

## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre *Symmetry*

Herramienta Web de Química, de la Jacobs University Bremen (Alemania)

<http://symmetry.jacobs-university.de/>

Juan Gil Rubio

Este sitio proporciona herramientas para el tratamiento de la simetría de moléculas utilizando la Teoría de Grupos y su aplicación al análisis de espectros vibracionales. Permite reducir una representación de simetría para una molécula dada en un grupo de simetría dado en representaciones irreducibles y calcular los modos vibracionales activos. Se puede ver el análisis de la simetría de 22 moléculas predefinidas de hasta 12 átomos y ejemplos de moléculas sencillas pertenecientes a cada grupo puntual.

En la página inicial accedemos a un grupo de simetría pinchando en su símbolo. Tomamos como ejemplo el  $C_{2v}$ .

**Character tables for chemically important point groups**

Nonaxial groups	<a href="#">C<sub>1</sub></a>	<a href="#">C<sub>s</sub></a>	<a href="#">C<sub>i</sub></a>	-	-	-	-
C <sub>n</sub> groups	<a href="#">C<sub>2</sub></a>	<a href="#">C<sub>3</sub></a>	<a href="#">C<sub>4</sub></a>	<a href="#">C<sub>5</sub></a>	<a href="#">C<sub>6</sub></a>	<a href="#">C<sub>7</sub></a>	<a href="#">C<sub>8</sub></a>
D <sub>n</sub> groups	<a href="#">D<sub>2</sub></a>	<a href="#">D<sub>3</sub></a>	<a href="#">D<sub>4</sub></a>	<a href="#">D<sub>5</sub></a>	<a href="#">D<sub>6</sub></a>	<a href="#">D<sub>7</sub></a>	<a href="#">D<sub>8</sub></a>
C <sub>nv</sub> groups	<a href="#">C<sub>2v</sub></a>	<a href="#">C<sub>3v</sub></a>	<a href="#">C<sub>4v</sub></a>	<a href="#">C<sub>5v</sub></a>	<a href="#">C<sub>6v</sub></a>	<a href="#">C<sub>7v</sub></a>	<a href="#">C<sub>8v</sub></a>
C <sub>nh</sub> groups	<a href="#">C<sub>2h</sub></a>	<a href="#">C<sub>3h</sub></a>	<a href="#">C<sub>4h</sub></a>	<a href="#">C<sub>5h</sub></a>	<a href="#">C<sub>6h</sub></a>	-	-
D <sub>nh</sub> groups	<a href="#">D<sub>2h</sub></a>	<a href="#">D<sub>3h</sub></a>	<a href="#">D<sub>4h</sub></a>	<a href="#">D<sub>5h</sub></a>	<a href="#">D<sub>6h</sub></a>	<a href="#">D<sub>7h</sub></a>	<a href="#">D<sub>8h</sub></a>
D <sub>nd</sub> groups	<a href="#">D<sub>2d</sub></a>	<a href="#">D<sub>3d</sub></a>	<a href="#">D<sub>4d</sub></a>	<a href="#">D<sub>5d</sub></a>	<a href="#">D<sub>6d</sub></a>	<a href="#">D<sub>7d</sub></a>	<a href="#">D<sub>8d</sub></a>
S <sub>n</sub> groups	<a href="#">S<sub>2</sub></a>	<a href="#">S<sub>4</sub></a>	<a href="#">S<sub>6</sub></a>	<a href="#">S<sub>8</sub></a>	<a href="#">S<sub>10</sub></a>	<a href="#">S<sub>12</sub></a>	-
Cubic groups	<a href="#">T</a>	<a href="#">T<sub>h</sub></a>	<a href="#">T<sub>d</sub></a>	<a href="#">O</a>	<a href="#">O<sub>h</sub></a>	<a href="#">I</a>	<a href="#">I<sub>h</sub></a>
Linear groups	<a href="#">C<sub>∞v</sub></a>	<a href="#">D<sub>∞h</sub></a>	-	-	-	-	-

<a href="#">Cartesian Coordinates</a>	<a href="#">Z-Matrix</a>
<a href="#">Examples</a>	<a href="#">NEW</a>
<a href="#">Help</a>	<a href="#">Literature</a>

Al hacer clic, nos aparece la tabla de caracteres junto con información adicional del grupo.

### Character table for point group $C_{2v}$

$C_{2v}$	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	linear functions, rotations	quadratic functions	cubic functions
$A_1$	+1	+1	+1	+1	z	$x^2, y^2, z^2$	$z^3, x^2z, y^2z$
$A_2$	+1	+1	-1	-1	$R_z$	xy	xyz
$B_1$	+1	-1	+1	-1	x, $R_y$	xz	$xz^2, x^3, xy^2$
$B_2$	+1	-1	-1	+1	y, $R_x$	yz	$yz^2, y^3, x^2y$

### Additional information

Number of symmetry elements	h = 4
Number of irreducible representations	n = 4
Abelian group	yes
Number of subgroups	3
Number of distinct subgroups	2
Subgroups (Number of different orientations)	$C_s(2), C_2$
<a href="#">Optical Isomerism (Chirality)</a>	no
Polar	yes

La misma pantalla, un poco más abajo, nos ofrece la posibilidad de reducir cualquier representación reducible del grupo, así como ejemplos de moléculas pertenecientes al grupo.

### Reduction formula for point group $C_{2v}$

[Type of representation](#)

$\Gamma_{\text{general}}$    $\Gamma_{3N}$    $\Gamma_{\text{vib}}$

E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
0	0	0	0

Submit Reset

### Examples

<a href="#">Water</a>	<a href="#">Formaldehyde</a>	<a href="#">Diazomethane</a>
<a href="#">1,2-Dichloroethylene (cis)</a>	<a href="#">Trisulfurdinitrogen dioxide</a>	<a href="#">Squaric Acid Difluoride</a>
<a href="#">Butadiene (s-cis)</a>	<a href="#">Propane</a>	<a href="#">Cyclohexane (boat)</a>
<a href="#">Azulene</a>	<a href="#">Phenanthrene</a>	

Para reducir cualquier representación, debemos introducir los caracteres de la representación en los recuadros correspondientes.

Una vez introducimos los caracteres de la representación a reducir, pinchamos en **Submit** y nos aparecen las representaciones irreducibles que componen la representación problema.

### Reduction formula for point group $C_{2v}$

Type of representation

$\Gamma_{\text{general}}$ 
  $\Gamma_{3N}$ 
  $\Gamma_{\text{vib}}$

E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
3	1	3	1

### Reduction formula for point group $C_{2v}$

Characters of input representation

E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
3	1	3	1

Decomposition into Irreducible representations

$A_1$	$A_2$	$B_1$	$B_2$
2	0	1	0

Pinchando en alguna de las moléculas del grupo podemos ver datos de la molécula y representaciones 3D animadas. Por ejemplo, pinchando en [Water](#):

### Reduction formula for point group $C_{2v}$

Type of representation

$\Gamma_{\text{general}}$ 
  $\Gamma_{3N}$ 
  $\Gamma_{\text{vib}}$

E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
0	0	0	0

---

### Examples

<a href="#">Water</a>	<a href="#">Formaldehyde</a>	<a href="#">Diazomethane</a>
<a href="#">1,2-Dichloroethylene (cis)</a>	<a href="#">Trisulfurdinitrogen dioxide</a>	<a href="#">Squaric Acid Difluoride</a>
<a href="#">Butadiene (s-cis)</a>	<a href="#">Propane</a>	<a href="#">Cyclohexane (boat)</a>
<a href="#">Azulene</a>	<a href="#">Phenanthrene</a>	

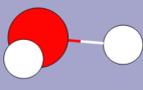
Por ejemplo, pinchando en [Water](#) llegamos a una nueva ventana con la siguiente información:

#### Grouptheoretical Analysis

##### Composition Input Structure

Atomic Number	Atomic Symbol	Isotope	Isotope Mass	Isotope Abundance	Number Atoms	Mass
1	H	1	1.0078	99.9844	2	2.0157
8	O	16	15.9949	99.7620	1	15.9949
Total					3	18.0106
Isotopomer Natural Abundance (%)						99.7309

Determined Point Group:  $C_{2v}$



Volviendo a la página inicial, si pinchamos en **Examples**, podemos ver el análisis por Teoría de Grupos de una serie de moléculas sencillas comunes predefinidas.

**Character tables for chemically important point groups**

Nonaxial groups	<a href="#">C<sub>1</sub></a>	<a href="#">C<sub>s</sub></a>	<a href="#">C<sub>i</sub></a>	-	-	-	-
C <sub>n</sub> groups	<a href="#">C<sub>2</sub></a>	<a href="#">C<sub>3</sub></a>	<a href="#">C<sub>4</sub></a>	<a href="#">C<sub>5</sub></a>	<a href="#">C<sub>6</sub></a>	<a href="#">C<sub>7</sub></a>	<a href="#">C<sub>8</sub></a>
D <sub>n</sub> groups	<a href="#">D<sub>2</sub></a>	<a href="#">D<sub>3</sub></a>	<a href="#">D<sub>4</sub></a>	<a href="#">D<sub>5</sub></a>	<a href="#">D<sub>6</sub></a>	<a href="#">D<sub>7</sub></a>	<a href="#">D<sub>8</sub></a>
C <sub>nv</sub> groups	<a href="#">C<sub>2v</sub></a>	<a href="#">C<sub>3v</sub></a>	<a href="#">C<sub>4v</sub></a>	<a href="#">C<sub>5v</sub></a>	<a href="#">C<sub>6v</sub></a>	<a href="#">C<sub>7v</sub></a>	<a href="#">C<sub>8v</sub></a>
C <sub>nh</sub> groups	<a href="#">C<sub>2h</sub></a>	<a href="#">C<sub>3h</sub></a>	<a href="#">C<sub>4h</sub></a>	<a href="#">C<sub>5h</sub></a>	<a href="#">C<sub>6h</sub></a>	-	-
D <sub>nh</sub> groups	<a href="#">D<sub>2h</sub></a>	<a href="#">D<sub>3h</sub></a>	<a href="#">D<sub>4h</sub></a>	<a href="#">D<sub>5h</sub></a>	<a href="#">D<sub>6h</sub></a>	<a href="#">D<sub>7h</sub></a>	<a href="#">D<sub>8h</sub></a>
D <sub>nd</sub> groups	<a href="#">D<sub>2d</sub></a>	<a href="#">D<sub>3d</sub></a>	<a href="#">D<sub>4d</sub></a>	<a href="#">D<sub>5d</sub></a>	<a href="#">D<sub>6d</sub></a>	<a href="#">D<sub>7d</sub></a>	<a href="#">D<sub>8d</sub></a>
S <sub>n</sub> groups	<a href="#">S<sub>2</sub></a>	<a href="#">S<sub>4</sub></a>	<a href="#">S<sub>6</sub></a>	<a href="#">S<sub>8</sub></a>	<a href="#">S<sub>10</sub></a>	<a href="#">S<sub>12</sub></a>	-
Cubic groups	<a href="#">T</a>	<a href="#">T<sub>h</sub></a>	<a href="#">T<sub>d</sub></a>	<a href="#">O</a>	<a href="#">O<sub>h</sub></a>	<a href="#">I</a>	<a href="#">I<sub>h</sub></a>
Linear groups	<a href="#">C<sub>∞v</sub></a>	<a href="#">D<sub>∞h</sub></a>	-	-	-	-	-

<a href="#">Cartesian Coordinates</a>	<a href="#">Z-Matrix</a>
<a href="#">Examples</a> 	<a href="#">NEW</a>
<a href="#">Help</a>	<a href="#">Literature</a>

En la nueva ventana que se abre, si pinchamos **Submit** en la columna  $\Gamma_{3N}$  para una molécula dada, podemos ver el análisis de los movimientos moleculares. Pinchando en **Submit** en la columna  $\Gamma_{vib}$ , veremos el análisis de sus modos vibracionales.

**Predefined reducible representations**

3-atomic molecules						
Name	Formula	Point group	$\Gamma_{3N}$	$\Gamma_{vib}$	$\Gamma_{valence}$	$\Gamma_{\pi}$
Carbondioxid	CO <sub>2</sub>	<a href="#">D<sub>∞h</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Hypoflouric acid	HO <sub>F</sub>	<a href="#">C<sub>s</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Water	H <sub>2</sub> O	<a href="#">C<sub>2v</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-
4-atomic molecules						
Name	Formula	Point group	$\Gamma_{3N}$	$\Gamma_{vib}$	$\Gamma_{valence}$	$\Gamma_{\pi}$
Ammonia	NH <sub>3</sub>	<a href="#">C<sub>3v</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-
Borontrifluoride	BF <sub>3</sub>	<a href="#">D<sub>3h</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Chlorotrifluoride	ClF <sub>3</sub>	<a href="#">C<sub>2v</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Ethyne	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	<a href="#">D<sub>∞h</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Fluoroamine	NH <sub>2</sub> F	<a href="#">C<sub>s</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Hydrogen peroxide (cis)	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	<a href="#">C<sub>2v</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Hydrogen peroxide (trans)	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	<a href="#">C<sub>2h</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-
Hydrogen peroxide	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	<a href="#">C<sub>2</sub></a>	<a href="#">Submit</a>	<a href="#">Submit</a>	-	-