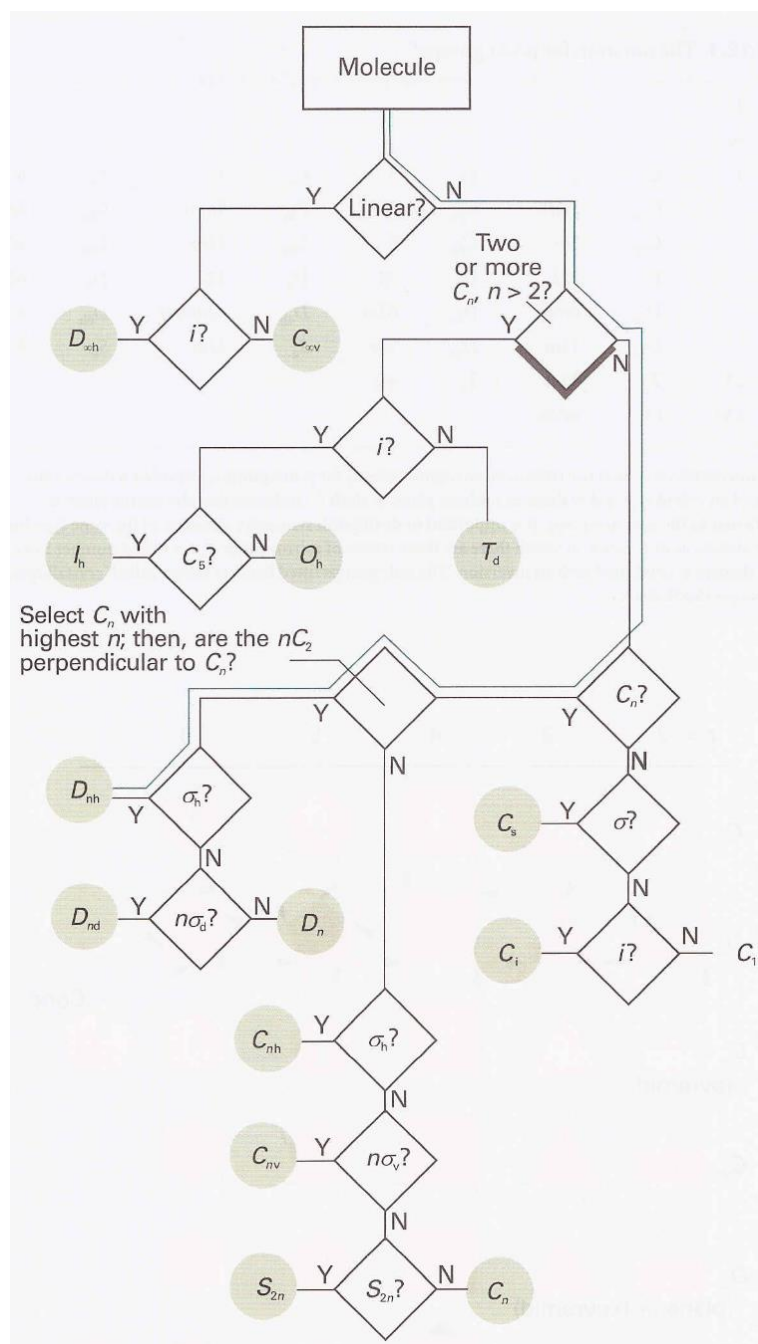
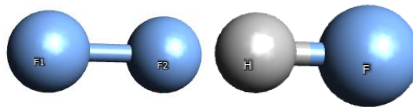


SYMETRIE MOLEKUL–Řešení

Některé molekuly molekuly vykazují symetrii, tzn. záměnou některé části molekuly získáme totožný objekt jako na počátku. Této záměně se říká operace symetrie a typickými operacemi jsou rotace (otočení), reflexe (zrcadlení) a inverze (převrácení). Těmto operacím symetrie přísluší prvky symetrie jako je např. bod, osa (přímka) a rovina. S pomocí vývojového diagramu níže přiřaďte k následující sadě molekul prvky symetrie, dále operace symetrie a přiřaďte molekuly k příslušným bodovým grupám.

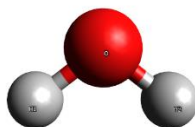


a) Molekula fluoru vs. fluorovodíku



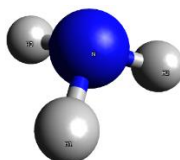
Řešení: Lineární – ano. V případě molekuly F_2 jsou prvky symetrie (P) identita E (mají ji všechny molekuly) s operací symetrie (O) takovou, že s molekulou neděláme nic (resp. násobíme jedničkou). Dalším významným prvkem symetrie je střed symetrie i , pro nějž je charakteristická operace inverze (překlopení) přes tento bod. Osa, na níž leží oba atomy, hlavní osa symetrie a je ∞ -četná, touto osou zároveň prochází ∞ vertikálních rovin symetrie. Tato molekula přísluší bodové grupě symetrie $D_{\infty h}$. V molekule HF je opět identita, ale střed symetrie chybí. Podle vývojového diagramu patří tato molekula k bodové grupě $C_{\infty v}$. Další prvky symetrie bychom našli nahlédnutím do tabulek charakterů.

b) Voda



Řešení: Lineární – ne. Voda je typickým představitelem molekul lomeného tvaru. P: E , C_2 (dvojčetná osa symetrie a je hlavní osou symetrie. Operace s ní spojená je rotace o 180° ($360^\circ/2$). Více n -četných ($n > 2$) os přítomno není, rovněž není přítomno více dvojčetných os kolmých na hlavní osu C_2), dále není přítomna horizontální rovina symetrie σ_h , která je kolmá na hlavní osu symetrie. Za to jsou přítomny dvě vertikální roviny symetrie σ_v , které tuto hlavní osu obsahují (leží v ní). Operace spojené s těmito rovinami je zrcadlení (reflexe). Molekula vody patří do bodové grupy C_{2v} .

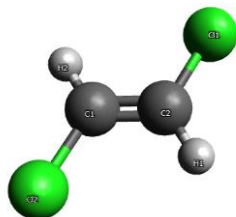
c) Amoniak



Řešení: Lineární – ne.

P: E , C_3 (hl. trojčetná osa s O rotace o 120° ($360^\circ/3$)). Dále tři σ_v . Bodová grupa C_{3v} .

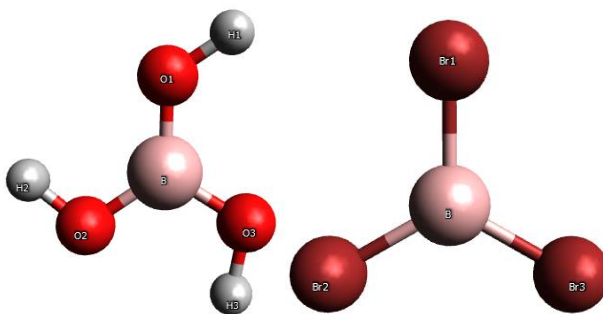
d) (*E*)-1,2 – dichlorethen



Řešení: Lineární – ne.

P: *E*, C_2 (kolmá na rovinu molekuly s O rotace o 120°), i , σ_h (v rovině molekuly, kolmá na C_2 s O zrcadlení v rovině molekuly). Vertikální roviny přítomny nejsou. Odpovídající bodová grupa je C_{2h} .

e) Kyselina trihydrogenboritá vs. bromid boritý

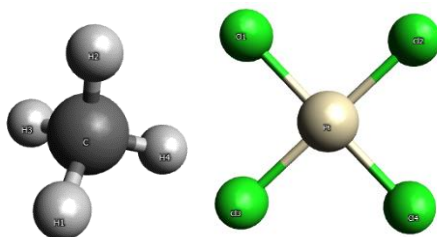


Řešení: Lineární – ne.

$B(OH)_3$ P: *E*, C_3 , σ_h , S_3 (nevlastní trojčetná osa, která odpovídá součinu operací rotace (o 120°) kolem hlavní trojčetné osy C_3 a zrcadlení v rovině kolmé na tuto osu, tzn. že leží v C_3). Vertikální roviny v molekule nejsou. Bodová grupa je tedy C_{3h} .

BBr_3 P: *E*, C_3 , $3C_2$ (kolmé na hl. osu C_3), S_3 , σ_h , $3\sigma_v$. Bodová grupa D_{3h} .

f) Methan vs. anion tetrachloroplatnatý

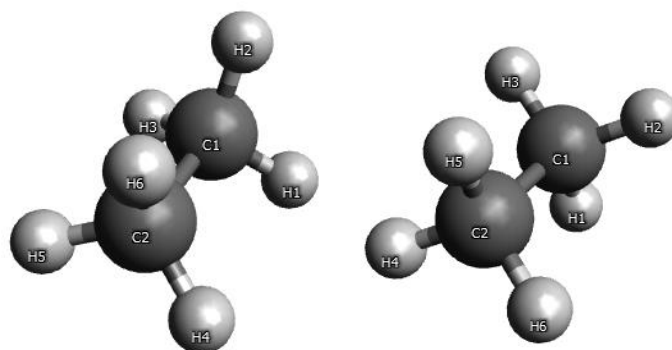


Řešení: Lineární – ne.

CH_4 P: E , dvě a n -četných ($n > 2$) os = více trojčetných os C_3 , není i . Bodová grupa: T_d . Dalšími prvky jsou samozřejmě dvojčetné osy C_2 , samozřejmě i nevlastní čtyřčetné osy S_4 (rotace o 90° a zrcadlení v rovině kolmé na tuto osu) a dále tam můžeme nalézt tzv. dihedralní roviny symetrie σ_d , což jsou takové roviny symetrie, které půlí úhel mezi dvojčetnými osami.

$[\text{PtCl}_4]^{2-}$ P: E , C_4 (hl. čtyřčetná osa), více C_2 kolmých na C_4 , σ_h . Bodová grupa: D_{4h} . Samozřejmě tam najdeme i , S_4 , σ_v a σ_d .

g) Ethan v zákrytové (eclipsed) a nezákrytové (staggered) konformaci

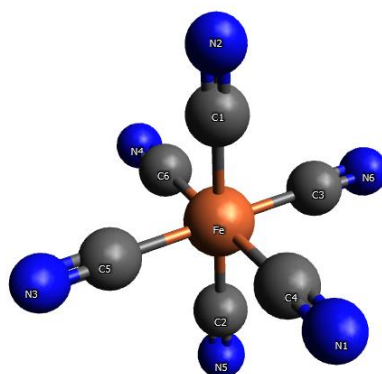


Řešení: Lineární – ne.

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ (eclipsed) P: E , C_3 , $3C_2$ (kolmé na hl. osu C_3), S_3 , σ_h , $3\sigma_v$. Bodová grupa D_{3h} .

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ (staggered) P: E , C_3 , $3C_2$, i , S_6 , σ_d . Bodová grupa D_{3d} .

h) Hexakynoželeznatý anion



Řešení: Lineární – ne.

$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ P: E , dvě a n -četných ($n > 2$) os = více trojčetných os C_3 , dále C_4 , C_2 , střed symetrie i je přítomen – bodová grupa je O_h . Dále nalezneme S_4 , S_6 , σ_h , σ_d .