κέντρο συμμετρίας

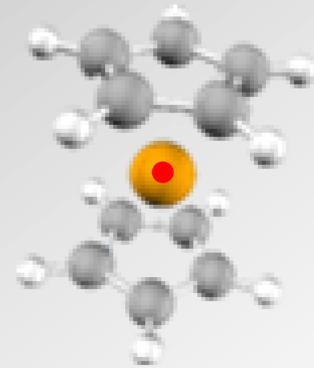
Διεργασία Στοιχείο συμμετρίας

i: Διεργασία **αναστροφής** ως προς ένα κεντρικό σημείο του μορίου (το στοιχείο: **κέντρο συμμετρίας**)

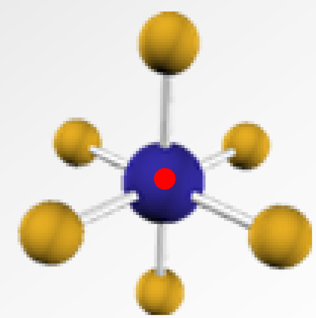


Αν σε ένα αντικείμενο - μόριο υπάρχει κέντρο συμμετρίας, i, για κάθε σημείο του αντικειμένου r, υπάρχει ένα άλλο σημείο, r′, που ανήκει επίσης στο αντικείμενο.





Τα μόρια που έχουν κέντρο συμμετρίας καλούνται **κεντροσυμμετρικά**



Από το κέντρο συμμετρίας διέρχονται όλα τα στοιχεία συμμετρίας του μορίου.

Μη κανονική (improper) διεργασία

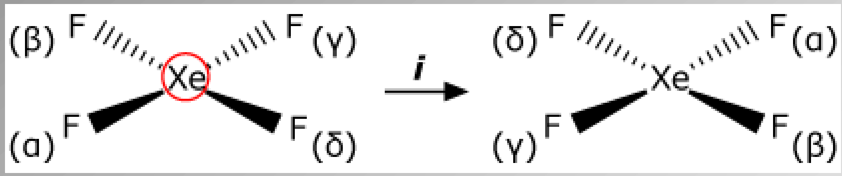
Αναστροφή

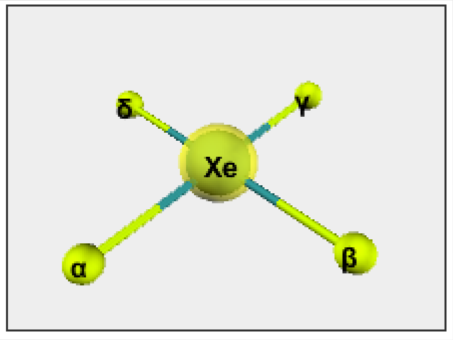
Διεργασία

Κέντρο συμμετρίας

Στοιχείο συμμετρίας

i: Διεργασία αναστροφής ως προς ένα κεντρικό σημείο του μορίου (το στοιχείο: κέντρο συμμετρίας)





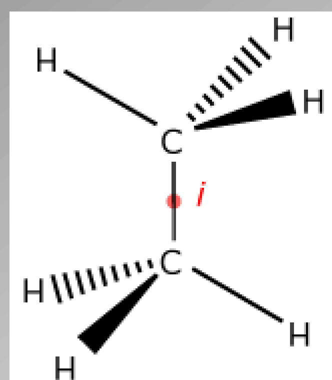
Αναστροφή

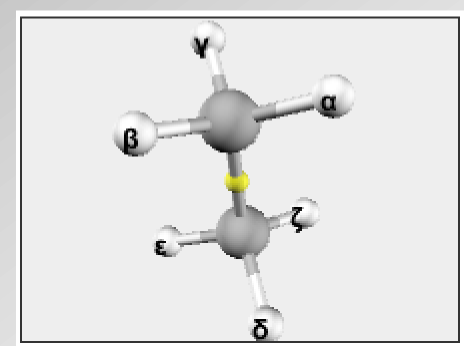
Διεργασία

Κέντρο συμμετρίας

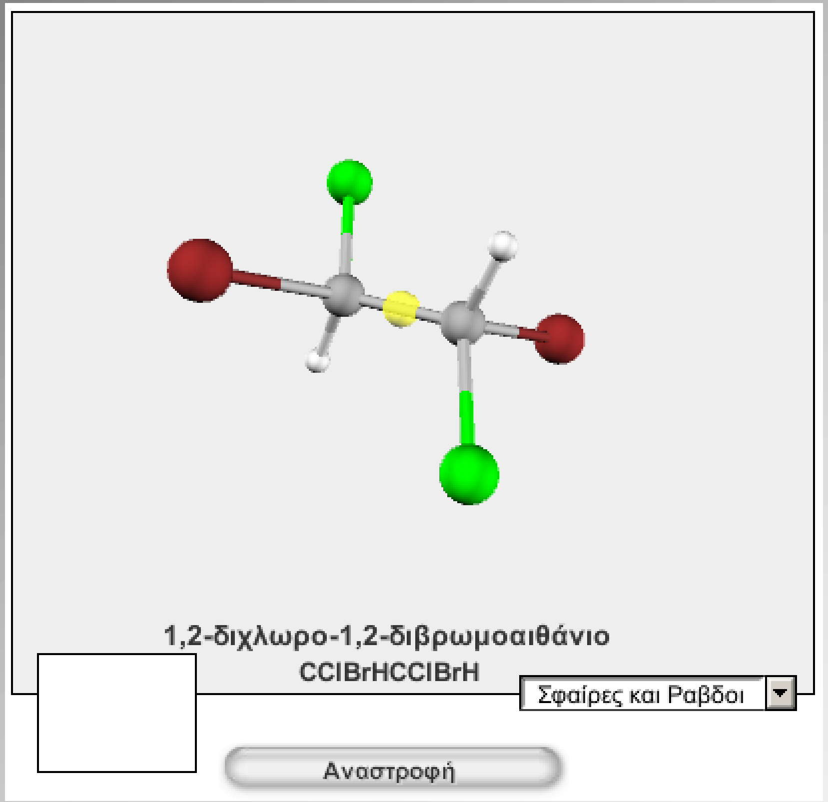
Στοιχείο συμμετρίας

i: Διεργασία **αναστροφής** ως προς ένα κεντρικό σημείο του μορίου (το στοιχείο: **κέντρο συμμετρίας**)





Παραδείγματα μορίων με κέντρο αναστροφής



Στροφοκατοπτρισμός

Διεργασία

Άξονας στροφοκατοπτρισμού

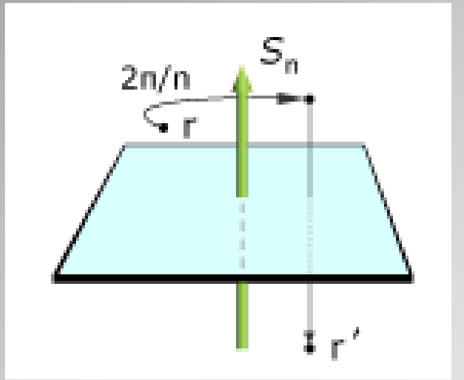
Στοιχείο συμμετρίας

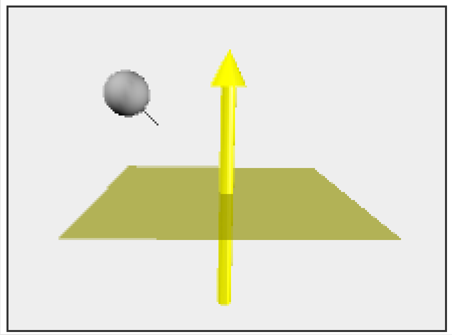
S_n n = 1, 2, 3, …

Περιστροφή κατά 2π/n rad (360°/n) και κατοπτρισμός ως προς επίπεδο (σ_h) κάθετο στον άξονα περιστροφής.

n: τάξη άξονα

Μη κανονική (improper) διεργασία



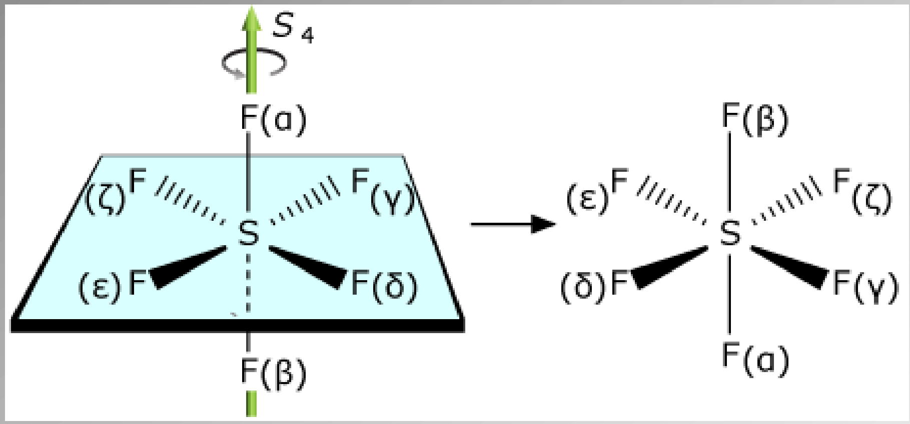


Στροφοκατοπτρισμός

Διεργασία

Άξονας στροφοκατοπτρισμού

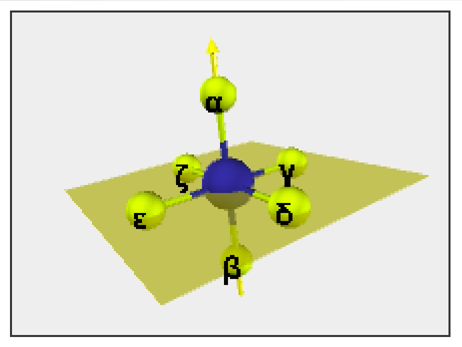
Στοιχείο συμμετρίας



S_n $n = 1, 2, 3, \ldots$

Περιστροφή κατά $2\pi/n$ rad ($360°/n$) και κατοπτρισμός ως προς επίπεδο κάθετο στον άξονα περιστροφής.

n: τάξη άξονα



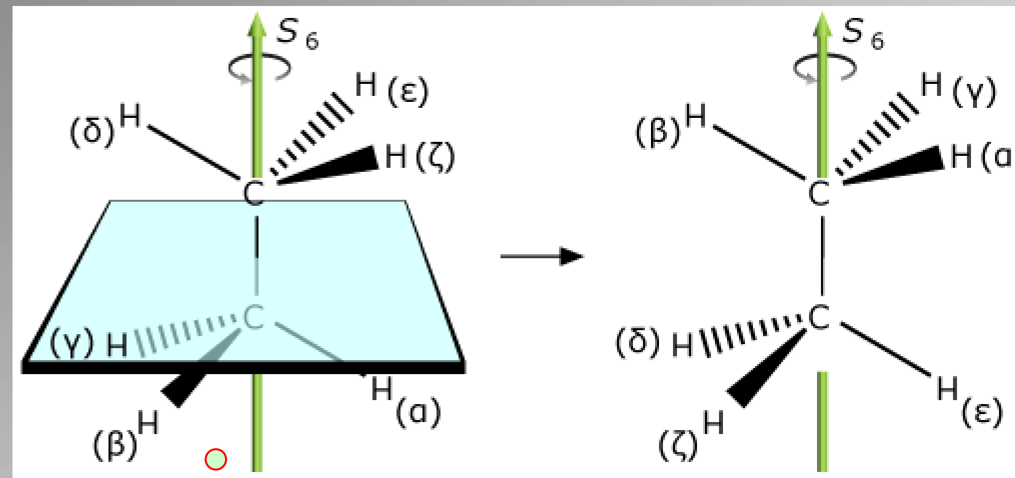
Στροφοκατοπτρισμός
Διεργασία

Άξονας στροφοκατοπτρισμού
Στοιχείο συμμετρίας

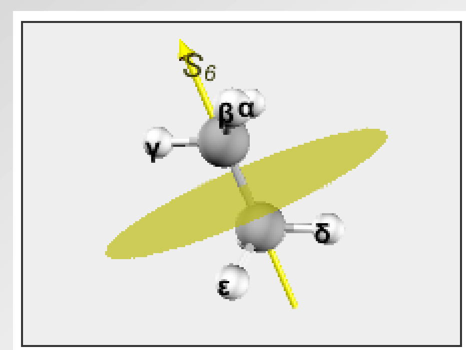
S_n $n = 1, 2, 3, \ldots$

Περιστροφή κατά $2\pi/n$ rad ($360°/n$) και κατοπτρισμός ως προς επίπεδο κάθετο στον άξονα περιστροφής.

n: τάξη άξονα



ΠΡΟΣΟΧΗ: Η ύπαρξη C_n και σ_h είναι **ικανή** αλλά **όχι αναγκαία** συνθήκη για να έχει ένα μόριο άξονα στροφοκατοπτρισμού S_n



Στροφοκατοπτρισμός

Διεργασία

Άξονας στροφοκατοπτρισμού

Στοιχείο συμμετρίας

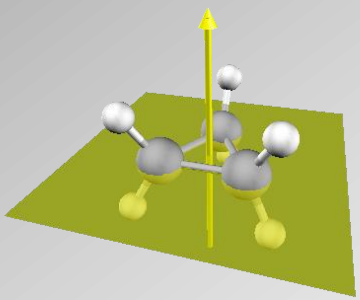
S_n n = 1, 2, 3, …

Περιστροφή κατά 2π/n rad (360°/n) και κατοπτρισμός ως προς επίπεδο κάθετο στον άξονα περιστροφής.

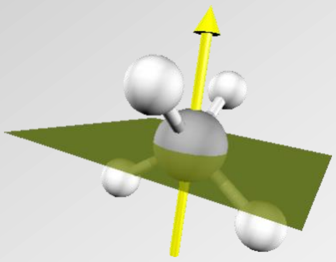
n: τάξη άξονα

Μη κανονική (improper) διεργασία

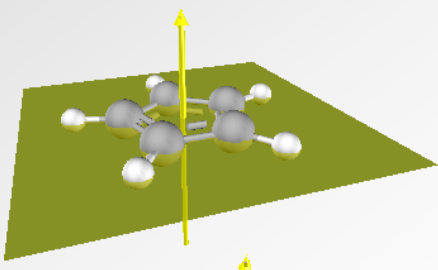
S_3, n=3, φ=2π/3=120°



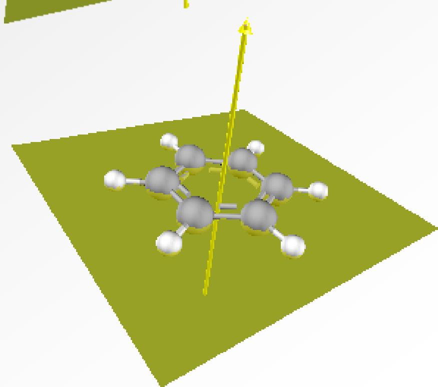
S_4, n=4, φ=π/2=90°



S_5, n=5, φ=2π/5=72°

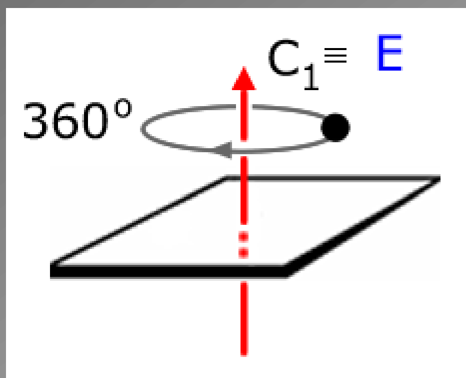


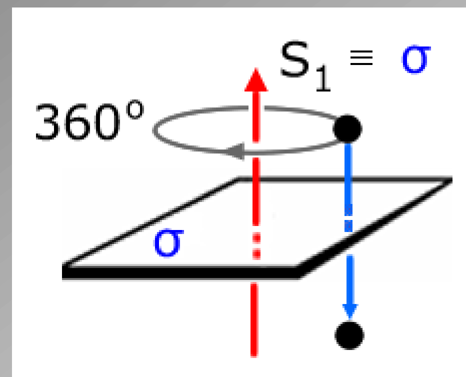
S_6, n=6, φ=π/3=60°

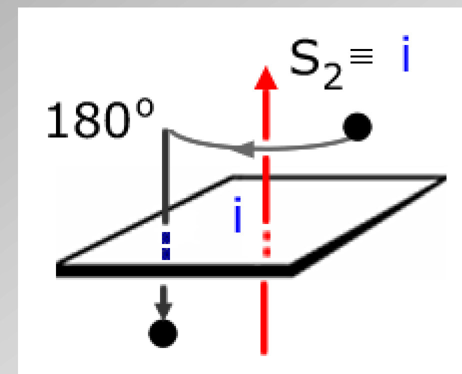


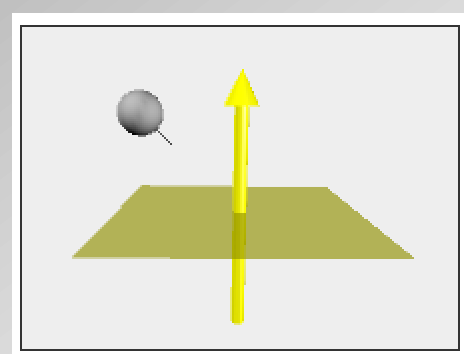
Ισοδυναμία διεργασιών συμμετρίας

$C_1 \equiv E$ $\qquad$ $S_1 \equiv \sigma$ $\qquad$ $S_2 \equiv i$



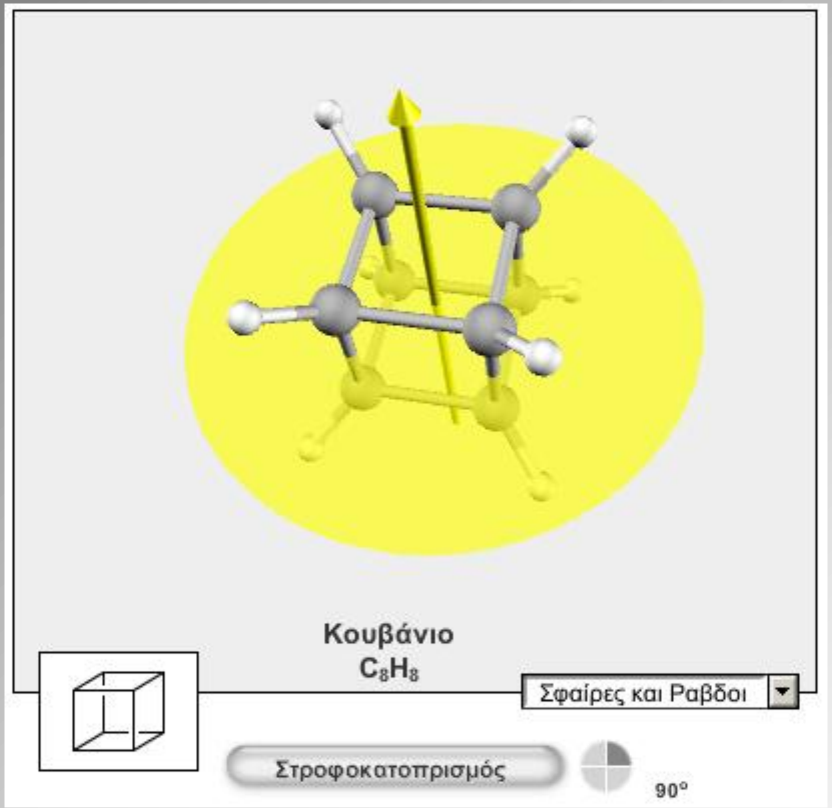






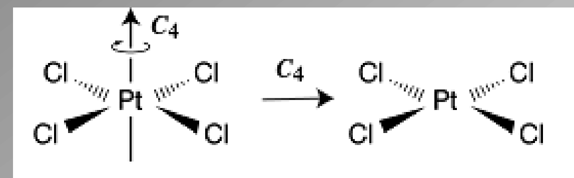
Μοριακή Συμμετρία

Παραδείγματα μορίων με άξονες στροφοκατοπτρισμού

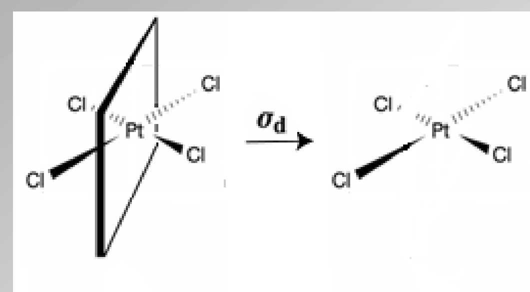


Περιγραφή – οπτικοποίηση διάταξης ατόμων κατά την εφαρμογή των διεργασιών συμμετρίας

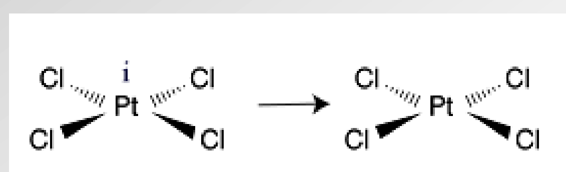
C_n



σ

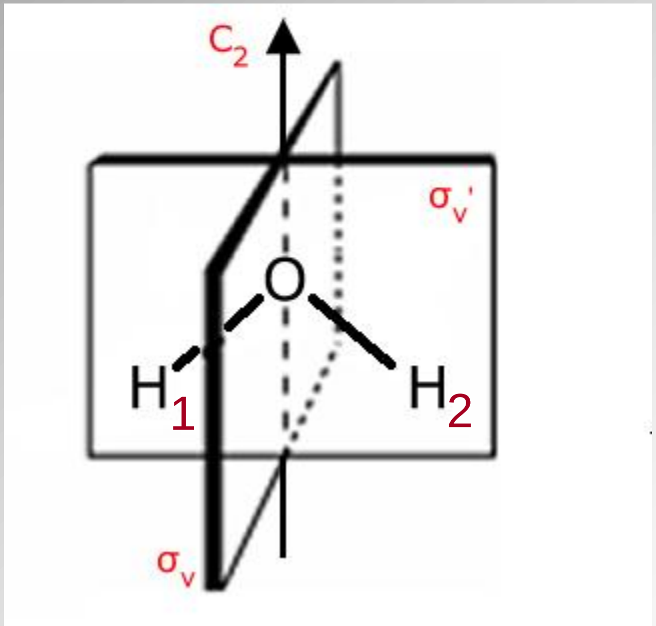


i

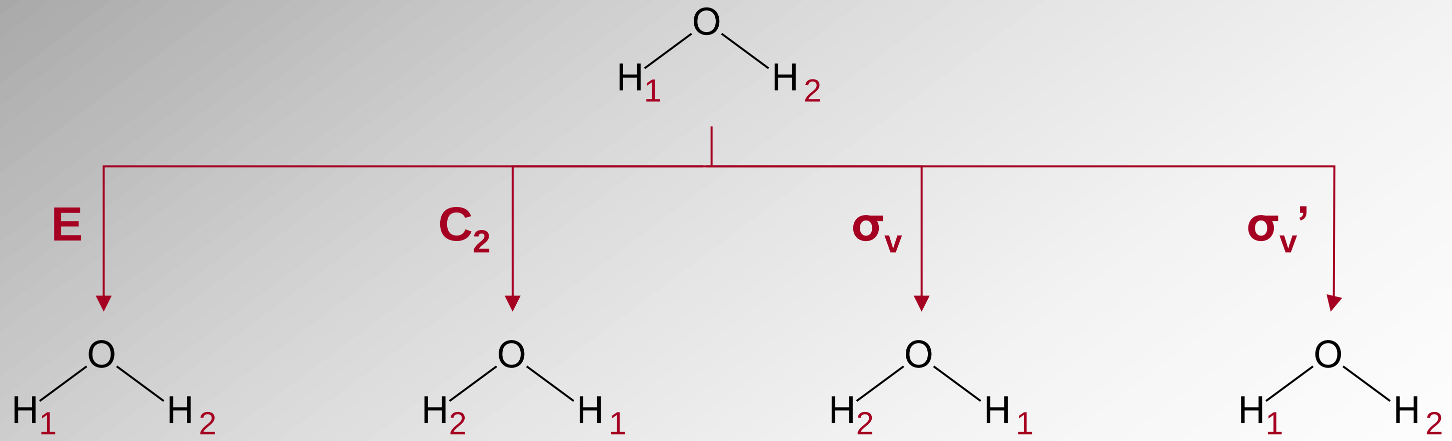


Αποτέλεσμα διεργασιών συμμετρίας

Η **διάταξη στο χώρο** του μορίου πριν και μετά την επίδραση της διεργασίας συμμετρίας ***ταυτίζονται***.



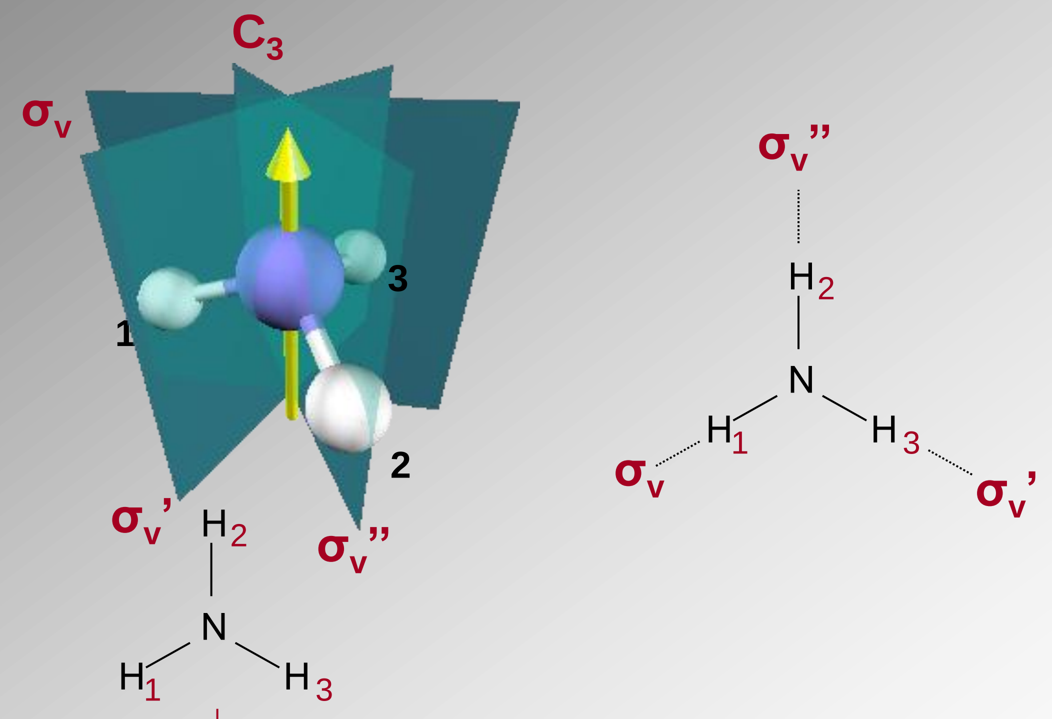
Αλλά πολλές φορές είναι χρήσιμη η διευκρίνιση της τελικής θέσης των ατόμων μετά την επίδραση της διεργασίας συμμετρίας.

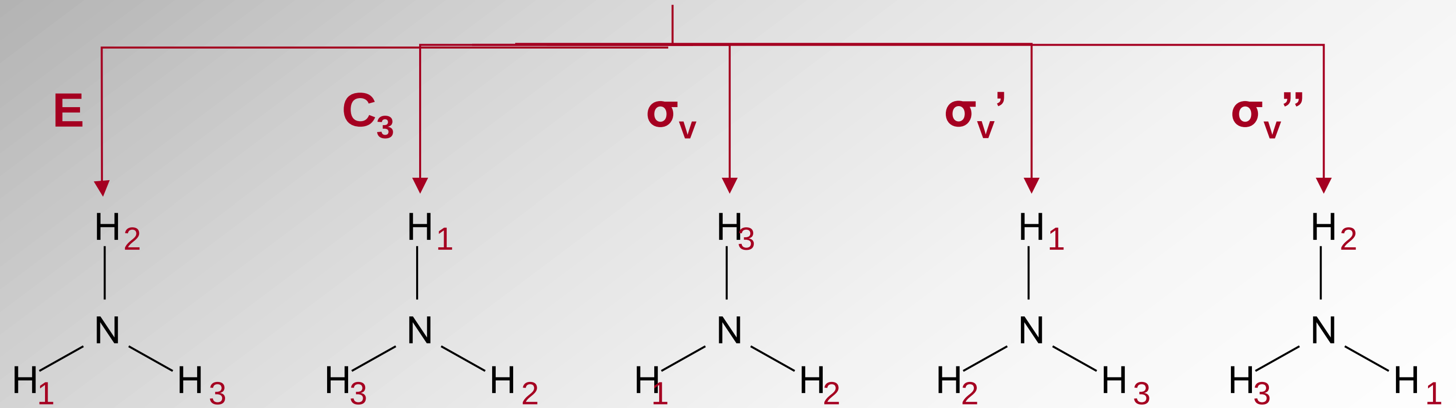


Αποτέλεσμα διεργασιών συμμετρίας

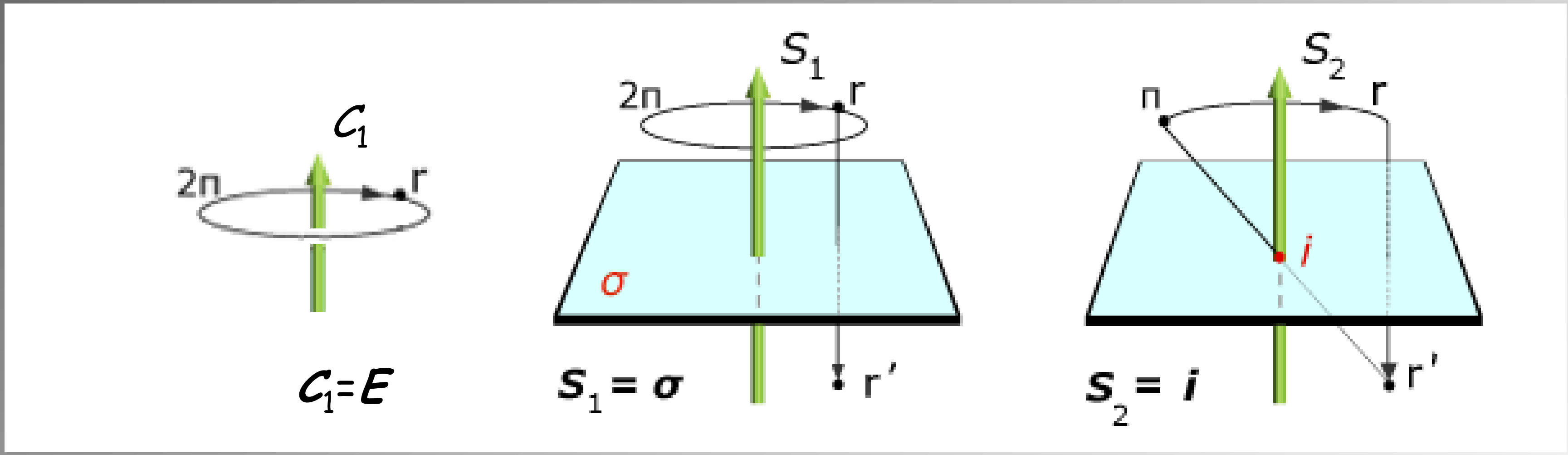
Η **διάταξη στο χώρο** του μορίου πριν και μετά την επίδραση της διεργασίας συμμετρίας ***ταυτίζονται***.

Αλλά πολλές φορές είναι χρήσιμη η διευκρίνιση της τελικής θέσης των ατόμων μετά την επίδραση της διεργασίας συμμετρίας.





Βασικές διεργασίες



Περιστροφή C_n

Στροφοκατοπτρισμός S_n

Συνδυασμός διεργασιών συμμετρίας

Γινόμενο τελεστών συμμετρίας

$$\hat{Y} \cdot \hat{X} = \hat{Z}$$

X, Y, Z: Διεργασίες συμμετρίας ενός μορίου

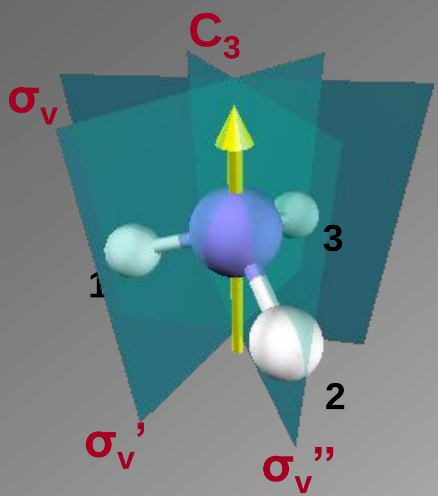
$$Y \cdot X \cdot (\text{Μόριο}) = Z \cdot (\text{Μόριο})$$

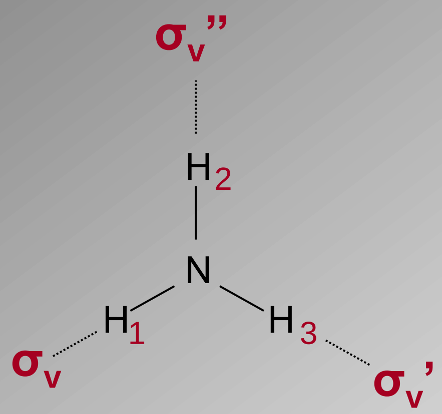
Η επίδραση του X και στη συνέχεια επίδραση του Y έχουν σαν αποτέλεσμα την ίδια σχετική θέση των ατόμων του μορίου με την επίδραση του Z

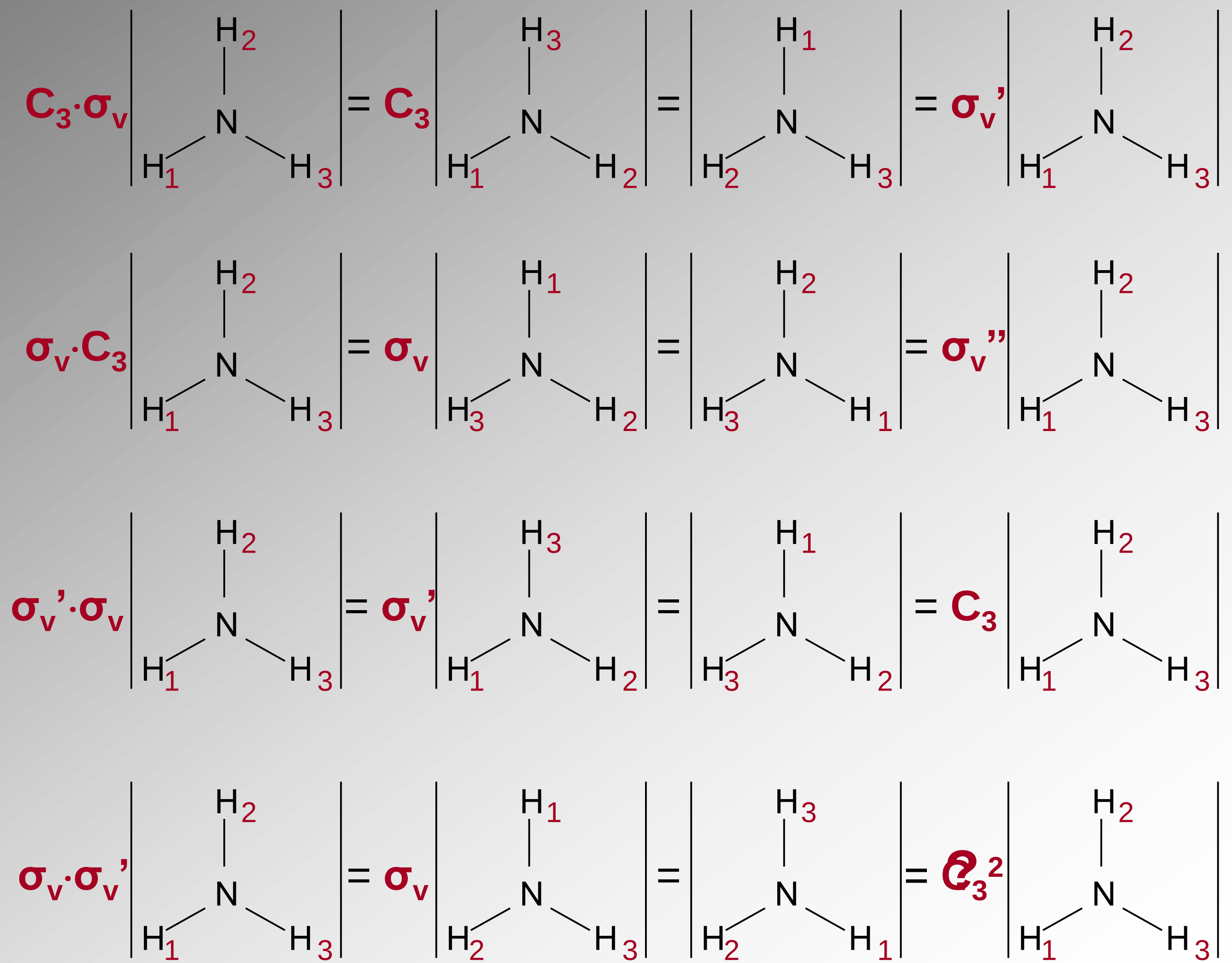
Δεν ισχύει πάντα η αντιμεταθετική ιδιότητα

$$X \cdot Y \neq Y \cdot X$$

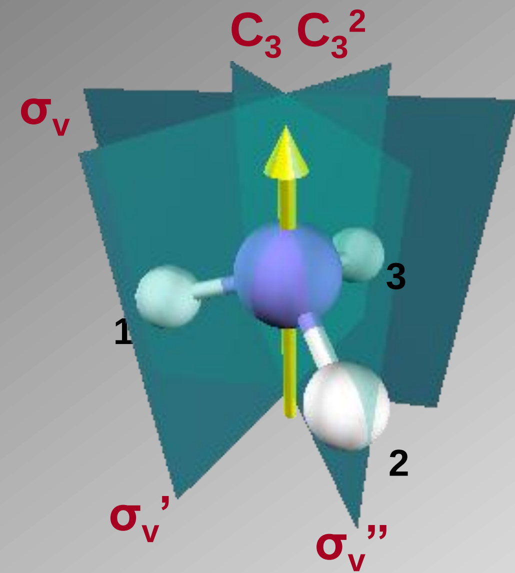
Συνδυασμός διεργασιών συμμετρίας

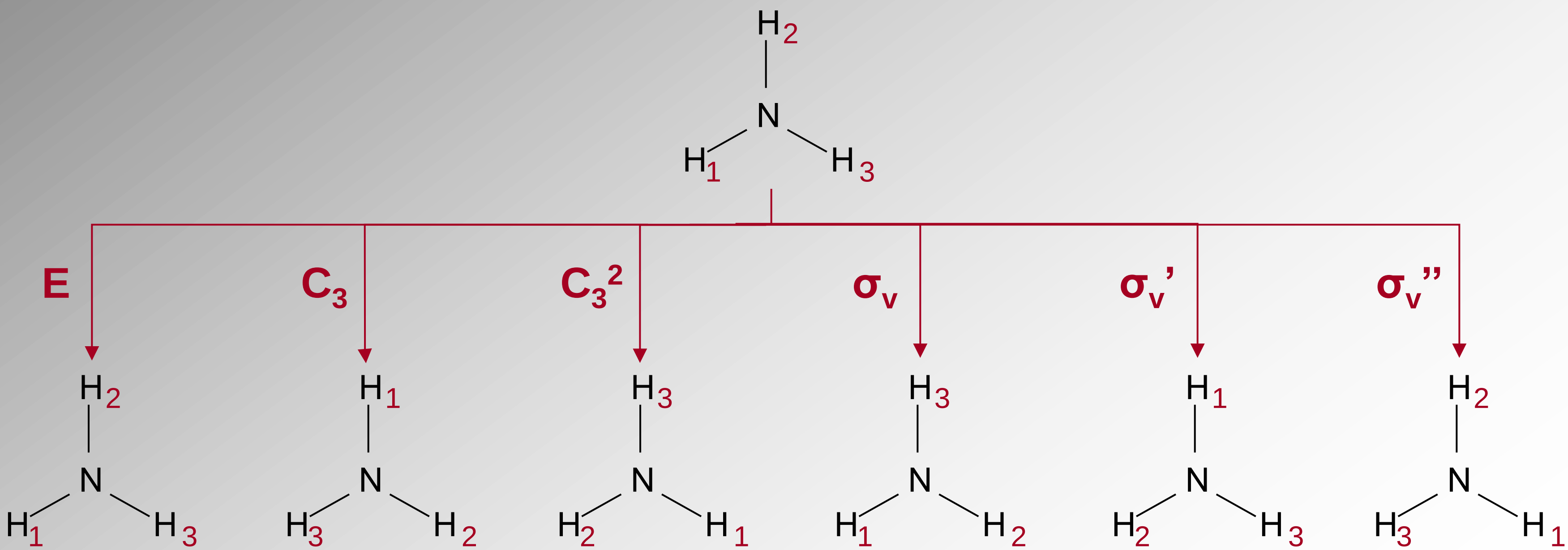






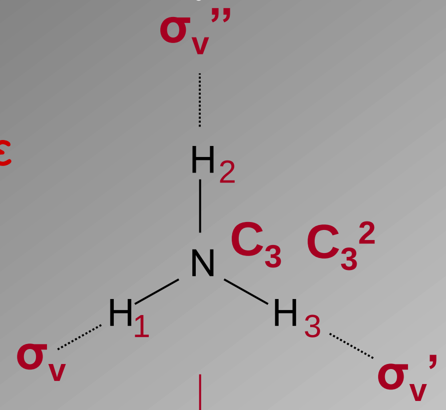
Όλα τα στοιχεία συμμετρίας του μορίου NH_3

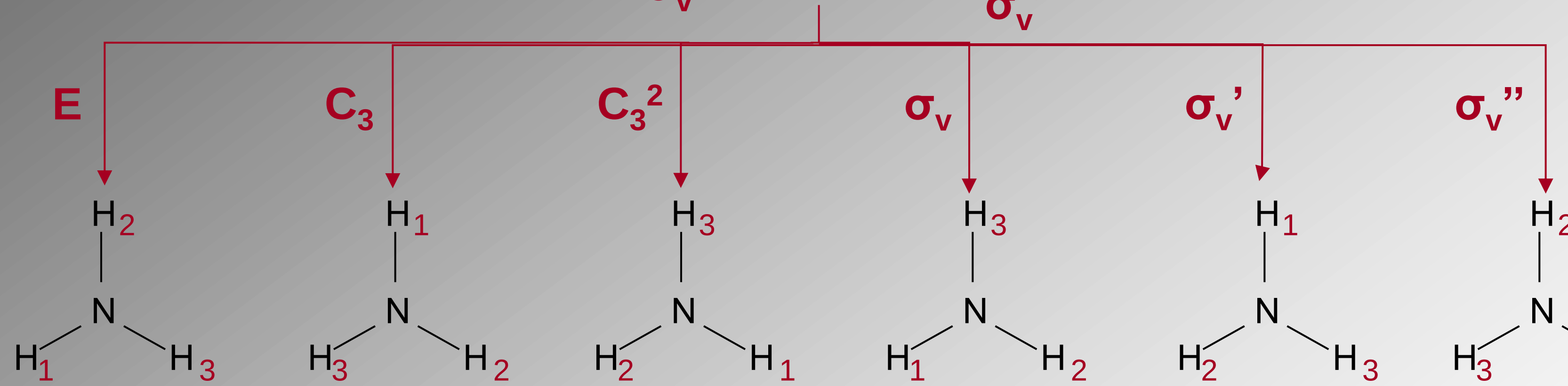




Πίνακας πολλαπλασιασμού διεργασιών

Ο συνδυασμός διεργασιών συμμετρίας ισοδυναμεί πάντα με μια άλλη διεργασία συμμετρίας του μορίου.





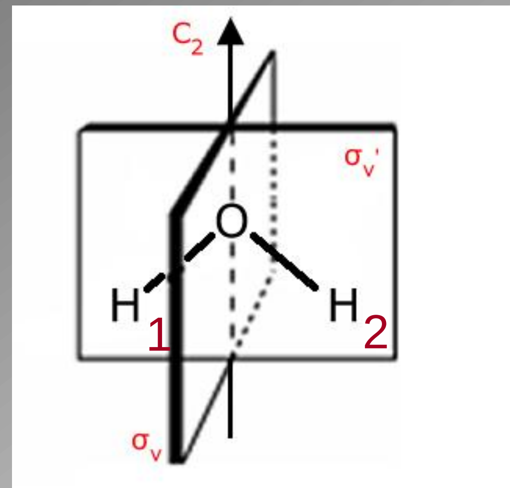
Πίνακας πολλαπλασιασμού

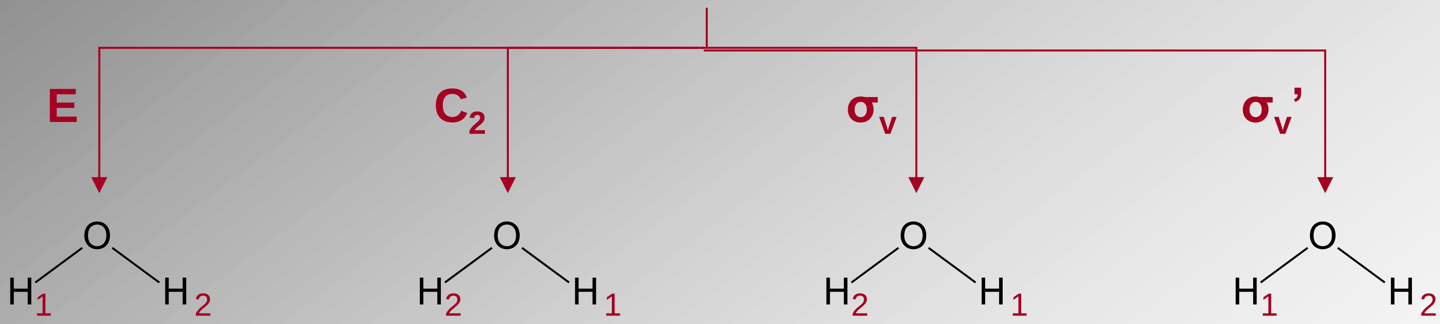
	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	EE	C_3E	C_3^2E	σ_vE	$\sigma_v'E$	$\sigma_v''E$
C_3	EC_3	C_3C_3	$C_3^2C_3$	σ_vC_3	$\sigma_v'C_3$	$\sigma_v''C_3$
C_3^2	EC_3^2	$C_3C_3^2$	$C_3^2C_3^2$	$\sigma_vC_3^2$	$\sigma_v'C_3^2$	$\sigma_v''C_3^2$
σ_v	$E\sigma_v$	$C_3\sigma_v$	$C_3^2\sigma_v$	$\sigma_v\sigma_v$	$\sigma_v'\sigma_v$	$\sigma_v''\sigma_v$
σ_v'	$E\sigma_v'$	$C_3\sigma_v'$	$C_3^2\sigma_v'$	$\sigma_v\sigma_v'$	$\sigma_v'\sigma_v'$	$\sigma_v''\sigma_v'$
σ_v''	$E\sigma_v''$	$C_3\sigma_v''$	$C_3^2\sigma_v''$	$\sigma_v\sigma_v''$	$\sigma_v'\sigma_v''$	$\sigma_v''\sigma_v''$

	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v'	σ_v''	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	C_3^2	E

Πίνακας πολλαπλασιασμού διεργασιών

Ο συνδυασμός διεργασιών συμμετρίας ισοδυναμεί *πάντα με μια άλλη διεργασία συμμετρίας του μορίου*.





Πίνακας πολλαπλασιασμού

	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	EE	C_2E	σ_vE	$\sigma_v'E$
C_2	EC_2	C_2C_2	σ_vC_2	$\sigma_v'C_2$
σ_v	$E\sigma_v$	$C_2\sigma_v$	$\sigma_v\sigma_v$	$\sigma_v'\sigma_v$
σ_v'	$E\sigma_v'$	$C_2\sigma_v'$	$\sigma_v\sigma_v'$	$\sigma_v'\sigma_v'$

	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	E

Διεργασίες – τελεστές συμμετρίας X^m

$$X \cdot X \cdot X \cdot\cdot\cdot = X^m, m = 1, \infty$$

Δεν είναι παρά συνδυασμοί μιας διεργασίας συμμετρίας με τον εαυτό της.
π.χ $X \cdot X = X^2$

Συνεπώς θα ισοδυναμούν με μια διεργασία του μορίου.
π.χ. αν X είναι μια διεργασία ενός μορίου τότε
$X^2 = X \cdot X = Y$, όπου Y είναι διεργασία συμμετρίας του μορίου.
$X^3 = X \cdot X \cdot X = X^2 \cdot X = Y \cdot X = Z$, όπου Z είναι διεργασία συμμετρίας του μορίου.

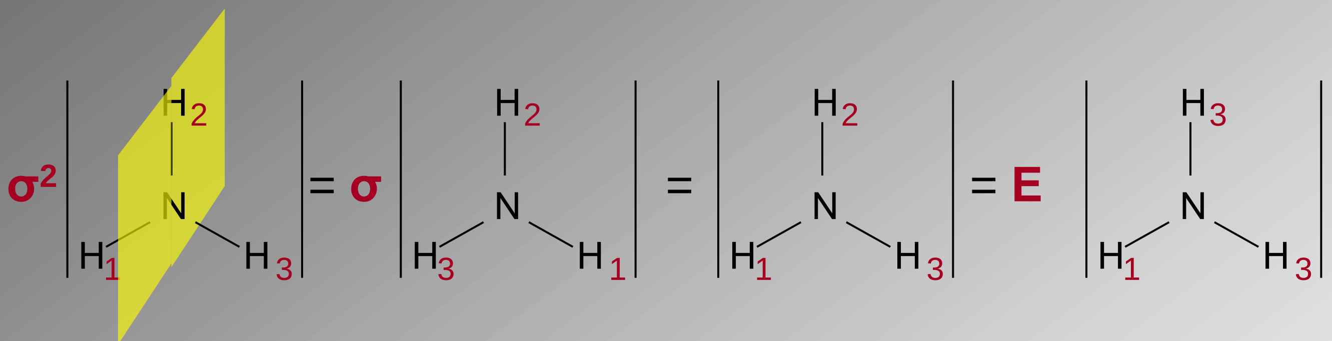
$m = 1, \infty$. Οι διεργασίες συμμετρίας είναι άπειρες;

Διεργασίες – τελεστές συμμετρίας X^m

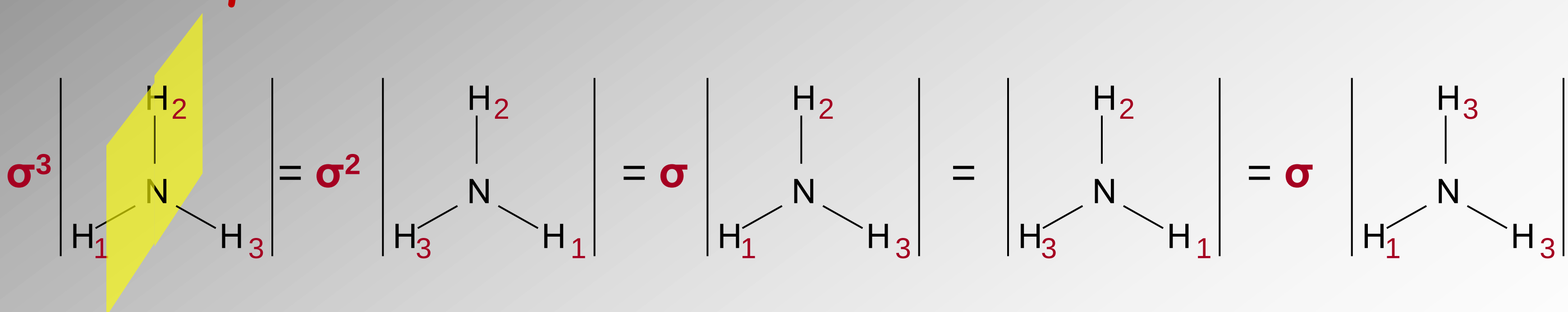
$$X \cdot X \cdot X \cdot \cdot \cdot = X^m$$

Επίπεδα συμμετρίας σ^m (Κατοπτρισμός)

m = άρτιο: $\sigma^m = E$



m = περιττό: $\sigma^m = \sigma$



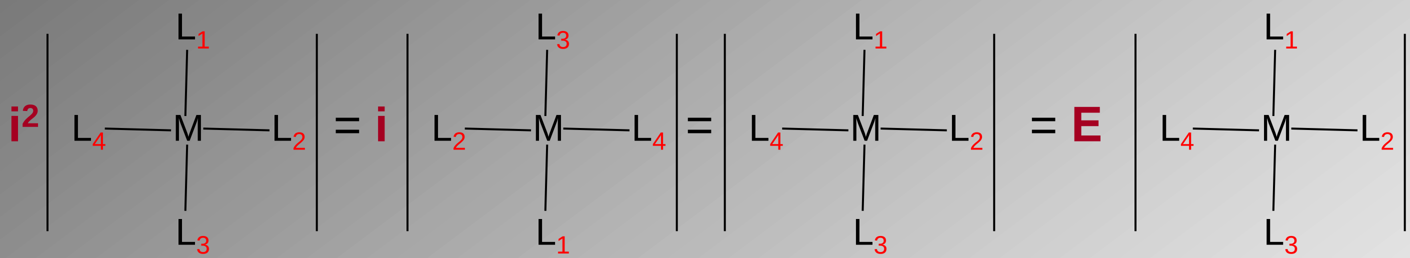
Μοριακή Συμμετρία

Διεργασίες – τελεστές συμμετρίας X^m

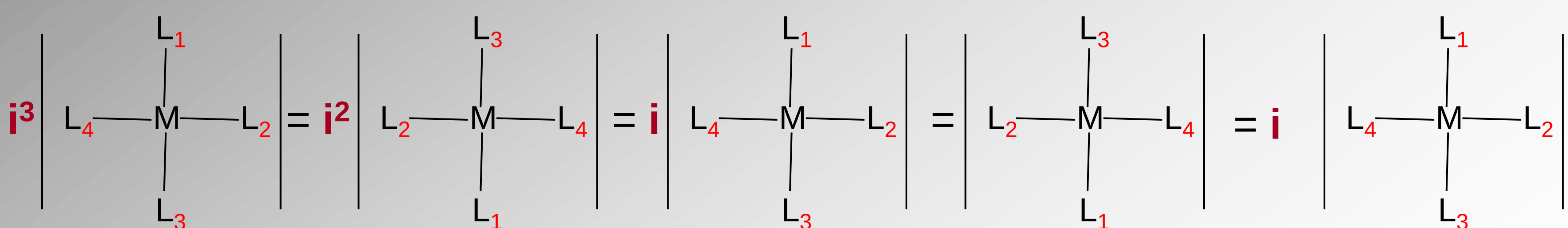
$$X \cdot X \cdot X \cdot \cdot \cdot = X^m$$

Κέντρο συμμετρίας i^m (Αναστροφή)

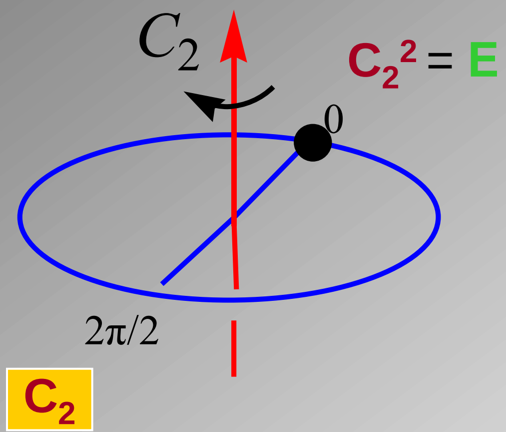
m = άρτιο: $i^m = E$

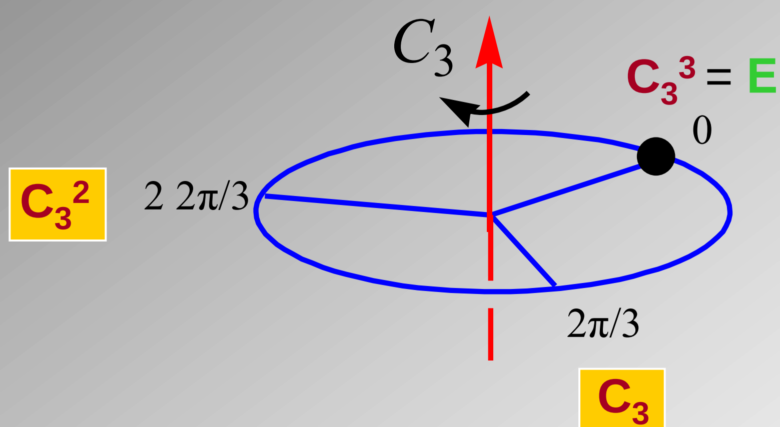


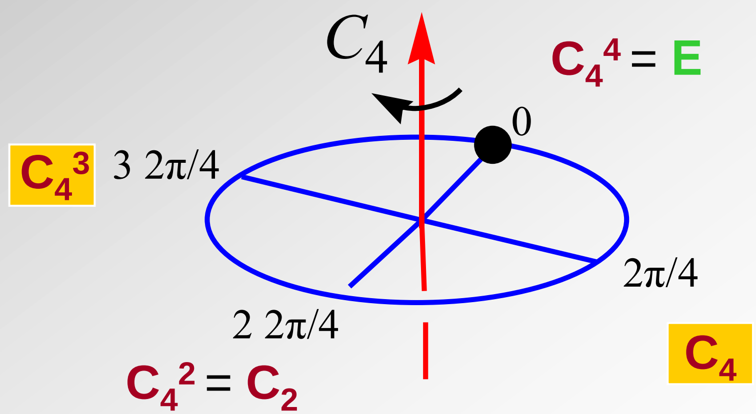
m = περιττό: $i^m = i$



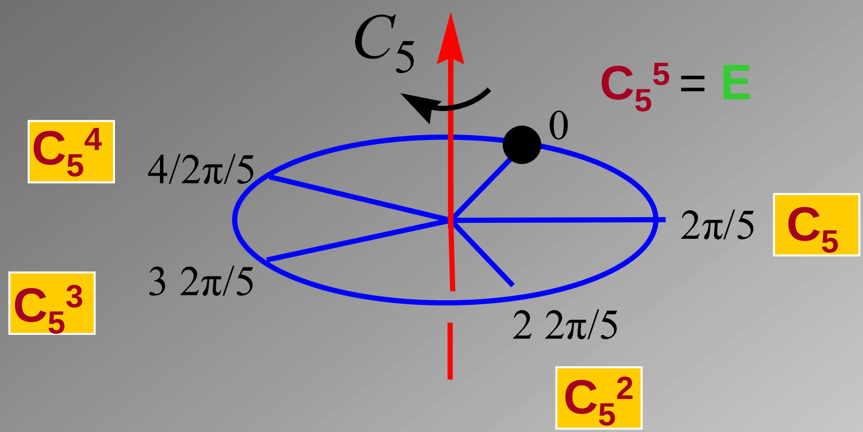
Άξονες περιστροφής C_n^m (περιστροφή κατά m360°/n)

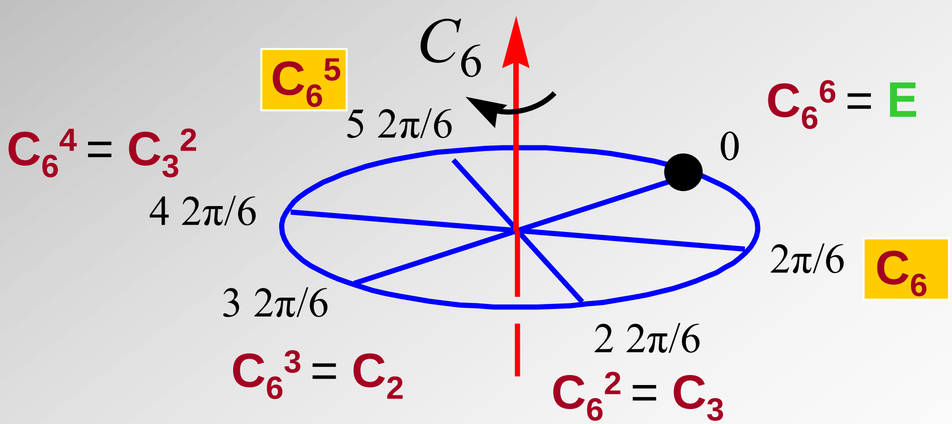






Άξονες περιστροφής C_n^m (περιστροφή κατά m360°/n)





Άξονες περιστροφής C_n^m (περιστροφή κατά m360°/n)

Συμπερασματικά από τα παραπάνω ευρήματα προκύπτει ότι η δύναμη C_n^m ισοδυναμεί ...

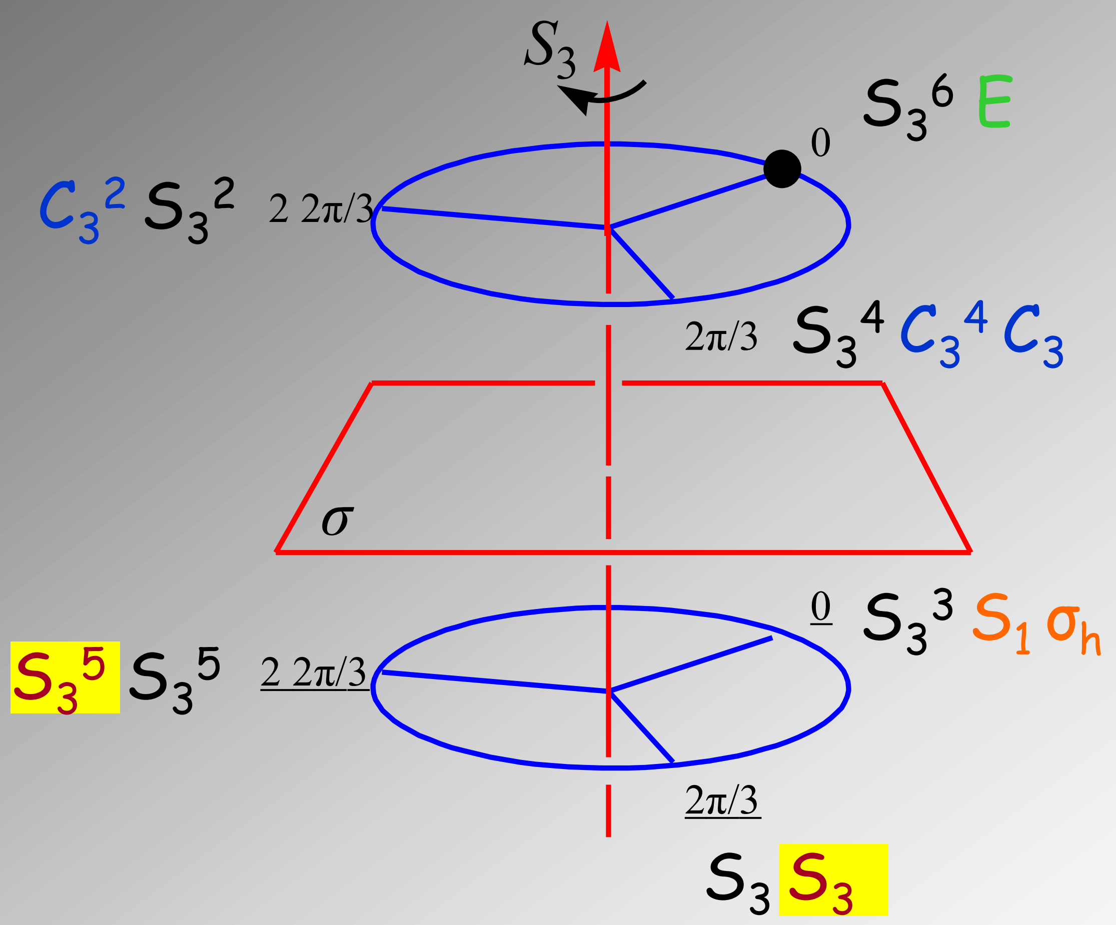
1. Με μια άλλη διεργασία περιστροφής μικρότερης τάξης του μορίου όταν τα *n* και *m* έχουν ακέραιο μέγιστο κοινό διαιρέτη *d* και συγκεκριμένα με τη διεργασία $C_{n/d}^{m/d}$,

2. Με μια νέα διεργασία του μορίου, C_n^m, όταν τα *n* και *m* δεν έχουν ακέραιο κοινό διαιρέτη και

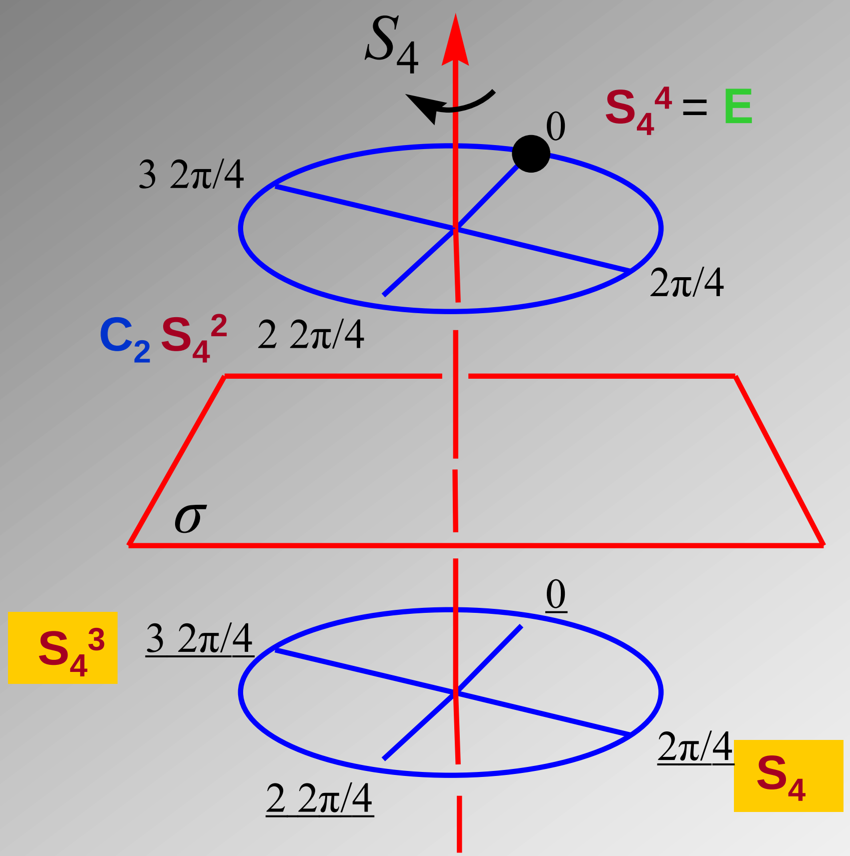
3. Την ταυτότητα, ***E***, όταν $m=n$.

Τέλος, είναι προφανές ότι δυνάμεις C_n^m για $m>n$ ισοδυναμούν με C_n^{m-n}

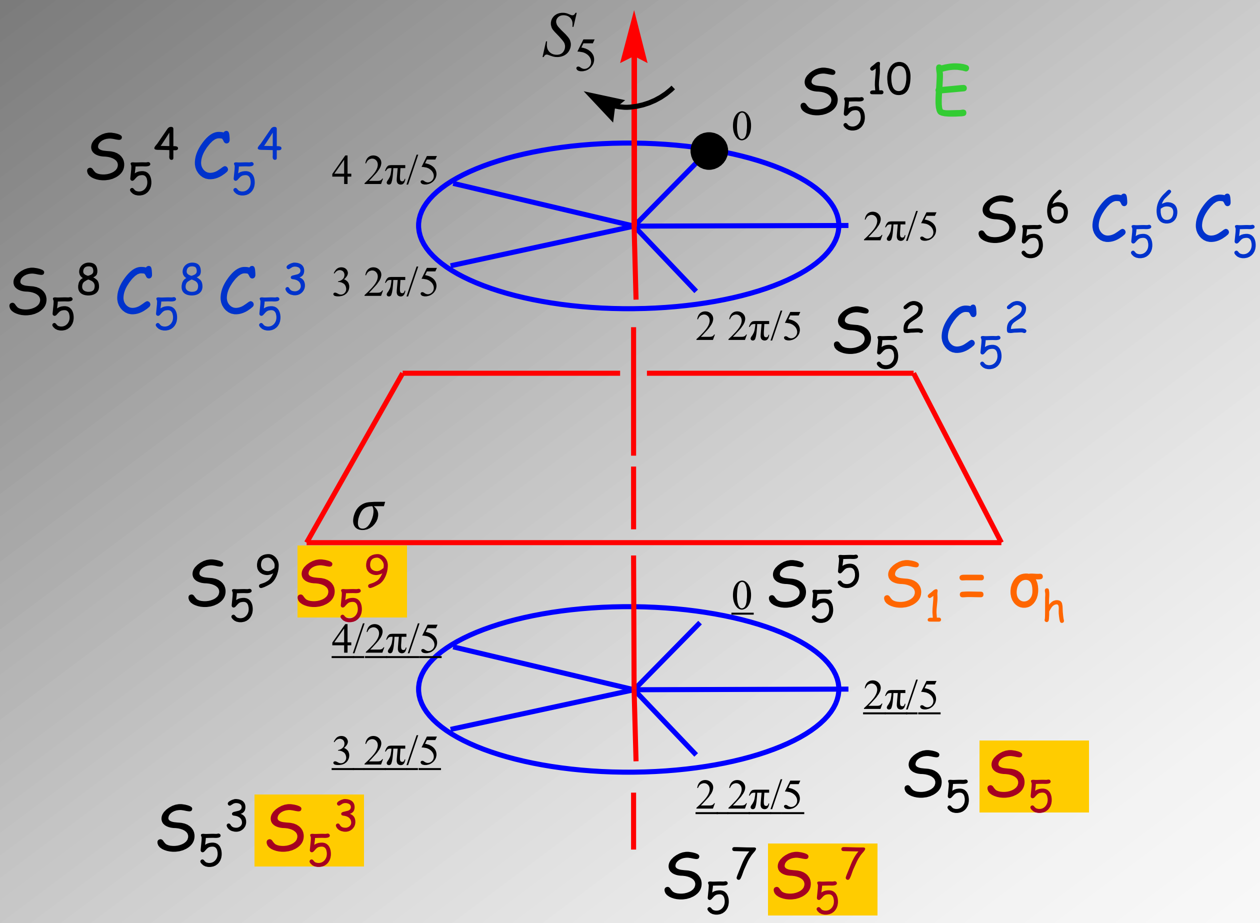
Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^m



Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^m



Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^m



Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^m

S_6	S_6^2	S_6^3	S_6^4	S_6^5	S_6^6
S_6	C_6^2	S_2	C_6^4	S_6^5	E
	C_3	i	C_3^2		

S_8	S_8^2	S_8^3	S_8^4	S_8^5	S_8^6	S_8^7	S_8^8
S_8	C_8^2	S_8^3	C_8^4	S_8^5	C_8^6	S_8^7	E
	C_4		C_2		C_4^3		

S_{12}	S_{12}^2	S_{12}^3	S_{12}^4	S_{12}^5	S_{12}^6	S_{12}^7	S_{12}^8	S_{12}^9	S_{12}^{10}	S_{12}^{11}	S_{12}^{12}
S_{12}	C_{12}^2	S_{12}^3	C_{12}^4	S_{12}^5	C_{12}^6	S_{12}^7	C_{12}^8	S_{12}^9	C_{12}^{10}	S_{12}^{11}	E
	C_6	S_4	C_3		C_2		C_3^2	S_4^3	C_6^5		

Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^m

Κατά την ανάλυση των δυνάμεων του στροφοκατοπτρισμού, S_n^m, το *άρτιο* ή *περιττόν* των αριθμών *n* και *m* έχει ιδιαίτερη σημασία. Έτσι, μπορούν να διατυπωθούν οι παρακάτω κανόνες.

Για *n* άρτιο: $S_n^n = E$ $\quad S_n^2 = C_{n/2}$ $\quad$ για $m>n$: $S_n^m = S_n^{n-m}$

Για *n* περιττό: $S_n^n = \sigma_h$ $\quad S_n^{2n} = E$ $\quad$ για $m>2n$: $S_n^m = S_n^{2n-m}$

Για *m* άρτιο: $S_n^m = C_n^m$

Για *m* περιττό: $S_n^m = S_n^m$ $\quad$ για $m=n/2$: $S_n^{n/2} = i$

Γενεσιουργές και παράγωγες διεργασίες

Σε κάθε μόριο υπάρχει μια σειρά διεργασιών από τους συνδυασμούς και δυνάμεις των οποίων προκύπτουν οι υπόλοιπες διεργασίες. Οι διεργασίες αυτές καλούνται *γενεσιουργές διεργασίες* και αυτές που προκύπτουν παράγωγες διεργασίες.

Γενεσιουργός διεργασία	Παράγωγες διεργασίες	
	Απλές	Δυνάμεις
C_1	E	
C_2	E	
C_3	E	C_3^2
C_4	E, C_2	C_4^3
C_5	E	C_5^2, C_5^3, C_5^4
C_6	E, C_2, C_3	C_3^2, C_6^5
S_1	E, σ	
S_2	E, i	
S_3	E, C_3, σ_h	C_3^2, S_3^5
S_4	E, C_2	S_4^3
S_5	E, C_5, σ_h	C_5^3, C_5^4, S_5^3, S_5^7, S_5^9
S_6	E, C_3, i	C_3^2, C_6^5
S_8	E, C_2, C_4	C_4^3, S_8^3, S_8^5, S_8^7
S_{10}	E, C_5, i	C_5^2, C_5^3, C_5^4, S_{10}^3, S_{10}^5, S_{10}^7
S_{12}	E, C_2, C_3, C_6	C_3^2, C_6^5, S_4^3, S_{12}^5, S_{12}^7, S_{12}^{11}

Αντίστροφες διεργασίες συμμετρίας X^{-1}

Επίπεδα συμμετρίας σ^{-1}

$$\sigma^{-1} = \sigma$$

Κέντρο συμμετρίας i^{-1}

$$i^{-1} = i$$

Άξονες περιστροφής C_n^{-1}

$$C_n^{-1} = C_n^{n-1}$$

Άξονες στροφοκατοπτρισμού S_n^{-1}

n=άρτιος, $S_n^{-1} = S_n^{n-1}$

n=περιττός, $S_n^{-1} = S_n^{2n-1}$

Περιγραφή της συμμετρίας ενός μορίου

Η συμμετρία ενός μορίου (αντικειμένου) περιγράφεται από μια σειρά στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας τα οποία είναι συνήθως εμφανή (π.χ. C_n, σ, i)

Επίσης περιγράφεται και από τις διεργασίες Ζ που προκύπτουν από το συνδυασμό των διεργασιών συμμετρίας ($X \cdot Y = Z$).

Αλλά και από τις διεργασίες που προκύπτουν από την ύψωση σε οποιαδήποτε δύναμη των διεργασιών συμμετρίας (X^m).

Το τελικό σύνολο των διεργασιών συμμετρίας αποτελούν την **ομάδα σημείου** του μορίου η οποία και χαρακτηρίζει το μόριο.

Σημείο:
Όλα τα στοιχεία συμμετρίας ενός μορίου έχουν ένα τουλάχιστον σημείο κοινό.

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (1/2)

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,* 3rd 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, 2nd 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,* 4th Ed., Springer-Verlag, New York, 1999.

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (2/2)

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 ΙΙ: 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

Σημείωμα Αδειοδότησης

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

Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Ιππολύτη Γκουντενούδη - Εσκιτζή

Θεσσαλονίκη, Ιούλιος 2015

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης