

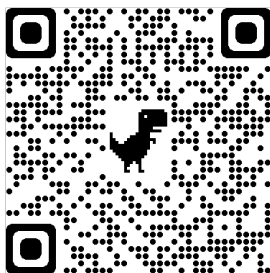
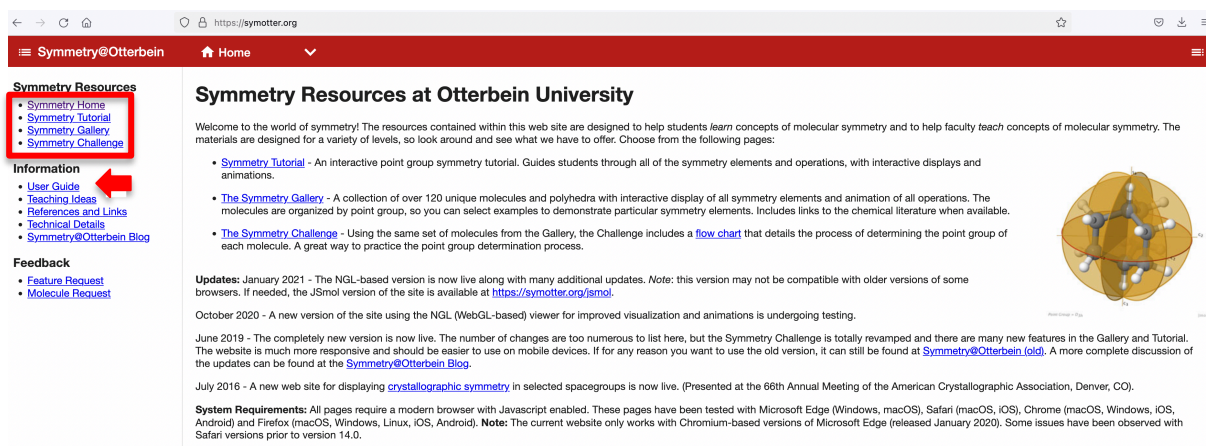
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre ***Symmetry@Otterbein***
(Página Web de Simetría Molecular de la Universidad de Otterbein)
<https://symotter.org/>

José Ruiz López

Se trata de una página web desarrollada por el Prof. Dean H. Johnston de la Universidad de Otterbein, Westerville (Ohio, USA). Está diseñada para ayudar a los estudiantes a aprender simetría molecular y a ayudar a los profesores a enseñar estos conceptos. Es utilizada por miles de estudiantes y profesores a nivel mundial. Proporciona una larga lista de moléculas y permite visualizar sus elementos y operaciones de simetría.

El aspecto de la página principal es el siguiente:



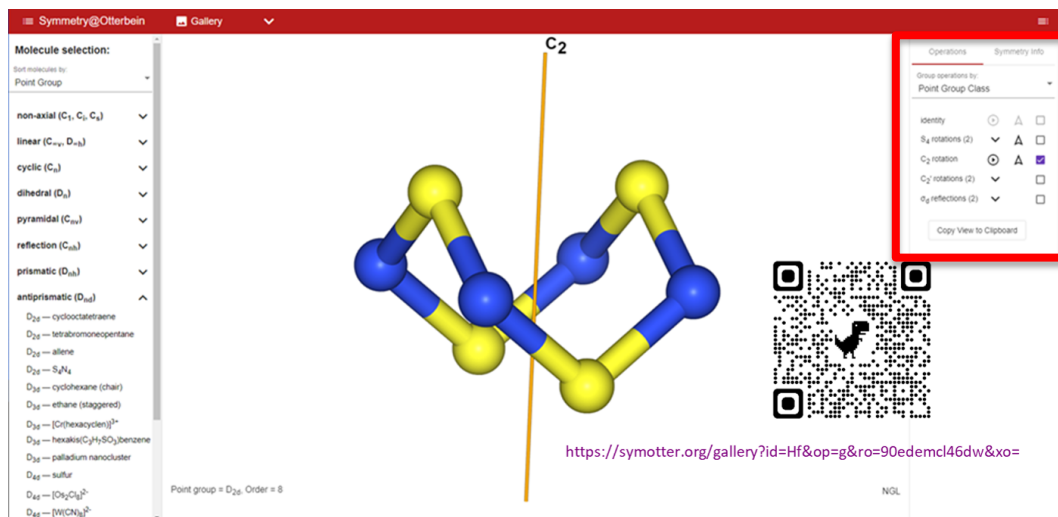
Este recurso incluye unas breves instrucciones para su manejo (en el apartado **User Guide**, <https://symotter.org/info/guide>) y está dividido en tres partes: i) “**Symmetry Tutorial**”, ii) “**The Symmetry Gallery**” y iii) “**The Symmetry Challenge**”, que se describen a continuación.

a) “Symmetry Tutorial”

Este apartado explica los distintos elementos y operaciones de simetría, apoyándose en ejemplos interactivos y animados.

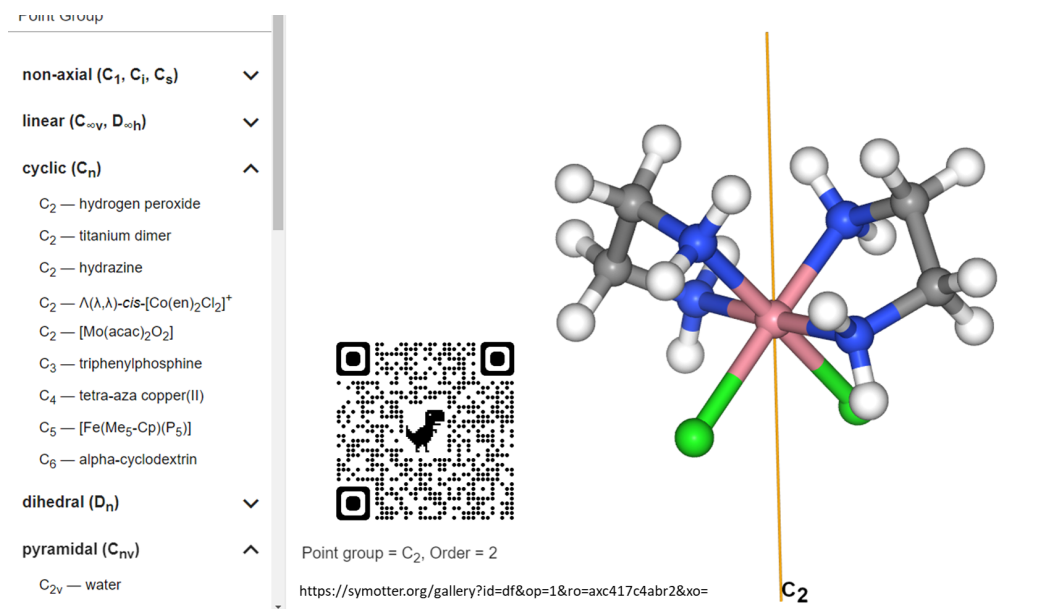
b) “**The Symmetry Gallery**”. Este apartado incluye cerca de 120 moléculas y poliedros con demostración interactiva de todos sus elementos de simetría, así como la animación de todas las operaciones de simetría. Las moléculas están ordenadas por grupo puntual, así que se puede elegir los ejemplos que interesen para visualizar elementos de simetría concretos. A continuación, se muestran algunos ejemplos.

- **Point group $D_{2d} - S_4N_4$**



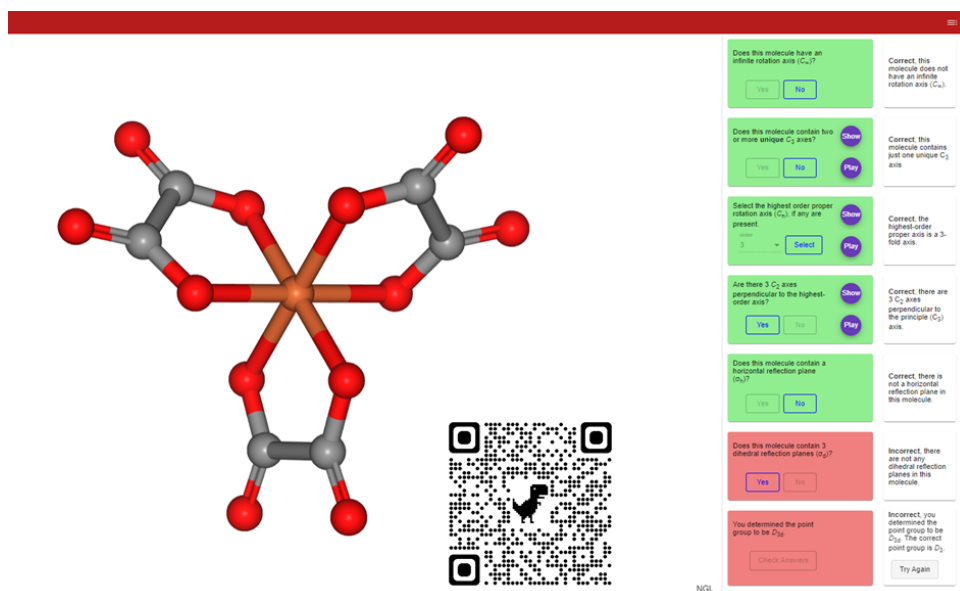
En el margen superior derecho, aparecen unas casillas que permiten seleccionar un elemento de simetría para visualizarlo en la pantalla.

- **Point group $C_2 - \Lambda(\lambda,\lambda)\text{-cis-[Co(en)}_2\text{Cl}_2]^+$**



c) “**The Symmetry Challenge**”: empleando las mismas moléculas incluidas en “The Symmetry Gallery”, este apartado fomentará la autoevaluación del alumnado en la determinación del grupo puntual al que pertenece cada molécula.

Elegimos una molécula y vamos contestando las preguntas sobre simetría que nos plantea la aplicación. Una vez terminado el ejercicio, la página nos lo corrige indicando en qué paso o pasos nos hemos equivocado y proporcionándonos las respuestas correctas.

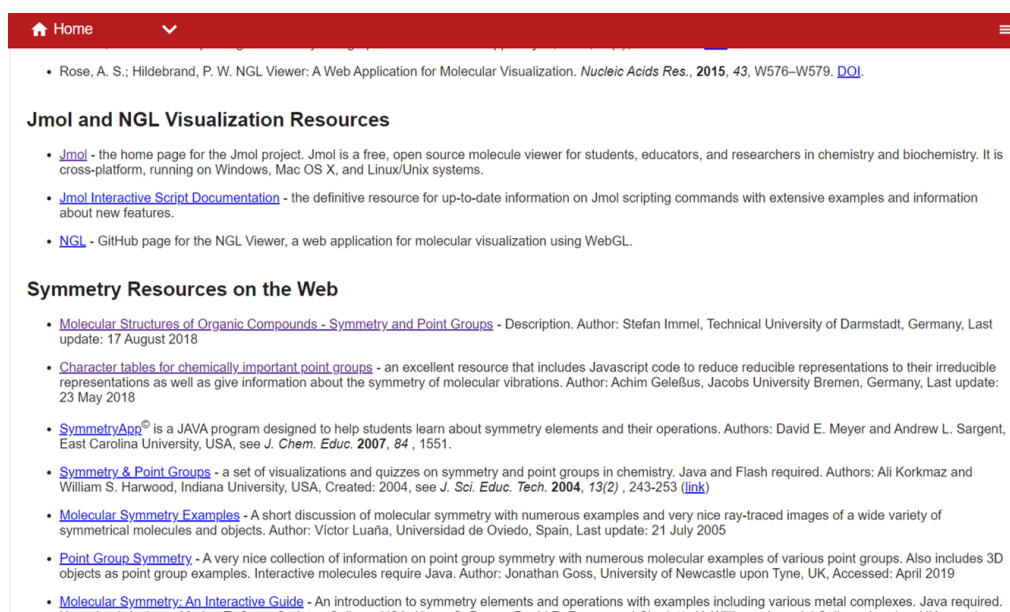


The screenshot displays the NGL Viewer interface. On the left is a 3D ball-and-stick model of a complex organic molecule. To its right is a QR code. On the far right is a vertical column of seven interactive questions about the molecule's symmetry, each with a 'Show' button and a 'Play' button. The questions and their feedback are as follows:

- Question: "Does this molecule have an infinite rotation axis (C_∞)?" Answer: No. Feedback: "Correct, this molecule does not have an infinite rotation axis (C_∞)."
- Question: "Does this molecule contain two or more unique C_2 axes?" Answer: No. Feedback: "Correct, this molecule contains just one unique C_2 axis."
- Question: "Select the highest order proper rotation axis (C_n) if any are present." Answer: 3. Feedback: "Correct, the highest-order proper axis is a 3-fold axis."
- Question: "Are there 3 C_2 axes perpendicular to the highest-order axis?" Answer: No. Feedback: "Correct, there are 3 C_2 axes perpendicular to the principle (C_3) axis."
- Question: "Does this molecule contain a horizontal reflection plane (σ_h)?" Answer: No. Feedback: "Correct, there is not a horizontal reflection plane in this molecule."
- Question: "Does this molecule contain 3 oblique reflection planes (σ_d)?" Answer: No. Feedback: "Incorrect, there are not an oblique reflection planes in this molecule."
- Question: "You determined the point group to be C_{3v} . Check Answers." Feedback: "Incorrect, you determined the point group to be C_{3v} . The correct point group is C_{3h} . Try Again."

Estas páginas son compatibles con Macs y PCs, así como con dispositivos móviles. Requieren navegadores modernos que deben tener habilitado JavaScript. Se ha comprobado su funcionamiento correcto con Microsoft Edge (Windows, macOS), Safari (macOS, iOS), Chrome (macOS, Windows, iOS, Android) y Firefox (macOS, Windows, Linux, iOS, Android)

Dispone de una guía de instrucciones en inglés (<https://symotter.org/info/guide>). De esta manera, su uso también fomentará el dominio de este idioma. Además, este recurso incluye una lista de páginas web de interés (<https://symotter.org/info/refs>).



The screenshot shows a web page titled "Symmetry Resources on the Web" with a navigation bar at the top containing a home icon and a dropdown menu. The page lists several resources:

- Rose, A. S.; Hildebrand, P. W. NGL Viewer: A Web Application for Molecular Visualization. *Nucleic Acids Res.*, 2015, 43, W576–W579. DOI
- Jmol and NGL Visualization Resources**
 - Jmol - the home page for the Jmol project. Jmol is a free, open source molecule viewer for students, educators, and researchers in chemistry and biochemistry. It is cross-platform, running on Windows, Mac OS X, and Linux/Unix systems.
 - Jmol Interactive Script Documentation - the definitive resource for up-to-date information on Jmol scripting commands with extensive examples and information about new features.
 - NGL - GitHub page for the NGL Viewer, a web application for molecular visualization using WebGL.
- Symmetry Resources on the Web**
 - Molecular Structures of Organic Compounds - Symmetry and Point Groups - Description. Author: Stefan Immel, Technical University of Darmstadt, Germany, Last update: 17 August 2018
 - Character tables for chemically important point groups - an excellent resource that includes Javascript code to reduce reducible representations to their irreducible representations as well as give information about the symmetry of molecular vibrations. Author: Achim Gelešus, Jacobs University Bremen, Germany, Last update: 23 May 2018
 - SymmetryApp[®] is a JAVA program designed to help students learn about symmetry elements and their operations. Authors: David E. Meyer and Andrew L. Sargent, East Carolina University, USA, see *J. Chem. Educ.* 2007, 84, 1551.
 - Symmetry & Point Groups - a set of visualizations and quizzes on symmetry and point groups in chemistry. Java and Flash required. Authors: Ali Korkmaz and William S. Harwood, Indiana University, USA, Created: 2004, see *J. Sci. Educ. Tech.* 2004, 13(2), 243-253 (link)
 - Molecular Symmetry Examples - A short discussion of molecular symmetry with numerous examples and very nice ray-traced images of a wide variety of symmetrical molecules and objects. Author: Victor Luña, Universidad de Oviedo, Spain, Last update: 21 July 2005
 - Point Group Symmetry - A very nice collection of information on point group symmetry with numerous molecular examples of various point groups. Also includes 3D objects as point group examples. Interactive molecules require Java. Author: Jonathan Goss, University of Newcastle upon Tyne, UK, Accessed: April 2019
 - Molecular Symmetry: An Interactive Guide - An introduction to symmetry elements and operations with examples including various metal complexes. Java required. Max J. Cantow, Merton College, Oxford, UK; David P. Bates, David P. Bates, and Sheldrick, William, Imperial College, London, UK, 2004