

UN NUEVO DIAGRAMA DE FLUJO DE ÁRBOL INVERTIDO PARA CLASIFICAR GRUPOS PUNTUALES

Aarón Pérez Benítez¹, José Antonio Guevara García², y Enrique González Vergara³

1. Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

2. Laboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología. Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, de la Universidad Autónoma de Tlaxcala.

3. Centro de Química, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Edif. IC8. C.U. San Manuel. Puebla, Pue. México. C.P. 72570

enrique.gonzalez@correo.buap.mx

Resumen

La clasificación de la simetría de una molécula particular dentro del grupo puntual apropiado desempeña un papel fundamental en la aplicación de la teoría de grupos para resolver problemas químicos. Aunque hay diferentes enfoques para esta clasificación, la propuesta de Carter de un diagrama de flujo de árbol invertido en 1968 ha sufrido muchas variaciones y actualmente se pueden encontrar diversos ejemplos en la literatura. Sin embargo, en algunos casos la simplicidad se ha convertido en complejidad y el valor del diagrama original no se ha reconocido por completo. En este trabajo se presenta un nuevo y sencillo diagrama de flujo de árbol invertido. Desde nuestro enfoque se plantea una serie de preguntas en cada punto de acuerdo con la presencia de un elemento particular de simetría. La respuesta a cinco de estas preguntas permite al estudiante avanzar rápidamente en la clasificación al alcanzar una de las siete secciones del árbol, las cuales contienen una gran cantidad de información sobre la simetría de la molécula que se analiza.

Palabras clave: Simetría, Grupos Puntuales, Diagrama de Clasificación

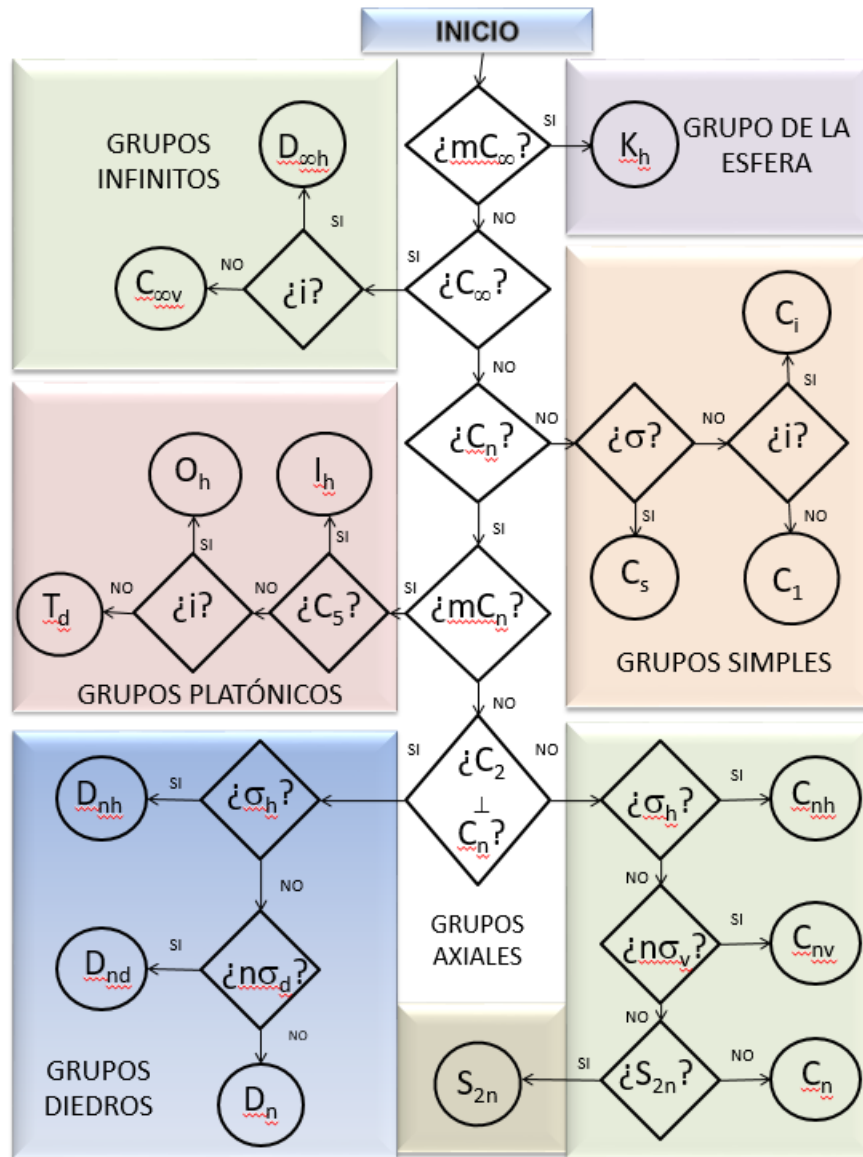
Los conceptos de simetría han sido introducidos de manera continua en el plan curricular de química desde el trabajo pionero de Cotton en 1963. Estos conceptos se abordaban inicialmente en libros avanzados de texto de química inorgánica, especialmente en capítulos sobre espectroscopia o métodos físicos. Actualmente, se incluye una descripción de los conceptos de simetría y una introducción a la teoría de grupos en los primeros capítulos de este tipo de libros de texto.

Clasificar fácil y rápidamente una estructura molecular según el grupo puntual al que pertenecen sus operaciones de simetría puede representar un problema inicialmente, pero el problema se simplifica si contamos con un diagrama guía que nos permita arribar a las asignaciones correctas por medio de la respuesta a preguntas sencillas. Estas preguntas se encuentran ordenadas en una secuencia lógica y generalmente son presentadas mediante un diagrama de flujo. Con base en las ideas originales de Carter, el diagrama que aquí se presenta permite clasificar de una manera sencilla las operaciones de simetría de una molécula dada en el grupo puntual correspondiente. Este grupo puntual consiste en un árbol invertido presentado en forma de diagrama de flujo, el cual contiene cinco preguntas básicas que permiten el acceso a siete secciones del árbol como se especifica en la siguiente tabla.

Grupos puntuales asociados a cada sector en el Diagrama de Árbol Invertido

Sección	Grupo Puntual
<i>Grupo de la Esfera</i>	K_h
<i>Grupos Infinitos</i>	$D_{\infty h}, C_{\infty v}$
<i>Grupos Simples</i>	C_s, C_i, C_1
<i>Grupos Platónicos</i>	I_h, O_h, T_d
<i>Grupos Diedros</i>	D_{nh}, D_{nd}, D_n
<i>Grupos Axiales</i>	C_{nh}, C_{nv}, C_n
<i>Grupo Axial Impropio</i>	S_{2n}

La entrada a cada sección permite descartar un gran número de grupos puntuales para concentrarse en preguntas sencillas que permitan encontrar el grupo puntual correspondiente fácil y rápidamente.



1. Se inicia con la pregunta sobre si existen varios ejes C_∞ (mC_∞) y si la respuesta es afirmativa, esto corresponderá al *grupo de la esfera* K_h .

2. Si lo anterior no es así, se prosigue a la siguiente pregunta sobre si la molécula posee C_{∞} . Si la respuesta es afirmativa, esto corresponderá a los *grupos infinitos* y la presencia de un centro de inversión definirá si ésta pertenece al grupo puntual $D_{\infty h}$ o $C_{\infty v}$.
3. Si, por el contrario, la molécula no posee C_{∞} , la siguiente pregunta será si posee un eje de orden n (C_n). Si esto no es así, se entrará a la sección de los *grupos simples*, donde la presencia de un plano o un centro de inversión definirá si la molécula es C_s o C_i , pero si esto no se presenta, la molécula pertenecerá al grupo puntual C_1 .
4. Si, por el contrario, la molécula posee varios C_n (mC_n) la molécula pertenecerá a los *grupos platónicos*. Si posee ejes de orden 5, pertenecerá al grupo puntual I_h , pero si no posee C_5 y tiene centro de inversión, pertenecerá al grupo puntual O_h . Si esto no es así, entonces pertenecerá al grupo puntual T_d .
5. En caso de que la molécula tenga un eje de mayor orden C_n , la siguiente pregunta será si posee C_2 perpendiculares a C_n . Si es así, la molécula pertenecerá a los *grupos diedros*, en cuyo caso la presencia de plano horizontal o plano diedro definirá si la molécula es D_{nh} o D_{nd} . Por otro lado, si la molécula tiene un eje de mayor orden y no posee ejes C_2 perpendiculares, la molécula pertenecerá a los *grupos axiales* y la presencia de plano horizontal o vertical definirá si la molécula pertenece al grupo puntual C_{nh} o C_{nv} . Si únicamente la molécula posee un eje de orden n (C_n), entonces el grupo puntual correspondiente será C_n . Finalmente, si la molécula posee un eje impropio de orden par ($2n$), la molécula pertenecerá al *grupo puntual axial impropio* S_{2n} .

De esta manera, a partir de cinco preguntas clave, es posible asignar una de las siete secciones a las que el grupo puntual de una molécula puede pertenecer y continuar con preguntas sencillas para determinar fácilmente el grupo puntual que describe totalmente la simetría de la molécula en cuestión.

Así, el primer paso para la aplicación de la teoría de grupos para la comprensión del comportamiento molecular se establece fácil y rápidamente por medio del diagrama aquí

presentado. Las direcciones electrónicas que se sugieren a continuación permiten realizar la clasificación de un gran número de ejemplos.

<http://symmetry.otterbein.edu/tutorial/index.html>

Consultada por última vez el 9 de septiembre de 2017.

<http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/pointgroups/examples.html>

Consultada por última vez el 9 de septiembre de 2017.

<http://es.webqc.org/printable-symmetrypointgroup-d2h.html>

Consultada por última vez el 12 de septiembre de 2017.

<http://newton.ex.ac.uk/research/qsystems/people/goss/symmetry/Molecules.html>

Consultada por última vez el 12 de septiembre de 2017.

Literatura recomendada

Carter, R. L. A Flow-Chart Approach to Point Group Classification. *Journal of Chemical Education*. 45 (1), 44, 1968.

Carter, R. L. Molecular Symmetry and Group Theory. New York, USA. John Wiley and Sons, Inc. 1998.

Cotton, F. A. Chemical Applications of Group Theory (Primera Edición). New York, USA. John Wiley and Sons, Inc. 1963.

Cotton, F. A. Chemical Applications of Group Theory (Tercera edición). New York, USA. John Wiley and Sons, Inc. 1990.

Hargitai, I y Hargitai, M. Symmetry in Chemistry. *European Reviews*. 13, Supp. No. 2, 61-75, 2005.

Hargitai, I. y Hargitai, M. Symmetry through the Eyes of a Chemist (Tercera Edición). Netherlands, *Springer*. 2009.

Kettle, S. F. A. Symmetry and Structure, Readable Group Theory for Chemist (Tercera Edición). Chichester, UK. John Wiley and Sons, Inc. 2008.

Weller, M. T., Overton, T. I., Rourke, J. P., y Armstrong, F. A. Inorganic Chemistry (Sexta Edición). UK & Europe. Oxford University Press. 2014.