

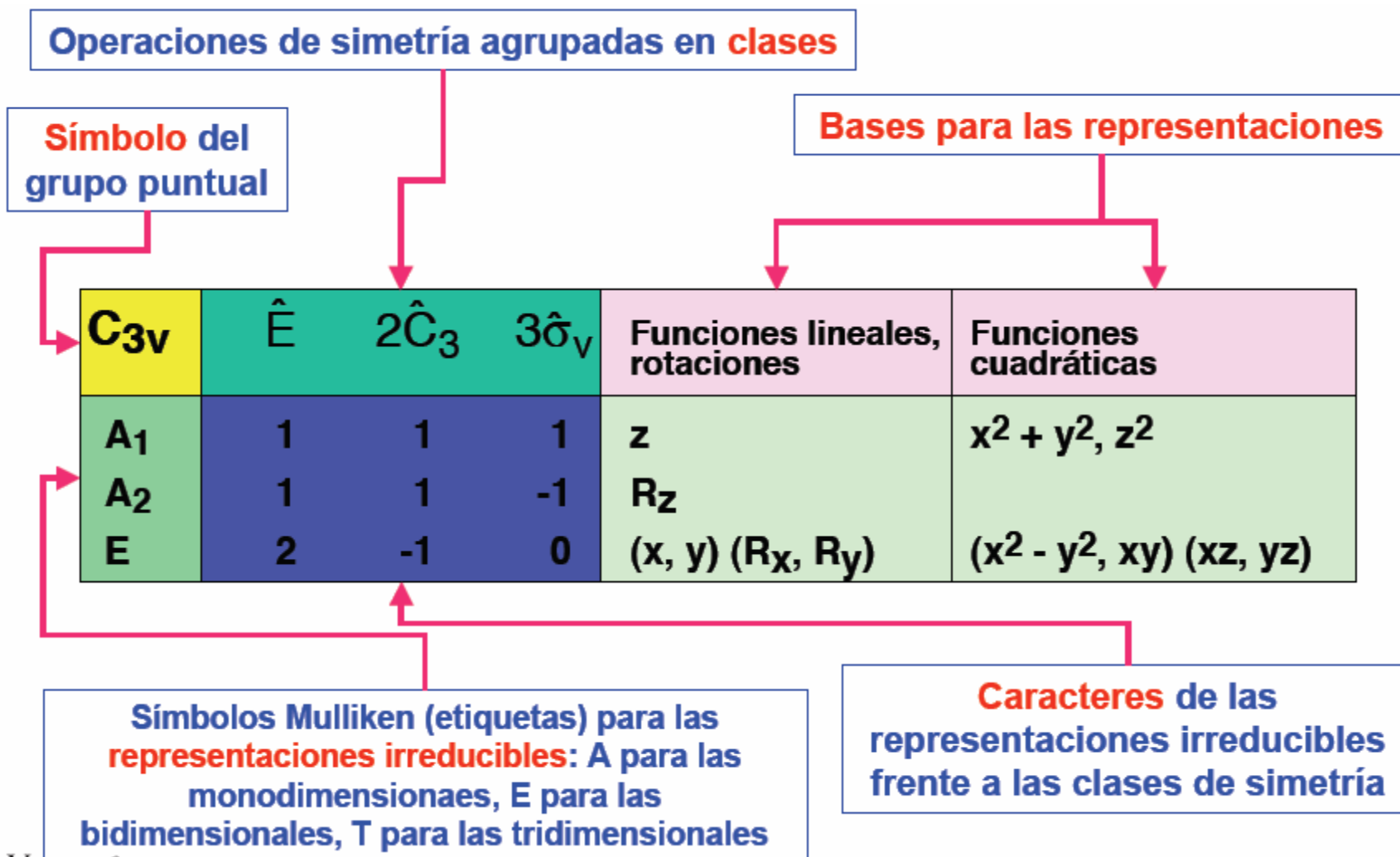
Tema II.

Tabla de Caracteres. Aplicación a la simetría de los orbitales atómicos.

Objetivos

- ✚ Conocer la información contenida en las Tablas de Caracteres.
 - Conocer e identificar los símbolos que la conforman
- ✚ Aplicar las operaciones de simetría de un grupo puntual a los orbitales atómicos.
- ✚ Confrontar orbitales atómicos de igual o diferente simetría
- ✚ Recordar el concepto de solapamiento.
 - Identificar los solapamientos nulos, positivos y negativos.

Tablas de caracteres del grupo puntual C_{3v}



Símbolos de Mulliken

Las representaciones monodimensionales se denotan por **A** o **B**, las bidimensionales por **E** y las tridimensionales por **T**.

$$\mathbf{A, B: } \chi(\mathbf{E})=1 \quad \mathbf{E: } \chi(\mathbf{E})=2; \quad \mathbf{T: } \chi(\mathbf{E})=3$$

Las representaciones simétricas respecto de la rotación en torno al eje C_n principal se denotan como **A** siendo los caracteres para las operaciones C_n^m igual a 1 (indica que no cambia el signo);

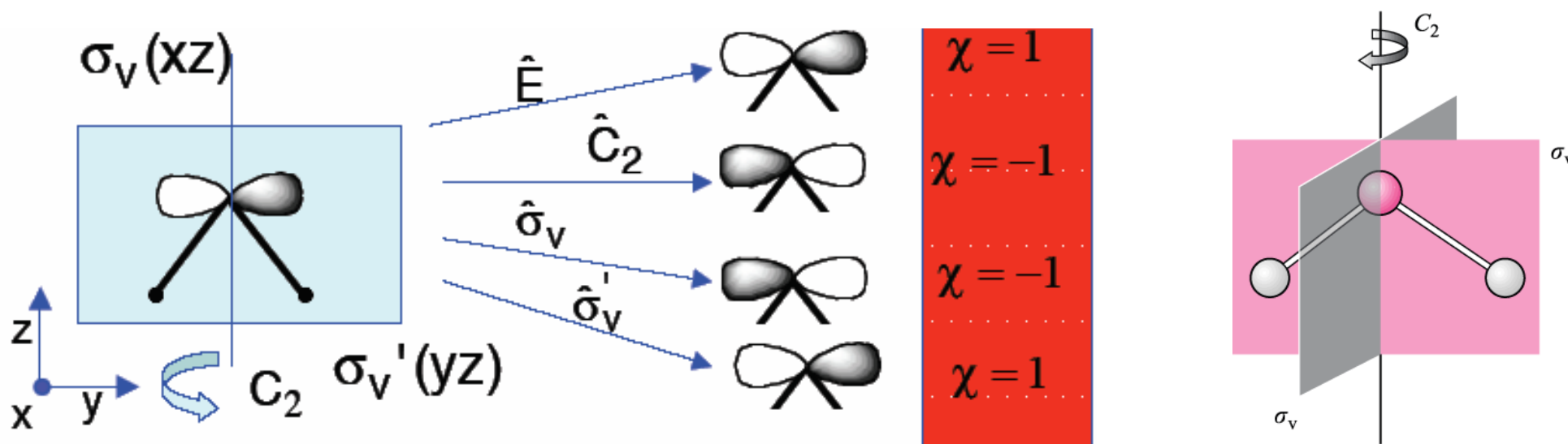
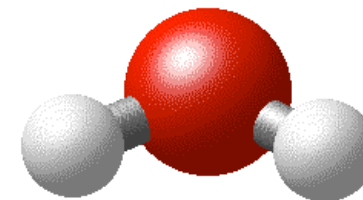
$$\chi(C_n^m)=1$$

Las representaciones antisimétricas respecto de la rotación se representan por **B** y $\chi(C_n^m)=-1$ (indicando que cambian de signo)

Subíndices y superíndices en los símbolos de Mulliken

- Los subíndices **1** y **2** en los símbolos A y B denotan un comportamiento simétrico (1) o antisimétrico (2) de las funciones base respecto:
 - ❖ a la rotación sobre los ejes C_2' (perpendiculares al eje principal) o si tal eje no existiera,
 - ❖ a la reflexión en los planos verticales σ_v o σ_d
- Las representaciones simétricas respecto del plano horizontal se denotan con una comilla'; las antisimétricas con comillas dobles''.
- El subíndice **g** (**gerade**) indica invarianza con la inversión i , mientras que el subíndice **u** (**ungerade**) indica cambio de signo. (Sólo se utiliza esta terminología en moléculas centrosimétricas)

Clasificación de los Orbitales atómicos del oxígeno en la molécula de agua

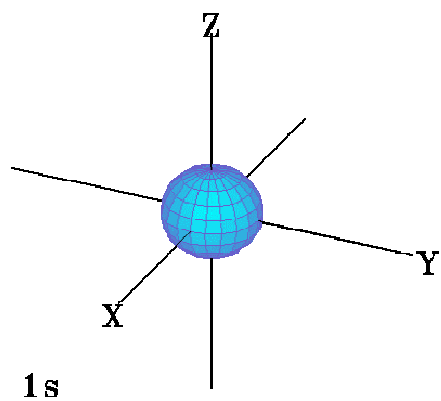


C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(XZ)$	$\sigma_v'(YZ)$		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	Rz	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, Ry	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, Ry	yz

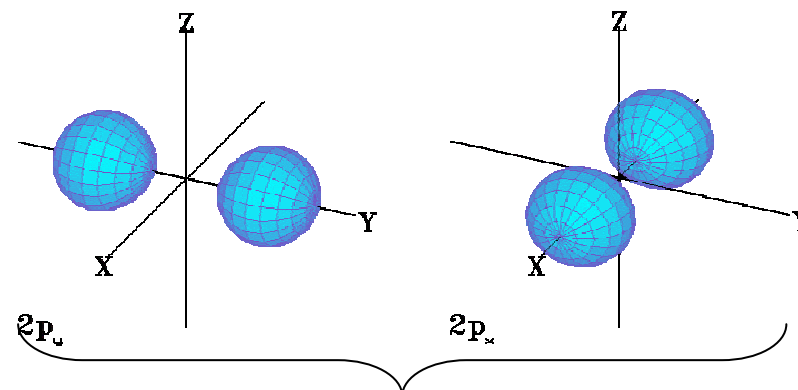
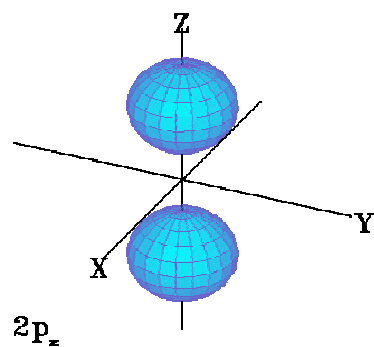
Clasificación de los Orbitales atómicos del nitrógeno en la molécula de amoniaco



C_{3v}	\hat{E}	$2\hat{C}_3$	$3\hat{\sigma}_v$	Funciones lineales, rotaciones	Funciones cuadráticas
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y) (R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy) (xz, yz)$

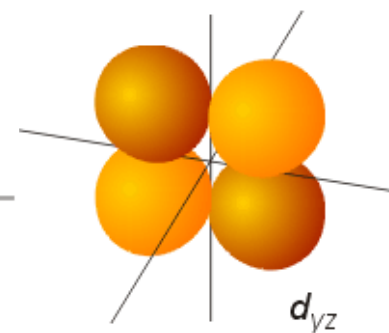
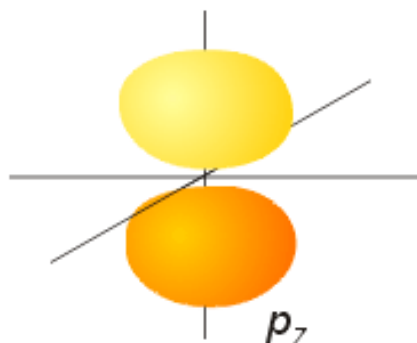
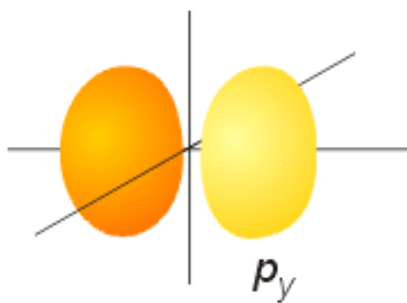
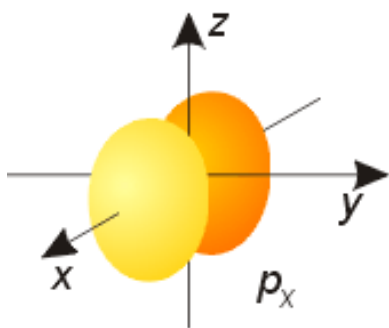
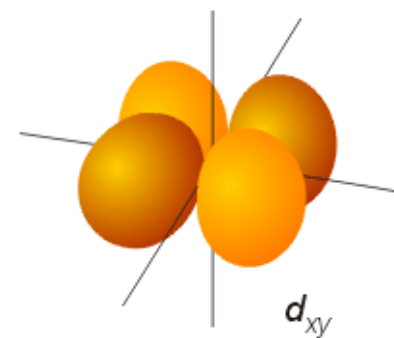
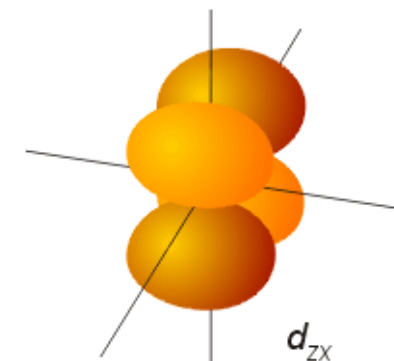
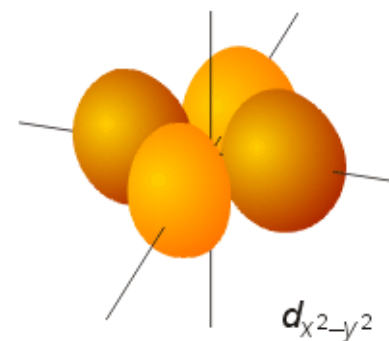
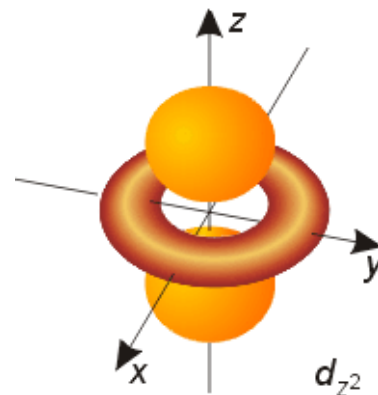
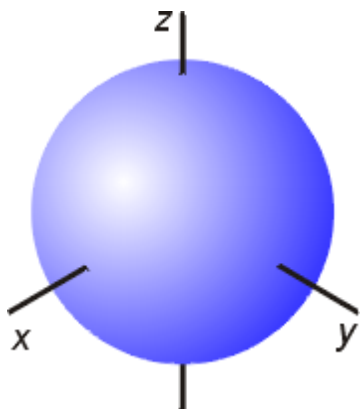


A_1

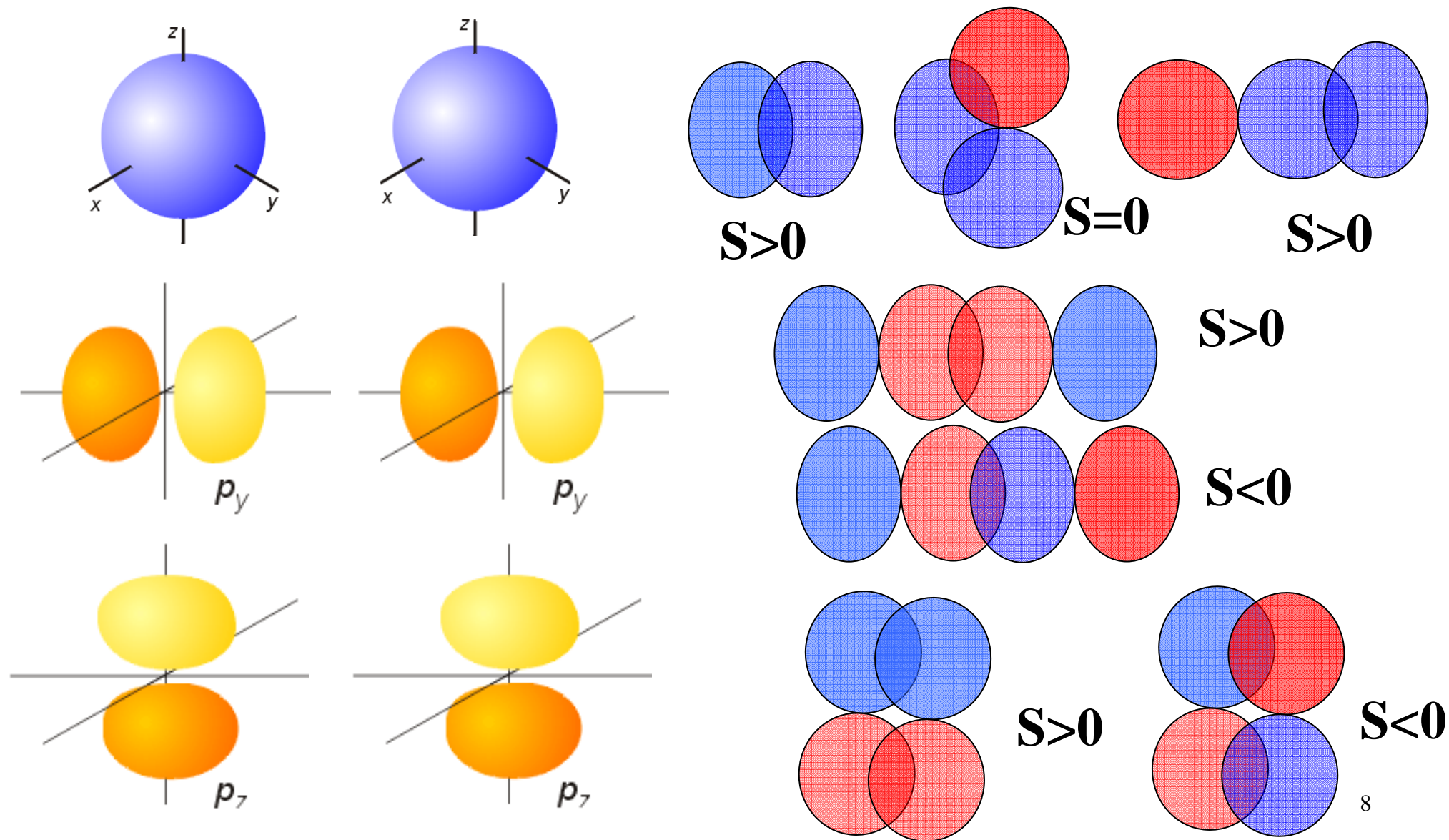


E

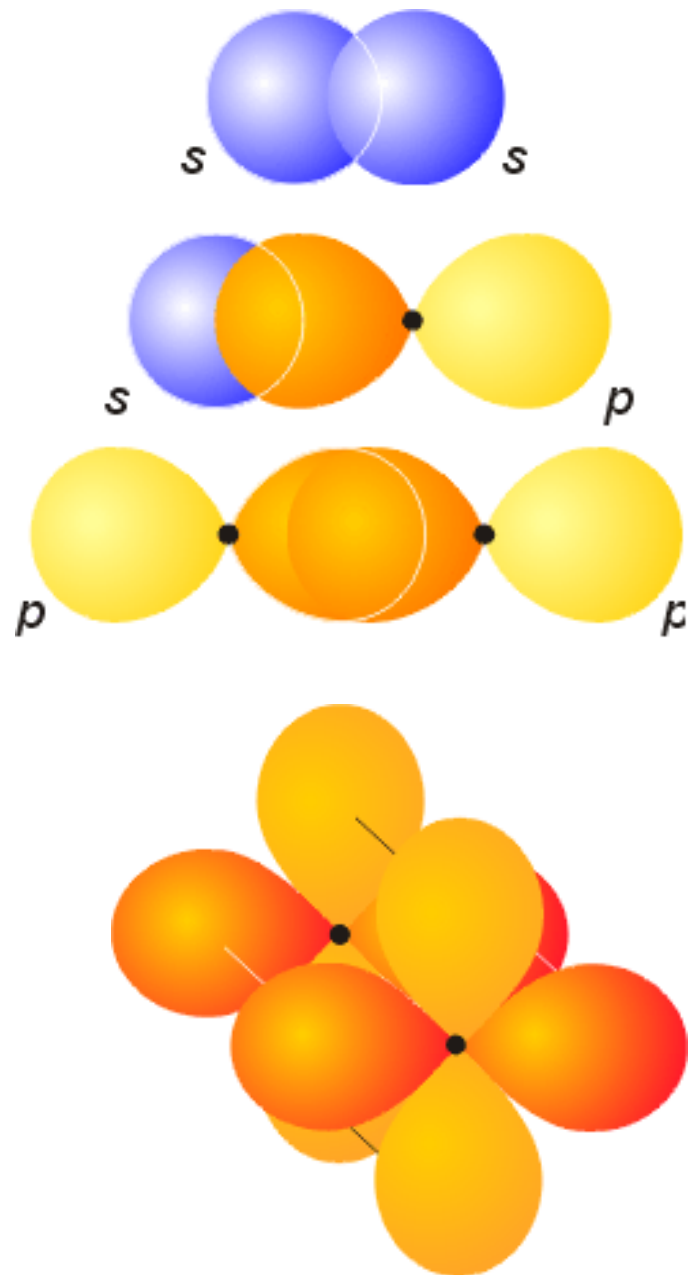
Simetría de los Orbitales atómicos



Solapamiento de Orbitales Atómicos en función de su simetría



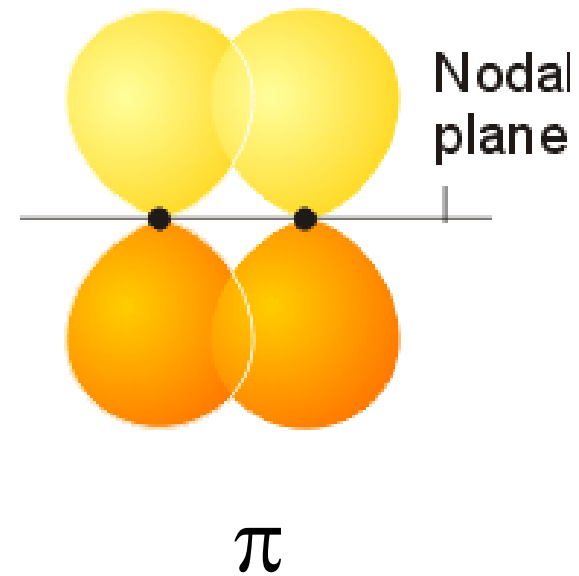
Tipos de solapamientos



σ

$$S > 0$$

δ



Nodal plane

π