



# Sự đối xứng của các phân tử

Bởi:

Nguyễn Văn Hiệu

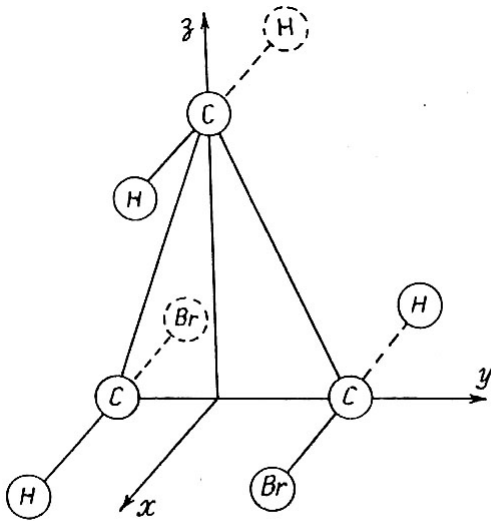
Một phân tử được gọi là bất đối xứng nếu không có phép quay, phép nghịch đảo, phép phản xạ gương nào hoặc một tổ hợp nào của các phép biến đổi này làm cho các nguyên tử cùng một loại của phân tử đổi chỗ cho nhau nhưng không làm thay đổi vị trí của phân tử (nghĩa là làm cho phân tử chuyển sang một vị trí mới giống như vị trí cũ vì có nhiều nguyên tử thuộc cùng một loại). Trái lại, nếu có các phép biến đổi cứng nói ở trên mà sau đó phân tử chuyển sang một vị trí giống như vị trí trước khi thực hiện phép các biến đổi này, thì ta nói rằng phân tử có tính đối xứng (bất biến) đối với các phép biến đổi đó, còn các phép biến đổi này thì được gọi là các phép đối xứng của phân tử. Chúng tạo thành nhóm đối xứng của phân tử.

Nếu tất cả các nguyên tử của một phân tử nào đó đều được sắp xếp dọc theo một đường thẳng được gọi là trục của phân tử thì phân tử được gọi là phân tử thẳng. Vị trí của mọi nguyên tử trong một phân tử thẳng đều được giữ cố định trong các phép quay góc bất kỳ quanh trục quay là trục của phân tử cũng như trong các phép phản xạ gương qua các mặt phẳng gương chứa trục của phân tử. Vậy mọi nhóm  $C_{nv}$  với trục quay  $C_n$  trùng với trục của phân tử và với  $n$  bất kỳ đều là nhóm đối xứng của các phân tử thẳng. Ta nói rằng các phân tử thẳng đối xứng đối với nhóm  $C_{\infty v}$ . Nếu một phân tử thẳng có một tâm nghịch đảo  $i$  nằm trên trục của phân tử, gọi là tâm đối xứng của nó, thì trong mỗi phép quay  $C_2$  quanh một trục bất kỳ trục giao với trục của phân tử tại tâm đối xứng  $i$  của nó phân tử sẽ chuyển sang một vị trí giống như vị trí ban đầu. Vậy nếu một phân tử thẳng có một tâm đối xứng  $i$  nằm trên trục của phân tử, thì vô số trục quay  $C_2$  trục giao với trục của phân tử cũng là các yếu tố đối xứng của nó. Phân tử cũng đối xứng đối với phép phản xạ gương,  $\sigma_h$  qua mặt phẳng gương trục giao với trục của phân tử tại tâm  $i$ . Vậy tất cả các tinh thể thẳng có tâm nghịch đảo đều đối xứng đối với các nhóm  $D_{nh}$  với  $n$  bất kỳ. Ta nói rằng các phân tử này đối xứng đối với nhóm  $D_{\infty h}$ . Một thí dụ về phân tử thẳng không có tâm đối xứng là sodium acetylide (hình 3.20a) với công thức chung  $AB_2C$ , còn carbon suboxide (hình 3.20b) với công thức chung  $A_3B_2$  cho ta một thí dụ về phân tử thẳng có tâm đối xứng. Các nhóm đối xứng  $C_{nv}$  và  $D_{nh}$  với  $n$  khác 2, 3, 4, 6 không phải là các nhóm điểm tinh thể học và do đó chỉ có thể là nhóm đối xứng của các phân tử chứ không thể là nhóm đối xứng của các tinh thể (ba chiều).

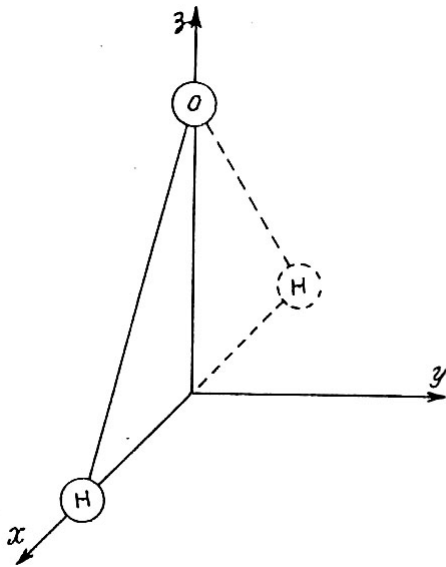
Bây giờ chúng ta trình bày cấu trúc của một phân tử mà nhóm đối xứng của chúng là các nhóm điểm tinh thể học. Nếu ta cũng xét cả nhóm điểm đặc biệt  $C_1$  chỉ chứa một yếu tố đơn vị  $E$  (phép biến đổi đồng nhất) thì đó là một nhóm tầm thường: nhóm đối xứng của tất cả các tinh thể bất đối xứng. Nhóm điểm  $C_i$  với hai yếu tố, yếu tố đơn vị  $E$  và phép nghịch đảo  $i$  đối với một tâm nghịch đảo nào đó, là nhóm đối xứng của tất cả các phân tử có tâm đối xứng. Nhóm điểm  $C_{1h} = C_{1v}$  là nhóm đối xứng của tất cả các phân tử mà mỗi phân tử có thể được tách ra thành hai nửa đối xứng với nhau qua một mặt phẳng nào đó, thành thử mỗi nửa là ảnh trong gương của nửa kia. Có rất nhiều phân tử thuộc hai loại này. Nhiều phân tử mà chúng ta xem xét dưới đây cũng đối xứng đối với tâm nghịch đảo hoặc / và đối xứng với mặt phẳng gương.

Cấu trúc của một phân tử có nhóm đối xứng  $C_2$ , trans-1,2-dibromocyclopropane, trình bày trên hình 3.21a; ba nguyên tử  $C$  nằm trên mặt phẳng  $yOz$ , trục quay  $C_2$  là trục  $Oz$ . Cấu trúc của phân tử nước  $H_2O$  được trình bày trên hình 3.21b. Ta chọn trục  $Ox$  trên đường thẳng đi qua hai nguyên tử  $H$ , gốc tọa độ  $O$  là trung điểm của đoạn thẳng nối hai nguyên tử này, trục  $Oz$  đi từ gốc tọa độ qua nguyên tử  $O$ . Trong phép quay  $C_2$  quanh trục  $Oz$  hai nguyên tử  $H$  đổi chỗ cho nhau, còn cả phân tử  $H_2O$  thì không dịch chuyển. Phân tử này đối xứng đối với hai mặt phẳng gương là các mặt phẳng tọa độ  $xOz$  và  $yOz$ . Vậy nhóm đối xứng của phân tử nước là nhóm  $C_{2v}$ . Phân tử  $SO_2$  có cấu trúc tương tự và do đó cũng có nhóm đối xứng  $C_{2v}$ .

## Sự đối xứng của các phân tử



Hình 3.21a. Trans-1,2-dibromocyclopropane

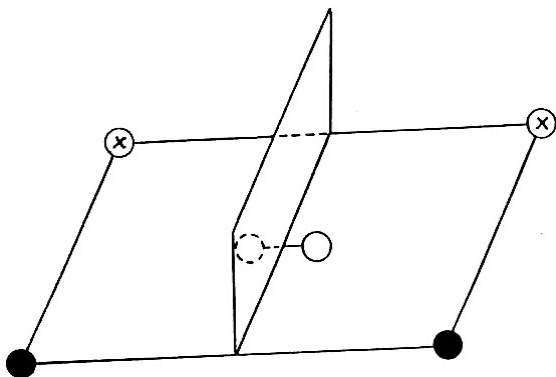


Hình 3.21b. H<sub>2</sub>O

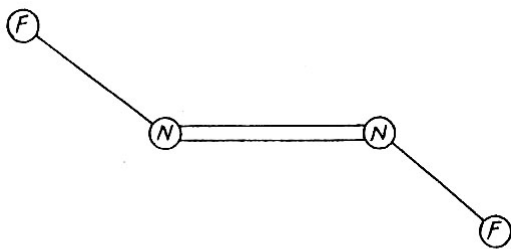
Các nguyên tử của phân tử cis-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> được sắp xếp trên cùng một mặt phẳng một cách đối xứng với một mặt phẳng khác trực giao với mặt phẳng của phân tử (hình 3.21c). Bản thân mặt phẳng của phân tử là một mặt phẳng gương. Phép quay C<sub>2</sub> quanh giao tuyến của hai mặt phẳng gương trực giao nói trên cũng là một phép đối xứng của phân tử. Vậy cis-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> có nhóm đối xứng là C<sub>2v</sub>. Phân tử trans-dinitrogen difluoride trình bày trên hình 3.21d, phân tử trans-dichloroethylene trình bày trên hình 3.21c và phân tử trans-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> trình bày trên hình 3.21f, là các phân tử gồm các nguyên tử sắp xếp trên cùng một mặt phẳng được chọn làm mặt phẳng của các hình vẽ nói trên, cùng có các yếu tố đối xứng sau đây: mặt phẳng gương  $\sigma_h$  chính là mặt phẳng của hình vẽ và trục quay

Sự đối xứng của các phân tử

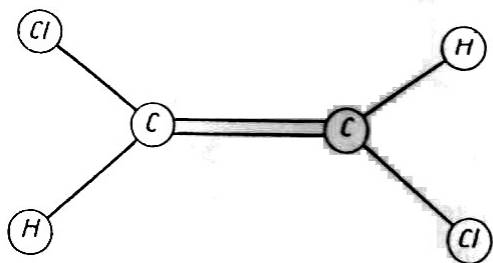
$C_2$  trục giao với mặt phẳng của hình vẽ. Các phân tử này có nhóm đối xứng là nhóm  $C_{2h}$ .



Hình 2.21c. cis- $C_2H_2Cl_2$

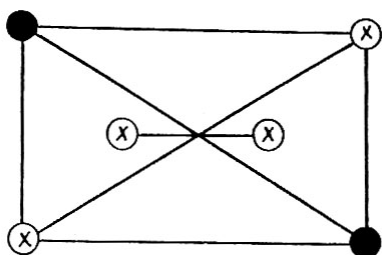


Hình 3.21d. Trans-dinitrogen difluoride



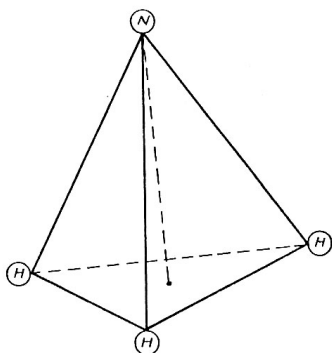
Hình 3.21e. Trans-dichloroethenes

## Sự đối xứng của các phân tử



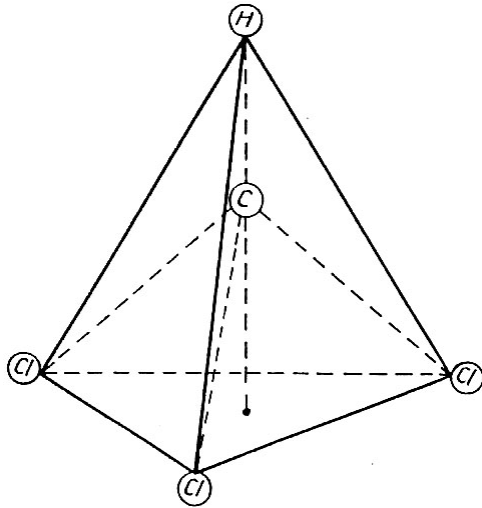
Hình 3.21f. Trans- $C_2H_2Cl_2$

Phân tử ammonia  $NH_3$  có ba nguyên tử  $H$  được sắp xếp ở ba đỉnh của một hình tam giác đều và một nguyên tử  $N$  nằm ngoài mặt phẳng của hình tam giác trên đường thẳng đó tại tâm của hình tam giác (hình 3.22a). Đường trục giao này là một trục quay  $C_3$ , còn ba mặt phẳng chứa trục quay này và đi qua các cạnh của hình tam giác đều tại trung điểm của chúng, nghĩa là các mặt phẳng phân giác của ba góc của hình tam giác đều, là ba mặt phẳng gương. Nhóm đối xứng của phân tử ammonia là nhóm  $C_{3v}$ . Phân tử  $CHCl_3$  với cấu trúc trình bày ở trên hình 3.22b có các tính chất đối xứng tương tự; nhóm đối xứng của nó cũng là nhóm  $C_{3v}$ . Phân tử orthoboric acid có các nguyên tử được sắp xếp trên cùng một mặt phẳng mà ta chọn làm mặt phẳng hình vẽ (hình 3.22c). Các nguyên tử cùng một loại đối chỗ cho nhau trong các phép quay  $C_3$  và  $C_3^2$  quanh trục quay trục giao với mặt phẳng hình vẽ tại vị trí của nguyên tử  $B$ , tâm điểm của phân tử. Mặt phẳng hình vẽ chính là mặt phẳng gương của phân tử. Vậy phân tử orthoboric acid có nhóm đối xứng  $C_{3h}$ .

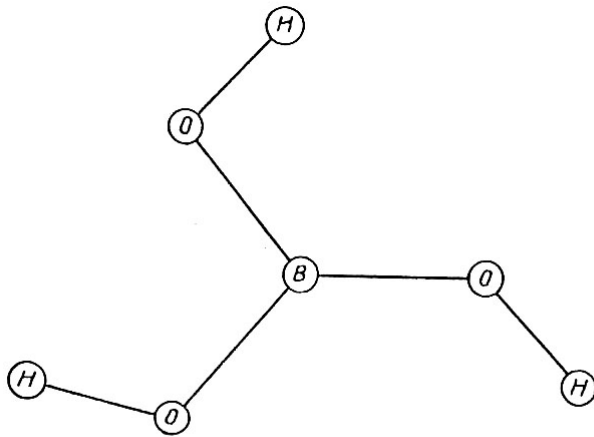


Hình 3.22a. Ammonia

Sự đối xứng của các phân tử



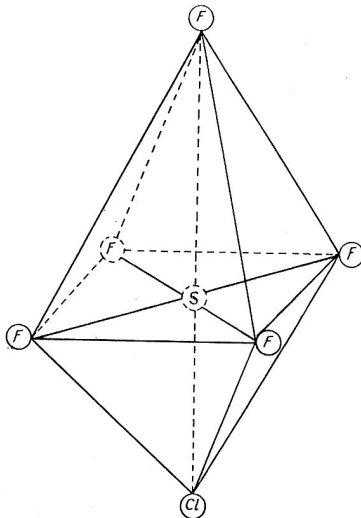
Hình 3.22b.  $\text{CHCl}_3$



Hình 3.22c. Orthboric acid

Phân tử  $\text{SF}_5\text{Cl}$  có bốn nguyên tử F được sắp xếp ở bốn đỉnh của một hình vuông, một nguyên tử S nằm ở tâm của hình vuông, còn một nguyên tử F và một nguyên tử Cl nằm ngoài mặt phẳng hình vuông, trên đường thẳng trục giao với mặt phẳng này ở tâm của hình vuông (hình 3.23).

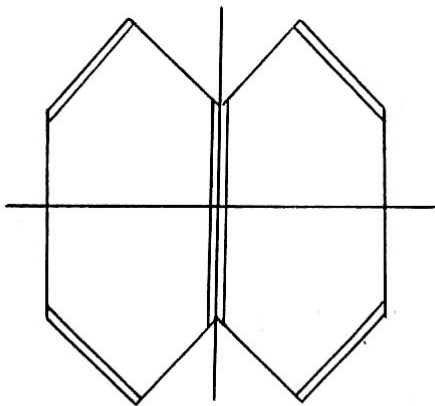
## Sự đối xứng của các phân tử



Hình 3.23. SF<sub>5</sub>Cl

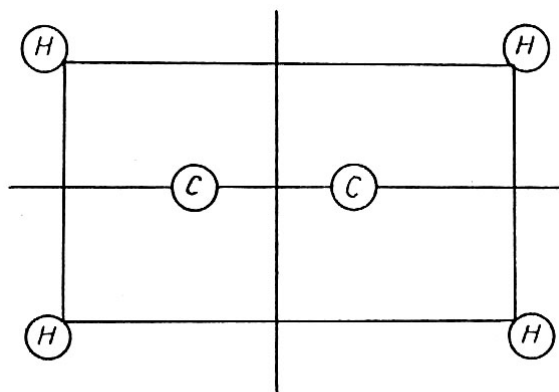
Trong các phép quay  $C_4$ ,  $C_4^2$ ,  $C_4^3$  quanh đường thẳng trục giao đó bốn nguyên tử F ở bốn đỉnh của hình vuông đổi chỗ cho nhau, còn nguyên tử F thứ năm và hai nguyên tử S, Cl không dời chỗ. Ngoài ra phân tử còn đối xứng đối với bốn mặt phẳng đi qua các đỉnh của hình vuông và hai mặt phẳng đi qua các tung điểm các cạnh của hình vuông. Phân tử SF<sub>5</sub>Cl có nhóm đối xứng là nhóm  $C_{4v}$ .

Phân tử naphthalene với cấu trúc trình bày trên hình 3.24a có ba yếu tố đối xứng là ba trục quay  $C_2$  trục giao với nhau tại tâm nghịch đảo của phân tử, hai trục quay  $C_2$  trục giao với mặt phẳng hình vẽ. Vì vậy mặt phẳng hình vẽ cũng lại là một yếu tố đối xứng – mặt phẳng gương, cho nên nhóm đối xứng của phân tử naphthalene là nhóm  $D_{2h}$ . Phân tử C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> với các nguyên tử sắp xếp trên cùng một mặt phẳng mà ta chọn làm mặt phẳng của hình vẽ trên hình 3.24b có tính chất đối xứng đối với phép phản xạ gương qua mặt phẳng này và đối với ba phép quay  $C_2$  quanh ba trục quay trục giao với nhau: một trục trục giao với mặt phẳng hình vẽ và hai trục kia nằm trong mặt phẳng này. Do đó phân tử C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> cũng có nhóm đối xứng là nhóm  $D_{2h}$ .



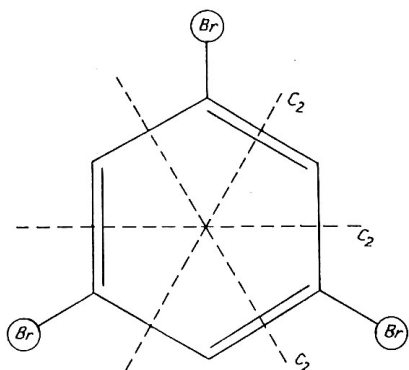
Hình 3.24a. Naphthalene

## Sự đối xứng của các phân tử



Hình 3.24b.  $C_2H_4$

Phân tử 1, 3, 5-tribromobenzene với các nguyên tử được sắp xếp trên cùng một mặt phẳng được chọn làm mặt phẳng hình vẽ có các yếu tố đối xứng sau đây (xem hình 3.25): một trục quay  $C_3$  trục giao với mặt phẳng hình vẽ tại tâm đối xứng của phân tử, ba trục quay  $C_2$  nằm trong mặt phẳng hình vẽ tạo với nhau các góc  $\frac{\pi}{3}$  và  $\frac{2\pi}{3}$ , và mặt phẳng gương là chính mặt phẳng hình vẽ. Nhóm đối xứng của phân tử này là nhóm  $D_{3h}$ .

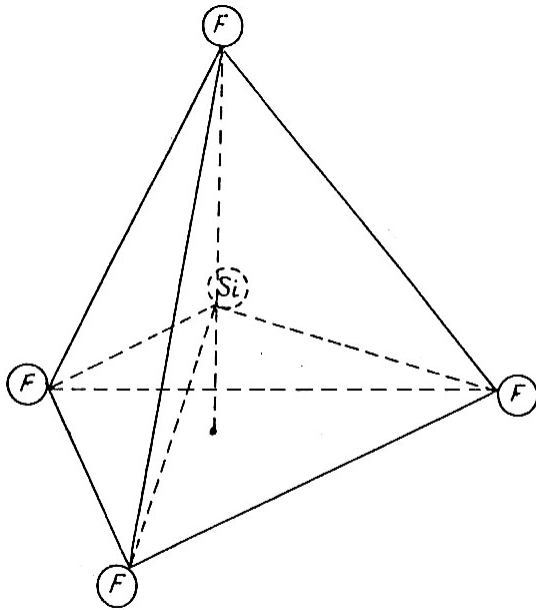


Hình 3.25. 1,2,3-tribromobenzene

Phân tử  $SiF_4$  có bốn nguyên tử F sắp xếp ở bốn đỉnh của một hình tứ diện đều, còn nguyên tử Si thì nằm ở tâm của hình này và cách đều cả bốn nguyên tử F (hình 3.26). Nhóm đối xứng của phân tử  $SiF_4$  là nhóm tứ diện  $T_d$ .

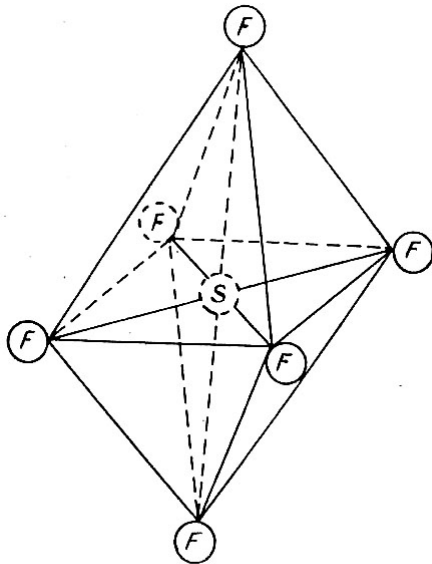


## Sự đối xứng của các phân tử



Hình 3.26.  $\text{SiF}_4$

Phân tử  $\text{SF}_6$  có sáu nguyên tử F sắp xếp ở sáu đỉnh của một hình bát diện đều, còn nguyên tử S thì nằm ở tâm của hình này và cách đều cả sáu nguyên tử F (hình 3.27). Nhóm đối xứng của phân tử  $\text{SF}_6$  là nhóm bát diện  $O_h$ .



Hình 3.27.  $\text{SF}_6$

Cuối cùng chúng ta chú ý rằng vì các phân tử không có cấu trúc tuần hoàn cho nên có thể có nhiều nhóm điểm  $C_n$ ,  $C_{nh}$ ,  $C_{nv}$ ,  $D_n$ ,  $D_{nh}$ ,  $D_{nd}$ ,  $S_n$  không phải là nhóm điểm tinh thể học mà lại là các nhóm đối xứng của những phân tử nào đó.

Sự đối xứng của các phân tử

Nhóm điểm của các phân tử có công thức hóa học thuộc một số dạng đơn giản được trình bày trong bảng sau đây:

Bảng nhóm điểm của một số loại phân tử

Phân tử hoặc phức ion	Công thức	Dạng hình học	Nhóm điểm
Nercuric chlodife	$AB_2$	thẳng, có i	$D_{\infty h}$
Hydrogen	$A_2$	thẳng, có i	$D_{\infty h}$
Hydrochloride acid	$AB$	thẳng, không có i	$C_{\infty h}$
Carbonyl sulphide	$ABC$	thẳng, không có i	$C_{\infty h}$
Nước	$AB_2$	tròn	$C_{2v}$
Methylene chloride	$AB_2C_2$	tứ diện	$C_{2v}$
Chloroform	$AB_3C$	tứ diện	$C_{2v}$
Ammonia	$AB_3$	tháp tam giác	$C_{3v}$
Boron trifluoride	$AB_3$	tam giác	$D_{3h}$
Phosphorus pentafluofide	$AB_5$	tháp tam giác kép	$D_{3h}$
Bromine pentafluoride	$AB_5$	tháp vuông	$C_{4v}$
Sulphur hexafluofide	$AB_6$	bát diện	$O_h$
Iodine heptafluoride	$AB_7$	tháp ngũ giác	$D_{5h}$