



Conciencia Tecnológica

ISSN: 1405-5597

contec@mail.ita.mx

Instituto Tecnológico de Aguascalientes  
México

Medina Valtierra, Jorge; Frausto Reyes, Claudio  
La Simetría Molecular  
Conciencia Tecnológica, núm. 27-30, 2005  
Instituto Tecnológico de Aguascalientes  
Aguascalientes, México

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=94403012>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

# La Simetría Molecular

Divulgación Científica

Dr. Jorge Medina Valtierra <sup>1,2</sup>, Dr. Claudio Frausto Reyes <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica

Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Av. A. López Mateos No.1801 Ote.

Fracc. Bona Gens, Aguascalientes 20256, Ags. Tel.: 01(449) 9105002 Ext.159, fax: 01 (449) 9700423

<sup>2</sup>Centro de Investigaciones en Optica, A. C., Unidad Aguascalientes. Prol. Constitución No. 607,

Fracc. Reserva de Loma Bonita, Aguascalientes 20200, Ags.. E-mail: [jomeval@aol.com](mailto:jomeval@aol.com)

## Resumen

La *simetría* de una molécula determina muchas de sus propiedades. El estudio de la *Simetría Molecular* es muy importante porque permite completar análisis teóricos y experimentales sobre la estructura de las moléculas. Sus principios básicos son aplicados en las teorías de la química cuántica, la espectroscopia molecular y otros estudios de física y química.

**Palabras clave:** Elementos de simetría, espectroscopia molecular, grupos puntuales.

## Introducción

Sin duda alguna, la belleza y el orden de las cosas dependen de su *simetría*. Este concepto aplicado a las moléculas, abarca varios tipos de simetría siendo los más comunes aquellos que se refieren a la *rotación* y/o *traslación* de un elemento o grupo de ellos o bien, a las imágenes reflejadas de elementos que definen la *simetría especular* [1].

Cuando se da vueltas a un balón colocado en la punta de un dedo (ver figura 1), nos parece que el balón no cambia debido al fenómeno de la *simetría rotacional*.

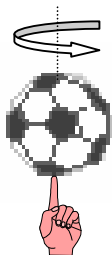


Figura 1. Rotación de un balón

Una serie alineada de elementos iguales y del mismo color (iguales características) presenta *simetría traslacional*, pues es indistinguible esta serie de otra

donde el primer elemento ha sido colocado al final de la fila como se señala en la figura 2.

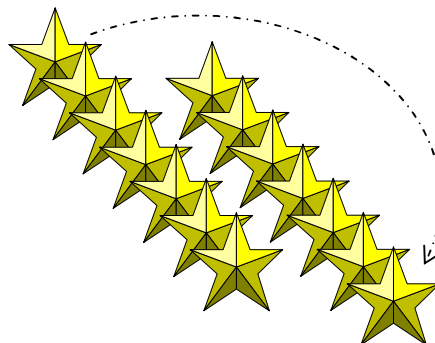


Figura.2. Filas de elementos idénticos.

Nosotros mismos somos indistinguibles, salvo por pequeños detalles, de la imagen reflejada en un espejo (ver figura 3). A esto se le conoce como *simetría especular*.

El objetivo de este escrito es analizar algunos elementos de simetría puntal en moléculas tales como la *identidad*, *acción*, *ejes*, *planos* y *centros*. Esto es de gran ayuda para que estudiantes de cursos básicos de Química entiendan mejor la estructura de las moléculas y la aplicación de técnicas analíticas en la identificación y cuantificación de compuestos químicos.

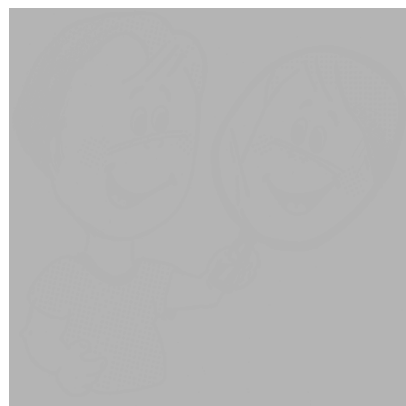


Figura .3. Imagen especular de un individuo.

Como soporte al objetivo perseguido, se dan algunos ejemplos con moléculas sencillas como aquellas del agua, amoníaco y benceno. También se mencionan algunas técnicas espectroscópicas, muy usadas hoy en día, y que basan sus principios en las propiedades de las moléculas, principalmente en su *simetría*.

### Simetría de las moléculas

Las moléculas son un *arreglo espacial* de átomos que determina su simetría y por consiguiente define los elementos de simetría propios de la molécula. En una transformación coordinada de una molécula toman parte diversos elementos de simetría [2].

### Elementos de simetría en las moléculas

- 1) *Identidad, I*. Esta es una propiedad que todas las moléculas tienen y es la identificación de la misma al permanecer inamovible, o bien al hacerla girar  $360^\circ$  alrededor de un eje principal queda la molécula en su posición original. A este parámetro también se le denomina como  $C_1$  de acuerdo a la notación espectroscópica llamada de **Schoenflies**, figura 4.

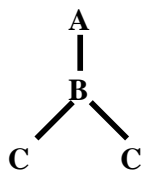


Figura 4. Molécula sin movimiento aparente.

- 2) *Acción de simetría A*. Es el movimiento molecular de giro que al terminarse, la molécula queda aparentemente sin cambios (ver figura 5). Así que, una molécula tiene  $p$  movimientos de simetría.

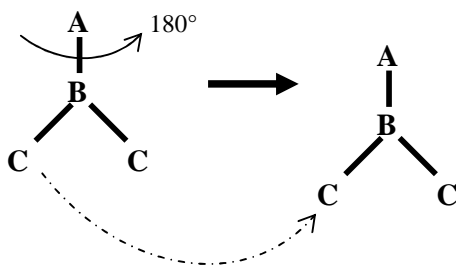


Figura 5. Rotación de la molécula,  $180^\circ$ .

- 3) *Centro de simetría, i*. Punto simétrico que parece inamovible durante uno o más movimientos de simetría, tal como se indica en la figura 6.

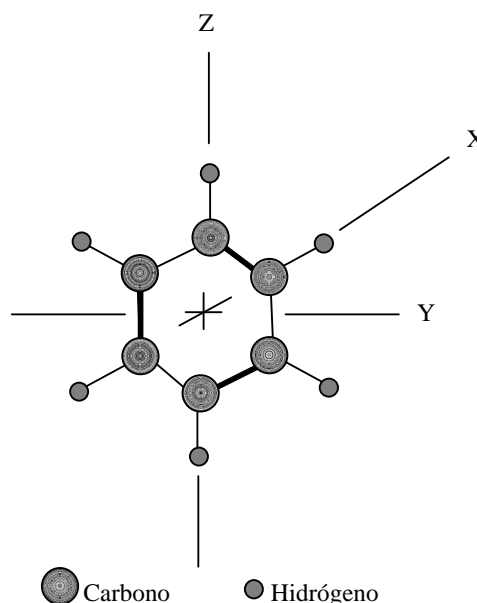


Figura 6. Centro de simetría en el benceno.

En ocasiones coincide el centro de simetría con un átomo de la molécula en cuestión. Sin embargo, no todas las moléculas poseen un centro de simetría. Ciertas moléculas tienen *isómeros* (moléculas con el mismo número y tipo de átomos pero en diferente posición espacial) que no presentan un centro de simetría. Por ejemplo, de los isómeros del dibromodichloroetano (CHBrCl-CHBrCl), sólo el isómero *trans* tiene centro de simetría.

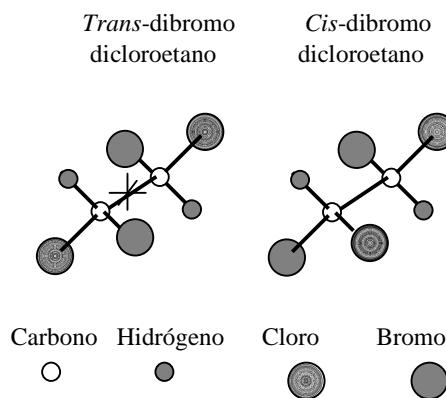


Figura 7. Centro de Simetría en la molécula de *Trans*-Dibromodichloroetano.

- 4) *Eje de simetría,  $C_p$* . Línea imaginaria alrededor de la cual se ejecuta un movimiento de simetría en la molécula. La rotación a través de este eje en ángulos de  $360^\circ/p$  ofrece configuraciones indistinguibles en la molécula.

A continuación se esquematizan ejemplos de moléculas sencillas como el agua y el amoníaco que tienen diferentes ejes de simetría [3]. La molécula de agua,  $H_2O$  (dos átomos de hidrógeno unidos a un átomo de oxígeno), puede girar  $180^\circ$  con un movimiento de rotación sin cambio aparente, es decir; tiene dos posiciones simétricas alrededor de un *eje diada*,  $C_2$ . Esto se muestra en la figura 8.

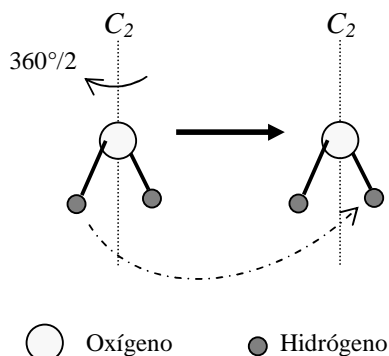


Figura 8. Eje de simetría  $C_2$  para la molécula de agua.

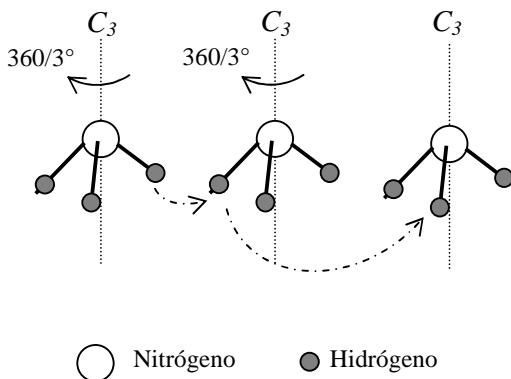


Figura 9. Eje de simetría  $C_3$  para la molécula de amoníaco.

En la figura 9 se señala que la molécula de amoníaco,  $NH_3$ , tiene un eje tríada  $C_3$  con tres posiciones de rotación de  $120^\circ$  cada una.

La molécula del benceno,  $C_6H_6$  (seis átomos de carbono unidos entre sí a través de enlaces dobles formando un anillo y seis átomos de hidrógeno unidos cada uno a un átomo de carbono), presenta 6 posiciones simétricas de  $60^\circ$  cada una (ver figura 10). Esto, porque la distribución de electrones en los 6 enlaces es simétrica. (Para estimular la imaginación del lector, tanto la rotación como las siguientes 5 posiciones de esta molécula, se omiten deliberadamente).

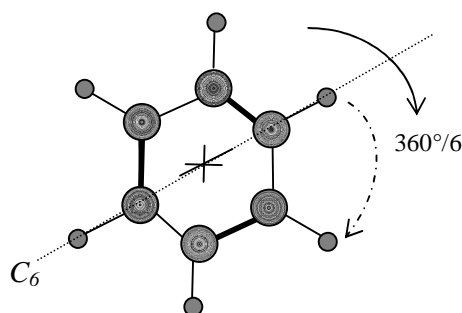


Figura 10. Eje de simetría  $C_6$  para el benceno.

Como resulta obvio, si la molécula analizada es más compleja, es más difícil visualizar todos los elementos de simetría, sobre todo, los movimientos [1].

- 5) *Plano de simetría,  $\sigma$* . Plano imaginario donde se produce un reflejo indistinguible de la mitad de la molécula.

Los planos-espejo comúnmente intersectan el eje de simetría y determinan el reflejo de una molécula. La esquematización de los planos en las moléculas de agua y amoníaco se presentan en la figura 11.

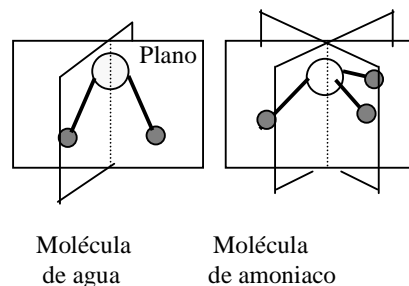


Figura 11. Planos verticales de simetría en el agua y en el amoníaco.

Las anteriores moléculas tienen un sólo tipo de planos que son llamados *planos verticales* y se denotan como  $\sigma_v$ . Este es un plano especular o simplemente espejo que incluye al *eje de simetría rotacional*. Por otro lado, un plano horizontal, definido como  $\sigma_h$ , es un espejo imaginario colocado perpendicularmente al eje principal de rotación. Como ejemplo, en la figura 12 se presenta la molécula del pentacloruro de fósforo,  $\text{PCl}_5$  que tiene un plano horizontal.

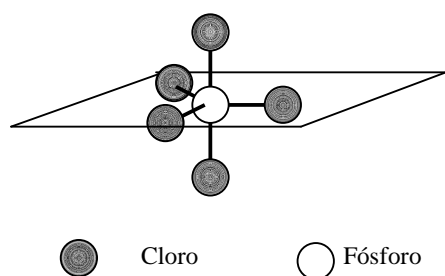


Figura 12. Plano horizontal de simetría en la molécula de  $\text{PCl}_5$ .

Además, en ciertas moléculas existen planos especulares diagonales los cuales incluyen el *eje de simetría principal* en la molécula y que además bisecta (parte a la mitad) al ángulo resultante entre un par de ejes  $C_2$  perpendiculares al eje principal. Un ejemplo es la molécula de etano,  $\text{C}_2\text{H}_6$  (ver figura 13). Así como se presenta la molécula de etano, ésta tiene tres ejes  $C_2$ , un plano horizontal  $\sigma_h$ , un plano vertical  $\sigma_v$  y tres planos diagonales  $\sigma_d$ .

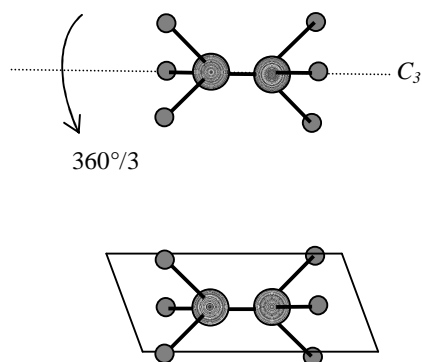


Figura 13. Eje de simetría principal y un plano diagonal en la molécula de etano.

- 6) *Eje de rotación-reflexión,  $S_p$* . La rotación a través de este eje en ángulos de  $360^\circ/p$ , seguido de una reflexión en un plano perpendicular al eje,

produce una configuración indistinguible del original (figura 14).

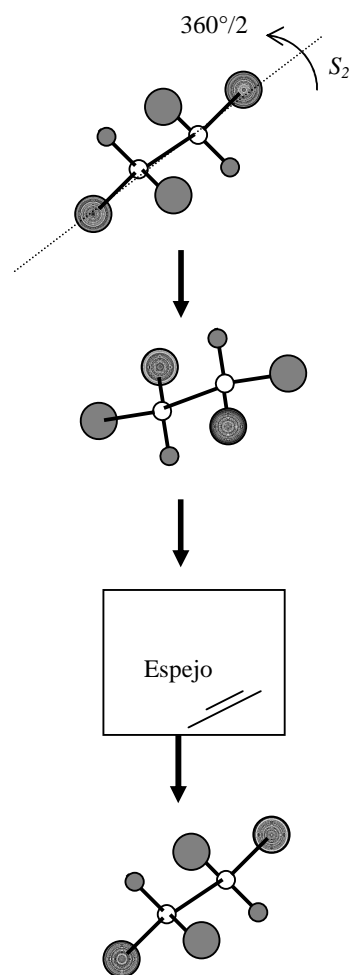


Figura 14. Eje de rotación-reflexión en la molécula del *Trans-dibromodichloroetano*.

El eje  $S_p$  está definido como un *eje impropio* ya que se compone de la combinación de dos movimientos diferentes. Para que esto se lleve a cabo no es estrictamente necesario que la molécula que se mueve, contenga ni el eje  $C_p$  ni el plano  $\sigma_h$ .

Una molécula lineal tiene un número infinito de movimientos simétricos así que se le atribuye un eje de simetría  $C_\infty$  y eje de rotación-reflexión  $S_\infty$ . (Ver figura 15).

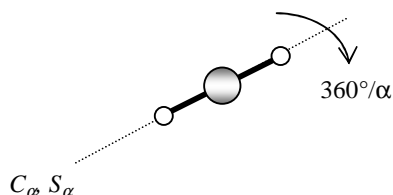


Figura 15. Eje de rotación-reflexión para una molécula lineal.

Una aplicación práctica de los movimientos de simetría de las moléculas está en las técnicas de análisis por espectroscopia. Cuando un haz de fotones incide sobre una molécula, produce una redistribución de las cargas definido este fenómeno como *momento dipolar* [4]. Tal redistribución de cargas polares da como consecuencia una vibración de los enlaces los cuales dependen de la simetría de las moléculas. Para que se den estas vibraciones debe haber una transferencia de energía del haz de fotones hacia la molécula (espectro de absorción) que posteriormente libera parte o toda la energía esparciendo fotones con la misma longitud de onda a los incidentes (Efecto Rayleigh) o con diferente longitud de onda (Efecto Raman).

Los patrones de absorción-emisión que conllevan fotones con diferente energía emitida, sirven de identificación de la molécula o del material analizado. Una molécula cualquiera presenta varios modos de vibración que pueden ser simétricos o asimétricos con respecto a los elementos de simetría. Por lo tanto una molécula presenta varios picos pero en intensidad y posición únicos lo cual también sirve para cuantificar los elementos y compuestos químicos, bioquímicos y material biológico presente en una muestra.

No es una regla general que a medida que aumente el número de átomos en las moléculas, aumenta la dificultad para definir los elementos de simetría o para predecir las bandas de vibración.

Un ejemplo relativamente simple es la relación entre la estructura y las propiedades físicas de la molécula del fullereno (ver figura 16), molécula orgánica descubierta hace apenas 15 años en los residuos de la combustión a altas temperaturas.

Esta molécula es en sí una pelota de fútbol compuesta por la unión simétrica de 60 átomos de carbono, y que por consiguiente tal molécula es conocida en una jerga más popular como futboleno [5]. Los modos de vibración por la excitación de radiaciones infrarroja (IR) y por un haz láser (Raman)

en el Fullereno ( $C_{60}$ ) son muy interesantes sobre todo por la simplicidad que presentan. En una molécula no lineal de  $N$  átomos se tienen  $3N-6$  vibraciones normales [4]., así que al aplicar la anterior fórmula se esperarían 174 modos vibracionales para esta molécula. Sin embargo, apenas si se detectan 4 bandas o picos tipo IR y sólo 10 picos en el espectro Raman debido a la alta simetría que tiene esta molécula.

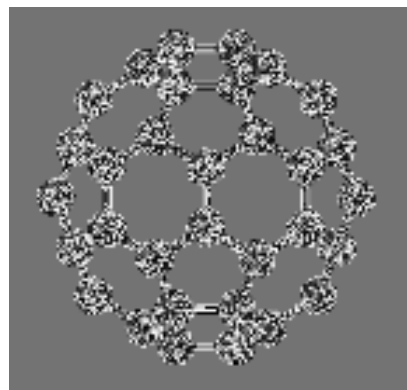


Figura 16. Estructura del fullereno.

En la figura 16 se nota que la molécula  $C_{60}$  tiene la forma regular de un *icosaedrón truncado* con 20 caras hexagonales y 12 caras pentagonales, donde cada pentágono está rodeado de 5 hexágonos y a su vez cada hexágono comparte sus caras con 3 pentágonos y 3 hexágonos. Además, todos los átomos de carbono son equivalentes porque cada uno de ellos une dos hexágonos y un pentágono.

Otra característica importante es que presenta dos grupos de enlaces C-C, los que enlazan dos caras hexagonales presentan una longitud de aproximadamente de 1.39 Å mientras que aquellos que enlazan una cara hexagonal con una pentagonal tienen una longitud mayor de 1.46 Å. [5]. El grupo de los icosaedros al que pertenece esta peculiar molécula presenta 120 elementos de simetría. Algunos de estos elementos se presentan en la figura 17.

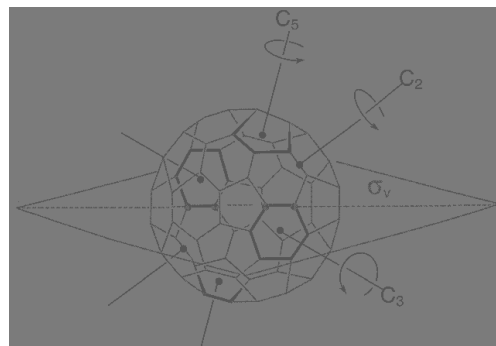


Figura 17. Elementos de simetría en la molécula del Fullereno.

### Grupos puntuales en las moléculas

Los elementos que se han descrito en la sección anterior son *elementos de simetría puntual* debido a que por lo menos uno de sus puntos permanece fijo durante los movimientos de la molécula. Por otro lado, en una molécula pueden existir varios elementos de simetría. De tal manera que para describir la simetría de una molécula, lo más lógico es pensar en proporcionar un listado de todos sus elementos de simetría y además añadir la orientación entre ellos. Se entiende que esto resultaría bastante complicado en la mayoría de los casos.

Afortunadamente, los elementos de simetría en una molécula en particular no son mutuamente excluyentes sino al contrario, son recíprocamente complementarios. Así que la simetría completa de una molécula se puede definir señalando un mínimo necesario de elementos de simetría. Por ejemplo, consideremos la molécula de agua por ser relativamente sencilla además de que atrás ya se esquematizaron sus elementos de simetría. En la molécula de agua existen dos planos especulares que son perpendiculares entre sí y un eje  $C_2$ . Sin embargo la simetría de esta molécula se puede describir con sólo señalar que tiene un eje  $C_2$  y un plano vertical  $\sigma_v$ , ya que la presencia de estos dos elementos hace implícito la existencia de otro plano  $\sigma_v$  perpendicular al primero tal como se nota en las figuras 8 y 11.

En base a lo descrito anteriormente, un conjunto de elementos de simetría se le puede considerar como *grupo puntual* ya que sus elementos son combinados por una operación. Además el sistema debe cumplir con las siguientes propiedades agrupadas en una *ley de combinación* [3]:

#### A. La ley de combinación es asociativa

Esta ley también llamada *multiplicación*, se define como la aplicación de dos o más operaciones de simetría y se describe así;

$$\text{operación } n, \text{ operación } n-1, \dots, \text{ operación } 1$$

y se lee de derecha a izquierda.

La asociación de elementos significa que el producto de  $n$  elementos se pueden agrupar en  $n-1$  formas. Por ejemplo, la asociación de los tres elementos  $\sigma_v$ ,  $\sigma_v$ ,  $C_2$  se puede escribir de dos maneras:

$$\sigma_v(\sigma_v C_2) \text{ o bien; } (\sigma_v \sigma_v)C_2.$$

Sin embargo, en la teoría de grupos, el orden de los factores puede alterar el producto.

#### B. Existe un elemento de identidad en el conjunto

El elemento de identidad ya fue definido anteriormente y representado por el símbolo  $I$ .

Para cualquier elemento de simetría  $A$ , se cumple que;

$$IA = AI = A$$

#### C. El inverso de cada elemento es un elemento del conjunto

Para un elemento de simetría  $A$ , existe su recíproco  $A^{-1}$  tal que;

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

Así para el eje  $C_2$ , su inverso es el mismo elemento  $C_2$  de tal manera que;

$$C_2 C_2 = C_2^2 = I$$

La descripción adecuada de un *grupo puntual* debe de proporcionar la suficiente información acerca de sus propiedades. Para esto, se usa la notación inventada por Schoenflies para determinar el *grupo puntual* de una molécula u objeto.

### Conclusiones

En este escrito de divulgación científica, se presentaron algunos elementos de simetría de un *grupo puntual* aplicados a moléculas. De la misma manera y para un mejor entendimiento, cada elemento de simetría fue acompañado de una ilustración. Aunque estos son algunos de los elementos de simetría más utilizados en la descripción de moléculas, para ampliarlos y profundizar el conocimiento del lector se recomienda leer los artículos citados en este escrito, consultar libros de química orgánica e inorgánica, física molecular, teoría de grupos y espectroscopia, así como consultar notas específicas en páginas Web del Internet.

### Referencias

- [1] Shriver, D.F., Atkins P., Langford C.H., (1994) *Inorganic Chemistry*, Freeman & Co., New York.
- [2] Mason, J., *J. of Chem. Educ.* (1988) Vol. **65**, No. **1**, p. 17.
- [3] Olbris, D. J., J. Herzfeld, (1999) *J. of Chem. Educ.* Vol. **76**, No. **3** p. 349.
- [4] Lagorio, M.G., (2000) *J. of Chem. Educ.* Vol. **77**, No. **11**, p. 1444.
- [5] Habata, Y., S. Akabori, (2001) *J. of Chem. Educ.* Vol. **78**, No. **1** p. 121.