

# Molecular Symmetry

①

((التماثل الجزيئي))

- Symmetry

التماثل

- Symmetry elements

عناصر التماثل

- Symmetry operation

عمليات التماثل

\* Identity operation (E) الهوية ابدية

\* Rotation about n-fold axis of symmetry ( $C_n$ )

الدوران حول محور التماثل

\* Reflection through center symmetry (Inversion center)

(i)

الانعكاس خلال مركز التماثل

\* Reflection through plane symmetry (mirror plane)

( $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$ )

الانعكاس خلال مستوى التماثل

\* Rotation about an axis, followed by reflection

( $S_n$ )

الدوران حول المحور التماثلي

- Factors affecting the presence of free electrons pairs

العوامل المؤثرة بوجود الأزواج الحرة

- Point groups نقاط التماثل

- Type of symmetry أنواع التماثل

د. محمد البراهيم

2020

Symmetry

②

المثال

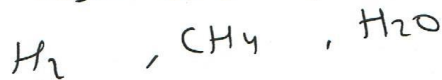
هذه خاصية تتمازج في الجزيئات بوجودها بارضا مختلفه في الفراغ حسب لا يمكن التمييز بين تلك الجزيئات ونفرد على المحاور لادونه وانما حالك في الفراغ.

وعلى هذا المصنوع فان الجزيئات تنقسم الى قسمين

Symmetric molecules

جزيئات متماثلة

وهي الجزيئات التي تكون في الذرات المكونه للجزيء متماثله مثلا  $H_2, CH_4, H_2O$



جزيئات غير متماثلة

unsymmetric molecules

وهي الجزيئات التي تكون على ذرات مختلفه  $HCl, HF, CH_3Cl$



الغايه من دراسة التماثل

1. معرفه الارتيالات المستعمه في اثار
2. التنبؤ بسلوك الشعاع تحت التكرار واطراف مؤلفه التبعيه
3. توقعه الفعاليه الاستوييه للجزيئات
4. معرفه الصفات الكيميائيه للجزيئه

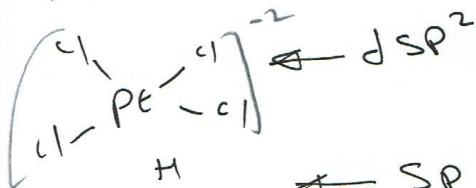
اشكال الجزيئات حسب التهجين



خطي linear



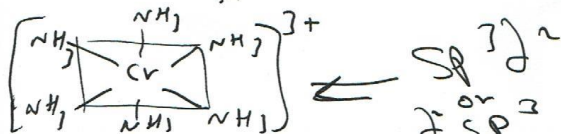
مثلث مستوي trigonal planar



مربع مستوي Squar planar



هرم رباعي Tetrahedral



ثماني السطوح octahedral

Symmetry elements

(3)

عنصر التماثل

هي عبارة عن كيان هندسي (نقطة، خط، مستوى) والتي بدونها لا يمكن ان تجري عمليات التماثل.

Symmetry operations

عمليات التماثل

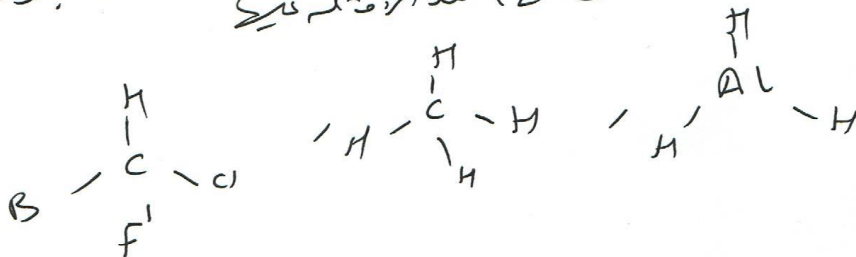
هي تلك العمليات المنفذة على الجزيء والتي تترك دون حدوث تغيير ضاهري في تركيبه (كما ان الجزيء لم يبدل في تقديره) بسبب الذرات، الاصل والاصول الاصلية والزاويا المختلفة.

وهناك خمسة انواع من عمليات التماثل -

Identity operation

(1) اذ تطبقه اذ كجوهيه

تمتلك جميع الجزيئات هذا النوع من عمليات التماثل - وادوات متماثلة اذ لم يتغير تماثلها وتعرف عناصر عدم التماثل التي عليه تماثل الجزيء تعود بصورتها الاصلية وتبقى الذرات في مواقعها الاصلية وبمركزها (E) من دون ان يتغير شيء.



Rotation about n-Fold axis of symmetry ( $C_n$ ) (2)

الدوران حول محور التماثل ( $C_n$ )

وهي عملية تتضمن تدوير الجزيء حول محور وهمي (خط) يمر من خلال الجزيء بحيث اذا دارت هذه الجزيء حولها بزوايا معينة تنتج جزيء لا يمكن تمييزها عن الجزيء الاصلية وان مقدار الزاوية يعبر عنه  $(\frac{360}{n})$  ويزن  $C_n$  حسب

$n$  = اعداد الجزيئات  
 $n-1$  = عدد الخطوات التي يجب عندها الدوران حتى تعود الى الحالة الاصلية

Rotation Step number الاصلية

الجزيئات المتماثلة ~~المتماثلة~~ العنبرية

C<sub>2</sub>

H<sub>2</sub>O

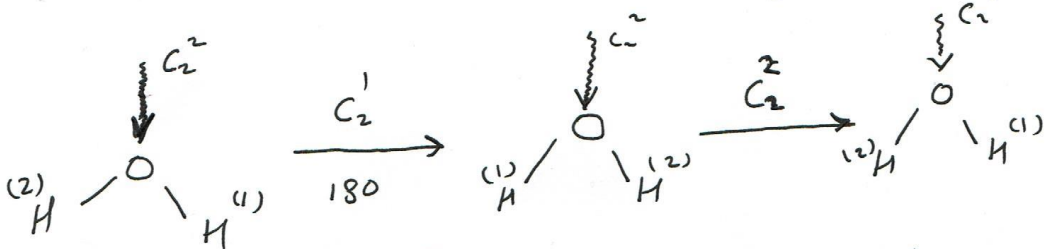
منزود

يكون عنبرية جزيئية ويكون معنوية (bent) فلو فرضنا وجود محور رصبي ربكون محودي يمر بزاوية الكاربين فإنه سوف يعبر الجزيئية أو محسين وللتوضيح سوف نعلم زاوية H ال H(1) و H(2) حيث تدور الجزيئية بحيث H(1) تأخذ مكان H(2) تحتاج ان تدور بزاوية 180 درجة لذلك تكون

عدد التماثلات → 2

$$\frac{360}{180} = 2$$

C<sub>2</sub> → عدد التماثلات

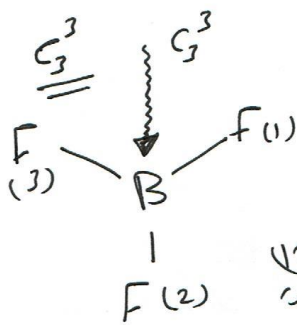


$$C_2 = E$$

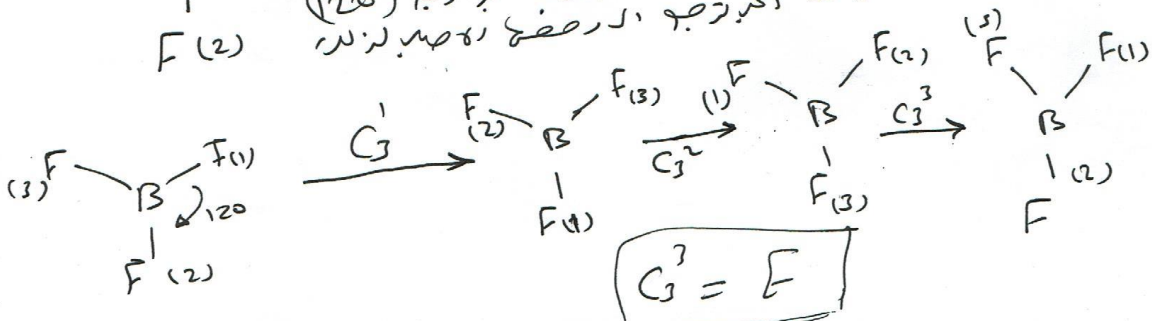
لذلك هو الجزيئية

بوصفنا هنا نجد ان عدم صعب المزدوج - الكاربينية كما في

$$C = \frac{360}{120} = 3 \Rightarrow C_3$$



لأننا ان فط رصبي يمر بزاوية البورون فلكي تتحرك F1 وتأخذ مكان F(2) وكذلك F(2) تأخذ مكان F(3) فببب تدوير الجزيئية بزاوية (120) درجة تكون طرات الكاربين والرضف الاصل لذلك



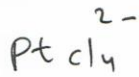
$$C_3 = E$$





⑤

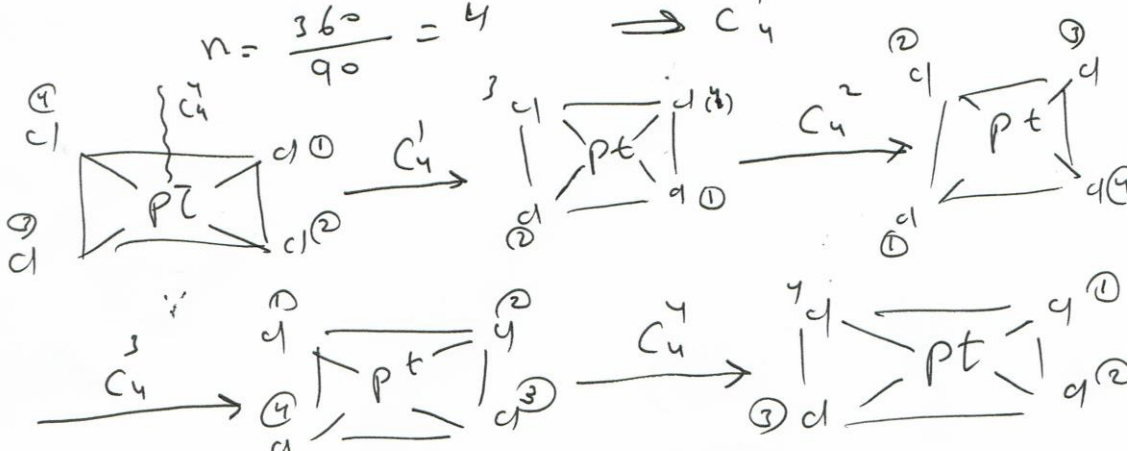
استه مر  $C_3^2$



مختلج رباعي

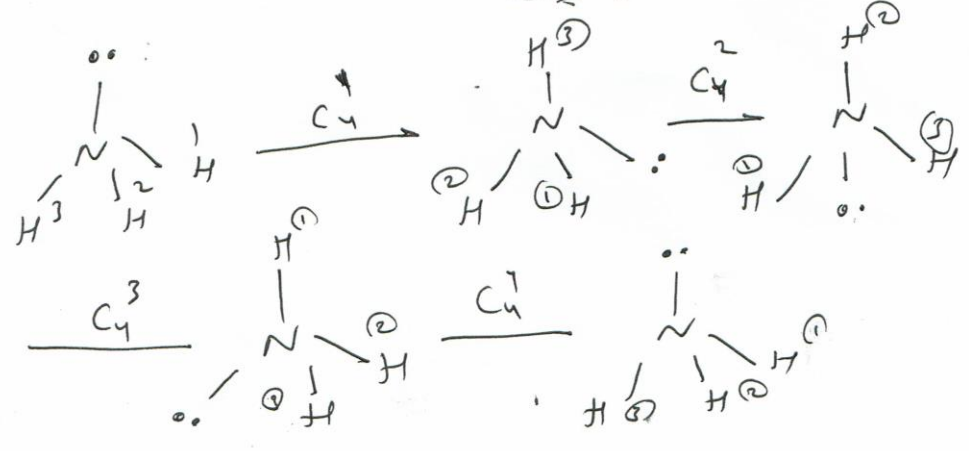
عند هذا الشكل محور عمودي عند الكربون يمر Pt مستقر  
الكربون دمر ذره Cl تأخذ مكان الذره الجاربه بحيث ان تدور  
بنزاع 90 و 180 درجات حتى تفصل بين الكربون الا هل

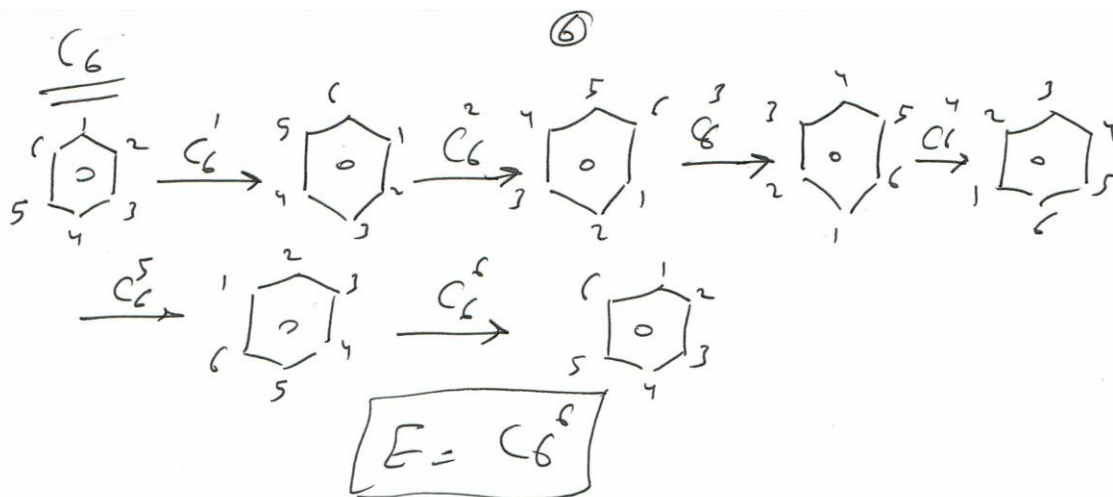
$n = \frac{360}{90} = 4 \Rightarrow C_4$



$C_4 = E$

المرحله  $NH_3$  عند حساب المزدوج الكربون فانه كما سب  
محا سبب الزوار الموصوره





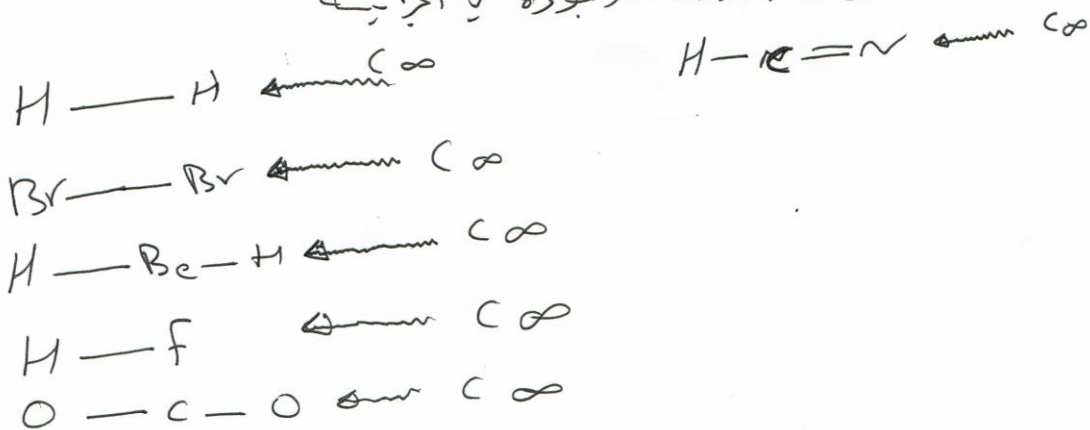
الجزيئات الغير متماثلة

الجزيئات الغير متماثلة يكون لها محور دوران  $C_1$  اي ان الجزيئه  
 كجبه ان تدور بخصوه وامره وازايه 360 درجه هتتصل على  
 الشكل الاصلي للجزيئه



الجزيئات الخطيه (المتماثله والغير متماثله) (Linear molecules)  $C_\infty$

هي حالة الجزيئات الخطيه سواء كانت هذه متماثله او غير متماثله  
 فانك محتوي على محور تماثل لا نهائي من محاور الدوران على اعتبار ان محور  
 الدوران يمر بالذرتين الموجوده على الجزيئه



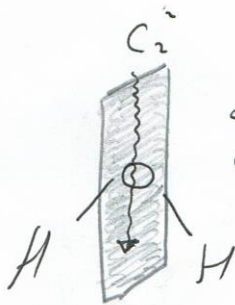
٧) عملية الانعكاس خلال مستوى التماثل (مستوى المراآة)

Reflection through a plane Symmetry  
(Mirror plane)

تتضمن هذه العملية وجود مستوى يعكس ضمن الجزيء بحيث يعكس الجزيء الى شطرين كل شطر يعكس الثاني ويكون انعكاس له عنه ذلك يقال ان الجزيء له مستوى انعكاس ويكون مستوى التماثل انواع

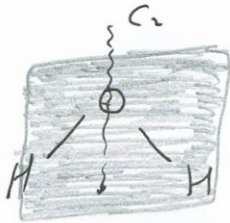
أ. النوع الاول (C<sub>v</sub>)

هو ذلك المستوى الذي يكون موازاً لمحور الدوران مثال ذلك جزيء الماء



يكون المستوى الاول موازاً لمحور الدوران بحيث يمر او يقطع جزيء O وسيظهر الجزيء الى شطين وكلاهما هو عكس بعض انعكاس للجزيء الثاني

والتصور التالي (C<sub>v</sub>) هو سير ب ذرات H O H بحيث يعكس الى عكس



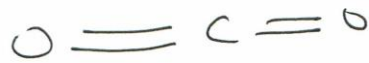
ب. النوع الثاني (C<sub>nh</sub>) وهو ذلك المستوى الذي يظهر الجزيء ويكون محود يمد محور الدوران ويكون موهوباً فقط في الجزيئات ذات استكاف كذا

octahedral (تتماثل 6) }  
tetrahedral (تتماثل 3) }  
في الحاله  
h<sub>6</sub> h<sub>3</sub> اضافه  
v<sub>6</sub> v<sub>3</sub>

⑧

النوع الثالث  $\infty$

دجور هذه المستويات من البرينات الاضوية الالستوي  
عمر ذات صفاتله دجور  $\infty$



البرينات الغير متانله دكل انواعه لسجله  $\infty$ ,  $\infty$ ,  $\infty$   
اد  $\infty$

$\frac{F_2}{H_2O, BU_3}$	نوع المستوي $\infty$	نوع التهجين البرينات المستوي
--------------------------	-------------------------	---------------------------------

$CH_4, (CO_2H)_2^+$	$\infty$	الغير مستوي tetrahedral octahedral
---------------------	----------	--

$CO_2$	$\infty$	البرينات الاضوية المتانله
--------	----------	---------------------------

المحتوي به $\infty, \infty, \infty$		البرينات الغير متانله عدد كانت ضله الا
-------------------------------------	--	---



Bcl<sub>3</sub>

(9)

الجزئية متوية

لا يوجد

لا توجد مستويات  $\sigma_v$

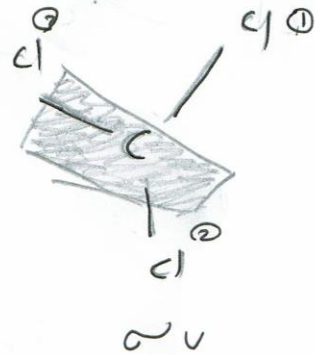
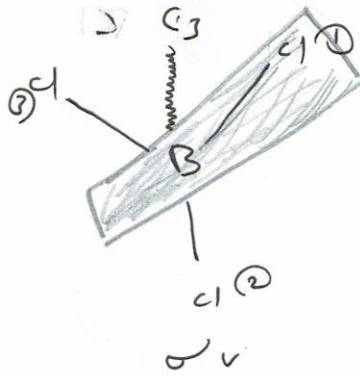
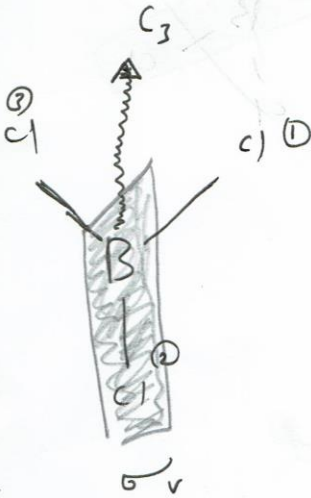
الطور الأول  $F - Cl (a)$

$F - Cl (b)$

$F - Cl (c)$

التي

التي



(10) الانقلاب طراز مدكز انماثل (i)

Reflection through ~~the~~ Center Symmetry  
(Inversion center) (i)

يقال للجزئية انماثلية مركزية اذا كانت مركز انقلاب اذا امكن تحريك كل ذرة من ذراته طراز المركز الى الجهة المقابلة وعلى نفس الارتفاع والارتفاع العكس تقع على ذرة من نفس النوع كما هو الحال مع الجزئيات الخطية مثل  $CO_2$



ذرة Be هي مركز الانقلاب حيث اذا تحركت  $H(1)$  الى  $H(2)$  المقابلة وعلى نفس الارتفاع فانها ستأخذ مكان ذرة  $H(2)$



\* جزيئات ذات شكل اكزي (tetrahedral) (sp<sup>3</sup>) لاكتويير مركزا انقلاب

\* صفاية التماسية BF<sub>3</sub> لاكتويير على مركز انقلاب

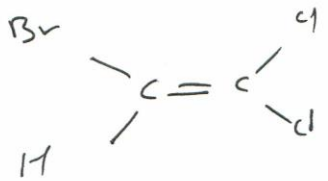
\* مثلث مستوي trigonal planar لاكتويير

\* octahedral كيتويير على مركز انقلاب

\* مربع مستوي كيتويير

\* الجزيئات الاصلية المتماثلة كيتويير مركزا انقلاب

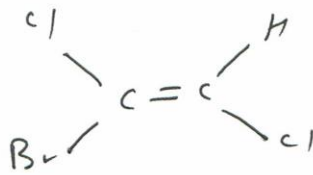
\* في العنصر متماثل لاكتويير مركزا انقلاب



BeF<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> كيتويير

لاكتويير (i)

HI لاكتويير

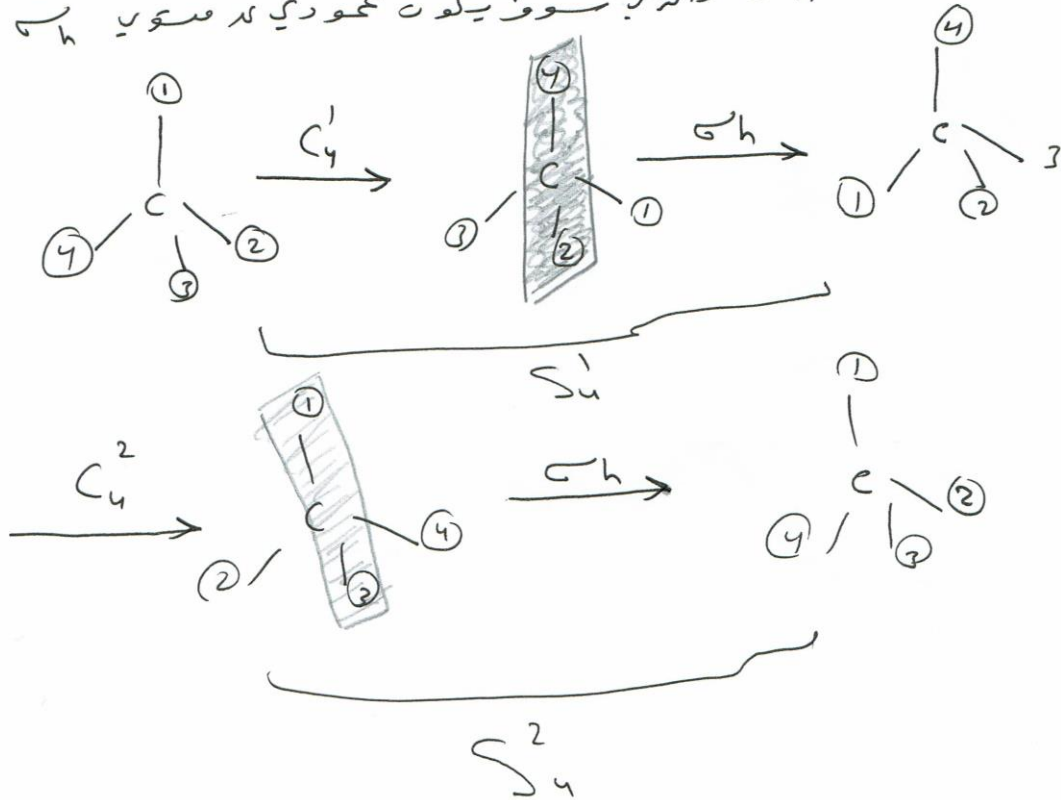


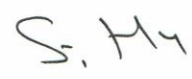
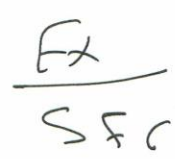
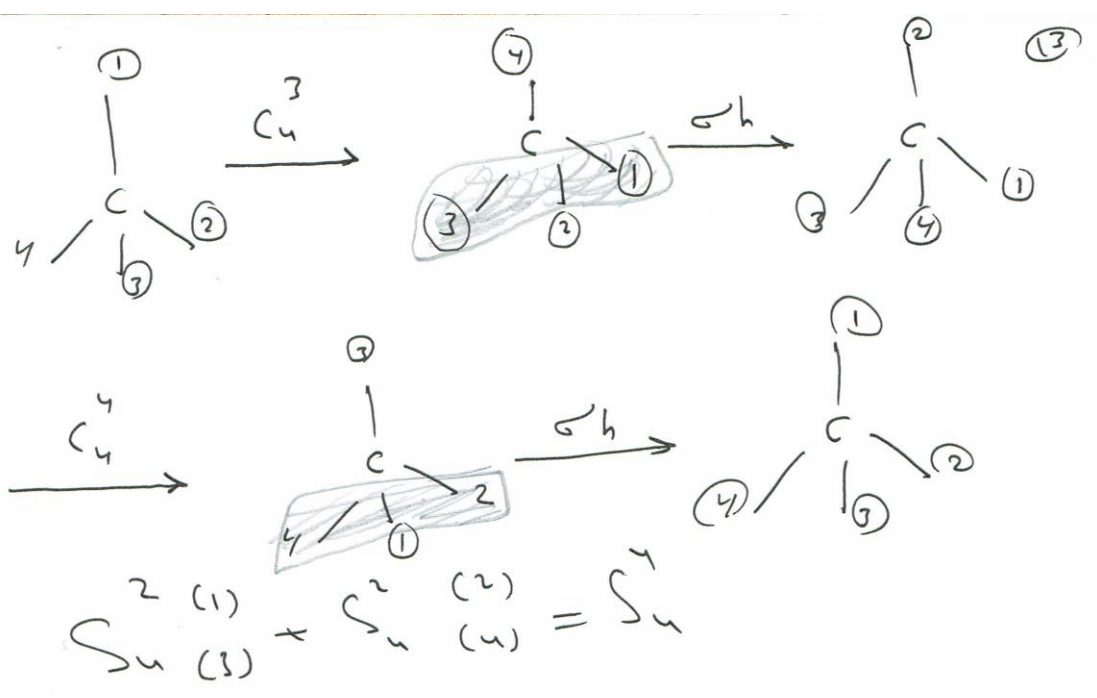
لاكتويير (j)

Rotation about an axis - followed by reflection ( $S_n$ )

تتطلب هذه العملية دوران الجزيء حول محور  $C_n$  ثم تتبع بانعكاس الذرات خلال مستوى عمودي على محور الدوران وتكون محصلة هاتين العمليتين هي  $S_n$  مماثلة في تكوينها الفعلي للجزيء الاصلية ولهذا يقال ان للجزيء محور دوران انعكاسي ويرمز له  $S_n$  للدلالة بوضوح انه في اسفل حرف (S) للدلالة على عمليات محور الدوران كما يوضح في اعلى بيين  $S$  للدلالة على عدد مرات الدوران

هذه العملية تكون للجزيئات ذات التماثل octahedral tetrahedral على مستوى  $C_h$  والذرات سوف يكون عمودي له مستوى  $C_h$





نوع الجزيئية  
 Octahedral  
 tetrahedral

ان صورتوں میں ہذا استوائی وجود  
 عمودی محور دوران لہذا جو صرف چاروں  
 سمتوں میں اس نوع



(14)

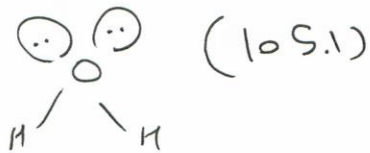
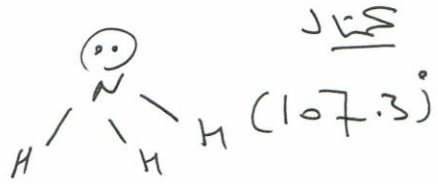
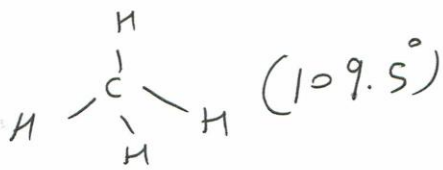
تأثير المجموعات (الارتدادية) على التماثل



١. زيادة عمليات التماثل كمتناظر



٢. تقلل من مقدار الزاوية بين الذرات نتيجة للشدة الزاوية



Point group

نقاط التماثل

هذه كل العمليات التي تظهر في التماثل للجزيئات

BF<sub>3</sub>



يوجد محور دوران C<sub>3</sub>

لا يوجد نقطة انعكاس

يوجد ثلاث مستويات عمودية σ<sub>v</sub>

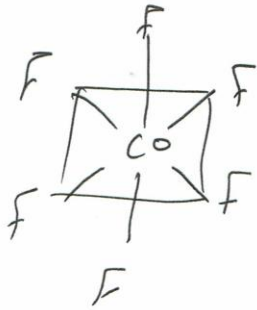
يوجد E

[C<sub>3</sub><sup>3</sup>, E, 3σ<sub>v</sub>]

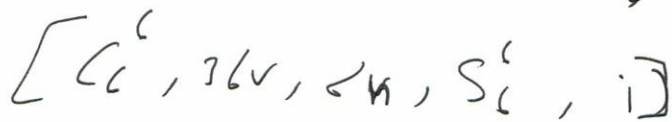
لذلك تكون



(5)



$C_6^6$  محور درزیات  
 $3C_2$  مستقر محور  
 $6C_2$  مستوی افقی  
 $i$  نقطه انعکاس  
 $S_6$  درزا - انعکاس

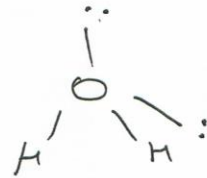
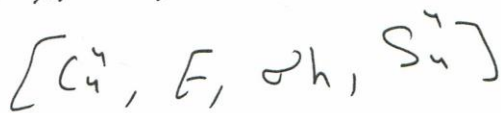


H<sub>2</sub>O

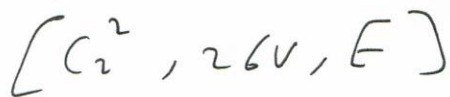
$[C_2, C_2, C_2]$  سه‌بینه غیر متماثل غیر قوی

$C_2$   
 دو بوجه مستوی افقی که در مرکز قرار می‌گیرند  
 دو بوجه نقطه - انعکاس که در مرکز قرار می‌گیرند

H<sub>2</sub>O بوجه و المزدوج و الکترونی



بعدم وجود الکترون در مرکز



انواع التماثل

Weak Symmetry

د. تماثل ضعیف

محتوی فقط در نوعین من التماثل

HOD

$$[E, \psi]$$

Moderate Symmetry

۲. تماثل متوسط

محتوی ۲ و ۱ انواع من التماثل

Strong or high Symmetry

۳. تماثل قوی

دهی الإکتون على جميع عملات التماثل