Groupe Ponctuel de Symétrie (GPS)

L'ensemble de toutes les transformations de symétrie d'une molécule donnée est appelée son groupe de symétrie !

On parle du groupe ponctuel de symétrie (GPS) de la molécule, car il y a toujours un point invariant par toutes les OPSY.

Définition mathématique d'un groupe

D'une façon générale pour qu'un ensemble d'élément A, B, C…etc. forme un groupe mathématique ; noté G il faut que les règle suivants sont vérifier :

1- le produit de deux éléments quelconques A et B de G doit être un élément C de G : $A \times B = C \in G$

2- la combinaison n'est pas forcément commutative

$$A \times B = C \; et \; B \times A = D$$

Avec $C \neq \; D \in G$

3- la multiplication des éléments du groupe doit être associative

∀ Les éléments $A, B \; et \; C;\; A(BC) = (AB)C$

4-

il existe un élément neutre unique E de la loi de composition :

$$EA = AE = A$$

5-

tout élément du groupe admet un inverse dans le groupe :

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E$$

Exemple

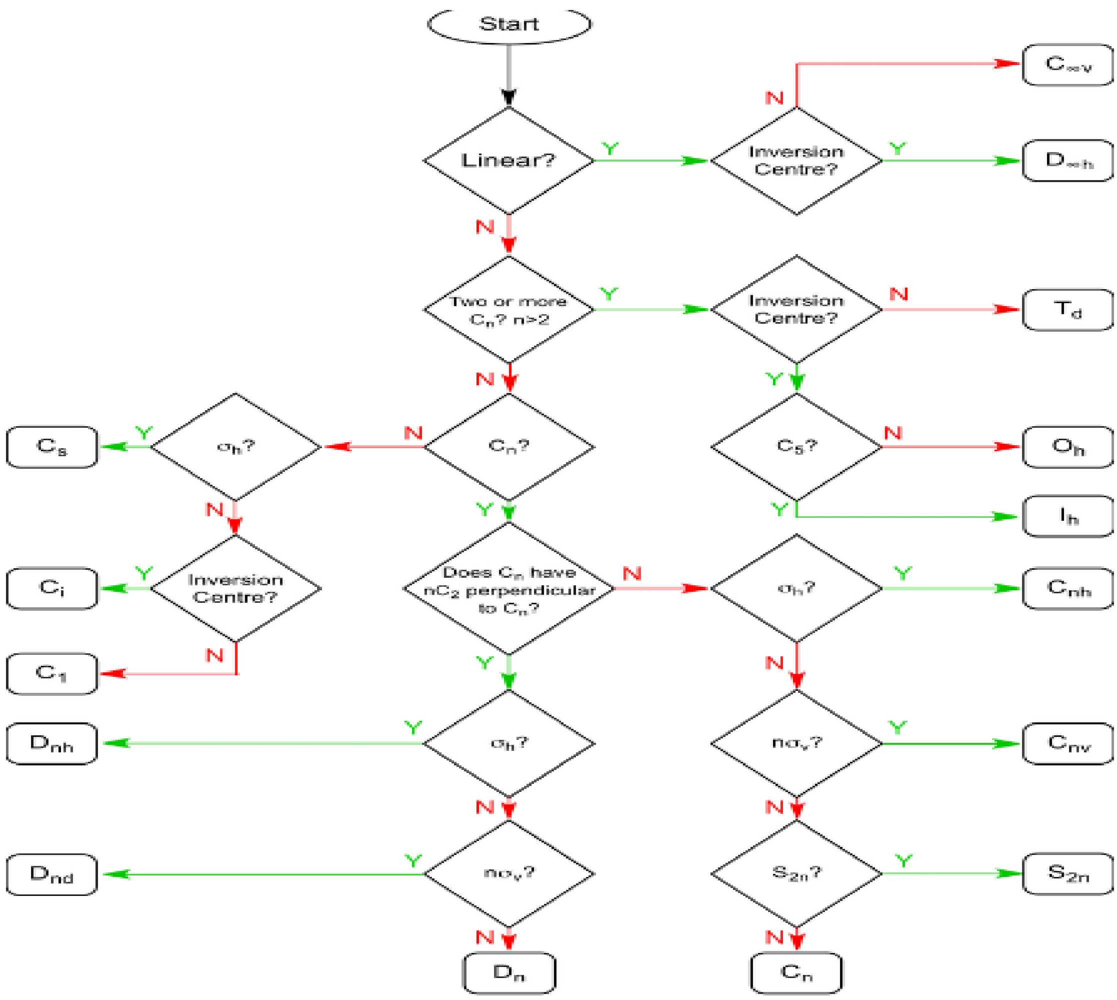
Le groupe de symétrie de H_2O est constitué de 04 éléments de symétrie: E, C_2 (z), $\sigma_v(\sigma_{yz})$, $\sigma_v(\sigma_{xz})$

L'ensemble de produits des éléments de symétrie est donnée par la table de multiplication du groupe

	E	C_2 (z)	σ_{yz}	σ_{xz}
E	E	C_2 (z)	σ_{yz}	σ_{xz}
C_2 (z)	C_2 (z)	E	σ_{xz}	σ_{yz}
σ_{yz}	σ_{yz}	σ_{xz}	E	C_2 (z)
σ_{xz}	σ_{xz}	σ_{yz}	C_2 (z)	E

Nomenclature et procédure d'identification des groupes de symétrie

- L'objectif est de déterminer l'ensemble des opérations de symétrie caractérisent une molécule ; c'est-à-dire son GPS
- Chaque GPS est caractérisé par une dénomination précise que l'on retrouve à l'aide de l'organigramme suivant :

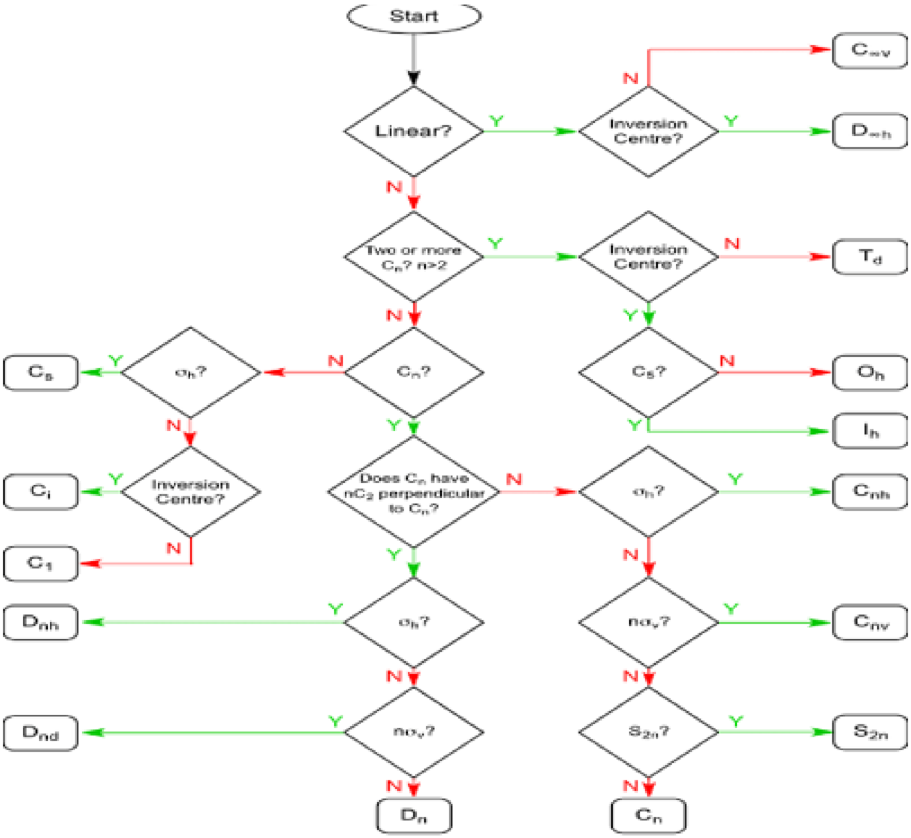


Exemple

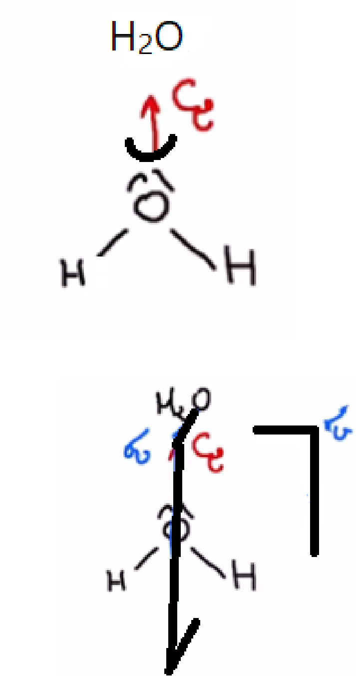
A l'aide de l'organigramme précèdent identifier les GPS des molécules suivantes :

H_2O, NH_3, BH_3 , C_6H_6 et CH4.

H_2O

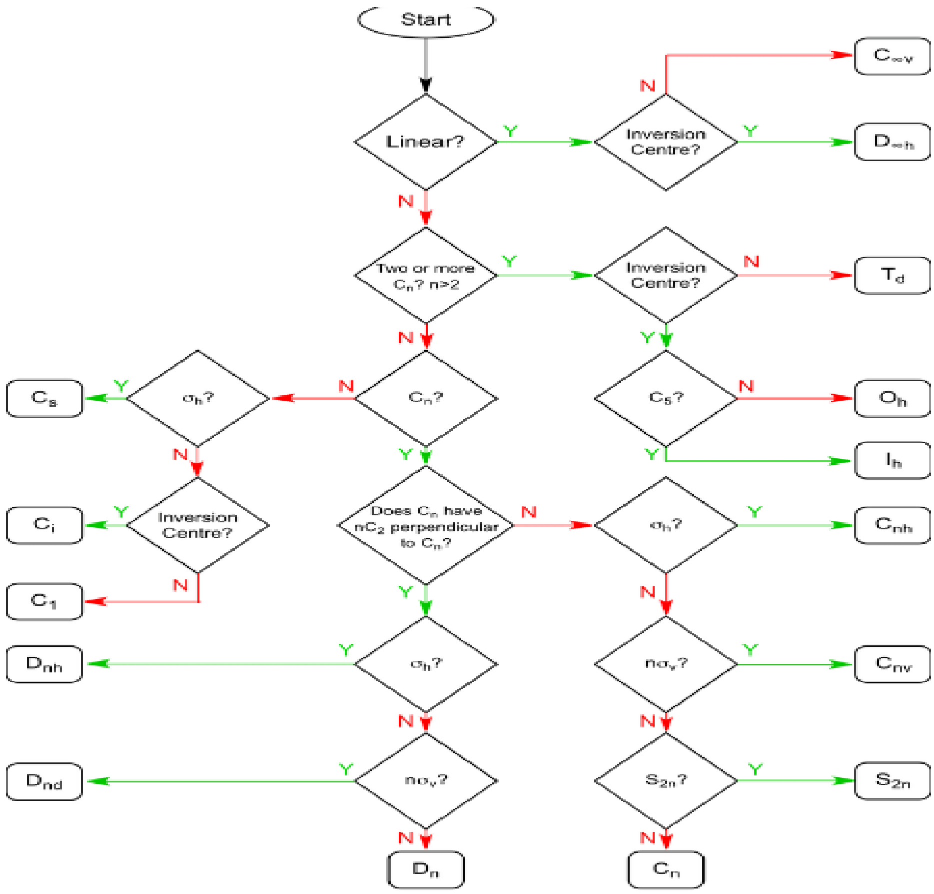


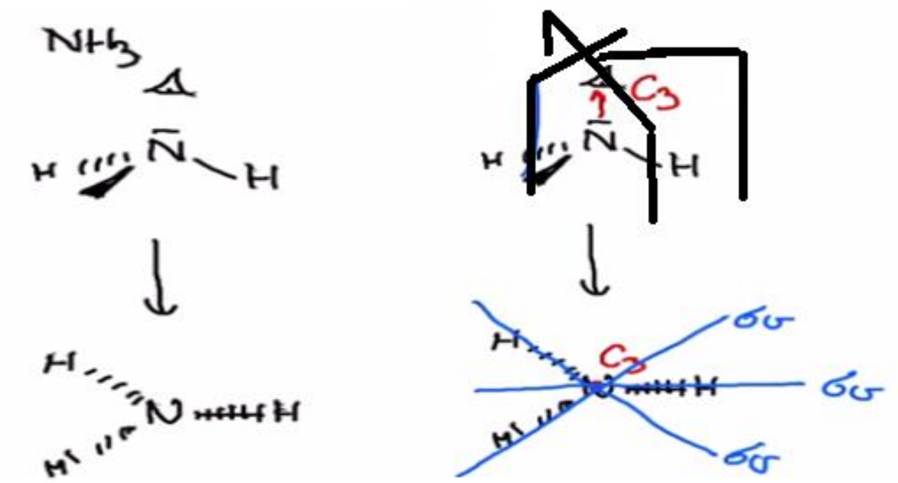
Start
Linear?
Inversion Centre?
C∞v
D∞h
Two or more Cn? n>2
Inversion Centre?
Td
Cn?
C5?
Oh
Ih
σh?
Cs
Inversion Centre?
Ci
C1
Does Cn have nC2 perpendicular to Cn?
σh?
Cnh
σh?
Dnh
nσv?
Cnv
nσd?
Dnd
S2n?
S2n
Dn
Cn



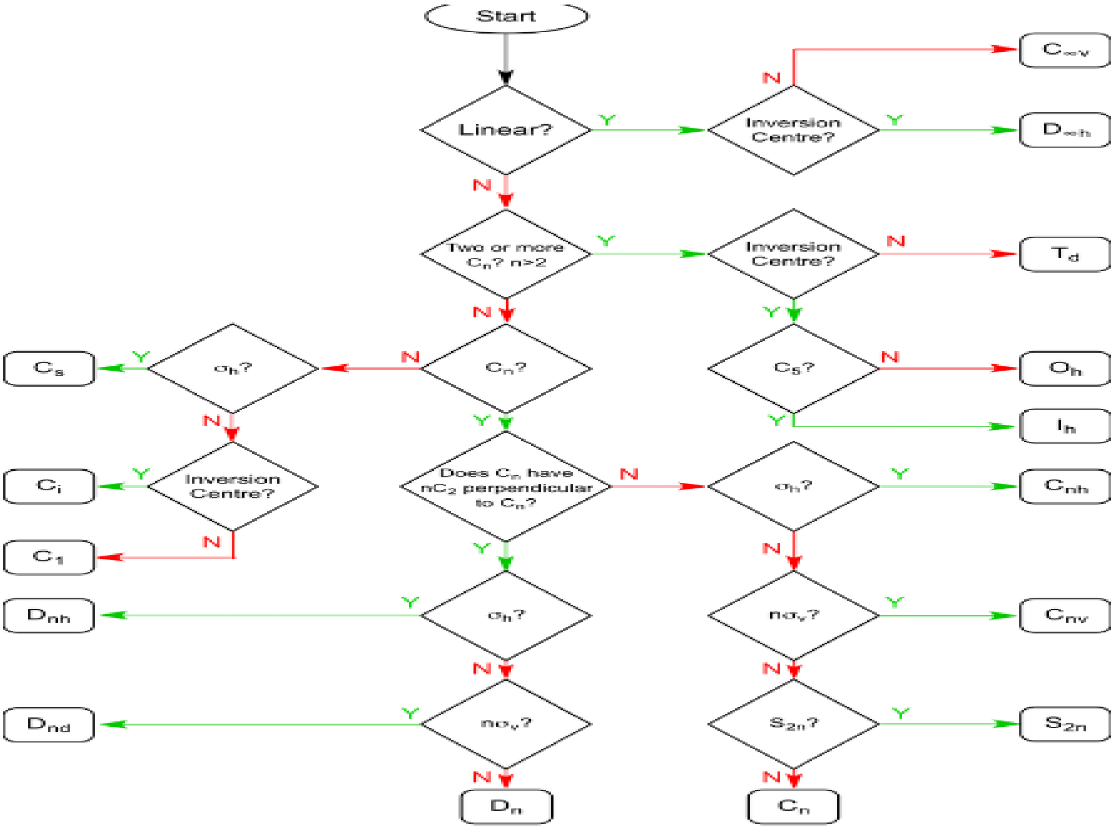
H2O

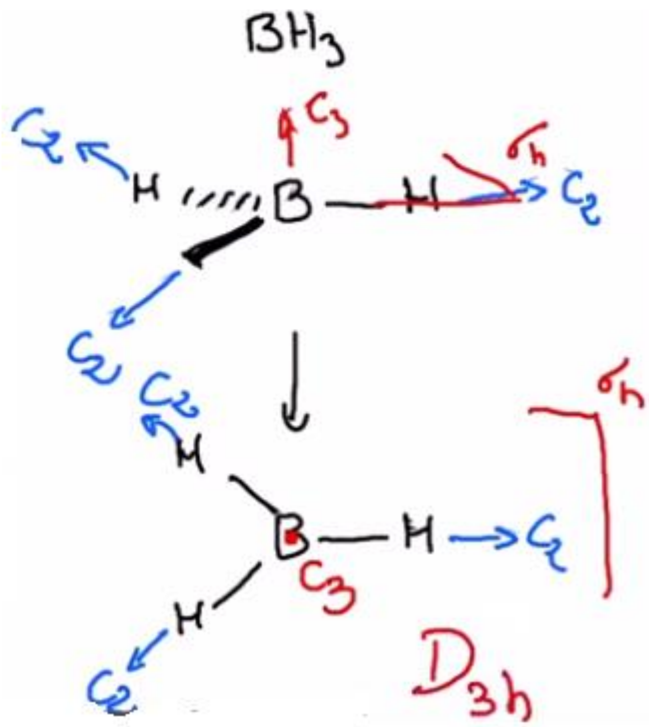
C_2V

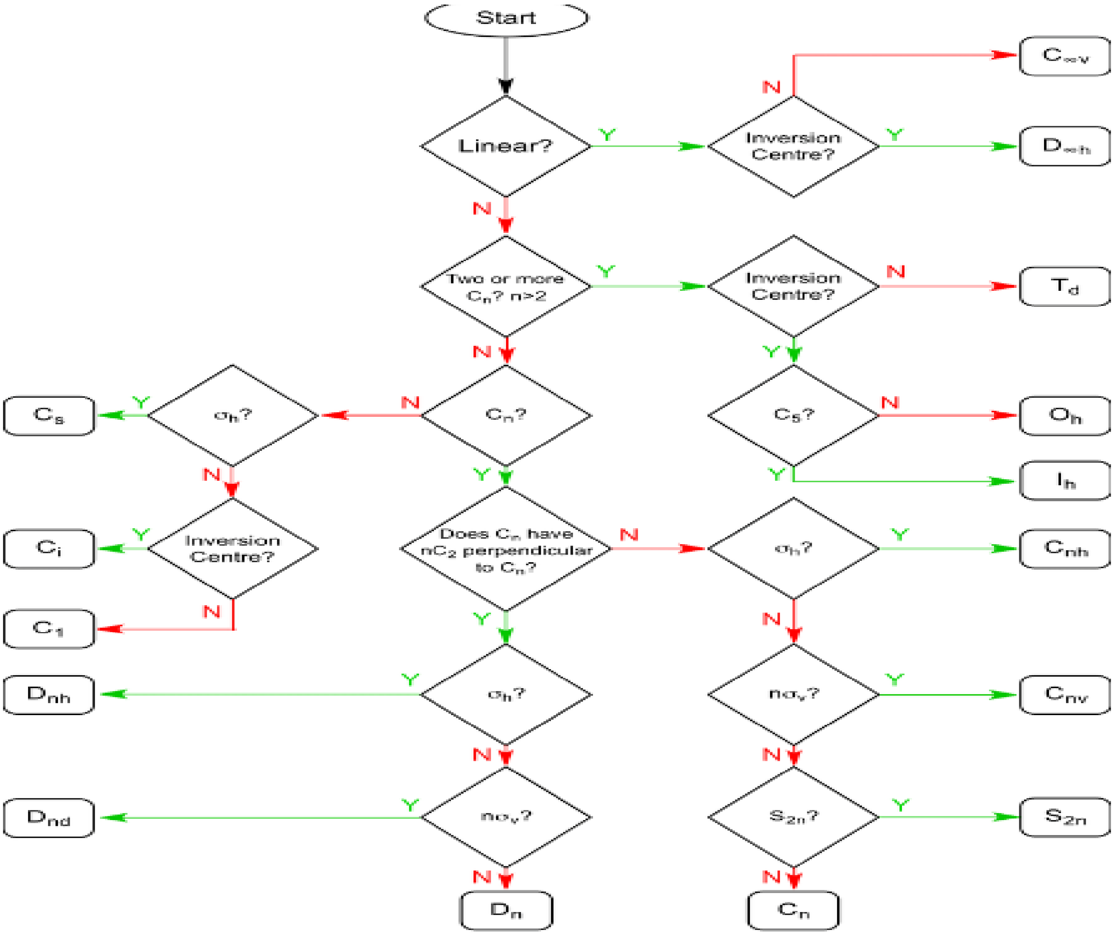

Start
Linear?
Inversion Centre?
C∞v
D∞h
Two or more Cn? n>2
Inversion Centre?
Td
Cn?
σh?
Cs
C5?
Oh
Ih
Inversion Centre?
Ci
C1
Does Cn have nC2 perpendicular to Cn?
σh?
Cnh
σh?
Dnh
nσv?
Cnv
nσv?
Dnd
S2n?
S2n
Dn
Cn

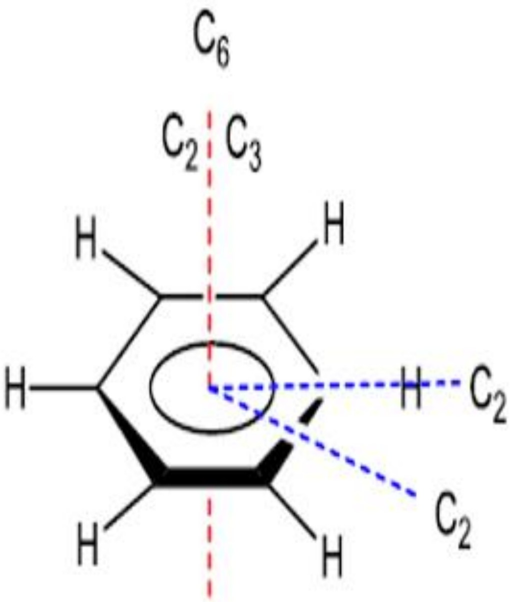

NH3
C3
C3

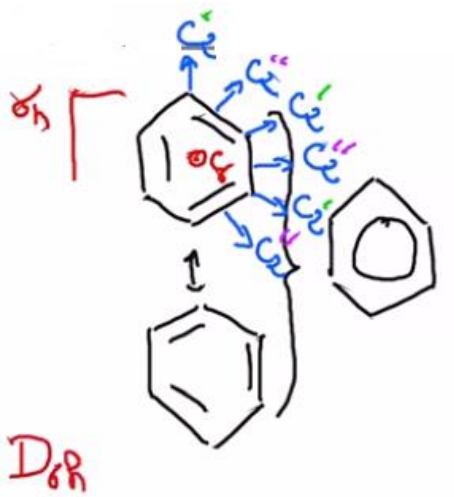
C_3V

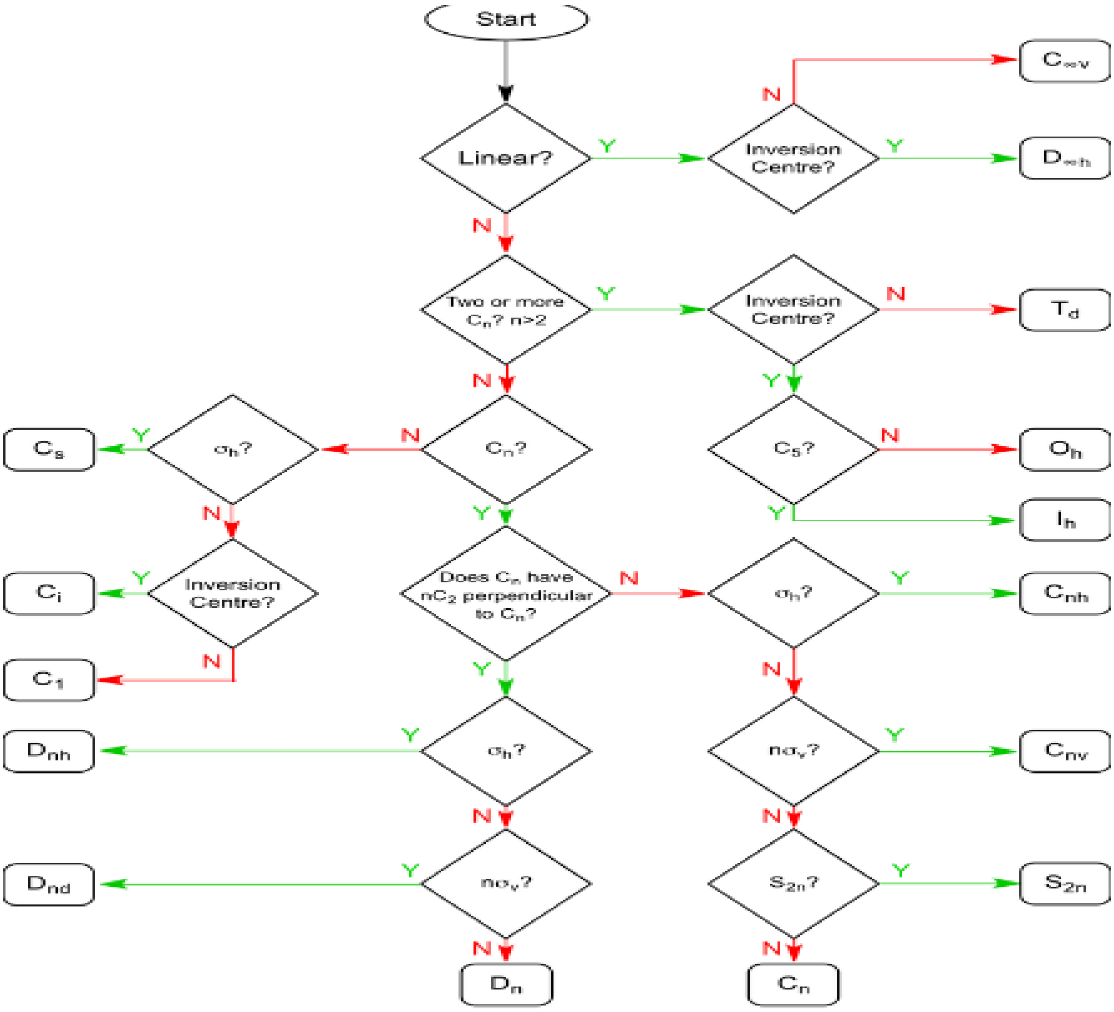

Start
Linear?
Inversion Centre?
$C_{\infty v}$
$D_{\infty h}$
Two or more C_n? n>2
Inversion Centre?
T_d
C_5?
O_h
I_h
C_n?
σ_h?
C_s
Inversion Centre?
C_i
C_1
Does C_n have nC_2 perpendicular to C_n?
σ_h?
C_{nh}
$n\sigma_v$?
C_{nv}
S_{2n}?
S_{2n}
C_n
σ_h?
D_{nh}
$n\sigma_d$?
D_{nd}
D_n
Y
N

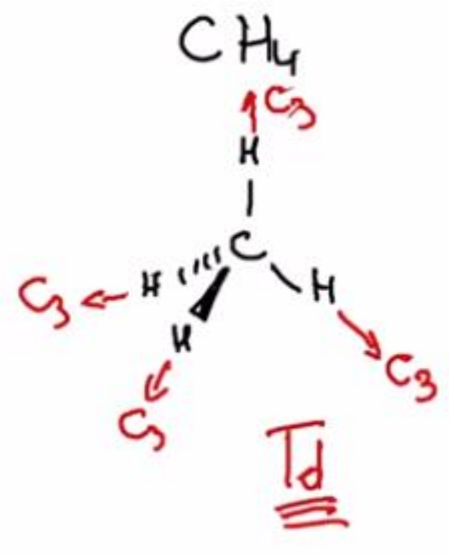

BH_3
C_3
C_2
σ_h
H
B
D_{3h}


Start
Linear?
Inversion Centre?
$C_{\infty v}$
$D_{\infty h}$
Two or more C_n? n>2
Inversion Centre?
T_d
C_n?
C_5?
O_h
I_h
σ_h?
C_s
Inversion Centre?
C_i
C_1
Does C_n have nC_2 perpendicular to C_n?
σ_h?
C_{nh}
σ_h?
D_{nh}
$n\sigma_v$?
C_{nv}
$n\sigma_d$?
D_{nd}
S_{2n}?
S_{2n}
D_n
C_n
Y
N

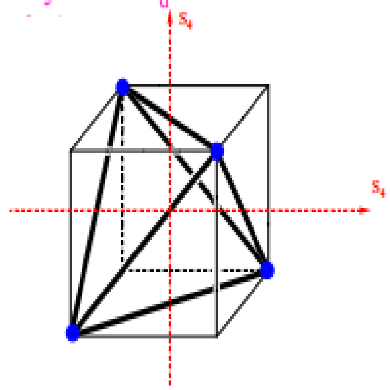

C_6
C_2
C_3
C_2
C_2
H


σ_h
D_{6h}


Start
Linear?
Inversion Centre?
$C_{\infty v}$
$D_{\infty h}$
Two or more C_n? n>2
Inversion Centre?
T_d
C_5?
O_h
I_h
C_n?
σ_h?
C_s
Inversion Centre?
C_i
C_1
Does C_n have nC_2 perpendicular to C_n?
σ_h?
C_{nh}
σ_h?
D_{nh}
$n\sigma_v$?
C_{nv}
$n\sigma_v$?
D_{nd}
S_{2n}?
S_{2n}
D_n
C_n
Y
N


CH_4
C_3
T_d

T_d tétraèdre: contient 3 axes S_4, 4 axes C_3 et 6 plans de symétrie σ_d.



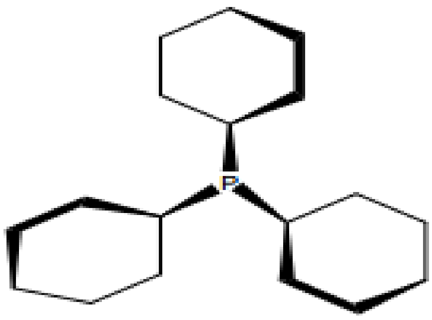
S_4, $S_4^2 \equiv C_2$, S_4^3 et $S_4^4 \equiv E$
C_3, C_3^2 et $C_3^3 \equiv E$
σ_d.
E
Il n'y a pas de centre d'inversion.
exemples: SiF_4, ClO_4^-, $Ni(CO)_4$

O_h octaèdre: L'octaèdre et le cube possèdent les mêmes éléments de symétrie.
3 axes C_4 (également S_4), quatre axes C_3 (également S_6), 6 axes C_2', 3 plans σ_h, 6 plans σ_d.

exemples: AlF_6, SF_6, $[Fe(CN)_6]^{3-}$

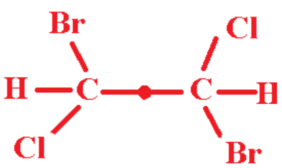
Les groupes uni axiaux Cn

Ils contiennent l'identité et l'élément Cn: triphénylphosphine C_3



Les groupes Ci

Ils contiennent l'identité et l'élément i

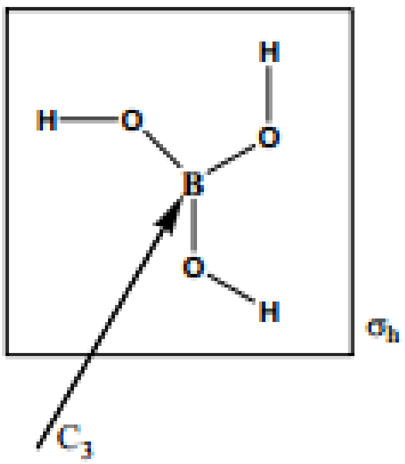


Les groupes Cnh

Ils contiennent en plus de l'identité un axe de rotation d'ordre n et un plan horizontal σh.

Ils comprennent les S_n^m qui résultent du produit de C_n^m et de σh(n impair)

Exemple l'acide borique



Les groupes Sn

Ils contiennent E et *seulement l'élément Sn*!

On peut montrer que pour n impair (n=3, 5, ..), l'ensemble des opérations autour de cet axe de rotation-réflexion est le même que celui qui forme le groupe Cnh:

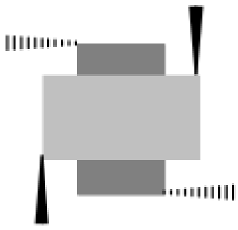
pour C_{3h}: C_3, C_3^2, E, σ_h, S_3 , S_3^5
pour S_3: S_3, $S_3^2 \equiv C_3^2$, $S_3^3 \equiv \sigma_h$, $S_3^4 \equiv C_3$, S_3^5, $S_3^6 \equiv E$

maintenant n pair:

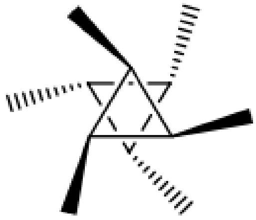
S_2: $S_2 \equiv i$ groupe C_i

S_4: $\mathbf{S_4}$, $S_4^2 \equiv \mathbf{C_2}$, $\mathbf{S_4^3}$, $S_4^4 \equiv \boldsymbol{E}$ les 4 éléments (en gras) forment un groupe. Ce groupe contient toujours un axe $\mathbf{C_{n/2}}$ colinéaire à $\mathbf{S_n}$.

S_4



S_6



Groupes linéaires

$\mathbf{C_{\infty v}}$ linéaire HCN

$\mathbf{D_{\infty h}}$ linéaire CO_2