

CAPVT VII

SIMETRIJA

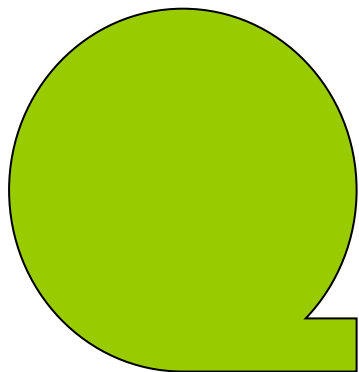
O simetriji

- Elementi simetrije
- Operacije simetrije
- Grupe točke

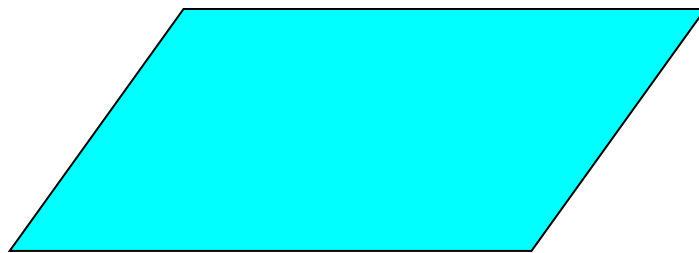
Elementi i operacije simetrije

Oznaka	Element simetrije	Operacija simetrije	Što konkretno čini
$\hat{E}$	[identitet]	identitet	ništa
$\hat{i}$	točka = centar simetrije / centar inverzije	inverzija	invertira kroz centralnu točku
$\hat{C}_n$	n -struka (prava) os simetrije (rotacije) / n -gira	rotacija	rotira (u smjeru suprotnom od kazaljke na satu) oko osi za $360^\circ/n$
$\hat{\sigma}$	zrcalna ravnina	zrcaljenje	zrcali (reflektira) preko ravnine
$\hat{S}_n$	n -struka (neprava) os simetrije (rotorefleksna os)	kompozicija rotacije i zrcaljenja	rotira (u smjeru suprotnom od kazaljke na satu) oko osi za $360^\circ/n$ i potom zrcali preko ravnine okomite na os.

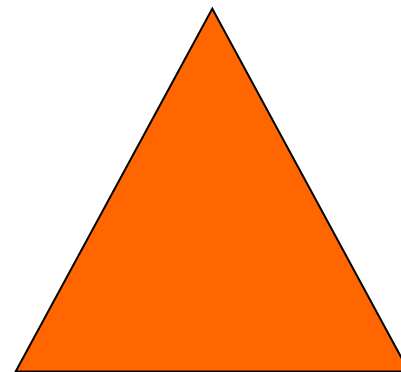
Osi simetrije



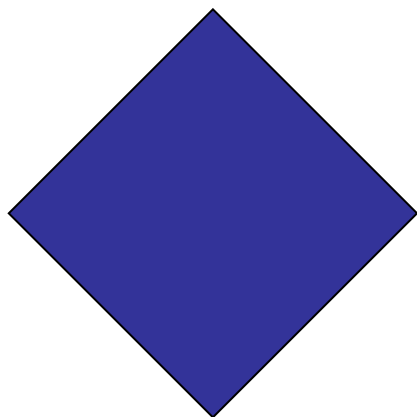
$C_1 = E$



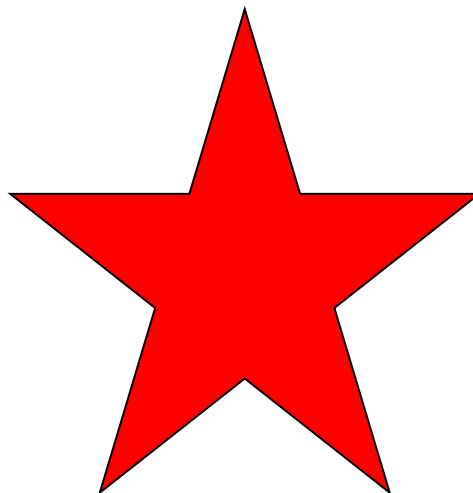
C_2



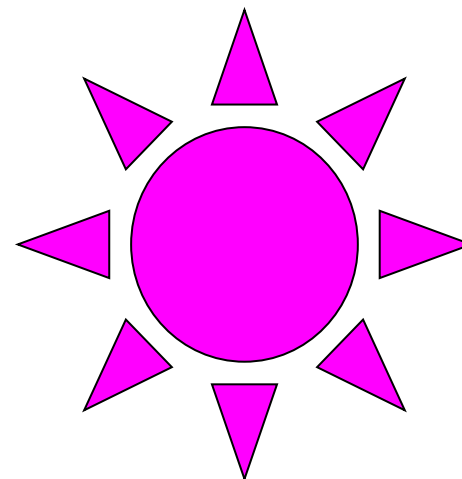
C_3



C_4



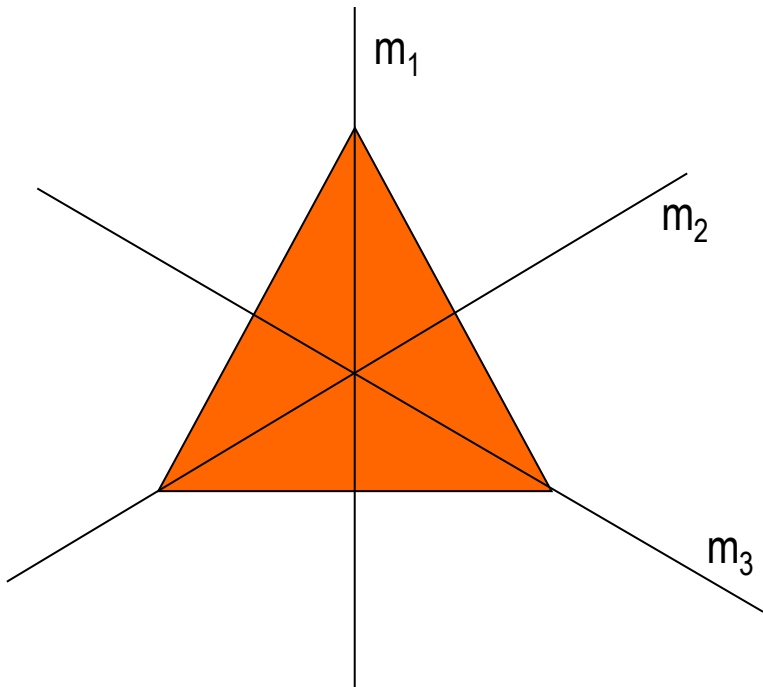
C_5



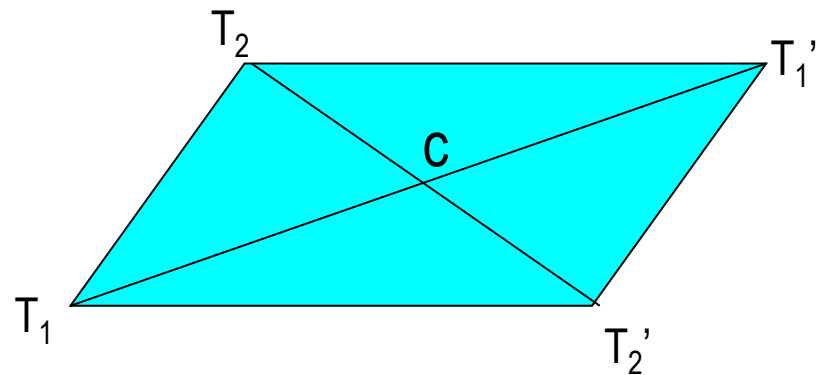
C_8

Zrcalne ravnine (σ) i inverzijski centri (i)

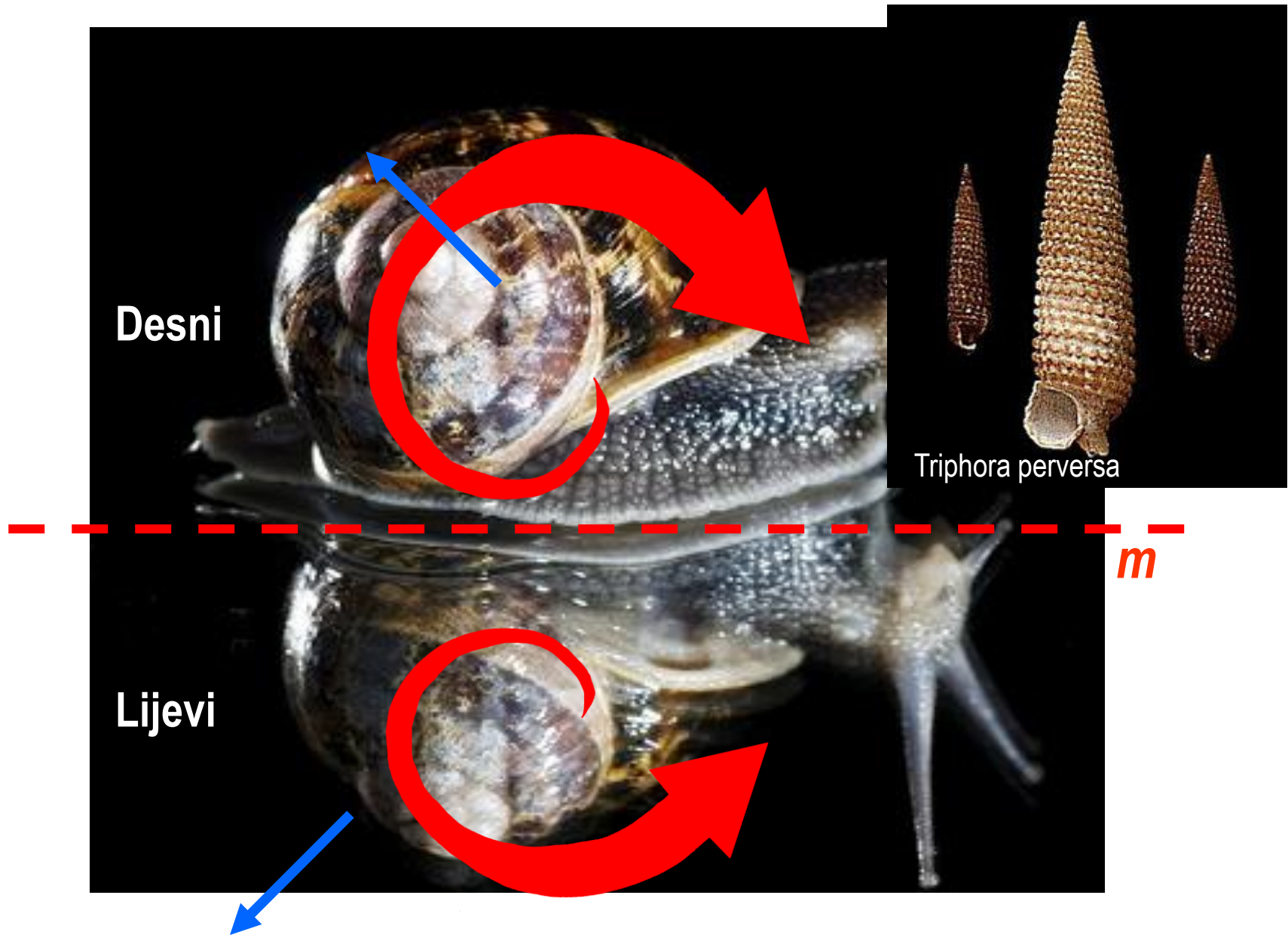
- Ravnina koja presijeca objekt tako da se dvije polovice odnose kao predmet i zrcalna mu slika



- Točka u središtu objekta od koje za svaku točku objekta postoji odgovarajuća točka na istoj udaljenosti s nasuprotne strane objekta



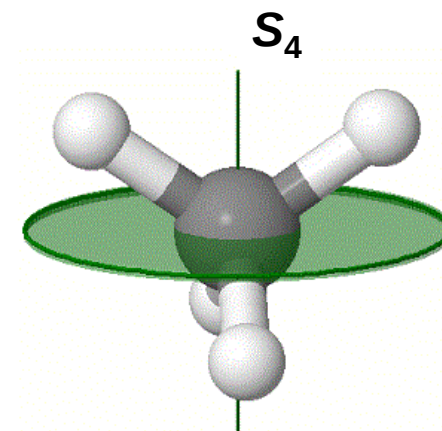
Lijevi i desni puževi



Neprave osi (S_n)

Kompozicija dvije operacije:

1. Rotacija oko osi za $2\pi/n$ radijana
2. Refleksija preko ravnine okomite na os



Grupe točke (točkine grupe)

Grupa $(S, \circ)$ = uređeni par (nepraznog) skupa (sve operacije simetrije na nekom objektu) i binarne operacije na tom skupu (uzastopno izvođenje dviju operacija) sa svojstvima:

1. Operacija je asocijativna

(za svaka tri člana skupa (a, b, c) vrijedi $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$)

2. Postojanje neutralnog elementa (E)

(za svaki član skupa (a) vrijedi $a \circ E = E \circ a = a$)

3. Postojnje inverznog elementa

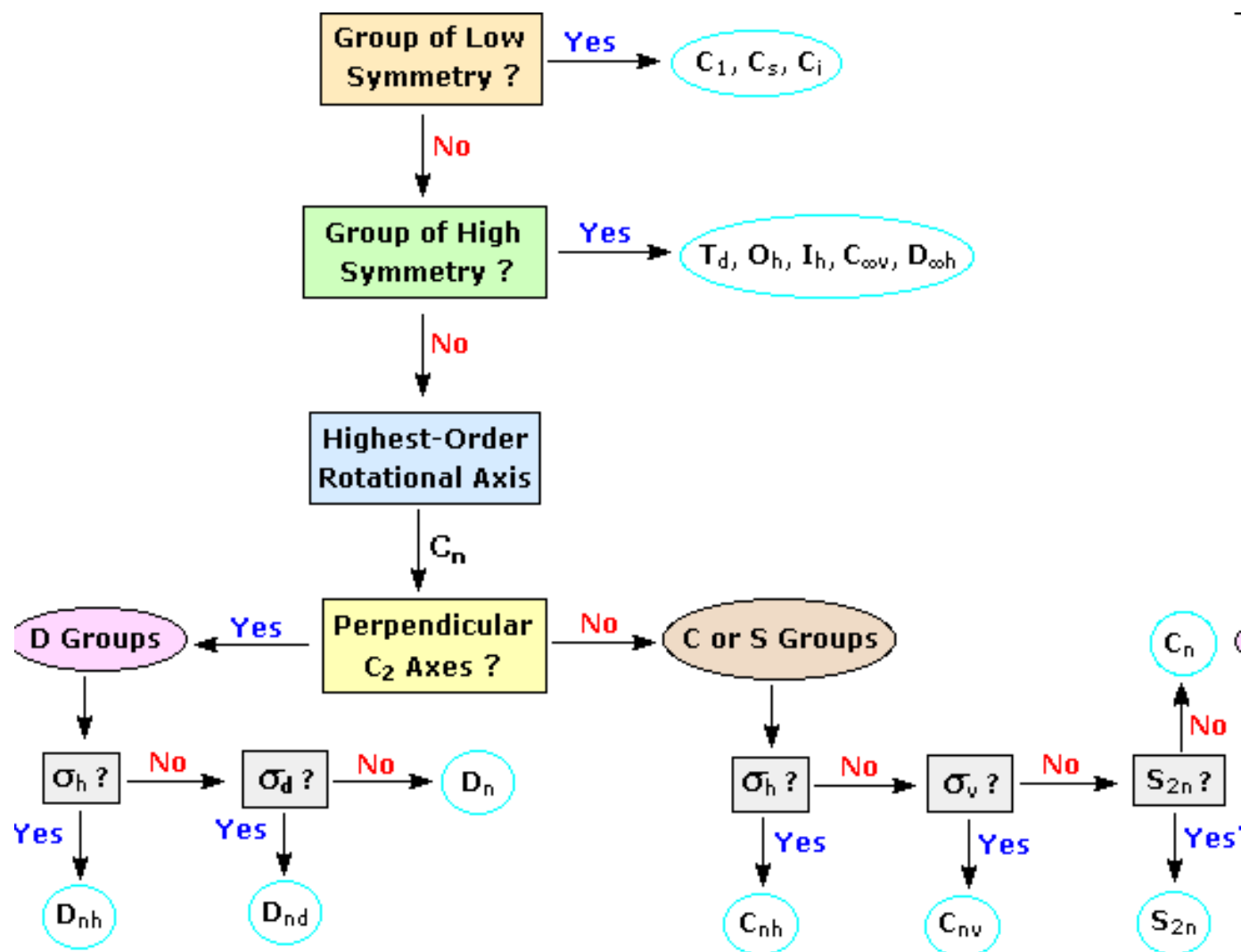
(za svaki element skupa (a) postoji (a^{-1}) tako da je $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = E$)

'tipovi' točkinih grupa (Schönflies)

C_1	samo identitet (e.g. CHBrClF)
C_s	samo (jedna) zrcalna ravnina (e.g. CH ₂ BrCl)
C_i	samo centar inverzije (e.g. 1,2-dibrom-1,2-dikloreten u zvjezdastoj konformaciji).
C_n	jedna os simetrije n -tog reda (C_2 , H ₂ O ₂)
C_{nv}	jedna os simetrije n -tog reda i n vertikalnih (sadrže os) zrcalnih ravnina (C_{2v} , H ₂ O; C_{3v} , NH ₃)
C_{nh}	jedna os simetrije n -tog, horizontalna (okomita na os) zrcalna ravnina, centar inverzije ili neprava os (C_{2h} , <i>trans</i> -1,2-dikloreten; C_{3h} : B(OH) ₃)
D_n	jedna os simetrije n -tog reda ('glavna') i n osi drugog reda okomitih na nju (D_3 , [Ph ₃ C] ⁺):
D_{nd}	jedna os simetrije n -tog reda ('glavna'), n osi drugog reda okomitih na nju i n dihedarskih (vertikalne, sadrže glavnu os ali ne i osi 2. reda) zrcalnih ravnina (D_{2d} , H ₂ C=C=CH ₂)
D_{nh}	jedna os simetrije n -tog reda ('glavna'), n osi drugog reda okomitih na nju i horizontalna (okomita na os) zrcalna ravnina (+ dihedarske i centar inverzije) (D_{6h} , benzen)
S_{2n}	Samo jedna neprava os reda $2n$ (i s njome podudarna os n -tog reda) (S_4 , 1,3,5,7-tetrametilciklooktatetraen)

'specijalne':

T_d	simetrija tetraedra (metan)	$C_{\infty v}$	linearna polarna (HCl)
O_h	simetrija oktaedra (kuban)	$D_{\infty h}$	linearna nepolarna (H ₂)
I_h	simetrija ikozaedra (B ₁₂ H ₁₂ ⁻)	K_h	sfera (bilo koji nevezani atom/monoatomni ion)

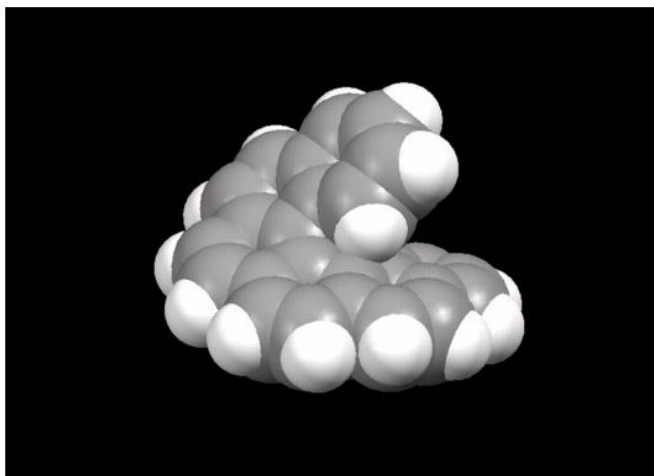
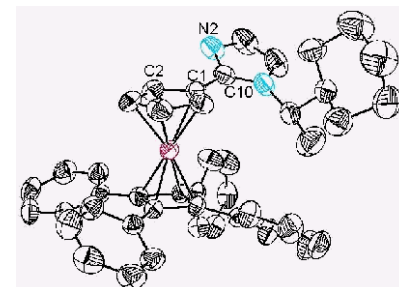
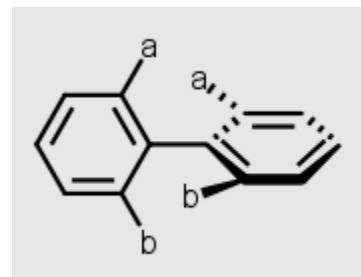


Simetrija molekule i svojstva

- Kiralnost
 - Izostanak elemenata simetrije 2. vrste
- Polarnost
 - Barem jedna polarna os

Vrste kiralnosti

- Centralna
- Osna
- Ravninska
- Helikalna



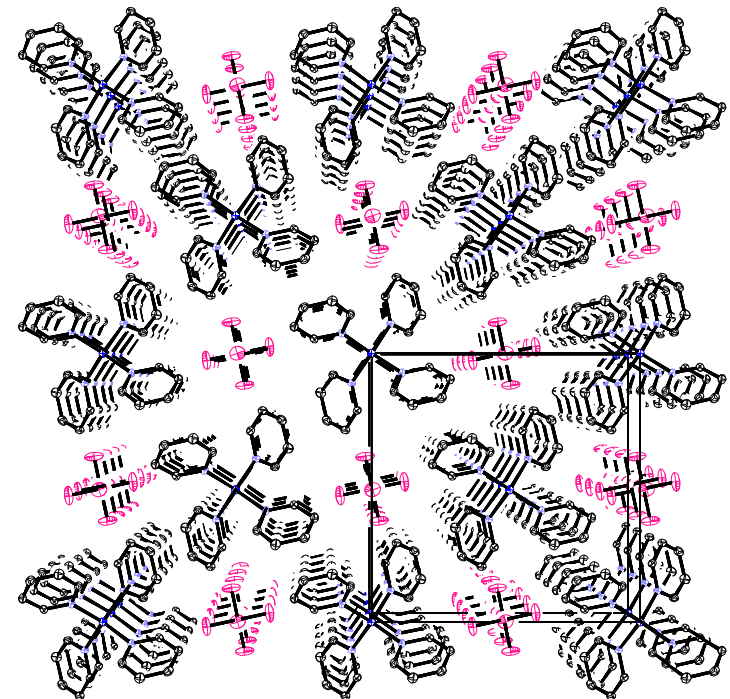
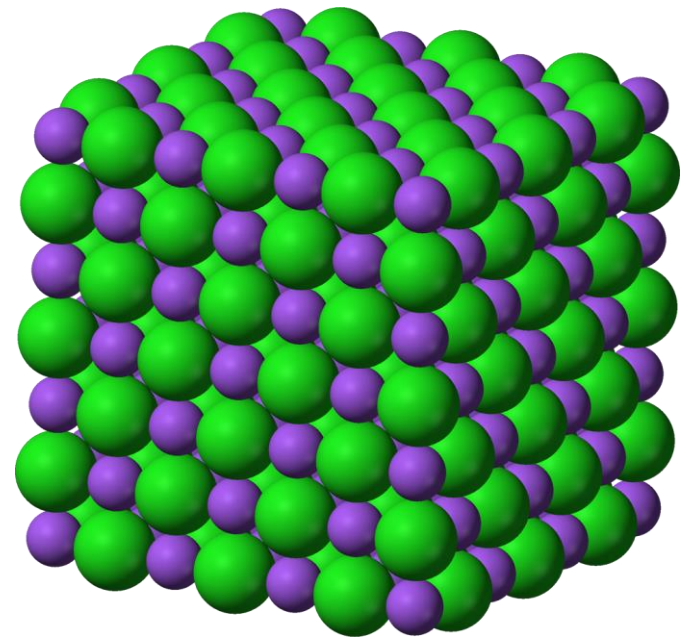
Periodične simetrije

Periodičnost = translacija s određenim (konačnim) translacijskim vektorom je također operacija;

Broj temeljnih translacijskih vektora jednak je dimenzionalnosti prostora (inače *subperiodičnost*)

Uz translaciju dozvoljeno je postojanje samo nekih operacija simetrije (samo osi određenih redova)

Ograničen broj mogućih simetrijskih grupa; u 3D dozvoljene rotacije reda 1, 2, 3, 4 i 6, ukupni broj **prostornih grupa** 230



$N_{\text{dimenzija}}$	Dozvoljeni redovi rotacije
1	1, 2
2, 3	1, 2, 3, 4, 6
4, 5	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12
6, 7	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 18, 20, 24, 30
8, 9	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 16, 18, 20, 21, 24, 28, 30, 36, 40, 42, 60
10, 11	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 18, 20, 21, 22, 24, 28, 30, 35, 36, 40, 42, 45, 48, 56, 60, 70, 72, 84, 90, 120

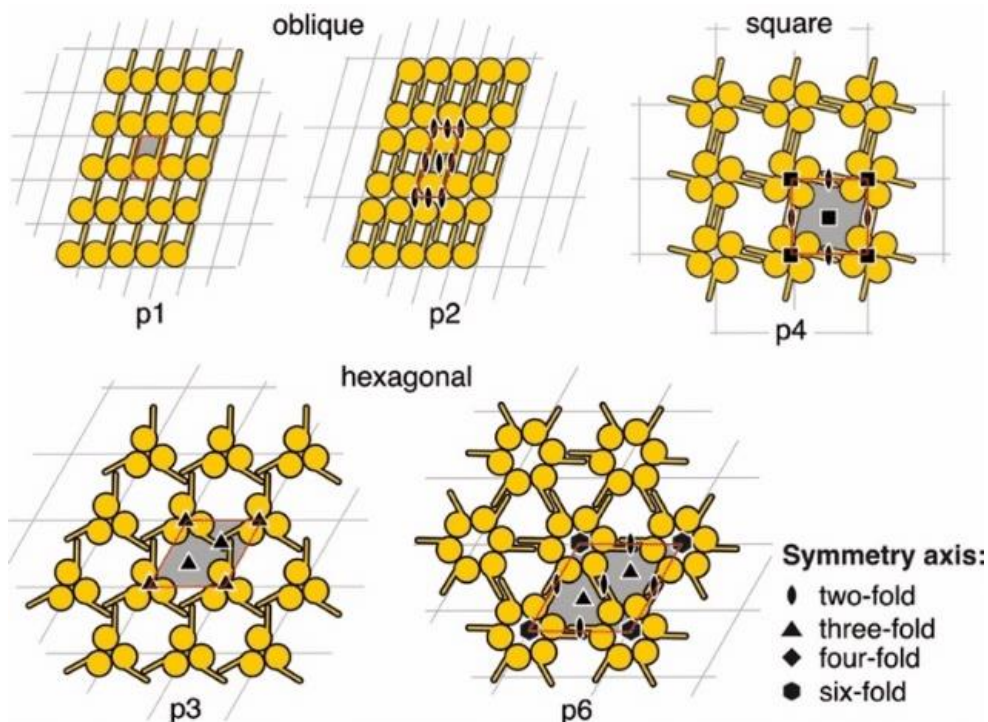
Subperiodične simetrije

Periodičnost u manjem broju dimenzija od
ukupne dimenzionalnosti prostora

U 2D – 1D periodične ‘grupe friza’ (7)

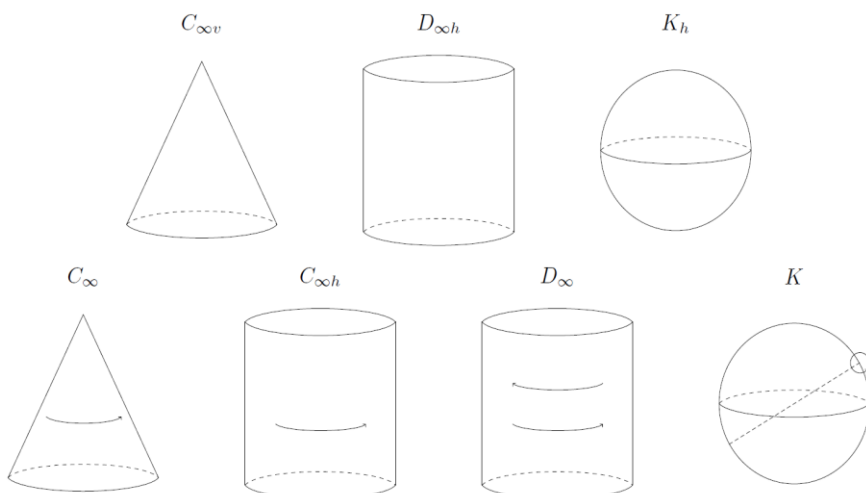
U 3D – 1D periodične ‘grupe štapa’ (75)

U 3D – 2D periodične ‘grupe sloja’ (80)



Granične simetrije

Granične grupe simetrije – simetrijske grupe koje se dobijaju iz pojedinih Schönfliesovih tipova kada (glavna) os simetrije postaje beskonačnog reda ($C_{\infty v}$, $D_{\infty h}$, K_h , ali i druge)



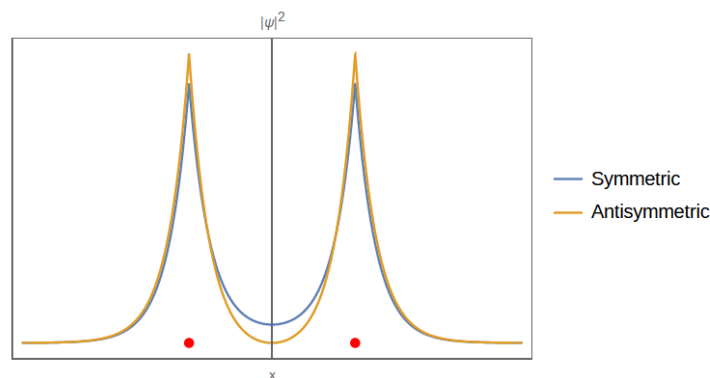
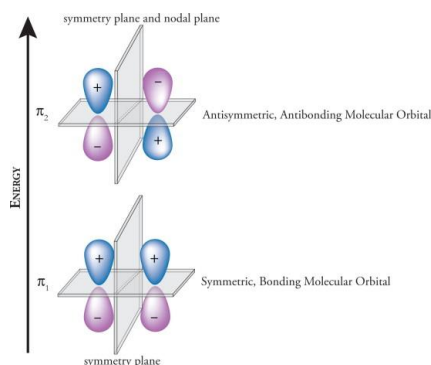
System	Degrees of symmetry						
	polar	central	axial	planal	planaxial	inversion	inversion planal
	1	2	3	4	6		
Monoclinic	C_1-1	C_2-1	C_2-2	C_2-m	$C_{2h}-2/m$		
Orthorhombic			D_2-422	$C_{2v}-mm$	$D_{2h}-mmm$		
Trigonal	C_3-3	$C_3(S_6)-\bar{3}$	D_3-32	$C_{3v}-3m$	$D_{3d}-\bar{3}m$		
Tetragonal	C_4-4	$C_{4h}-4/m$	D_4-422	$C_{4v}-4mm$	$D_{4h}-4/mmm$	$S_4-\bar{4}$	$D_{2d}-42m$
Hexagonal	C_6-6	$C_{6h}-6/m$	D_6-622	$C_{6v}-6mm$	$D_{6h}-6/mmm$	$C_{3h}-\bar{6}$	$D_{3h}-6m2$
	∞ (e)	$\infty:m$ (d)	$\infty:2$ (b)	∞m (c)	$m:\infty:m$ (a)		
Cubic	$T-23$	$T_h-m\bar{3}$	$O-432$	$T_d-\bar{4}3m$	$O_h-m\bar{3}m$		
						$K-\infty\infty$	$K_h-\infty\infty m$

Antisimetrija i 'obojane' simetrije

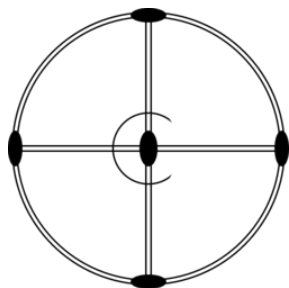
Operacija antisimetrije – postoji svojstvo koje primjenom operacije mijenja predznak (prelazi iz jednog u drugi 'oblik' od **dva** moguća)

'Obojane simetrije' – poćenje gdje svojstvo ima **dva ili više** mogućih stanja koja se ciklički mijenjaju primjenom operacije

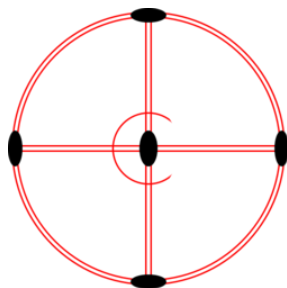
simetrične i antisimetrične linerane kombinacije orbitalâ



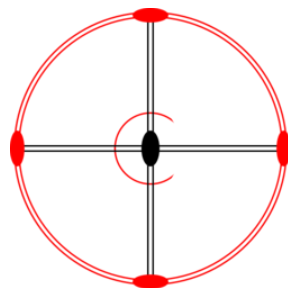
magnetske prostorne grupe



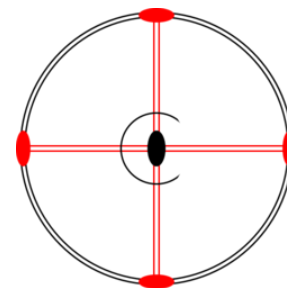
mmm



m'm'm'



mmm'



m'm'm