

4. Grups puntuals de simetria

4.1 Objectius

L'objectiu d'aquesta pràctica és visualitzar els elements i operacions de simetria d'un conjunt de molècules i, utilitzant com a exemple una molècula amb un alt grau de simetria com és el benzè, practicar els conceptes de la teoria de grups i aplicar-los a la predicció del nombre de bandes que apareixeran en els espectres infraroig i Raman.

4.2 Materials

- ✓ Presentació de Power Point: La presentació **P4** conté un breu repàs de la base teòrica necessària per a la realització d'aquesta pràctica.
- ✓ Esquema per a la determinació del grup puntual de simetria.
- ✓ Taules de caràcters.

4.3. Procediment

- ✓ Introdueix en l'ordinador el CD que se subministra amb el manual. Pots fer els passos següents directament sobre el CD o, si vols, copiar-ne el contingut en una carpeta del disc dur i treballar sobre ella.
- ✓ Repassa detalladament la presentació de Power Point **P4** per a recordar les explicacions teòriques necessàries (per a això has de tenir instal·lada aquesta aplicació en l'ordinador).
- ✓ Busca tots els elements i operacions de simetria de les molècules següents: SO_3 , $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$, C_6H_6 , CH_4 i PtCl_4^- . Determina a quin grup de simetria pertanyen utilitzant l'esquema que s'adjunta.

- ✓ Demuestra que les dos operacions \hat{C}_6 del benzè pertanyen a la mateixa classe.
- ✓ Comprova que l'operació \hat{i} del benzè no forma classe amb cap altra operació de simetria.
- ✓ Determina la representació 3N-dimensional del benzè.
- ✓ Precisa les espècies de simetria a què pertanyen les seues vibracions normals, indica la seua activitat en infraroig i en Raman i el nombre de bandes que apareixeran en aquests espectres.
- ✓ Traslada tots els resultats a les taules corresponents dels fulls de resultats.

4.4 Fulls de resultats

4.4.1 Elements i operacions de simetria

<i>Taula 4.1. Elements i operacions de simetria del SO₃</i>	
<i>Elements</i>	
<i>Operacions</i>	
<i>Grup puntual de simetria:</i>	

<i>Taula 4.2. Elements i operacions de simetria del H₂-C=C=C-H₂</i>	
<i>Elements</i>	
<i>Operacions</i>	
<i>Grup puntual de simetria:</i>	

<i>Taula 4.3. Elements i operacions de simetria del C₆H₆</i>	
<i>Elements</i>	
<i>Operacions</i>	
<i>Grup puntual de simetria:</i>	

<i>Taula 4.4. Elements i operacions de simetria del CH₄</i>	
<i>Elements</i>	
<i>Operacions</i>	
<i>Grup puntual de simetria:</i>	

<i>Taula 4.5. Elements i operacions de simetria del PtCl_4^-</i>	
<i>Elements</i>	
<i>Operacions</i>	
<i>Grup puntual de simetria:</i>	

4.4.2 Classes de simetria ($\hat{X}^{-1}\hat{A}\hat{X}=\hat{B}$) de la molècula de C_6H_6

Dibuix i numeració dels àtoms:

<i>Taula 4.6. Classe corresponent a l'eix de rotació C_6 del C_6H_6</i>	
<i>Operacions que formen una classe</i>	<i>Producte que ho demostra ($\hat{X}^{-1}\hat{C}_6^1\hat{X} = \hat{C}_6^5$)</i>
\hat{C}_6^1 y \hat{C}_6^5	

<i>Taula 4.7. Classe corresponent al centre d'inversió i del C_6H_6</i>	
<i>Operació que no forma classe amb cap altra</i>	<i>Productes que ho demostren ($\hat{X}^{-1} \hat{i} \hat{X} = \hat{i}$)</i>
\hat{i}	

4.4.3 Representació 3N-dimensional del C_6H_6

<i>Taula 4.8. Caràcters de la representació 3N-dimensional del C_6H_6</i>												
D_{6h}	\hat{I}	$2\hat{C}_6$	$2\hat{C}_3$	\hat{C}_2	$3\hat{C}'_2$	$3\hat{C}''_2$	\hat{i}	$2\hat{S}_6$	$2\hat{S}_3$	$\hat{\sigma}_h$	$3\hat{\sigma}_v$	$3\hat{\sigma}_d$
Γ_{3N}												

4.4.4 Representació 3N-dimensional del C_6H_6 com a suma directa

$\Gamma_{3N} =$

4.4.5 Representació de les rotacions i translacions del C_6H_6

$$\Gamma_{R+T} =$$

4.4.6 Representació de les vibracions del C_6H_6

$$\Gamma_V =$$

4.4.7 Espectres IR i Raman del C_6H_6

Taula 4.9. Activitat de les vibracions del C_6H_6 en IR i Raman

	<i>Vibracions actives</i>	<i>Nomb re de vibrac ions</i>	<i>Nom bre de ban des</i>
<i>Espectre IR</i>			
<i>Espectre Raman</i>			

Discussió de resultats:

