

تقارون در شیمی



۱- تقارون چیست؟ ۲- اجزای تقارون را نام ببرید؟ ۳- گروه نقطه ای چیست؟ ۴- کاربردهای مهم تقارون چیست؟

موضوع:

Symmetry (تقارون): مشابه یا متناظر بودن قسمتی از یک ساختار توسط یک نقطه، خط و صفحه فرضی را تقارون گویند

هدف:

با استفاده از تقارون ما می توانیم شناخت بیشتری از یک مولکول داشته باشیم و در توصیف بسیاری از مباحث از جمله اوربیتال مولکولی (MO)، پراش پرتو ایکس (X-ray)، رزونانس مغناطیس هسته (NMR) و مادون قرمز (Ir) مربوط به مولکول از آن استفاده کنیم.

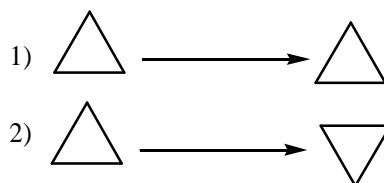
اجزای اصلی تقارون:

۱- اعمال تقارن ۲- عناصر تقارن

اعمال تقارن:

عمل تقارن عبارت از عملی که روی یک جسم انجام می شود، بطوریکه پس از انجام آن هر نقطه جسم روی نقطه معادل (یا شاید همان نقطه) در موقعیت اولیه قرار گیرد. عمل در صورتی تقارن است که دو وضعیت و جهت گیری جسم قبل و بعد از آن حرکت، غیر قابل تشخیص باشد.

(۱) عمل تقارون به شمار می آید ولی (۲) عمل تقارون به شمار نمی آید



عناصر تقارن:

به صورت خط، نقطه یا صفحه می باشند که به ترتیب محور تقارن، مرکز تقارن و صفحه تقارن نامیده می شوند و هر کدام دارای یک یا چند عمل تقارونی هستند.

انواع C_n :

C_n

C_2 چرخش $n = 2, 180^\circ$

C_3 چرخش $n = 3, 120^\circ$

C_4 چرخش $n = 4, 90^\circ$

C_5 چرخش $n = 5, 72^\circ$

C_6 چرخش $n = 6, 60^\circ$

.

.

C_∞ چرخش $n = \infty, (360/\infty)^\circ$

نکته مهم ۱: اگر در محور دوران محض (C_n^m) m و n قابل ساده کردن باشند حتما باید ساده کنیم

مثال: $C_4^2 = C_2$

نکته مهم ۲: اگر در محور دوران محض (C_n^m) m و n یکسان باشند عنصر یکسانی به دست می آید.

منظور از عنصر یکسانی یعنی خود جسم یا مولکول در حالت اولیه خود بدون هیچ تغییری.

$$C_n^m = E$$

نکته مهم ۳: هر محور دوران محض (C_n) به اندازه n تا عمل تقارون انجام می دهد.

مثال: محور C_4 چند عمل تقارون دارد؟ ۴ تا

$$C_4, C_4^2 = C_2, C_4^3, C_4^4 = E$$

نکته مهم ۴: یک مولکول می تواند چند محور چرخشی داشته باشد. از بین آنها محوری اصلی است که

بیشترین درجه (n) را داشته باشد و در صورتیکه محورها دارای درجه یکسان باشند آن محوری اصلی است

که از تعداد اتم بیشتری عبور کند. همچنین اگر محور چرخش محض اصلی (C_n) فرد باشد دارای n تا

محور C_2 است و اگر زوج باشد به اندازه $\frac{n}{2}$ محور C_2' و $\frac{n}{2}$ محور C_2'' است

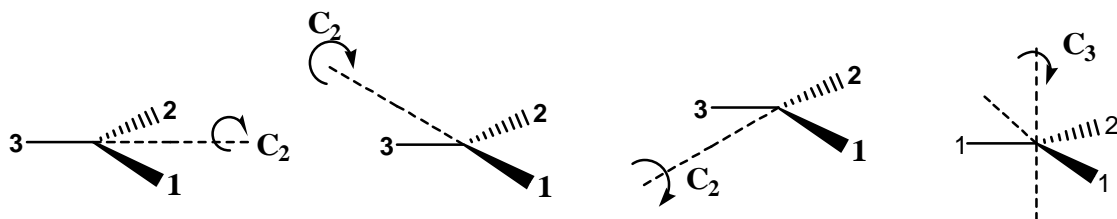
مثال: ساختار مثلثی دارای محور چرخش درجه ۳ و ۲ است. C_3 و C_2

C_3 یکی بیشتر نداریم و محور اصلی است که از مرکز مثلث عبور کرده و ۱، ۲ و ۳ را جابجا می کند.

تعداد عمل تقارون آن سه تا است $C_3, C_3^2, C_3^3 = E$ چون محور اصلی فرد است به اندازه ۳ تا محور

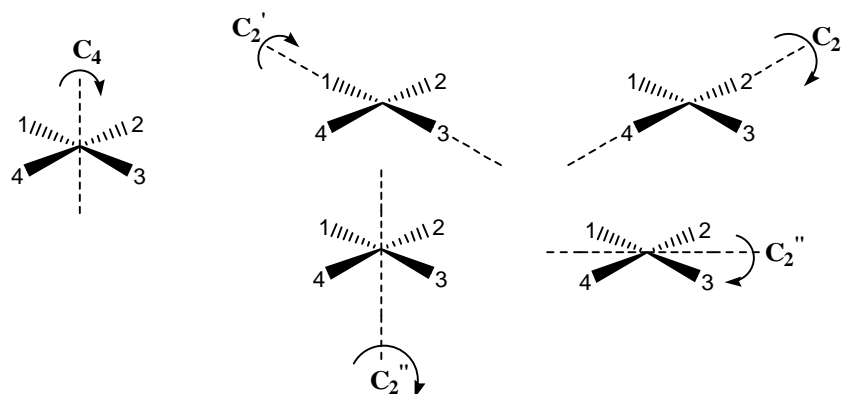
C_2 داریم

سه تا داریم. یکی از C_2 از نقطه ۱ و مرکز عبور کرده و ۲ و ۳ را جابجا می کند دومی از نقطه ۲ و مرکز عبور کرده و ۱ و ۳ را جابجا می کند و سومی از نقطه ۳ و مرکز عبور کرده و ۱ و ۲ را جابجا می کند



مثال: ساختار مربعی دارای محور چرخش درجه ۴ و ۲ است. $C_4, 2C_2', 2C_2''$

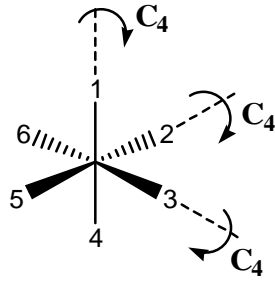
محور C_4 یکی بیشتر نداریم و محور اصلی است که از مرکز مربع عبور کرده و ۱، ۲، ۳، ۴ را جابجا می کند. تعداد عمل تقارون آن چهار تا است. $C_4^2 = C_2, C_4^3, C_4^4 = E$ چون محور اصلی زوج است به تعداد ۴ تا محور C_2 داریم و برای جلوگیری از اشتباه در تشخیص این محورها با محور $C_4^2 = C_2$ این محورها را با پراین و دابل پراین مشخص می کنیم که دو تا محور C_2' و دو تا محور C_2'' است محور C_2' از سه اتم میگذرد ولی محور C_2'' فقط از مرکز می گذرد.



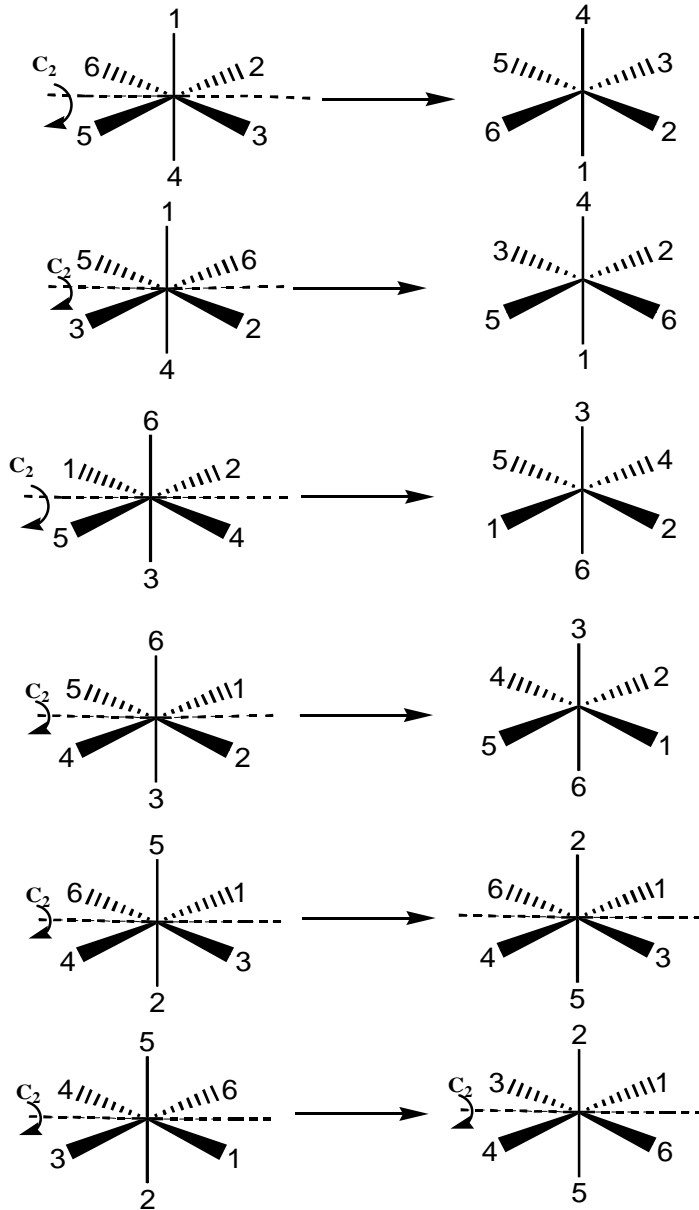
نکته مهم ۵: بعضی از مولکولها دارای چند محور اصلی هستند که درجه آنها یکی است.

مثال: در هشت وجهی سه تا محور اصلی C_4 داریم

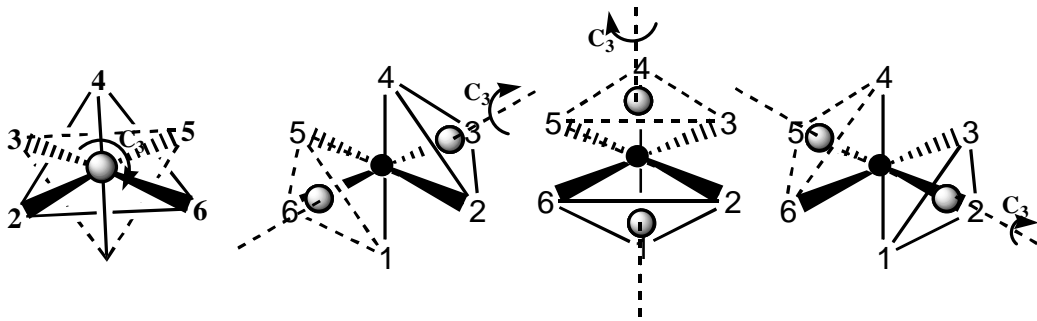
اولین محور C_4 که از اتمهای ۱، ۴ و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای ۲، ۳، ۵ و ۶ را جابجا میکند.
 دومین محور C_4 که از اتمهای ۲، ۵ و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای ۱، ۳، ۴ و ۶ را جابجا میکند.
 سومین محور C_4 که از اتمهای ۳، ۶ و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای ۱، ۲، ۴ و ۵ را جابجا میکند.



در این مولکول ما ۶ تا محور C_2 داریم



این مولکول ما 4 تا محور C_3 داریم



مثال: در چهار وجهی چهار تا محور اصلی C_3 داریم

اولین محور C_3 که از اتم 1 و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای 2، 3 و 4 را جابجا میکند.

دومین محور C_3 که از اتم 2 و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای 1، 3 و 4 را جابجا میکند.

سومین محور C_3 که از اتم 3 و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای 1، 2 و 4 را جابجا میکند.

چهارمین محور C_3 که از اتم 4 و اتم مرکزی میگذرد و اتمهای 1، 2 و 3 را جابجا میکند.

در چهار وجهی سه تا محور اصلی C_2 داریم

اولین محور C_2 که از بین نیمساز اتمهای 1-2 و اتم مرکزی و نیمساز اتمهای 3-4 و اتم مرکزی میگذرد و

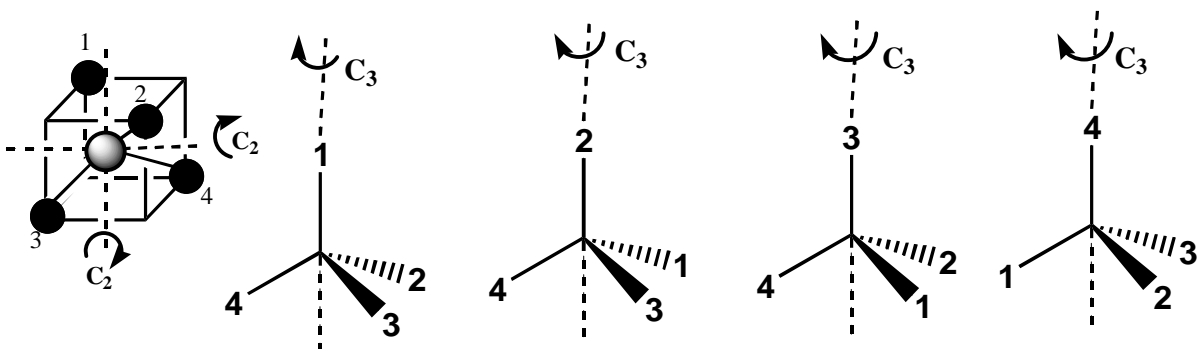
اتمهای 1، 2 و اتمهای 3، 4 را جابجا می کند.

دومین محور C_2 که از بین نیمساز اتمهای 2-3 و اتم مرکزی و نیمساز اتمهای 1-4 و اتم مرکزی میگذرد

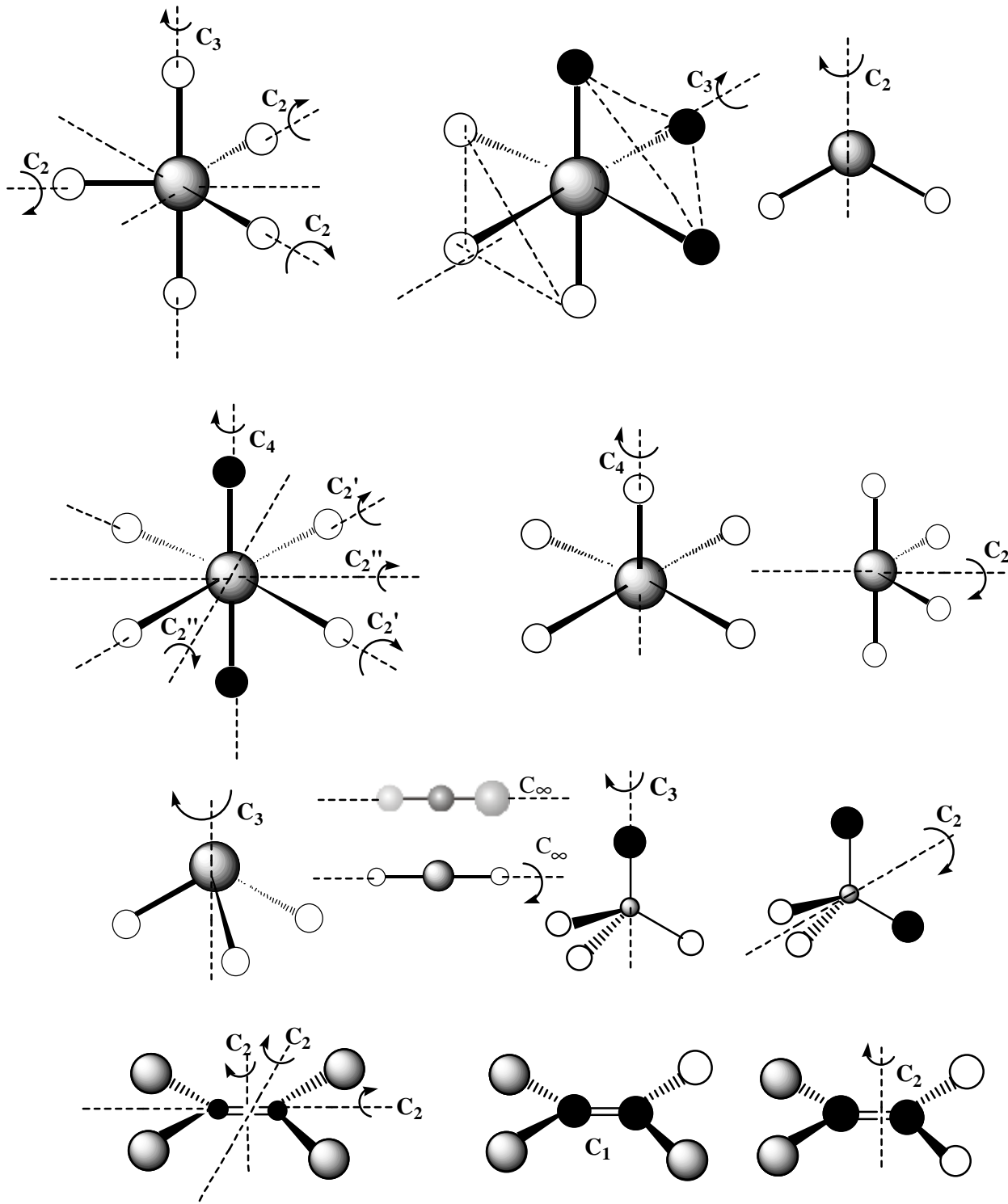
و اتمهای 2، 3 و اتمهای 1، 4 را جابجا می کند.

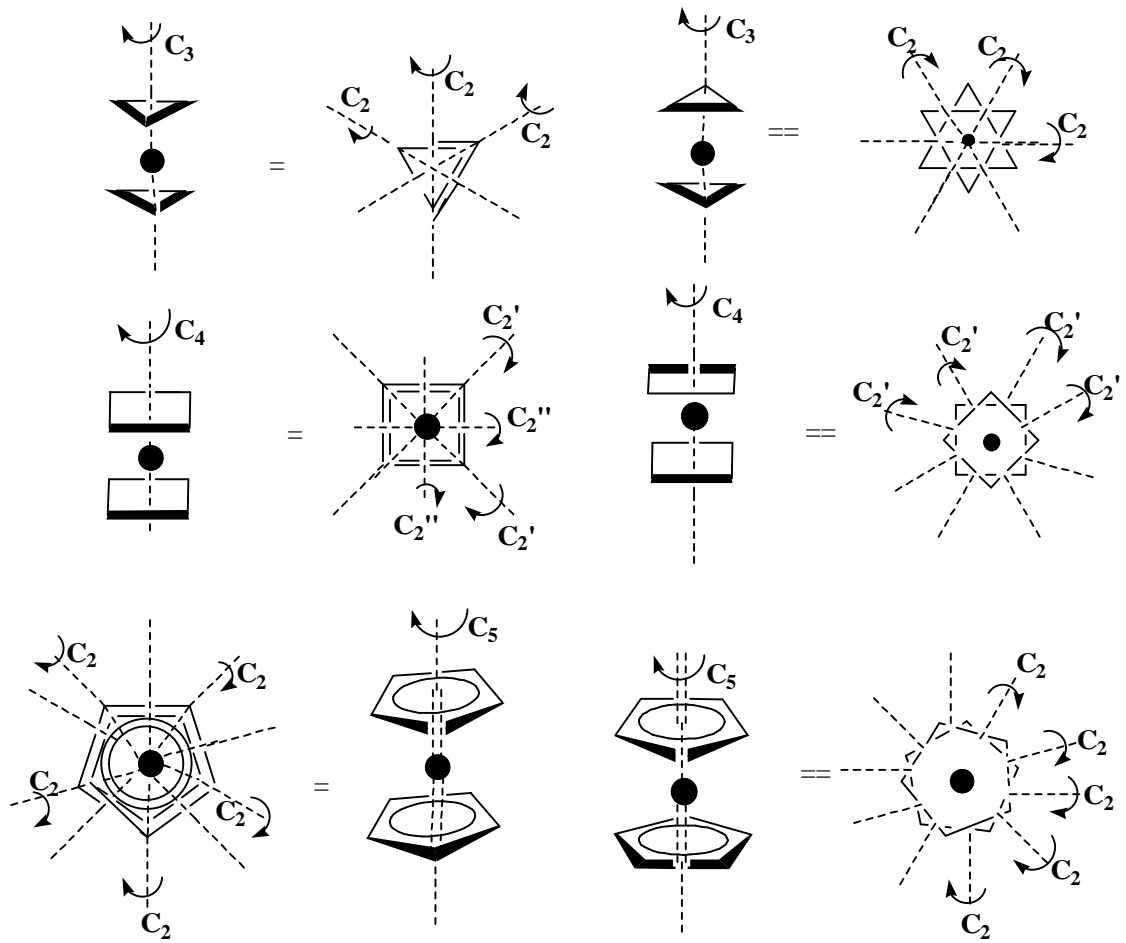
سومین محور C_2 که از بین نیمساز اتمهای 3-4 و اتم مرکزی و نیمساز اتمهای 1-2 و اتم مرکزی میگذرد

و اتمهای 3، 4 و اتمهای 1، 2 را جابجا می کند.

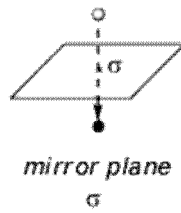


مثالهای مختلف:





انعکاس در یک صفحه تقارن:



صفحه تقارن، صفحه ایست که ملکول را به دو قسمت نموده که هریک تصویر آینه‌ای یکدیگر می‌باشند. یک چنین صفحه آینه‌ای را در ملکول، صفحه تقارن می‌نامند و آن را با علامت δ نشان می‌دهند.

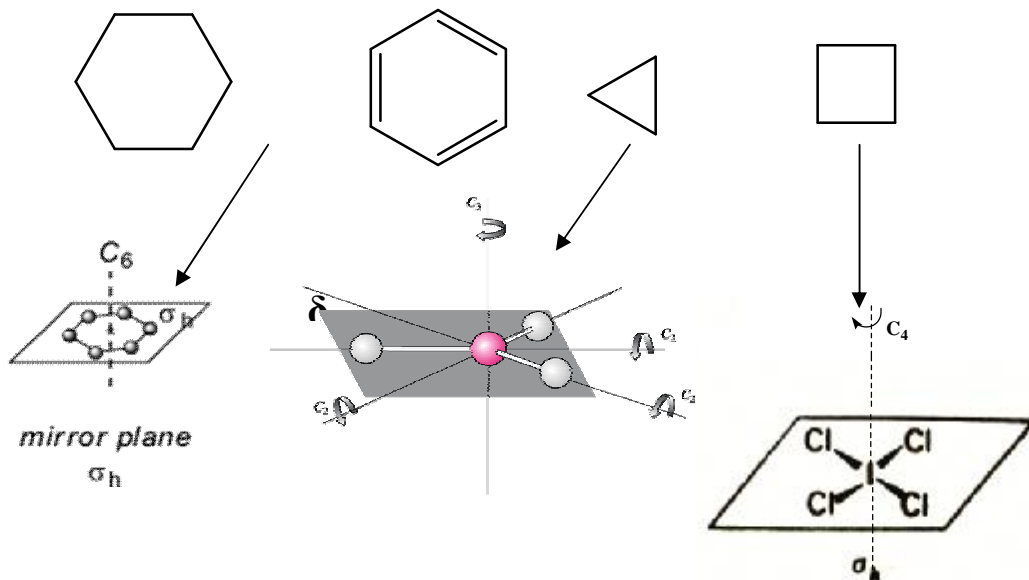
عمل انعکاس نیز بوسیله همین نشانه مشخص می‌شود. بطوریکه با انجام عمل انعکاس برای بار نخست، آرایشی معادل آرایش آغازی بدست می‌آید ولی با تکرار عمل انعکاس، مجدداً به آرایش اولیه بر

$$\delta^2 = E \quad \text{می‌گردیم}$$

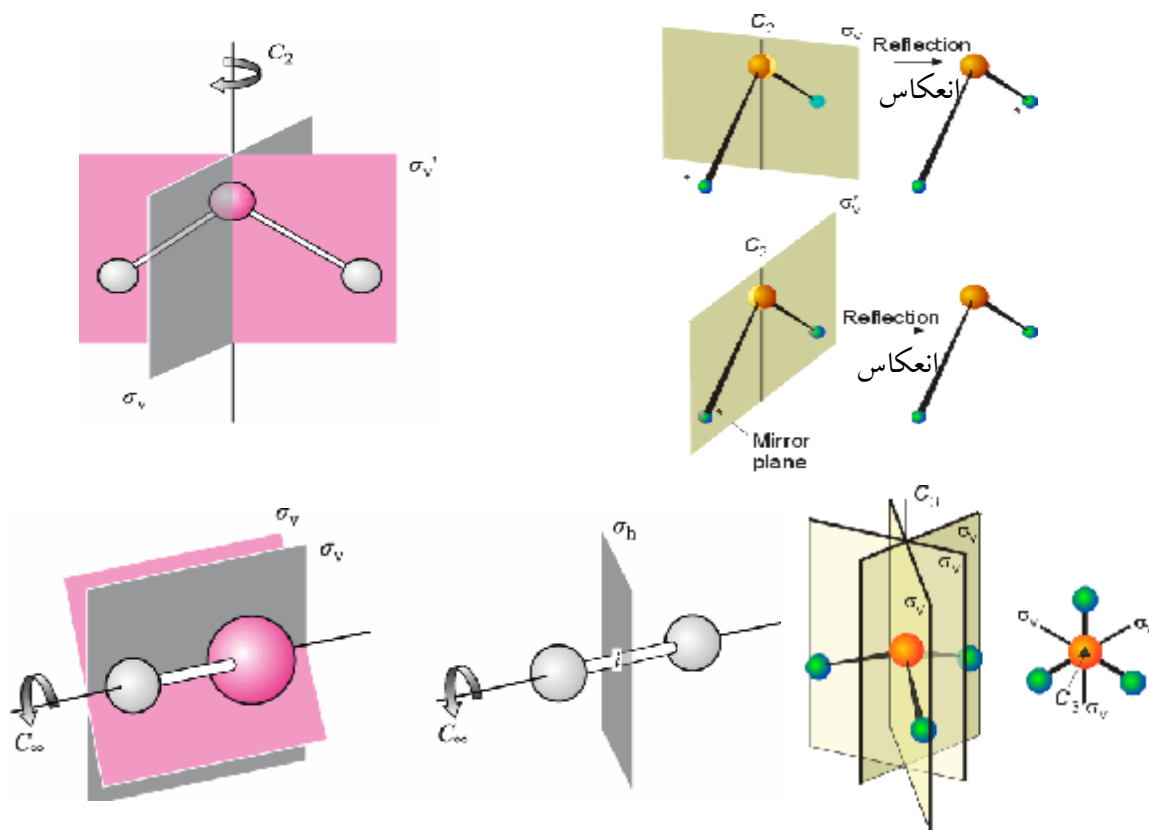
از این رو نتیجه می‌گیریم که صفحه انعکاس مولد یک عمل تقارن است.

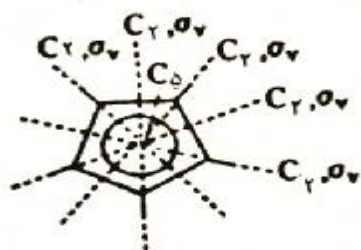
معمولاً با توجه به وضعیت صفحه تقارن نسبت به محور اصلی سه نوع صفحه تقارن در ملکول وجود دارد.

الف: صفحه تقارن افقی δh : صفحه تقارنی افقی صفحه ایست که بر محور اصلی ملکول عمود می باشد. مثال: در شکل های زیر صفحه کاغذ به عنوان صفحه تقارن افقی δh می باشد که عمود بر محور چرخش اصلی شکل های زیر است مثلا C_6 در حلقه شش تایی، C_3 در حلقه مثلثی و C_4 در حلقه مربعی

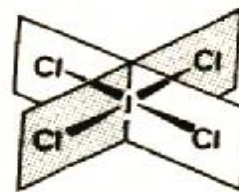


ب)- صفحه تقارن عمودی δv : صفحه تقارن عمودی صفحه ایست که دربردارنده محور اصلی ملکول باشد.

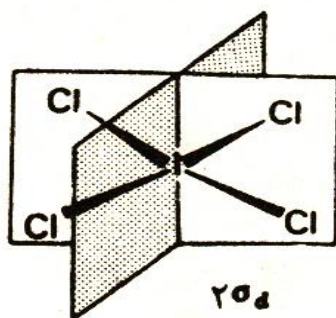
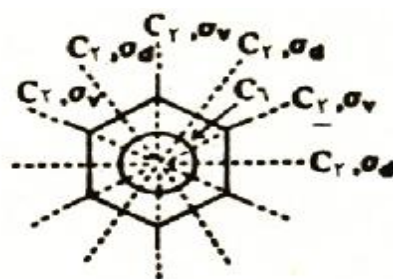




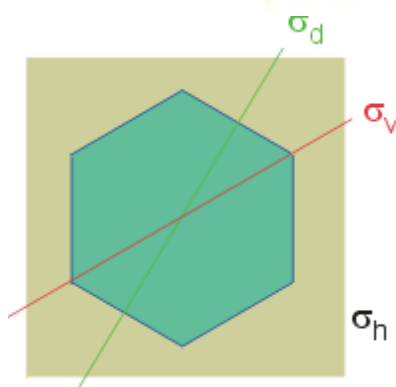
رادیکال سیکلوپنتا دی‌انیل

 $2\sigma_v$

ج: صفحه تقارنی مورب δ_d : اگر ملکولی دارای محورهای C_2 عمود بر محور اصلی بوده و دارای صفحه‌های تقارن عمودی باشد، آن صفحات، صفحات تقارنی مورب δ_d می‌نامند. یا صفحه‌ای که نیمساز زاویه‌های ایجاد شده بین محورهای C_2 را قطع کند.

 $2\sigma_d$ 

بنزن



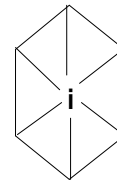
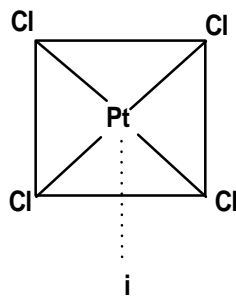
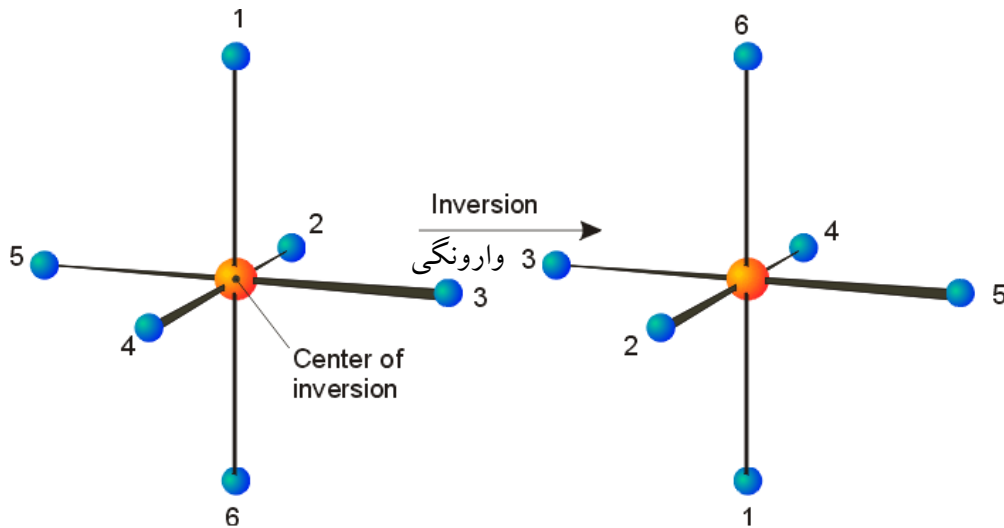
عمل یکسانی (Identity Element): E

عمل یکسانی در واقع یک عمل تقارنی هست و یک حالت بخصوصی از محور دوران متعارف (C_n) است که مرتبه آن یعنی $n = 1$ است. بنابراین عنصر یکسانی همان محور دوران C_1 می‌باشد که شامل دوران باندازه 360° درجه است.

این عمل هر شیء یا مولکولی را بدون تغییر می گذارد و آنرا با علامت E نشان می دهند، پس هر شیء یا مولکولی دارای عمل یکسانی است.

مرکز تقارون (i): Center of Inversion

$$i^2 = E$$



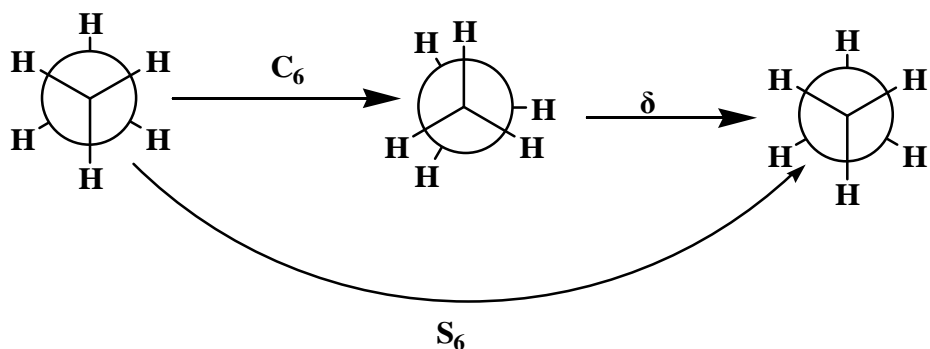
محور دوران مرکب مرتبه n یا محور دوران نامتعارفی:

S_n^m \mathcal{B} (Improper axis of rotation)

فرض کنید که ملکولی حول محوری دوران کند و جهت گیری حاصل از این دوران را در صفحه ای عمود بر این محور (عمل تقارن) منعکس گردد، بطوریکه جهت گیری حاصل قابل انطباق بر ملکول اولیه باشد، گفته می شود که این ملکول دارای محور دوران - انعکاس می باشد.

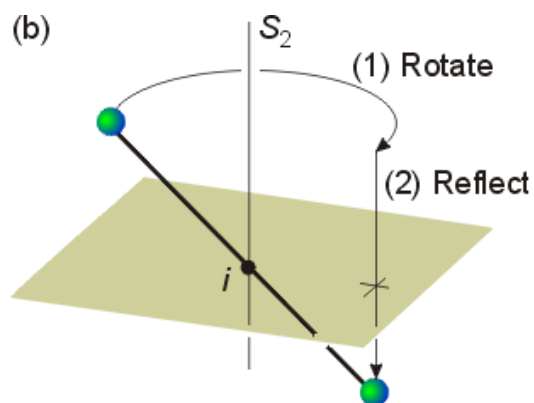
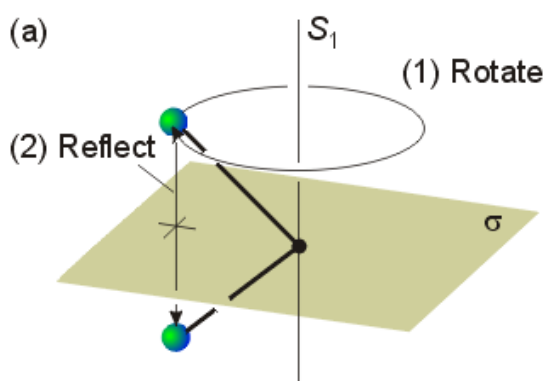
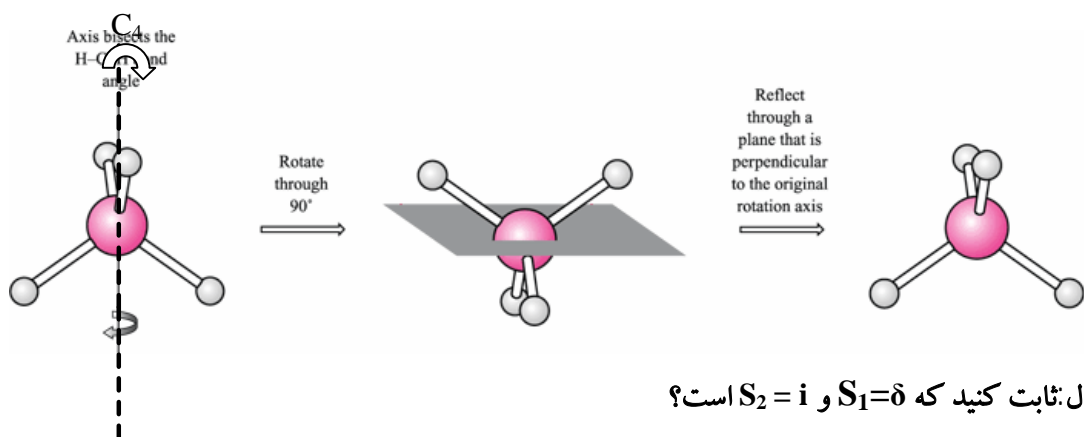
این محور چرخش را که محور نامتعارف نیز می گویند، بعلامت S_n نشان می دهند.

$$S_n^m = C_n^m \times \delta^m = \delta^m \times C_n^m$$



$$S_6 = C_6 \times \delta$$

توجه مهم: گاهی وقتها محور چرخشی یا صفحه عمود بر این محور به طور مستقل وجود ندارد ولی S_n داریم مثال:



مثال: کلیه اعمال تقارون S_3 و S_4 را بنویسید.؟

$$S_4 = C_4 \times \delta = S_4$$

$$S_4^2 = C_4^2 \times \delta^2 = C_4^2 \times \delta^2 (E) = C_2$$

$$S_4^3 = C_4^3 \times \delta^3 = C_4^3 \times \delta^3 (\delta) = S_4^3$$

$$S_4^4 = C_4^4 \times \delta^4 = C_4^4 (E) \times \delta^4 (E) = E$$

نتیجه: اگر S_n^m داشته باشیم با n زوج و $n=m$ باشد E به دست می آید.
 دوم اینکه S_n^m دارای n زوج دارای n عمل تقارون است که $n/2$ آن نا متعارفی و $n/2 - 1$ آن متعارفی و یک E است.

$$S_3 = C_3 \times \delta = S_3$$

$$S_3^2 = C_3^2 \times \delta^2 = C_3^2 \times \delta^2 (E) = C_3^2$$

$$S_3^3 = C_3^3 \times \delta^3 = C_3^3 (E) \times \delta^3 (\delta) = \delta$$

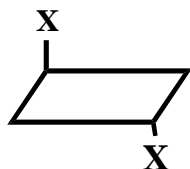
$$S_3^4 = C_3^4 \times \delta^4 = C_3^4 \times \delta^4 (E) = C_3^4$$

$$S_3^5 = C_3^5 \times \delta^5 (\delta) = C_3^5 \times \delta^5 = S_3^5$$

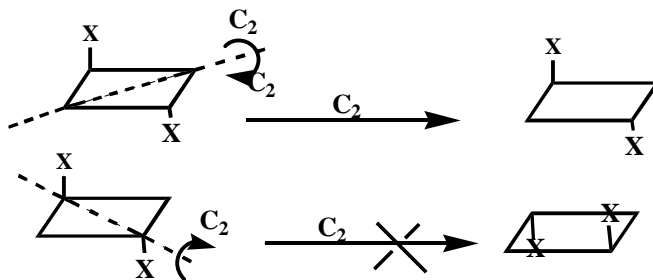
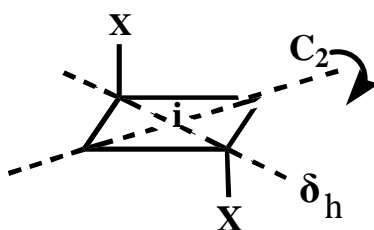
$$S_3^6 = C_3^6 \times \delta^6 = C_3^6 \times \delta^6 (E) = E$$

نتیجه: اگر S_n^m داشته باشیم با n فرد و $n=m$ باشد δ به دست می آید.
 دوم اینکه S_n^m دارای n فرد دارای $2n$ عمل تقارون است که $n-1$ آن نا متعارفی و $n-1$ آن متعارفی و یک E و یک δ است.

تمرین: کلیه عناصر تقارونی شکل زیر را به دست آورید.



جواب: E, C_2, δ_h, i



گروه نقطه ای (Point group):

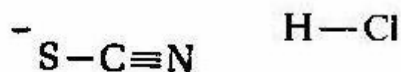
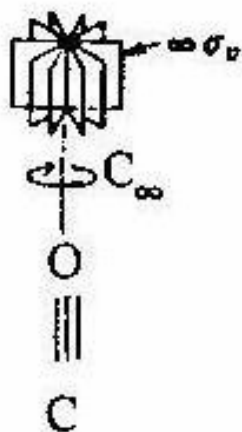
مجموعه عمل های تقارنی که درباره یک مولکول می توان انجام داد را اصطلاحاً "گروه نقطه ای آن مولکول" می نامند. در این مجموعه عمل های تقارنی موجب جابجا شدن و انتقال مولکول از نقطه ای به نقطه ای دیگر نمی گردد، یعنی آنرا در همان نقطه ای که درفضا وجود داشته باقی می گذارد و یا اینکه حداقل یکی از نقاط مولکول در درون آن جابجا نمی گردد.

راه کلی برای بدست آوردن گروه نقطه ای:

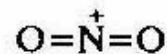
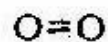
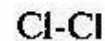
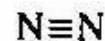
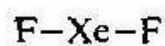
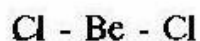
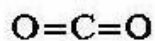
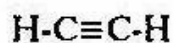
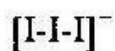
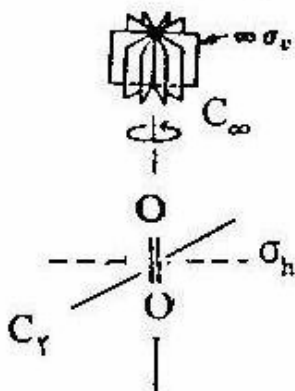
۱- مولکول یا شکل مورد نظر خطی است یا غیر خطی بله اگر جواب خیر است برو مرحله دوم

بله اگر خطی است به دو صورت است یا با مرکز تقارون است و یا بدون مرکز تقارون است

بدون مرکز تقارون دارای گروه نقطه ای $C_{\infty h}$ است مثال:



با مرکز تقارون دارای گروه نقطه ای $D_{\infty h}$ است مثال:



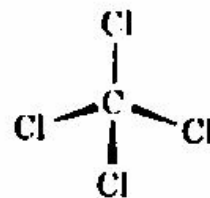
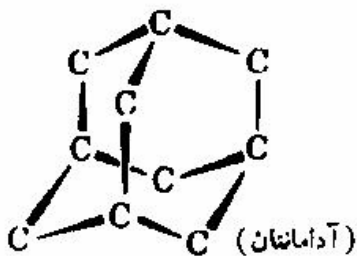
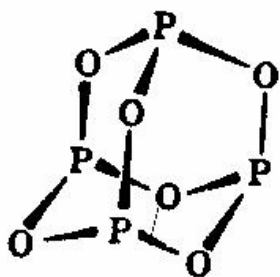
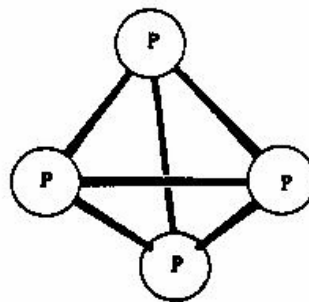
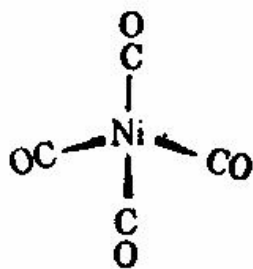
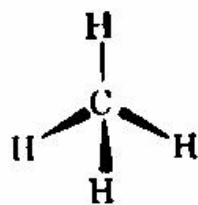
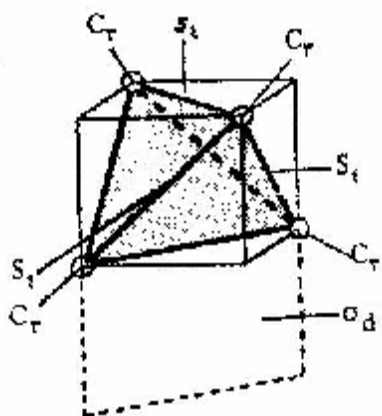
۲- اگر مولکول غیر خطی است آیا دو یا چند محور اصلی دارد یا ندارد اگر دارد عضو اجسام افلاطونی است اگر جواب ندارد است برو مرحله سوم.

Td مرکز تقارون ندارد ولی بقیه دارند

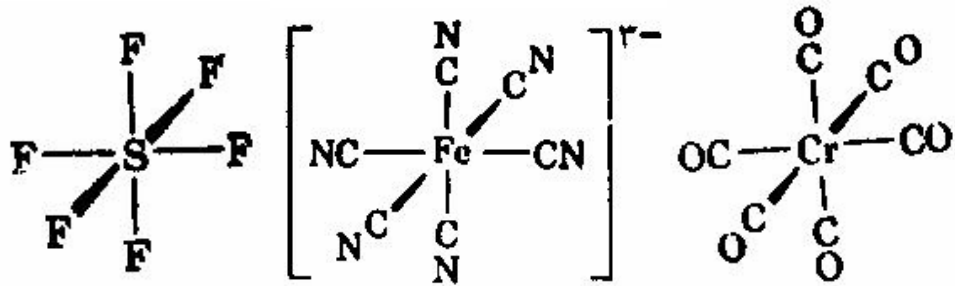
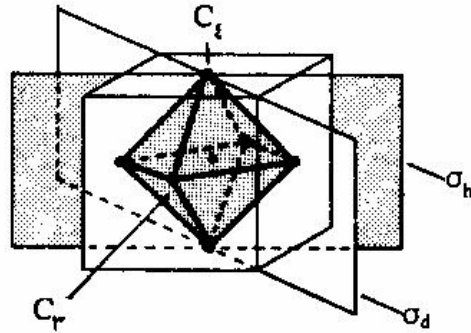
گروه افلاطونی: ۱- دارای وجوه منتظم باشند مثال: **چهار وجهی** دارای وجه مثلث متساوی الاضلاع است یا **هشت وجهی** دارای دارای وجه مثلث متساوی الاضلاع است یا **دوازده وجهی** دارای وجه پنج ضلعی منتظم است و **بیست وجهی** دارای وجه مثلث متساوی الاضلاع است.

۲- راسهای برابر داشته باشند ۳- ضلعهای برابر داشته باشند.

T_d چهار وجهی



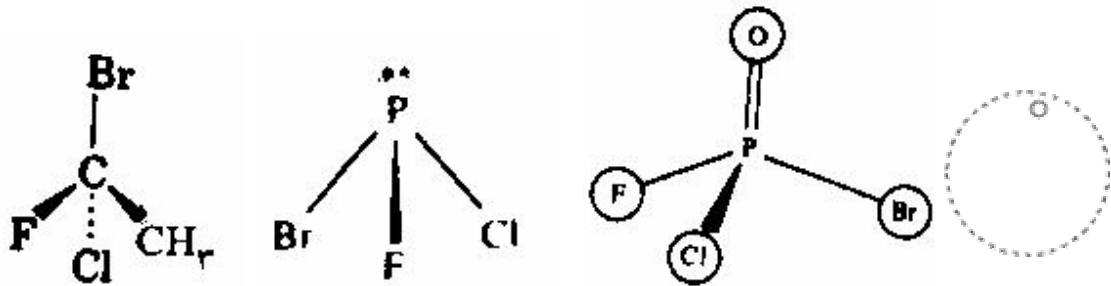
هشت وجهی O_h

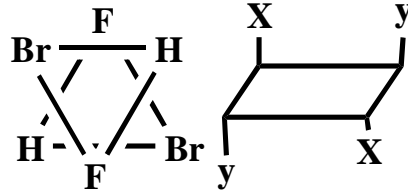
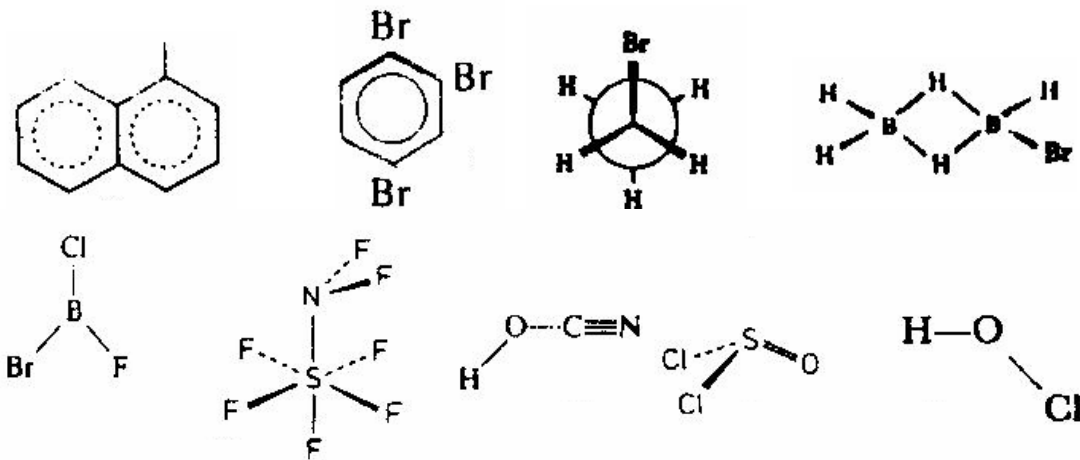


۳- مولکول دارای یک محور دوران می باشد یا خیر اگر جواب بله است برو مرحله ۴ و اگر خیر است جزو دسته گروههای ویژه است.

گروههای ویژه: C_1, C_i, C_s

C_1

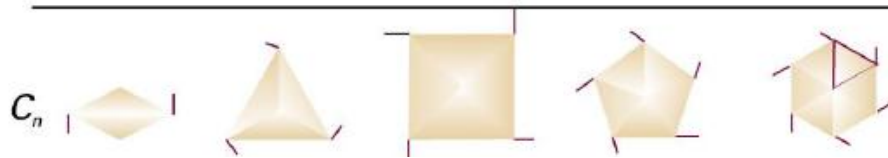


C_i  C_s 

۴- مولکول دارای یک محور دوران می باشد آیا دارای محورهای C_2 عمود بر محور اصلی است یا خیر اگر هست برو مرحله چهار واگر نیست به ترتیب زیر عمل می کنیم

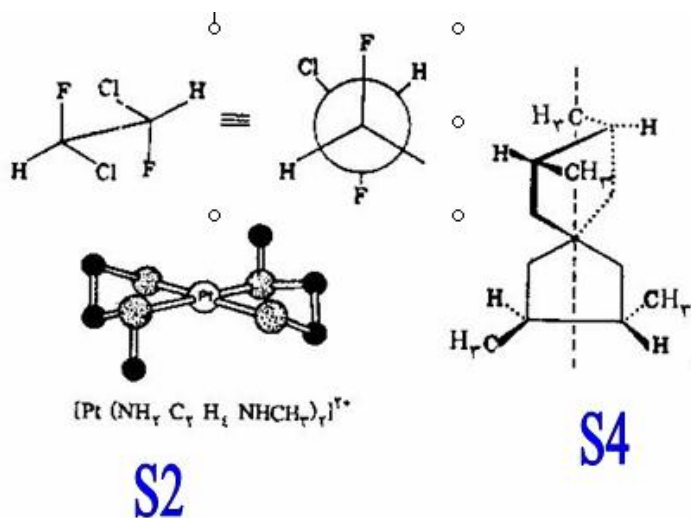
اگر محور تقارون اصلی داشت و صفحه نداشت محور S_{2n} نداشت گروه نقطه ای آن C_n است. مثال:

$n = 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6$



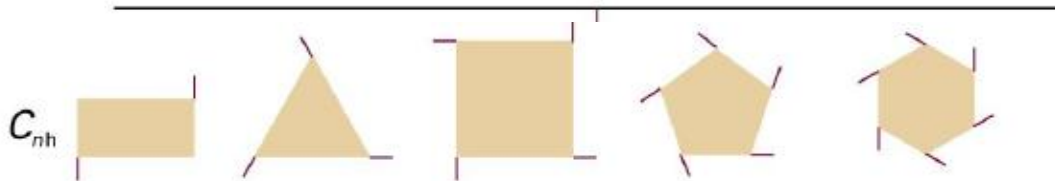
اگر محور تقارون اصلی داشت و صفحه نداشت محور S_{2n} داشت گروه نقطه ای آن S_{2n} است





اگر محور تقارون اصلی و صفحه عمود بر محور اصلی داشت گروه نقطه ای آن $C_n h$ است. مثال:

$n = 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6$

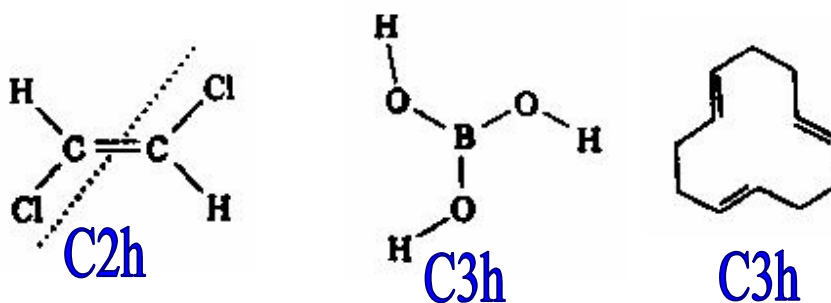


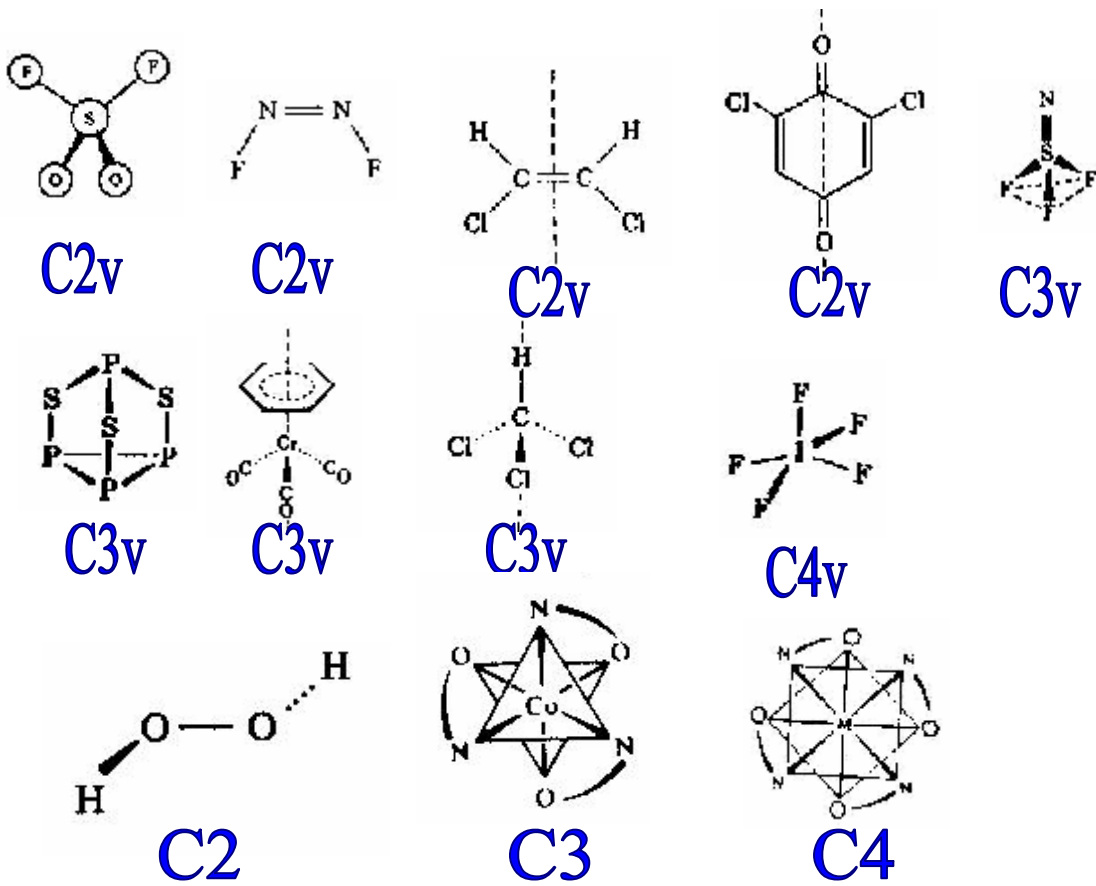
اگر محور تقارون اصلی و صفحه در برگیرنده محور اصلی داشت گروه نقطه ای آن $C_n v$ است. مثال:

$n = 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad \infty$

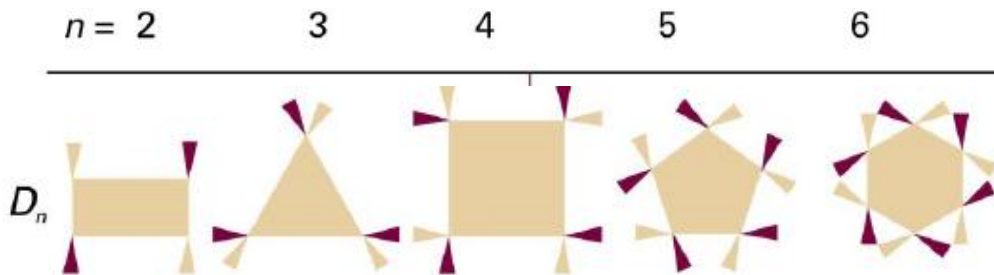


مثال:





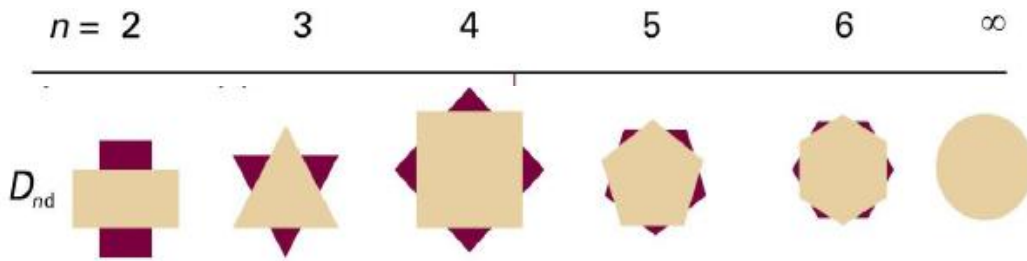
۵- مولکول دارای یک محور دوران می باشد و دارای محورهای C_2 عمود بر محور اصلی باشد و دارای صفحه عمود بر محور اصلی یا در بر گیرنده محور اصلی نباشد گروه نقطه ای D_n است.



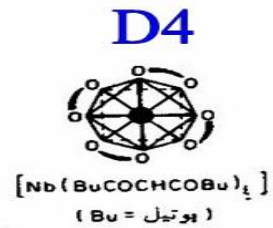
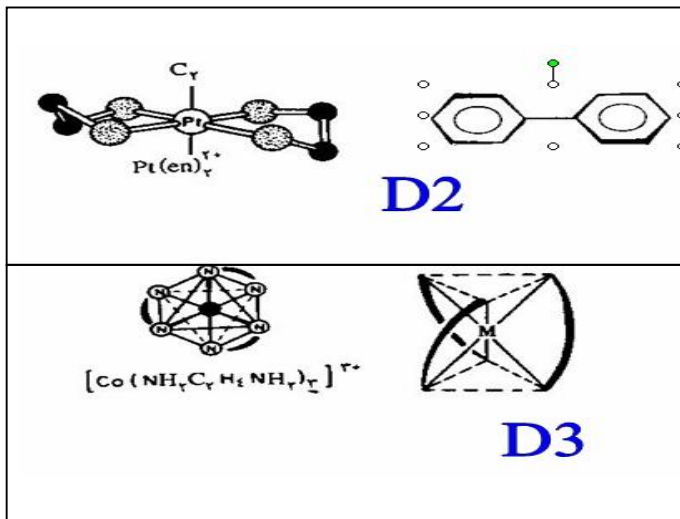
مولکول دارای یک محور دوران می باشد و دارای محورهای C_2 عمود بر محور اصلی باشد و دارای صفحه عمود بر محور اصلی گروه نقطه ای D_{nh} است

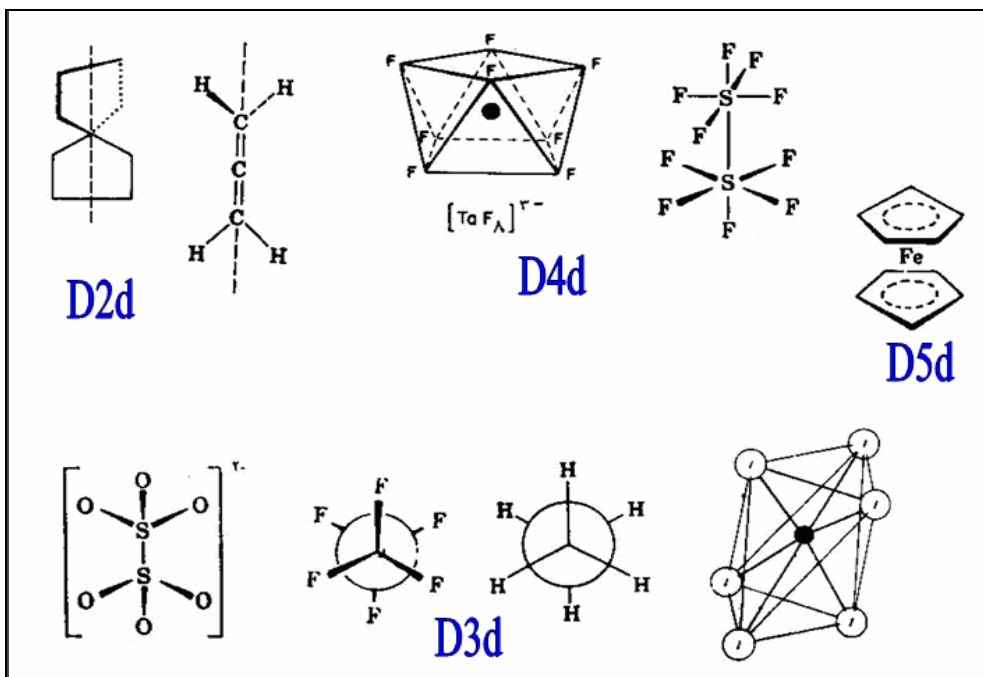
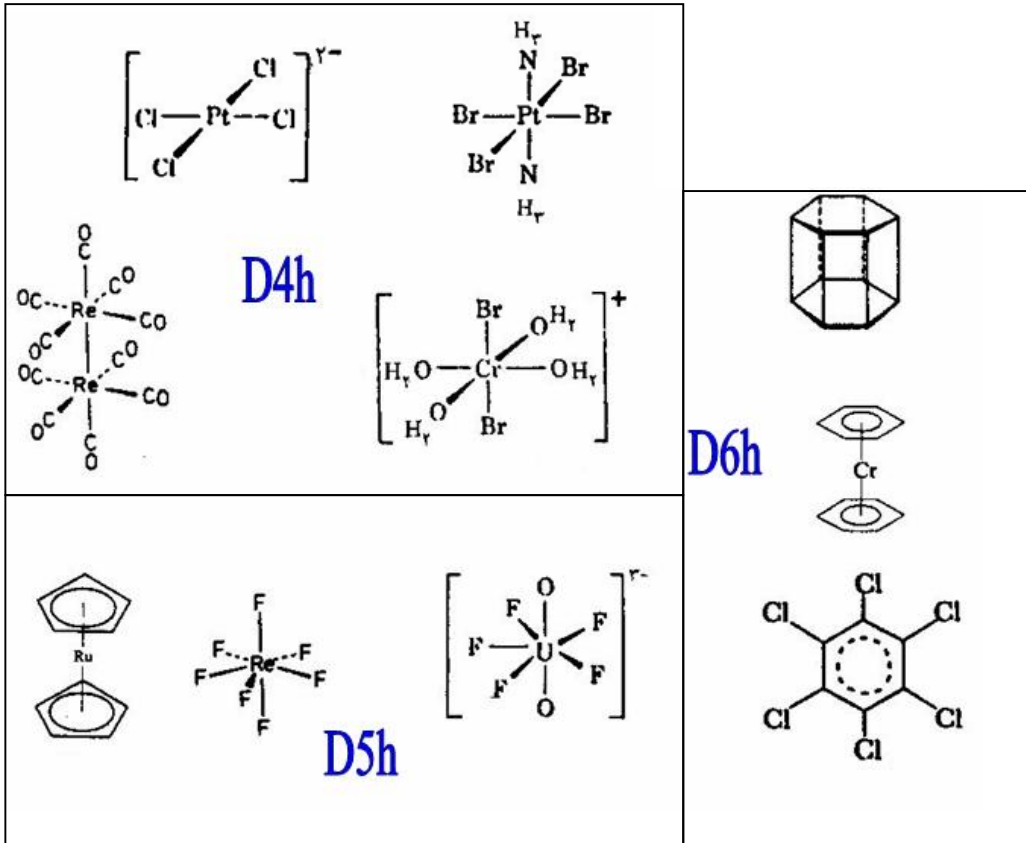


مولکول دارای یک محور دوران می باشد و دارای محورهای C_2 عمود بر محور اصلی باشد و دارای صفحه در بر گیرنده محور اصلی گروه نقطه ای D_{nd} است



مثال:





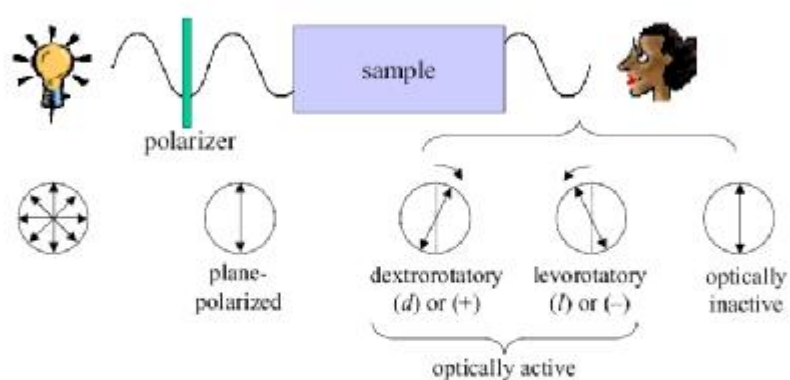
کاربرد تقارون:

۱- تعیین قطبیت مولکول

C_n, C_{nv}, C_s

۲- کایرالیت یا فعالیت نوری: مولکولهایی که دارای گروه نقطه ای باشند که در آنها هیچکدام از عناصر تقارونی از نوع صفحه یا محور Sn یا i یافت نشود.

D_n, C_n



مثال:

