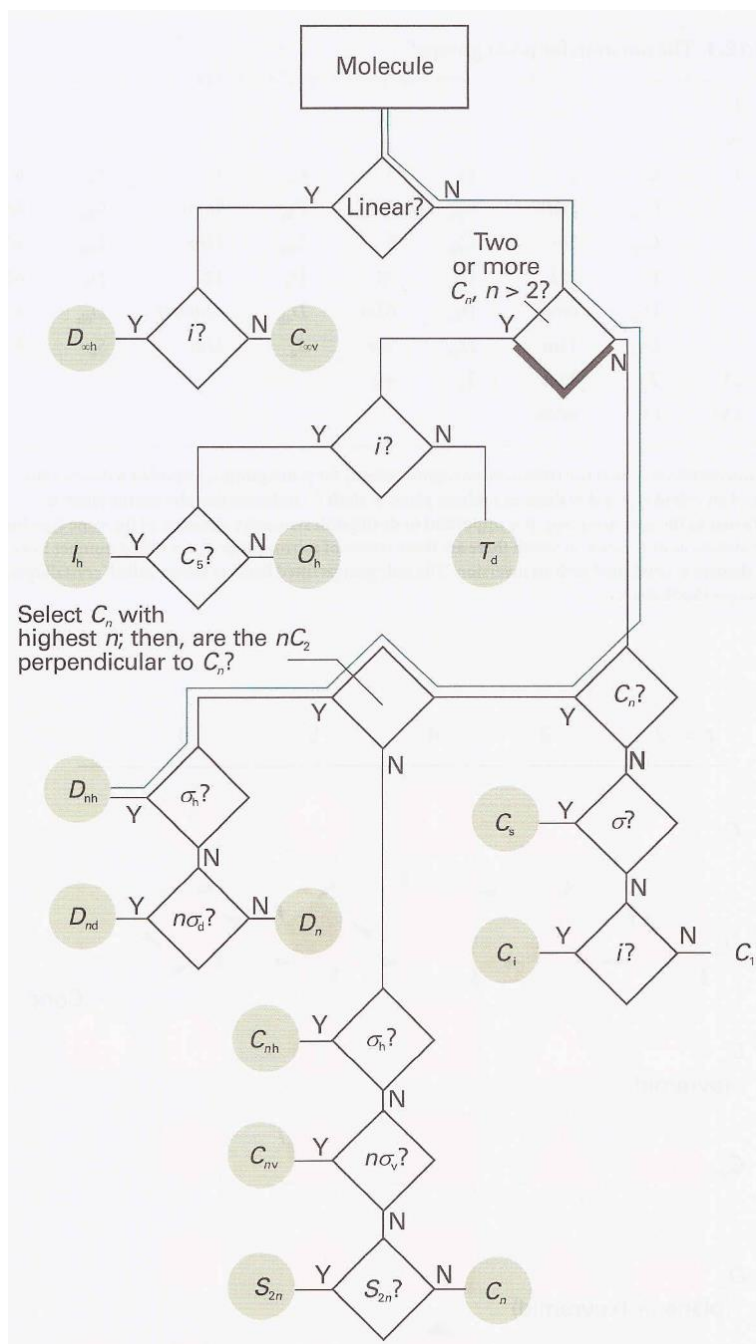
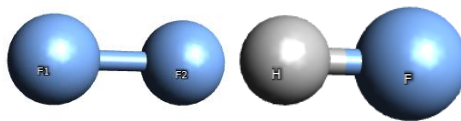


### SYMETRIE MOLEKUL

Některé 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 přiřadíte k následující sadě molekul prvky symetrie, dále operace symetrie a přiřadíte molekuly k příslušným bodovým grupám.

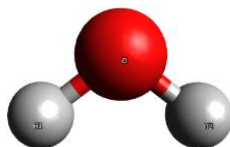


a) Molekula fluoru vs. fluorovodíku



*Řešení:* Lineární – ano. V případě molekuly  $F_2$  a vlastně všech molekul vůbec je prvkem symetrie (P) samotná molekula (samotný objekt), jež jí přísluší operace symetrie zvaná identita  $E$  (mají ji všechny molekuly) a která spočívá v tom, 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  $\infty$ -četná, touto osou zároveň prochází  $\infty$  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.

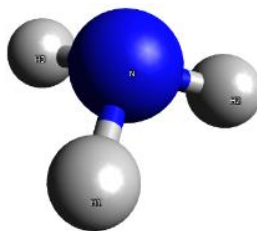
b) Voda



*Řešení:* Lineární – ne. Voda je typickým představitelem molekul lomeného tvaru.

P:  $C_2$  (dvojčetná osa symetrie a je hlavní osou symetrie. Operace s ní spojená je rotace o  $180^\circ$  ( $360^\circ/2$ ). 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  $\sigma_h$ , která je kolmá na hlavní osu symetrie. Za to jsou přítomny dvě vertikální roviny symetrie  $\sigma_v$ , které tuto hlavní osu obsahují (leží v ní). Operace spojené s těmito rovinami je zrcadlení (reflexe). Molekula vody patří do bodové grupy  $C_{2v}$ .

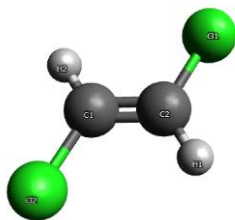
c) Amoniak



*Řešení:* Lineární – ne.

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

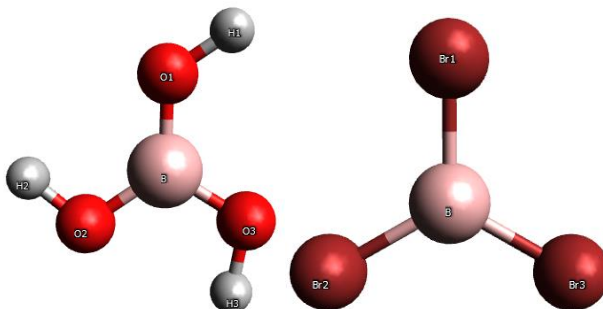
d) (*E*)-1,2 – dichlorethen



Řešení: Lineární – ne.

P:  $C_2$  (kolmá na rovinu molekuly s O rotace o  $120^\circ$ ),  $i$ ,  $\sigma_h$  (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

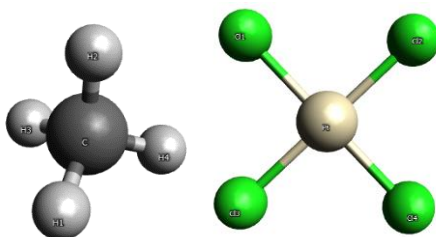


Řešení: Lineární – ne.

$B(OH)_3$  P:  $C_3$ ,  $\sigma_h$ ,  $S_3$  (nevlastní trojčetná osa, která odpovídá součinu operací rotace (o  $120^\circ$ ) 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:  $C_3$ ,  $3C_2$  (kolmé na hl. osu  $C_3$ ),  $S_3$ ,  $\sigma_h$ ,  $3\sigma_v$ . Bodová grupa  $D_{3h}$ .

f) Methan vs. anion tetrachloroplatnatý

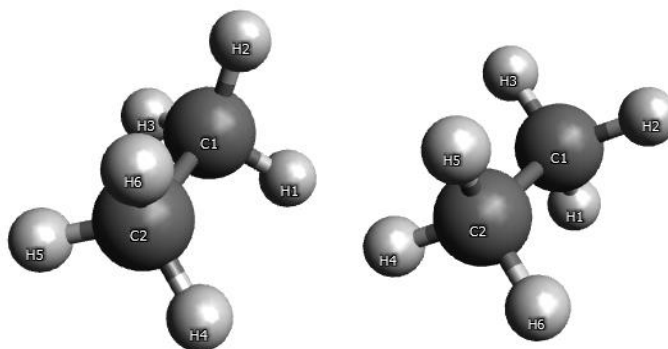


Řešení: Lineární – ne.

$\text{CH}_4$  P: 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  $90^\circ$  a zrcadlení v rovině kolmé na tuto osu) a dále tam můžeme nalézt tzv. dihedralní roviny symetrie  $\sigma_d$ , což jsou takové roviny symetrie, které půlí úhel mezi dvojčetnými osami.

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

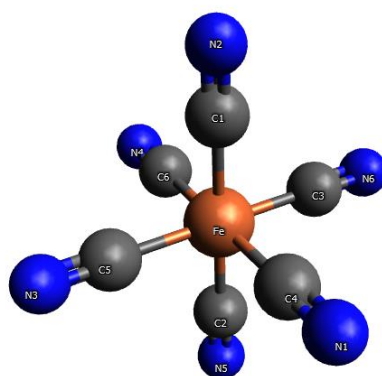
**g) Ethan v zákrytové (eclipsed) a nezákrytové (staggered) konformaci**



Řešení: Lineární – ne.

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$  (eclipsed) P:  $C_3$ ,  $3C_2$  (kolmé na hl. osu  $C_3$ ),  $S_3$ ,  $\sigma_h$ ,  $3\sigma_v$ . Bodová grupa  $D_{3h}$ .  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$  (staggered) P:  $C_3$ ,  $3C_2$ ,  $i$ ,  $S_6$ ,  $\sigma_d$ . Bodová grupa  $D_{3d}$ .

**h) Hexakynoželeznatý anion**



Řešení: Lineární – ne.

$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$  P: 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  $S_4$ ,  $S_6$ ,  $\sigma_h$ ,  $\sigma_d$ .