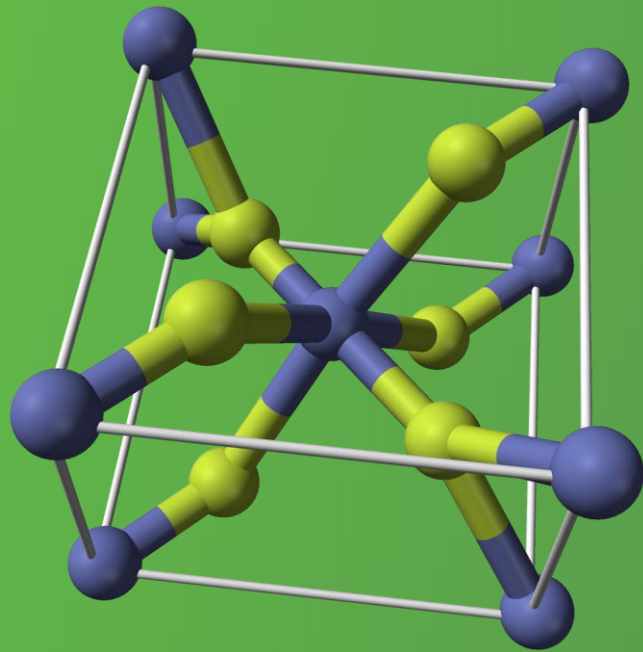




**TAL
TECH**

HARJUTUS 4

SÜMMEETRIARÜHMA MÄÄRAMINE

Toomas Tamm
Anorgaaniline keemia II
Kevad 2023

Sümmeetria- rühmad keemias

Kui väga eksootilised juhtumid välja arvata, siis jagunevad kõik „tavalised“ molekulid paarikümnesse sümmeetriarühma.

Juba väikese kogemuse olemasolu võimaldab lihtsamaid rühmi määrata „pealevaatamise teel“, ilma süstemaatilist protseduuri läbi tegemata.

Keerukamate juhtude jaoks võib abiks võtta sümmeetriat kirjeldavad õpikud või teatmikud.

Üks võimalik tegutsemisskeem on toodud tagapool.

- Alternatiivse skeemi leiata kõrval viidatud veebilehelt.

Vaadake ka
https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_symmetry

Ainult peegeldustasand: C_s

Ainult inversioonitsenter: C_i

Ainult üks sümmeetriatelg: C_n

Ainult peegelduspöördetelg: S_n

- S_2 ei kasutata, see on C_i

Igas rühmas on ka
identsuselement.

n -il on alati konkreetne
väärtus: 2, 3, 4, jne.

Sümmeetria- rühmade nimetused

Sümmeetriatelg ja peegeldustasand(id):

- Peegeldustasandid telje sihilised: C_{nv}
- Peegeldustasandid teljega risti: C_{nh}

Ühes ja samas sihis
võib kulgeda ka
mitu telge, näiteks
 C_6 , C_3 , C_2 (rühm C_{6v}).

Näited iga rühma molekulidest:
[https://en.wikipedia.org/wiki/
Molecular_symmetry](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_symmetry)

Peatelg (C_n) ja sellega risti C_2 teljed:

- Muid elemente pole: D_n
- On peegeldustasandid; langevad kokku C_2 telgedega: D_{nh}
- Peegeldustasandid on C_2 telgede vahel: D_{nd}

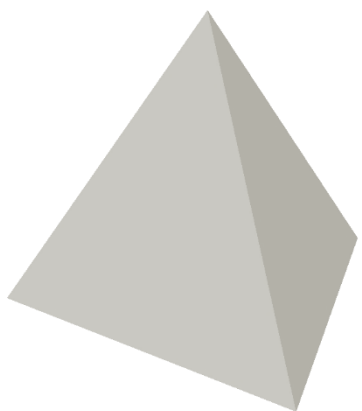
Sümmeetria- rühmade nimetused

Mitu C_3 telge: tetraeedri rühmad T , T_d , T_h

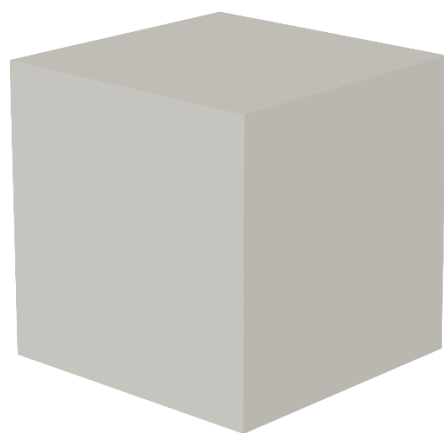
Mitu C_4 telge: kuubi rühmad: O , O_h

Mitu C_5 telge: ikosaeedri rühmad I , I_h

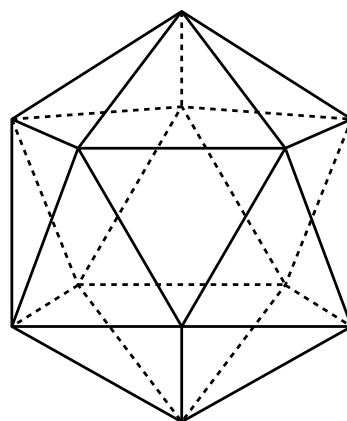
- Rühmades T_h , O_h , I_h esineb inversioonitsenter
- Rühmades T_d , T_h , O_h , I_h esinevad peegeldustasandid
- Kõigis esineb lisaks ka C_3 ja C_2 telgesid, mõnes ka S -e



tetraeeder (T_d)



kuup (O_h)



ikosaeeder (I_h)

Näited iga rühma molekulidest:
https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_symmetry

Sümmeetria- rühmade nimetused

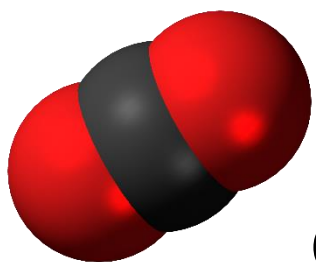
Lineaarsed molekulid:

Kui molekul on lineaarne, esineb sellel lõpmatut järku telg C_∞ ja lõpmata palju telje-sihilisi peegeldustasandeid.

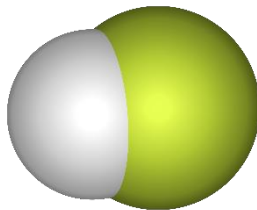
Kui lisaks on olemas inversioonitsenter: $D_{\infty h}$

Kui inversioonitsentrit ei ole: $C_{\infty v}$.

Nende rühmade karakterite tabelid on lõpmata suured ning sisaldavad mitte-täisarvulisi karaktereid.



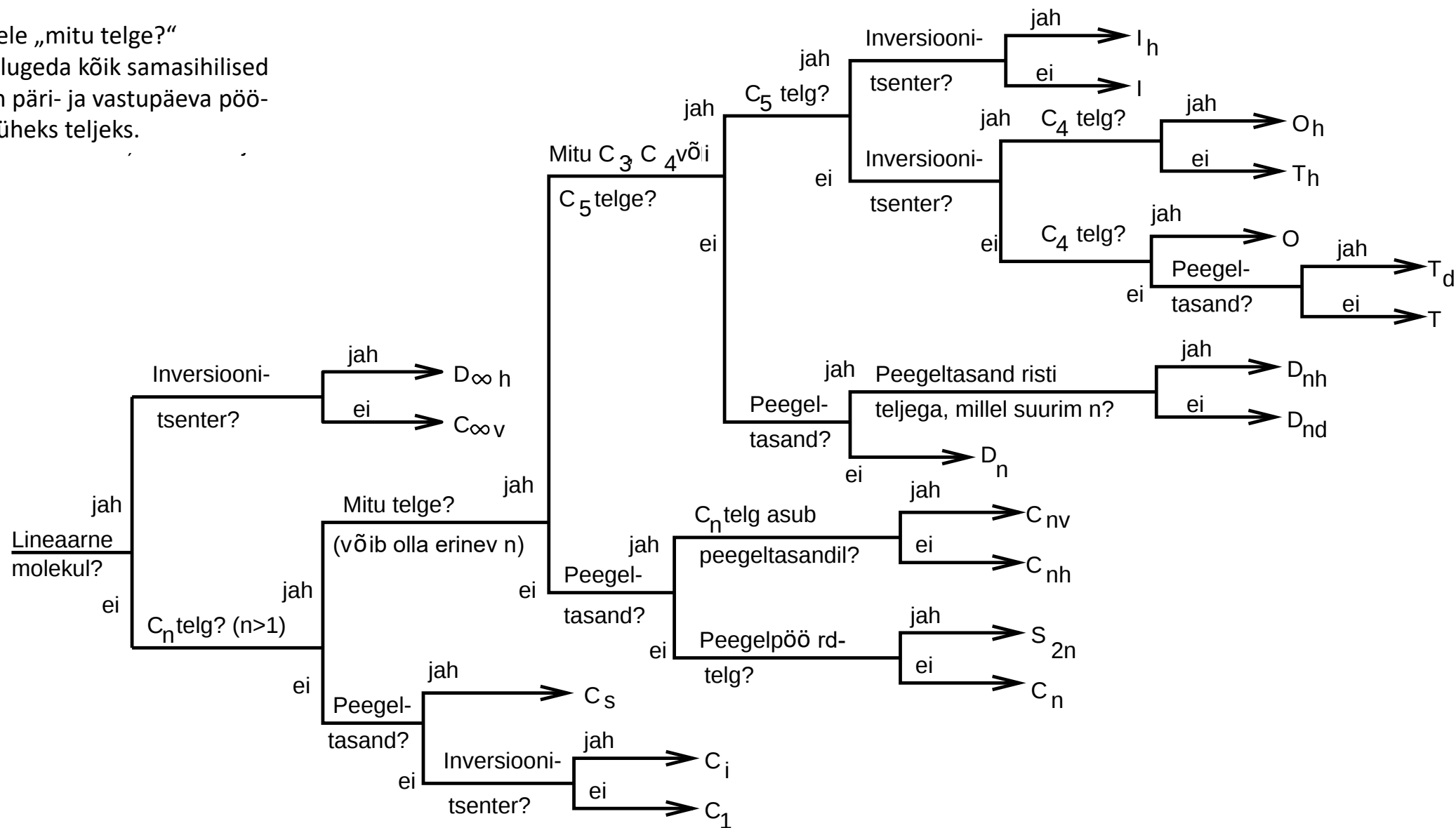
CO_2 ($D_{\infty h}$)

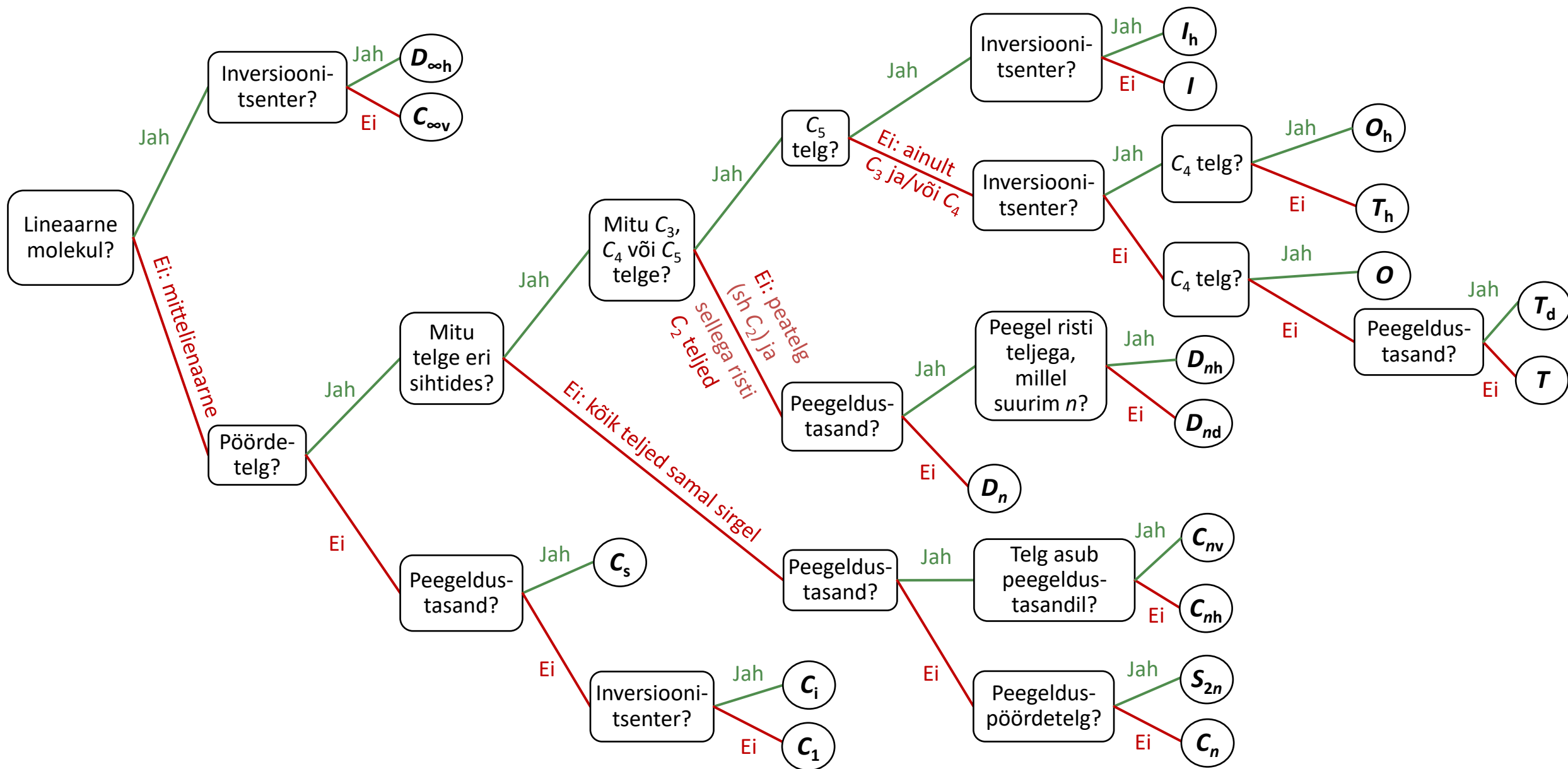


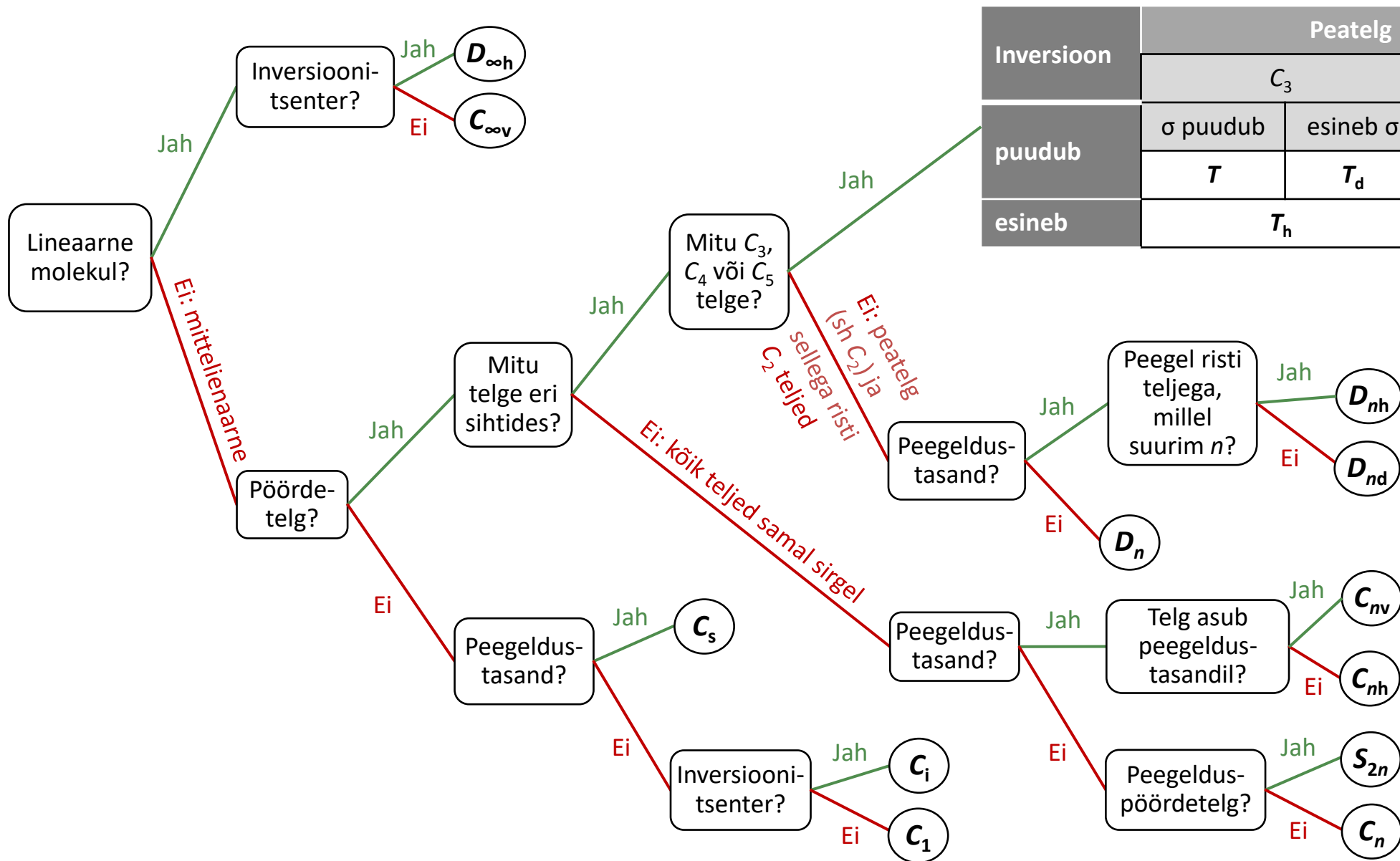
HF ($C_{\infty v}$)

Näited iga rühma molekulidest:
https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_symmetry

Küsimusele „mitu telge?“
vastates lugeda kõik samasihilised
teljed (sh päri- ja vastupäeva pöö-
ramine) üheks teljeks.







Inversioon	Peateg			
	C_3		C_4	C_5
puudub	σ puudub	esineb σ	O	I
	T	T_d		
esineb	T_h		O_h	I_h

Sümmeetriarühmade määramise skeem

Ülesanne: määrata sümmeetria- rühm

- kloroeteen
- fluorometaan
- etaan (varjestatud)
- benseen
- sulfaatioon
- spiropentaan
- sinihape
- boorhape
- tasandist välja pööratud eteen
- $M(OH_2)_6$ kompleks, milles M–O ja O–H sidemed on grupiti samal tasandil

Milline sümmeetriarühma määramise skeem on kõige parem?

Kuidas võiks skeeme edaspidi täiustada?