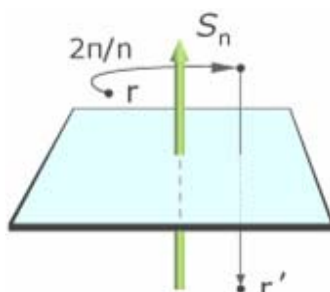


ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

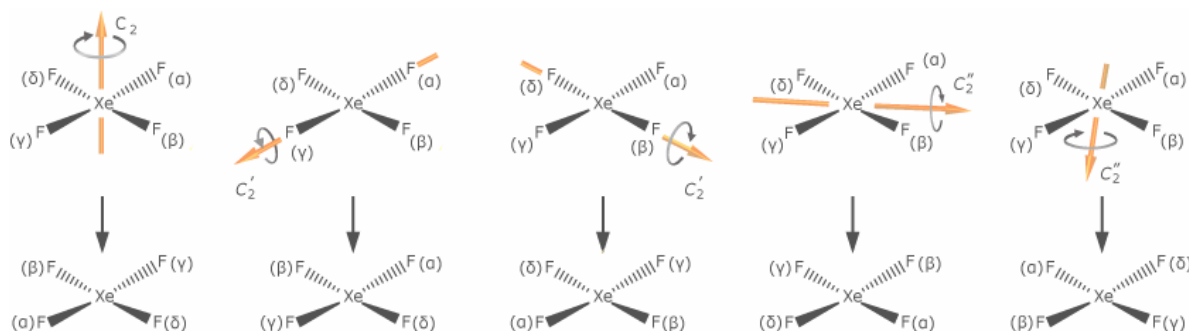
ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ



ΜΟΡΙΑΚΗ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΘΕΩΡΙΑ ΟΜΑΔΩΝ

Σημειώσεις παραδόσεων

Μιχάλης Π. Σιγάλας



Θεσσαλονίκη 2009

*Στο Νικόλα, τη Λεμονιά
την Ιωάννα και τους φοιτητές μου*

Περιεχόμενα

1. Γενικά περί συμμετρίας

1.1 Εισαγωγή	1
1.2 Αντιλήψεις για τη Συμμετρία	1
1.3 Η συμμετρία στη φύση	3
1.4 Η συμμετρία στην τέχνη και στην τεχνική	3
1.5 Η Συμμετρία στην Επιστήμη	5

2. Συμμετρία και Χημεία

2.1 Η συμμετρία στη Χημεία	7
2.2 Από τη Γενική περιγραφή της Μοριακής Συμμετρίας στη Μαθηματική της τυποποίηση	8
2.3 Ιστορική εξέλιξη της Θεωρίας των Ομάδων και των εφαρμογών της στη Χημεία	9

3. Στοιχεία και διεργασίες συμμετρίας

3.1 Εισαγωγή	11
3.2 Ορισμός Στοιχείου και Διεργασίας Συμμετρίας	11
3.3 Ταυτότητα, E	13
3.4 Περιστροφή, C_n . Άξονες Περιστροφής, C_n	13
3.5 Κατοπτρισμός ως προς επίπεδο, σ . Επίπεδα κατοπτρισμού, σ	15
3.6 Αναστροφή ως προς Σημείο, i . Κέντρο Αναστροφής, i	17
3.7 Στροφοκατοπτρισμός, S_n . Άξονες Στροφοκατοπτρισμού, S_n	18
3.8 Βασικές Διεργασίες Συμμετρίας	19
3.9 Κατάλληλες και Ακατάλληλες Διεργασίες Συμμετρίας	19
3.10 Συνδυασμός Διεργασιών Συμμετρίας	20
3.11 Δυνάμεις Διεργασιών Συμμετρίας, X^m	23
3.11.1 Δυνάμεις Διεργασιών Περιστροφής, C_n^m	23
3.11.2 Δυνάμεις Διεργασίας Κατοπτρισμού, σ^m	24
3.11.3 Δυνάμεις Διεργασίας Αναστροφής, i^m	25
3.11.4 Δυνάμεις διεργασιών στροφοκατοπτρισμού, S_n^m	25
3.12 Γενεσιουργές και Παράγωγες Διεργασίες Συμμετρίας	27
3.13 Αντίστροφες Διεργασίες Συμμετρίας, X^{-1}	28
3.14 Αντιστοιχία Μεταξύ Στοιχείων και Διεργασιών Συμμετρίας	28
3.15 Περιγραφή και Ορισμός της Συμμετρίας ενός Μορίου	29

4. Ομάδες Σημείου

4.1 Εύρεση του Συνόλου των Διεργασιών Συμμετρίας ενός Μορίου	31
4.2 Ορισμός των Ομάδων Σημείου	33
4.3 Περιγραφή των Ομάδων Σημείου	33
4.3.1 Μη περιστροφικές ομάδες: C_1 , C_s , C_i	34
4.3.2 Περιστροφικές ομάδες μοναδικού άξονα: C_n , C_{nv} , C_{nh} , S_{2n} , $C_{\infty v}$	35
4.3.3 Διεδρικές ομάδες: D_n , D_{nd} , D_{nh} , $D_{\infty h}$	39
4.3.4 Κυβικές ομάδες: T , T_h , T_d , O , O_h , I , I_h	43
4.3.5 Σφαιρική ομάδα: K_i	48
4.4 Συστηματική Μέθοδος Εύρεσης της Ομάδας Σημείου ενός Μορίου	48

5. Θεωρία Ομάδων και Μοριακή συμμετρία

5.1 Μαθηματικές Ομάδες και Ομάδες Σημείου	53
5.1.1 Ορισμός Μαθηματικής Ομάδας	53
5.1.2 Ομάδες Σημείου στη Μοριακή Συμμετρία	56
5.2 Πίνακες Πολλαπλασιασμού Ομάδων	57
5.2.1 Πίνακας Πολλαπλασιασμού Μαθηματικών Ομάδων	57
5.2.2 Πίνακας Πολλαπλασιασμού Ομάδων Σημείου	60
5.3 Αβελιανές Ομάδες	61
5.3.1 Αβελιανές Μαθηματικές Ομάδες	61
5.3.2 Αβελιανές Ομάδες Σημείου	62
5.4 Κυκλικές Ομάδες	62
5.4.1 Κυκλικές Μαθηματικές Ομάδες	62
5.4.2 Κυκλικές Ομάδες Σημείου	62
5.5 Υποομάδες	62
5.5.1 Υποομάδες Μαθηματικών Ομάδων	62
5.5.2 Υποομάδες Ομάδων Σημείου	63
5.6 Μετασχηματισμός Ομοιότητας και Κλάσεις Ομάδων	65
5.6.1 Κλάσεις Μαθηματικών Ομάδων	65
5.6.2 Κλάσεις Ομάδων Σημείου	66

6. Εκπροσωπήσεις Ομάδων Σημείου

6.1 Εισαγωγή	71
6.2 Άλγεβρα Μητρών	71
6.3 Εκπροσωπήσεις Μαθηματικών Ομάδων με Μήτρες	75
6.4 Εκπροσωπήσεις Ομάδων Σημείου με Μήτρες	77
6.4.1 Ορισμός του Καρτεσιανού Συστήματος Συντεταγμένων και Προσανατολισμός Μορίων	79
6.4.2 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Διάνυσμα Θέσης	80
6.4.3 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Διανυσματικούς Χώρους	84
6.4.4 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Συναρτησιακούς Χώρους	86
6.4.5 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση τις Μεταθέσεις Ατόμων του Μορίου	90
6.5 Αναγώγιμες και μη Αναγώγιμες Εκπροσωπήσεις	94
6.5.1 Ορισμός αναγώγιμων και μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων	94
6.5.1 Αναγωγή αναγώγιμων σε μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις	94

7. Πίνακες Χαρακτήρων των Ομάδων Σημείου

7.1 Το Μεγάλο Θεώρημα της Ορθογωνιότητας	99
7.2 Το Μικρό Θεώρημα της Ορθογωνιότητας	101
7.3 Πίνακες χαρακτήρων	102

8. Βασικές Αρχές και Τεχνικές για την Εφαρμογή της Θεωρίας Ομάδων στη Χημεία

8.1 Εύρεση Εκπροσωπήσεων Χαρακτήρων Διαφόρων Βάσεων	107
8.2 Χρήση Βασικών Προτύπων Συμμετρίας με Μιγαδικούς Χαρακτήρες	110
8.3 Αναγωγή Αναγώγιμων Εκπροσωπήσεων Χαρακτήρων	111
8.4 Τα Άμεσα Γινόμενα Εκπροσωπήσεων	113
8.4.1 Οι Εκπροσωπήσεις Μητρών των Γινομένων Συναρτήσεων	113
8.4.2 Οι Εκπροσωπήσεις Χαρακτήρων των Γινομένων Συναρτήσεων	113

8.4.3 Τα Άμεσα Γινόμενα των ΒΠΣ των ομάδων σημείου	114
9. Εφαρμογές Συμμετρίας και Θεωρίας Ομάδων στην Κβαντική Χημεία	
9.1 Η Συμμετρία των Μοριακών Κυματοσυναρτήσεων	117
9.1.1 Ιδιότητες Συμμετρίας του Χαμιλτώνιου Τελεστή	117
9.1.2 Ιδιότητες Συμμετρίας των Μοριακών Κυματοσυναρτήσεων	118
9.1.3 Εύρεση του Πλήθους των ΜΟ που Φέρουν Κάθε ΒΠΣ της Ομάδας Σημείου του Μορίου .	119
9.1.4 Εύρεση του ΒΠΣ της Ομάδας Σημείου του Μορίου που Φέρουν τα ΜΟ	122
9.2 Θεωρία Σθένους-Δεσμού και Υβριδισμένα Τροχιακά	127
9.2.1 Θεωρία Σθένους-Δεσμού και Υβριδισμένα Τροχιακά	127
9.2.2 Συμμετρία και Δόμηση Υβριδισμένων Τροχιακών για σ-δεσμούς	128
9.2.3 Συμμετρία και Δόμηση Υβριδισμένων Τροχιακών για π-δεσμούς	130
9.3 Μηδενισμός ή μη Ολοκληρωμάτων $\langle \Psi_i \Psi_j \rangle$ και $\langle \Psi_i \hat{O} \Psi_j \rangle$	131
9.3.1 Ολοκληρώματα της κβαντικής χημείας και συμμετρία	131
9.3.2 Ολοκληρώματα απλών συναρτήσεων και συμμετρία	131
9.3.3 Ολοκληρώματα της μορφής $\langle \Psi_i \Psi_j \rangle$	133
9.3.4 Ολοκληρώματα της μορφής $\langle \Psi_i \hat{O} \Psi_j \rangle$	133
9.4 Κανόνες Επιλογής στην Ηλεκτρονική Φασματοσκοπία	136
10. Συμμετρία, Πολικότητα και Οπτική Ενεργότητα των μορίων	
10.1 Συμμετρία και Πολικότητα των μορίων	141
10.2 Συμμετρία και Οπτική Ενεργότητα των μορίων	142
11. Βιβλιογραφία	147
Παράρτημα Ι. Πίνακες Χαρακτήρων Ομάδων Σημείου	149
Παράρτημα ΙΙ. Άμεσα Γινόμενα ΒΠΣ των Ομάδων Σημείου	161
Παράρτημα ΙΙΙ. Χρήσιμες Αποδείξεις	163