

N I DUNG

1. Khái ni m v i x ng:

2. Phân lo i: có 5 y u t i x ng

2.1 ng nh t (E hay I)

2.2 Tr c quay (C_n)

2.3 M t ph ng i x ng ()

2.4 Tâm i x ng (I)

2.5 Tr c quay – ph n x (tr c quay g ng)

3. M t s khái ni m

3.1 Nhóm i m

3.2 Quy t c phân lo i nhóm i x ng

3.3 M t s ví d

4. B ng c bi u

5. Phân lo i các dao ng chu n t c theo i x ng

www.mientay.vn.com

2. Phân loại các yếu tố chính

2.1 Nguyên tắc (E hay I)

Ký hiệu: **E** (Einheit) hoặc **I** (Identical)

Cấu hình
cân bằng gốc $\xrightarrow{\text{E (hoặc I)}}$ cấu hình mới trùng
với cấu hình gốc

\Rightarrow Nguyên tắc cơ bản chính nó sau khi biến đổi.

2. Phân loại các yếu tố đối xứng

2.2 Trục quay – Rotation axes (C_n)

Cấu hình
cân bằng gốc $\xrightarrow{\text{Quay quanh trục } C_n}$ cấu hình mới trùng
với cấu hình gốc

\Rightarrow Không thể phân biệt các cấu hình mới với cấu hình gốc.

Chiều quay có thể cùng chiều hoặc ngược chiều kim đồng hồ.

Góc quay $\frac{2\pi}{n}$; $n = 1, 2, 3, \dots$ và $n = 1, 2, 3, 4, 5$ và 6 và n là số nguyên tố; n : bậc của trục quay.

Trục quay C_n ; nếu có nhiều trục thì bậc của trục quay cao nhất là trục chính.

Các phân tử thuộc hàng C_∞

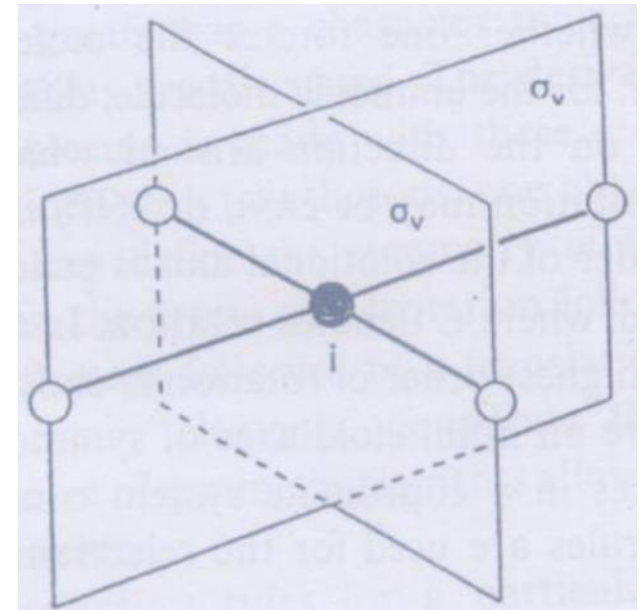
2. Phân loại các yếu tố đối xứng

2.3 Mặt phẳng đối xứng – Planet of symmetry ()

Cấu hình cân bằng gốc $\xrightarrow{\text{Mặt phẳng chia cấu hình thành 2 thành phần}}$ 2 thành phần đối xứng gương với nhau

Nếu một phân tử có hai mặt phẳng đối xứng thì chúng giao nhau theo một trục trục C_2 , nếu trục C_2 này là trục quay chính thì C_2 chính là trục quay chính. Các mặt phẳng đối xứng trục này gọi là σ_v .

(Hình vẽ phân tử AB_4 (ion $PtCl_4^{2-}$))

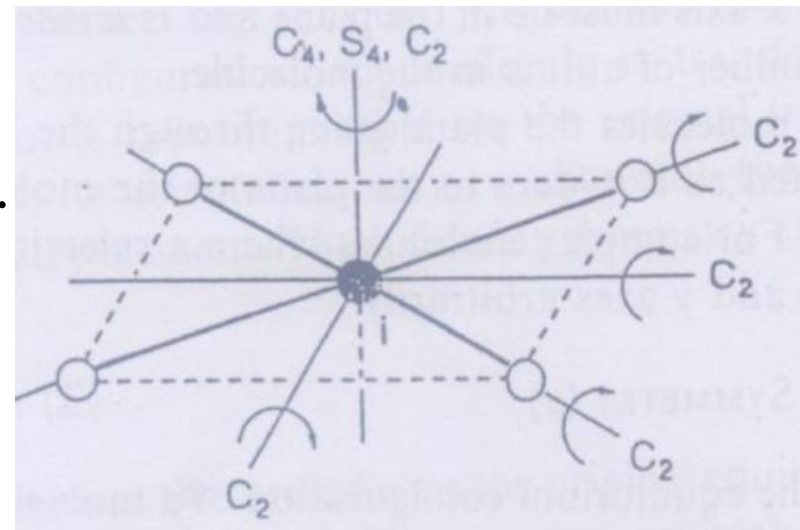
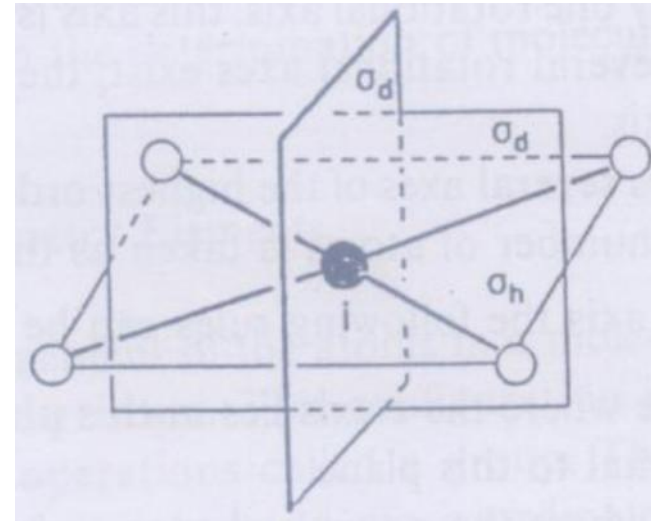


2. Phân loại các yếu tố đối xứng

2.3 Mặt phẳng đối xứng – Plane of symmetry ()

Num t phân t có hai m t ph ng i x ng giao nhau và có nhi u h n l tr c i x ng thì g i là m t ph ng i x ng chéo d.

Num t m t ph ng i x ng vuông góc v i tr c quay thì g i là m t ph ng i x ng n m ngang h.
(Hình v phân t d ng AB_4 (ion $PtCl_4^{2-}$))



2. Phân loại các yếu tố đối xứng

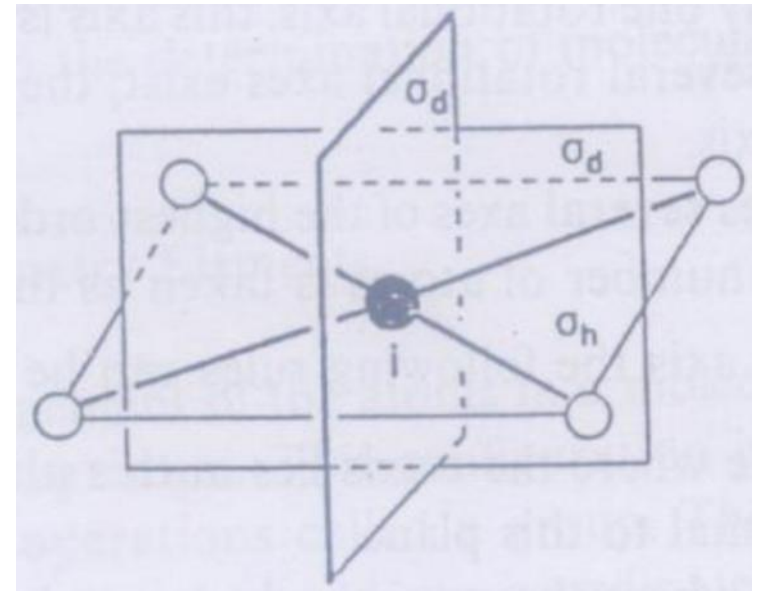
2.4 Tâm đối xứng – Center of Symmetry (I)

Nếu 1 nguyên tử $\xrightarrow{\text{Qua 1 điểm I}}$ 2 nguyên tử này đối xứng với nhau qua I
với 1 nguyên tử

Nếu I không trùng với vị trí của một nguyên tử nào thì số nguyên tử trong phân tử là chẵn.

Nếu I trùng với vị trí của một nguyên tử nào thì số nguyên tử trong phân tử là lẻ.

(Hình vẽ phân tử dạng AB_4 (ion $PtCl_4^{2-}$))



2. Phân loại các yếu tố đối xứng

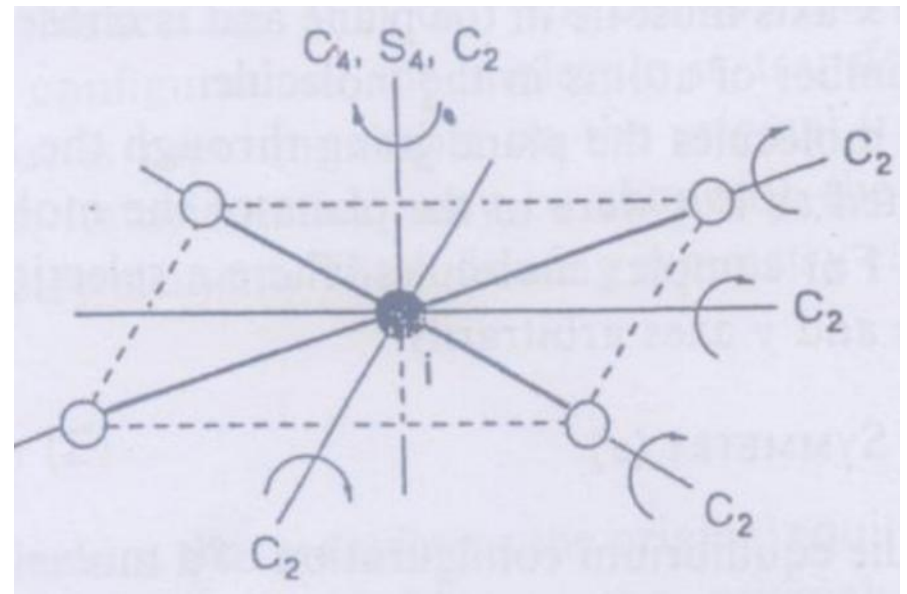
2.5 Trục phản xạ quay – Rotation reflection axes (S_n)

Cấu hình cân bằng gốc $\xrightarrow{\text{Quay 1 góc } \frac{2\pi}{n} \text{ quanh 1 trục } C_n \text{ và phản xạ qua mặt phẳng vuông góc trục } C_n}$ cấu hình mới trùng với cấu hình gốc

Góc quay $\frac{2\pi}{n}$; $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

biểu thức quay

(Hình vẽ phân tích đối xứng AB_4 (ion $PtCl_4^{2-}$))



2. Phân loại các yếu tố chính

* Bảng tóm tắt: Các yếu tố chính và các phép biến đổi chính

	Y U T I X N G	PHÉP BI N I I X N G
1.	nhóm (E hoặc I)	Phân tích không thay đổi.
2.	Trục quay (C_n)	Quay xung quanh trục với góc $2\pi/n$, $n = 1, 2, 3, \dots$ và trục phân tử là trục 1 p và $n = 1, 2, 3, 4$ và 6 và trục tinh thể.
3.	Tâm đối xứng hoặc tâm nghịch chuyển (I_n)	Nghịch chuyển các nguyên tử qua tâm.
4.	Mặt phẳng đối xứng (σ)	Phản xạ qua mặt phẳng.
5.	Trục phản xạ quay (S_n)	Quay xung quanh trục với góc $2\pi/n$ và sau đó phản xạ qua mặt vuông góc với trục này.

3. M t s khái ni m

3.1 Nhóm i m

Nhóm bao g m m t t p h p các y u t tùy ý (s quay, ph n x , ngh ch o, ...) th a m ãn 4 i u ki n sau ây:

1. Tích c a hai y u t A và B c a m t nhóm cho y u t C c ng thu c nhóm này: $A.B = C$.

2. Nhóm luôn luôn ch a m t và ch m t y u t n v E: $A.E = E.A = A$.

3. M i y u t nhóm u có y u t ng c c xác nh b i: $A.A^{-1} = A^{-1}.A = E$

4. Các y u t nhóm tuân theo nh lu t k t h p:
 $(A.B.C) = A.(B.C) = (A.B).C$

S y u t c a nhóm g i là b c c a nhóm, ký hi u là **h**.

Nhóm i m: t p h p các y u t i x ng c a m t phân t mà chúng th a m ãn các i u ki n trên.

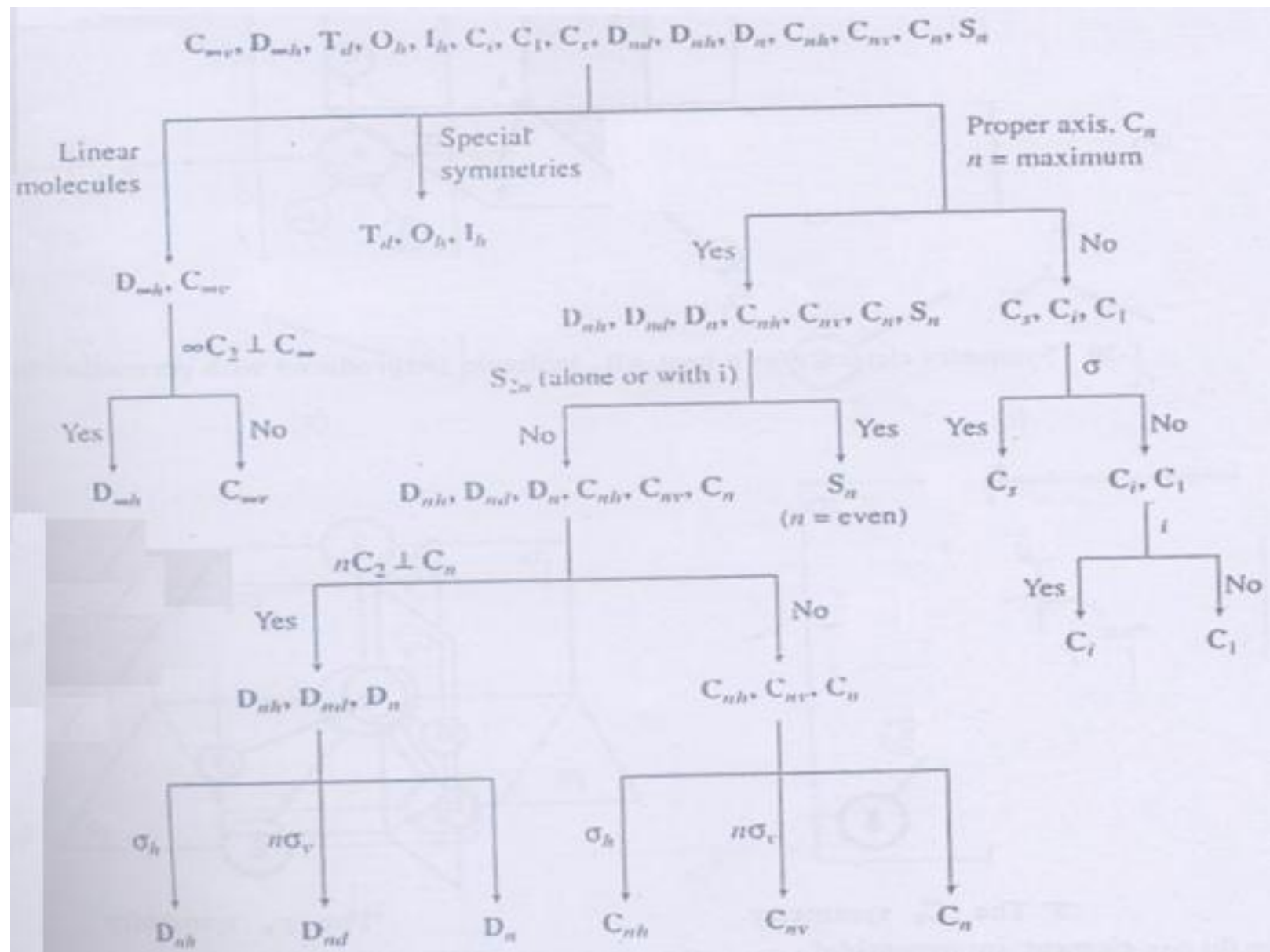
Phân t cô l p: $n = 1, 2, 3, \dots$

Phân t trong tinh th $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

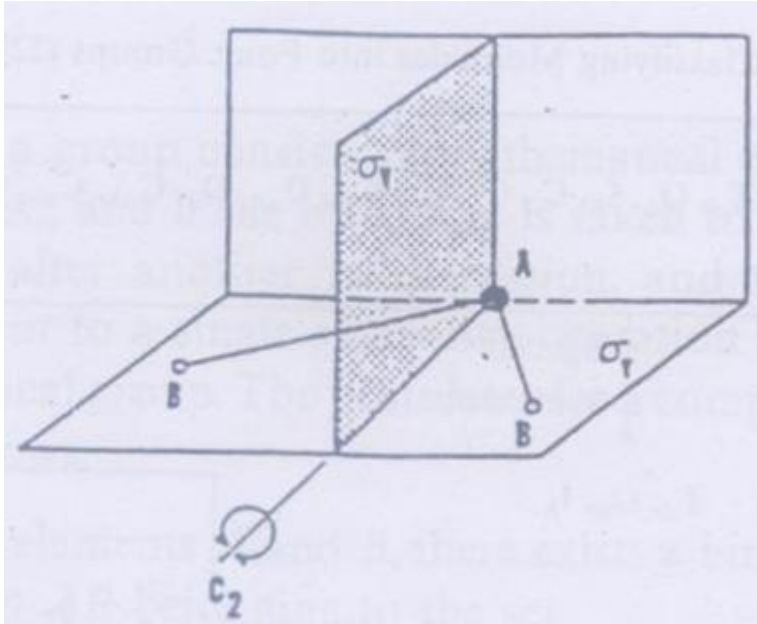
32 nhóm i m i x n g

Symbol	Plane σ	Axes of Symmetry				Center i	Example
		$6(C_6)$	$4(C_4)$	$3(C_3)$	$2(C_2)$		
C_1	—	—	—	—	—	—	CH_3CHO
C_2	—	—	—	—	—	—	H_2O_2
C_3	—	—	—	—	1	—	B(OH)_3
C_4	—	—	1	—	—	—	$\text{H}_2\text{S}(s)$
C_5	—	1	—	—	—	—	—
C_2	1	—	—	—	—	—	—
C_{2v}	1	—	—	—	—	—	HCOCl
C_{2v}	1	—	—	—	1	—	<i>trans</i> - $\text{CHCl}=\text{CHCl}$
C_{4v}	1	—	—	1	—	—	$\text{C}^+(\text{NH}_3)_3$
C_{6v}	1	1	—	—	—	1	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_4$
D_2	—	—	—	—	—	1	—
D_3	—	—	—	—	3	—	—
D_4	—	—	—	1	3	—	—
D_{2d}	3	—	—	—	4	—	$\text{Co}(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)_3^+$
D_{3d}	3	—	—	—	3	—	cyclobutane
D_{3h}	4	—	—	—	3	1	C_2H_4
D_{4h}	5	—	1	—	4	—	BCl_3
						1	PtCl_4^{2-}
D_{6h}	7	1	—	—	6	1	C_6H_6
$S_2 (C_2)$	—	—	—	—	—	1	FClHC-CHClF
S_4	—	—	—	—	1	—	$\text{C}_{10}\text{H}_8\text{F}_4$
S_6	—	—	—	1	—	1	—
D_{2d}	2	—	—	—	3	—	$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$
D_{3d}	3	—	—	1	3	1	Cyclohexane
C_{2v}	2	—	—	—	1	—	$\text{H}_2\text{O}(g)$
C_{3v}	3	—	—	1	—	—	$\text{NH}_3(g)$
C_{4v}	4	—	1	—	—	—	IF_3
C_{6v}	6	1	—	—	—	—	—
T	—	—	—	4	3	—	$\text{NH}_3(s)$
O	—	—	—	4	6	—	—
T_h	3	—	3	4	6	—	—
O_h	9	—	3	4	6	1	$\text{CO}_2(s)$
T_d	6	—	—	4	3	—	SF_6
							CH_4

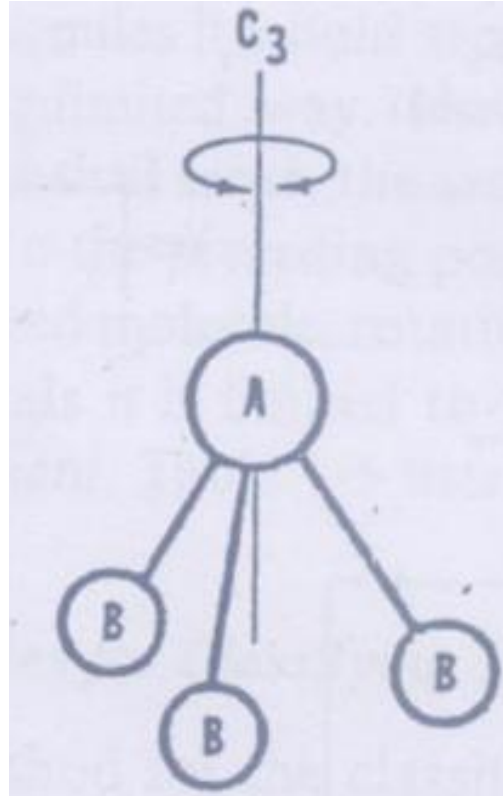
3.2 Phương pháp phân loại nhóm điểm (pp Zeldin)



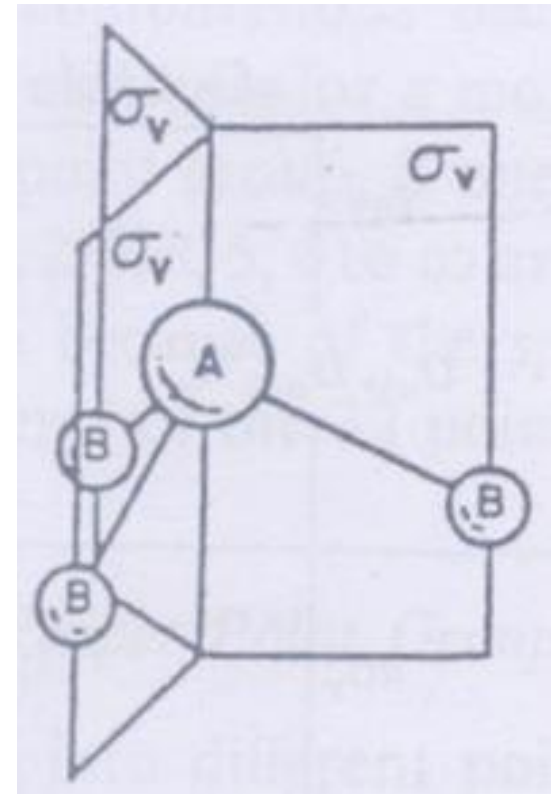
3.3 M t s ví d



Các y u t i x ng cho phân t không th ng hàng AB_2

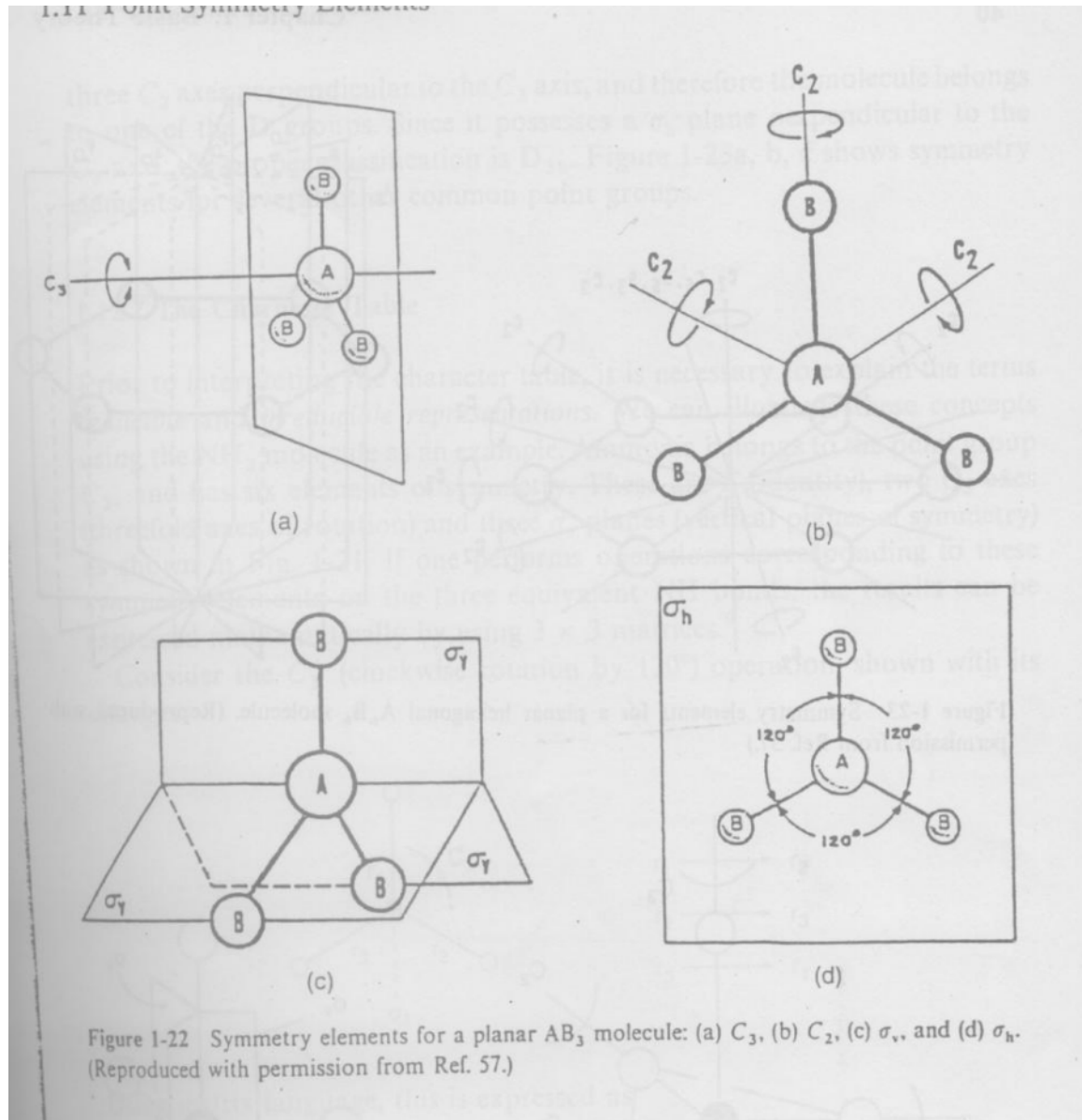


Y u t i x ng C_3 trong phân t hình tháp AB_3

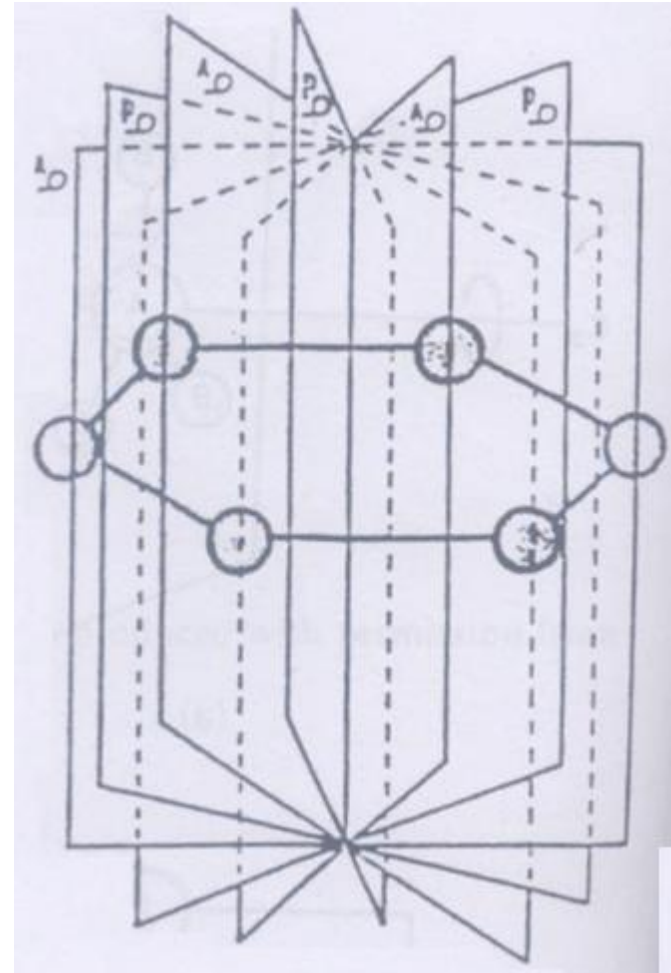
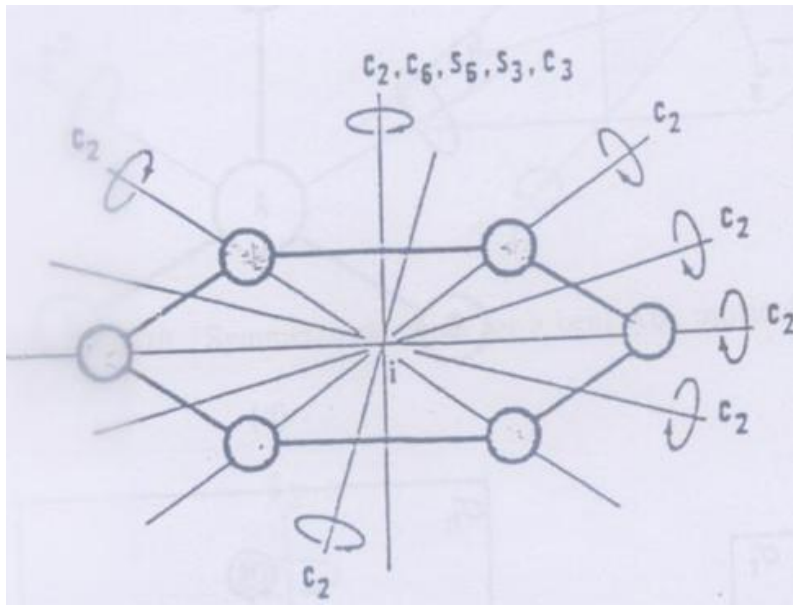


Y u t i x ng σ_v trong phân t hình tháp AB_3

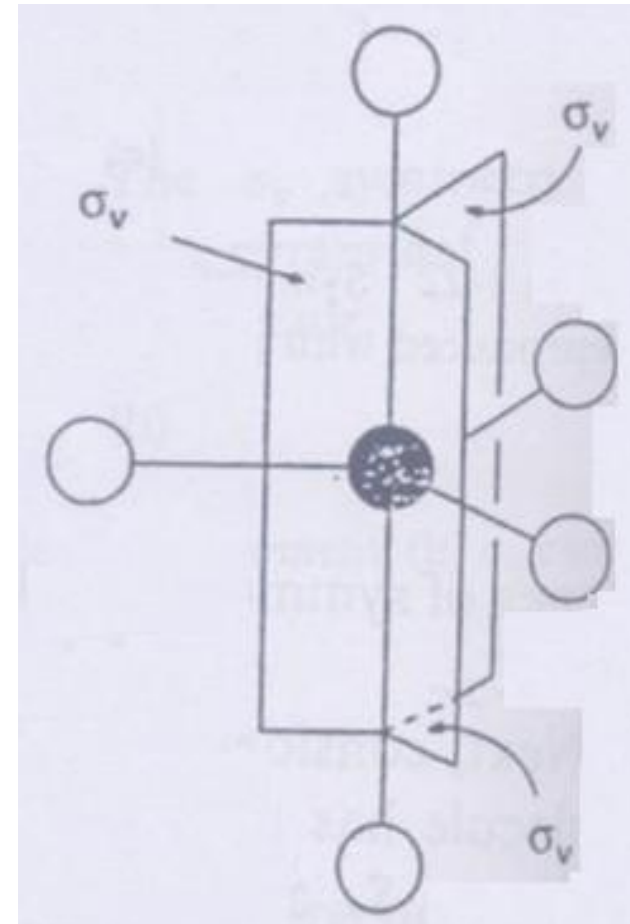
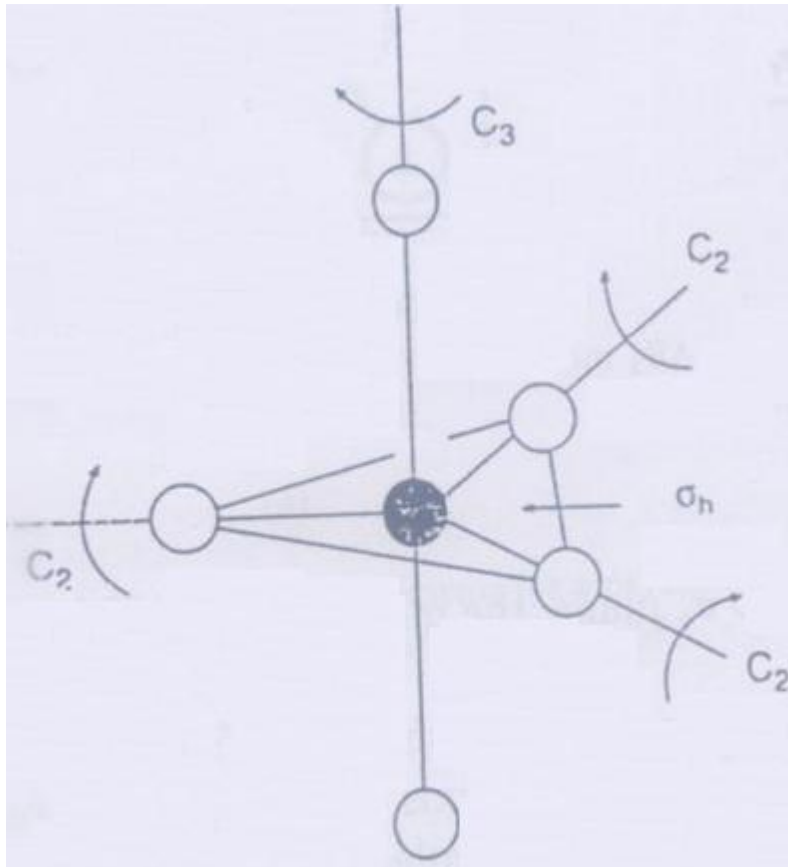
3.3 M t s ví d



3.3 M t s ví d



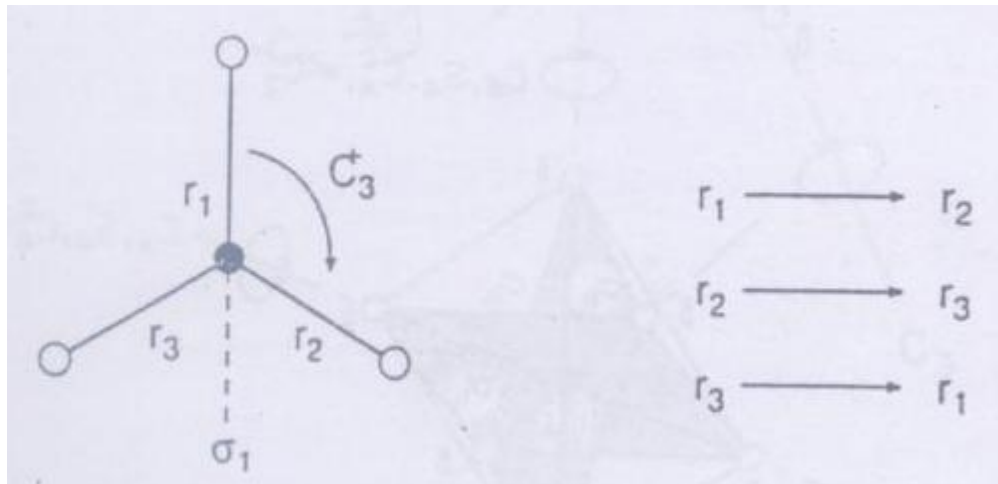
3.3 M t s ví d



4. Bảng đặc trưng

Phân tử Amoniac NH_3 :

- Thuộc nhóm đối xứng C_{3v}
- Có 6 phân tử đối xứng (phần tử đối xứng E, 2 trục C_3 và 3 mặt σ_v)

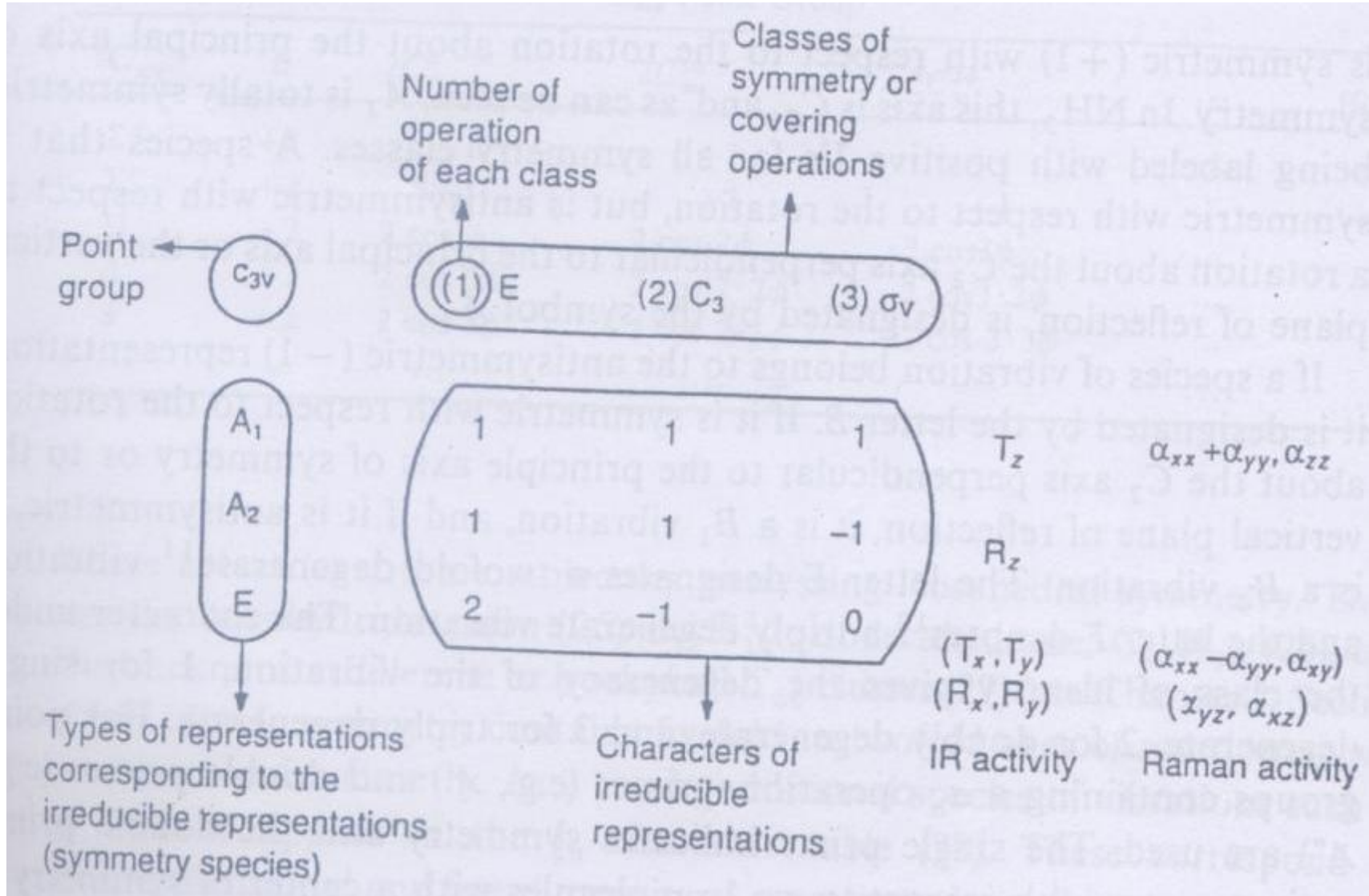


Bi u di n theo ma tr n

$$C_3^+ \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$$

$$E \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$$



Gi i thích b ng c bi u c a nhóm C_{3v}