

เอกสารประกอบการบรรยาย

วิชา คม331 เคมีอินทรีย์ 1

สมมาตรของโมเลกุล (Molecular symmetry)

- ❑ Symmetry elements & Symmetry operations
- ❑ Multiplication of symmetry operations
- ❑ Determination of molecular point groups

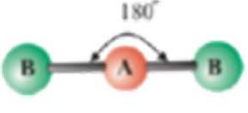
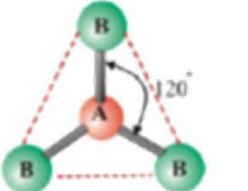
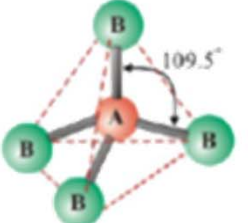
อาจารย์ ดร. วีรินทร์ดา ทะปะละ

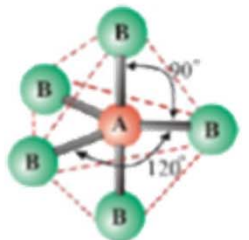
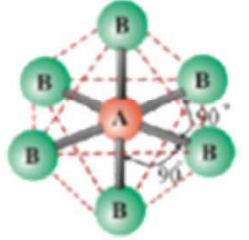
สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้

<http://www.chemistry.mju.ac.th/>

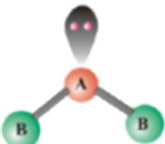
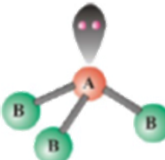
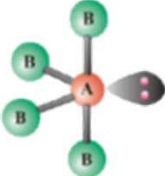
ทบทวน VSEPR model

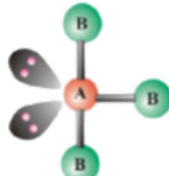
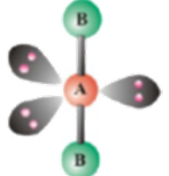
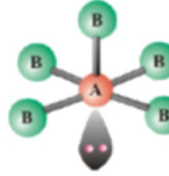
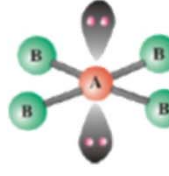
- กรณีไม่มีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวเหลือบนอะตอมกลาง

จำนวนพันธะ	สูตรทั่วไป	รูปร่างโมเลกุล
2	AB_2	 เส้นตรง (linear)
3	AB_3	 สามเหลี่ยมแบนราบ (trigonal planar)
4	AB_4	 ทรงสี่หน้า (tetrahedral)

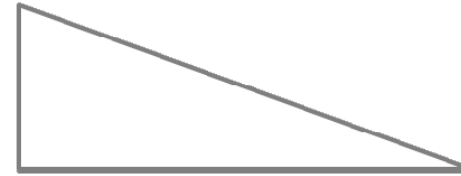
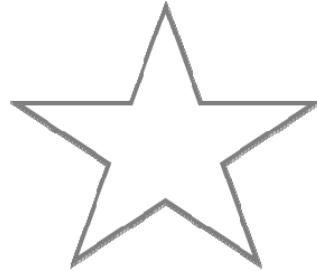
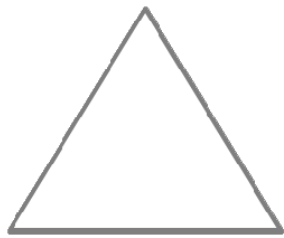
จำนวนพันธะ	สูตรทั่วไป	รูปร่างโมเลกุล
5	AB_5	 พีระมิดคู่ฐานสามเหลี่ยม (trigonal bipyramidal)
6	AB_6	 ทรงแปดหน้า (octahedral)

■ กรณีมีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวเหลือน้อยกว่า 2 อะตอมกลาง

จำนวน อิเล็กตรอน คู่ร่วมพันธะ	จำนวน อิเล็กตรอน คู่โดดเดี่ยว	สูตรทั่วไป	รูปร่างโมเลกุล
2	1	AB_2E	 มุมงอ (V - shaped)
3	1	AB_3E	 พีระมิดฐานสามเหลี่ยม (trigonal pyramidal)
2	2	AB_2E_2	 มุมงอ (V - shaped)
4	1	AB_4E	 ทรงสี่หน้าบิดเบี้ยว (distorted tetrahedral) หรือ seesaw

จำนวน อิเล็กตรอน คู่ร่วมพันธะ	จำนวน อิเล็กตรอน คู่โดดเดี่ยว	สูตรทั่วไป	รูปร่างโมเลกุล
3	2	AB_3E_2	 รูปคัทที (T - shaped)
2	3	AB_2E_3	 เส้นตรง (linear)
5	1	AB_5E	 พีระมิดฐานสี่เหลี่ยม (square pyramidal)
4	2	AB_4E_2	 สี่เหลี่ยมแบนราบ (square planar)

วัตถุใดมีสมมาตร ???



“Flag symmetry”



Thailand



Japan



Australia



America (USA)



Spain



Austria



Switzerland



Sweden

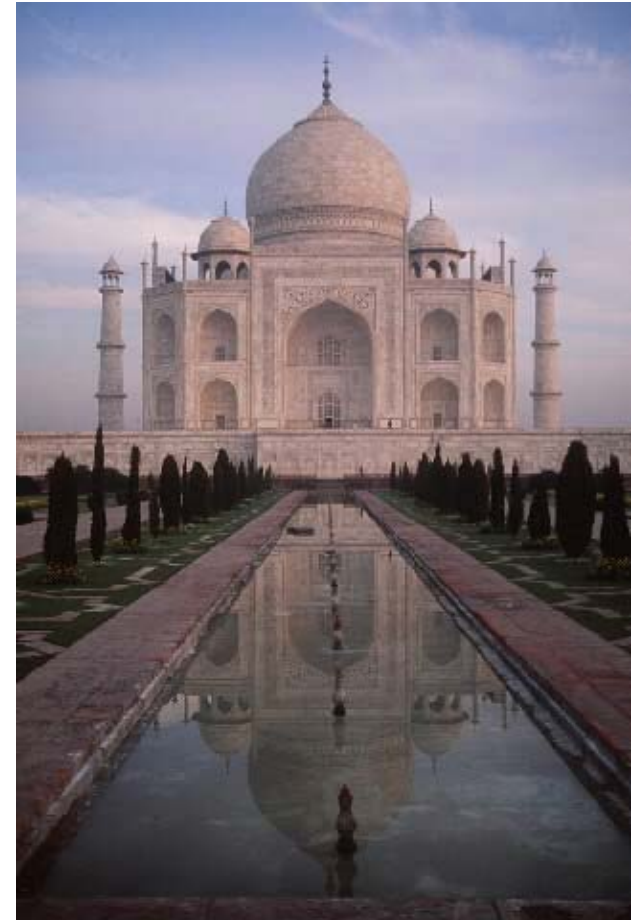
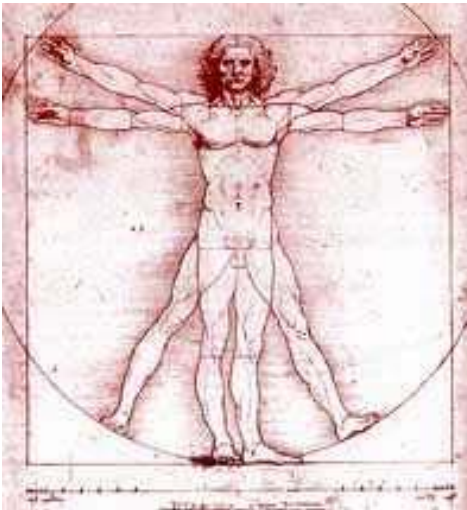


Great Britain



Việt Nam

Symmetry in nature, art and architecture



Symmetry elements & Symmetry operations

สมมาตรมูลฐาน (Symmetry element): รูปทรงทางเรขาคณิต เช่น จุด ระนาบ แกนหมุน ที่สมมติขึ้น ที่สามารถทำให้เกิดการกระทำสมมาตรได้

การกระทำสมมาตร (Symmetry operation): การกระทำบนภาพ/วัตถุ ที่ทำให้เกิดผลลัพธ์เป็นภาพ/วัตถุ ที่จัดเรียงตัวในทิศทางเหมือนเดิม (สามารถยกมาทับกันได้สนิท)

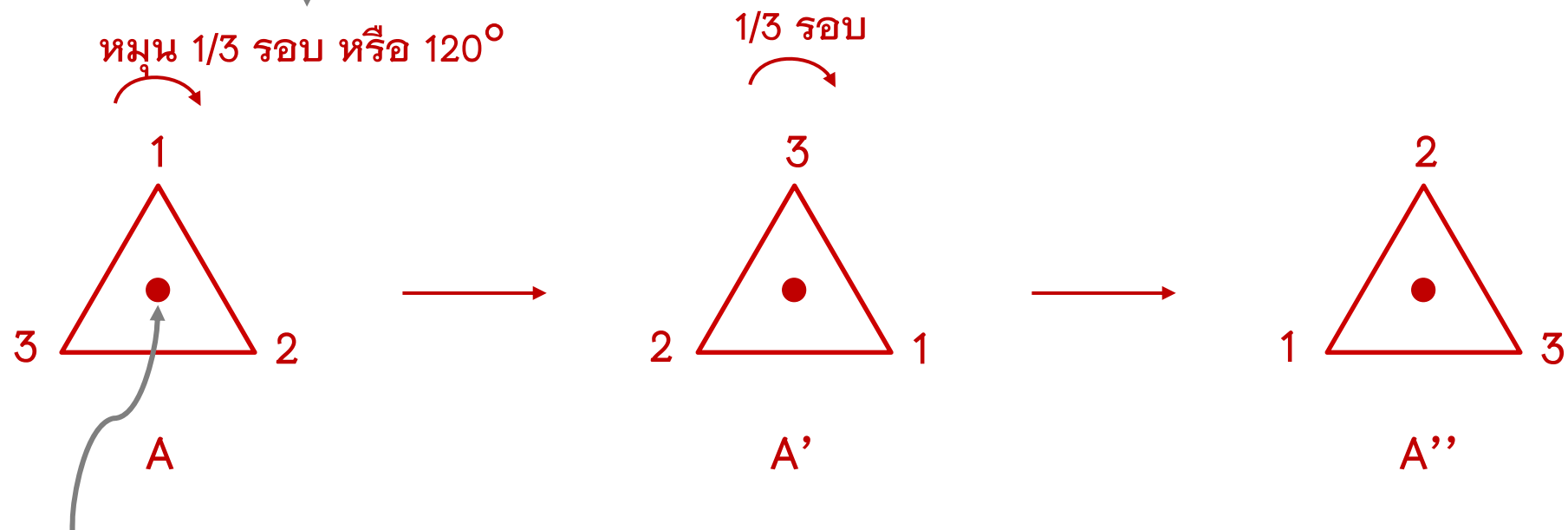
Element	Symbol	Operation
Proper axis	C_n	Rotation about axis by $360/n^\circ$
Symmetry plane	σ	Reflection in plane
Improper axis	S_n	1. Rotation by $360/n^\circ$ 2. Reflection through plane perpendicular to rotation axis
Inversion center	i	Inversion every point (x,y,z) translated to (-x,-y,-z)
Identity	E	Doing nothing

สมมาตรมูลฐาน และ การกระทำสมมาตร

(Symmetry elements & Symmetry operations)

Element	Symbol	Operation
แกนหมุนสมมาตร (Proper axis)	C_n	การหมุนรอบแกนหมุน $360/n$ องศา
ระนาบสมมาตร (Symmetry plane)	σ	การสะท้อนผ่านระนาบ
แกนหมุนสะท้อน (Improper axis)	S_n	1. การหมุนรอบแกนหมุน $360/n$ องศา 2. แล้วสะท้อนผ่านระนาบที่ตั้งฉากกับแกนหมุน
จุดศูนย์กลางสมมาตร (Inversion center)	i	ย้ายทุกจุด (x,y,z) ไปยัง $(-x,-y,-z)$
เอกลักษณ์ (Identity)	E	การไม่กระทำการใดๆ เลย

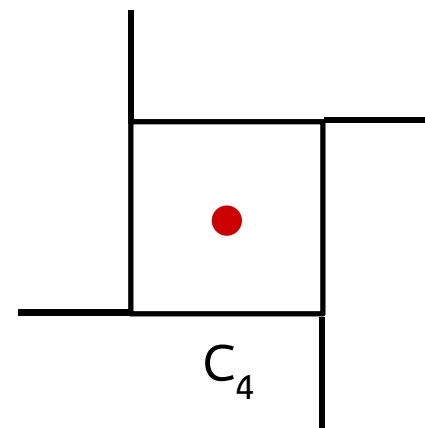
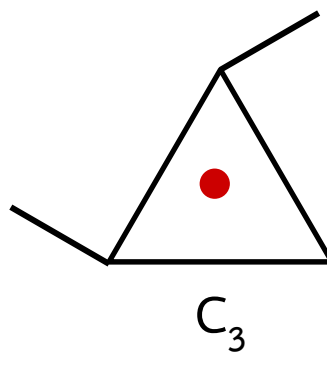
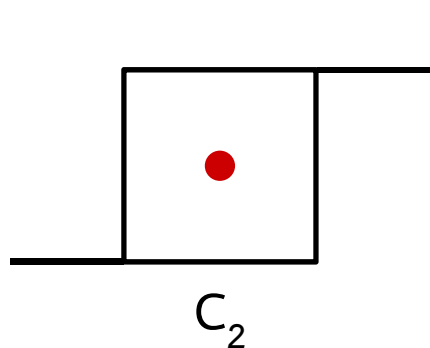
Symmetry operations = การหมุนสามเหลี่ยม 120 องศา



Symmetry elements = จุดหมุน/แกนหมุน

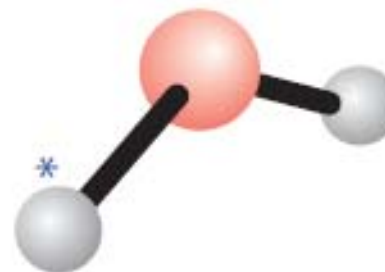
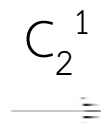
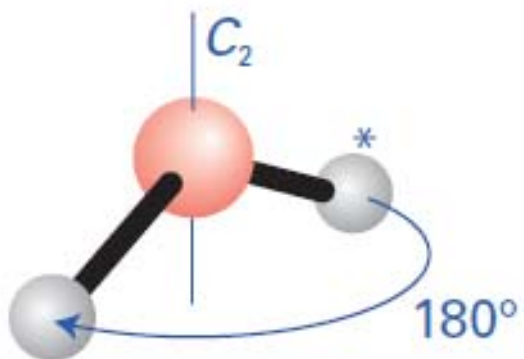
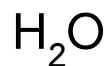
แกนหมุนสมมาตร (Proper rotation axis): C_n

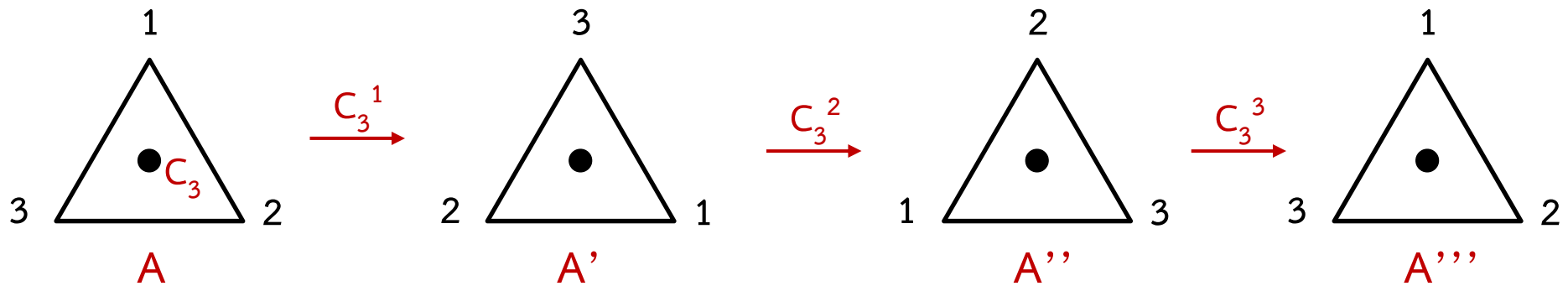
“การหมุนรอบแกนที่สมมติขึ้น (C_n) เป็นมุมเท่ากับ $360/n$ องศา แล้วทำให้ได้ภาพหรือรูปร่างที่สามารถยกมาทับกับภาพหรือรูปร่างตั้งต้นได้สนิท”



Symmetry element = แกนหมุนสมมาตร (C_n)

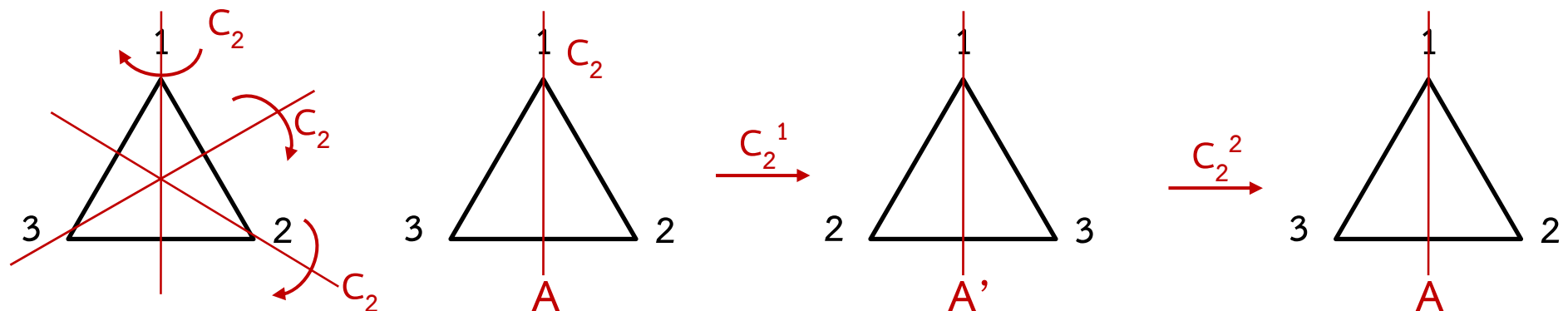
Symmetry operation = การหมุนรอบแกนหมุนสมมาตรด้วยมุม $360/n$ °



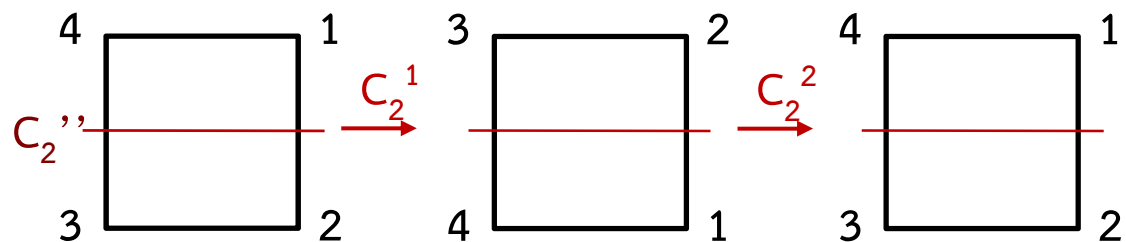
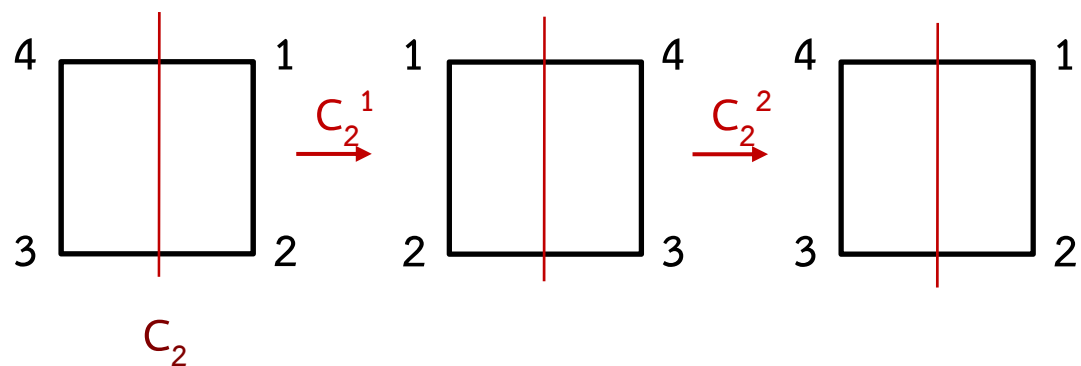
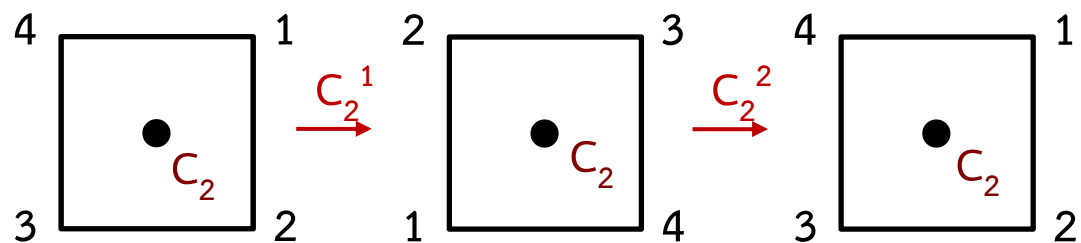
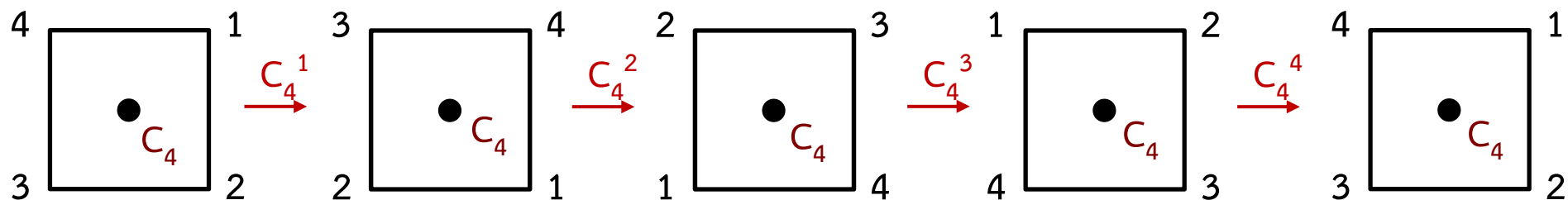


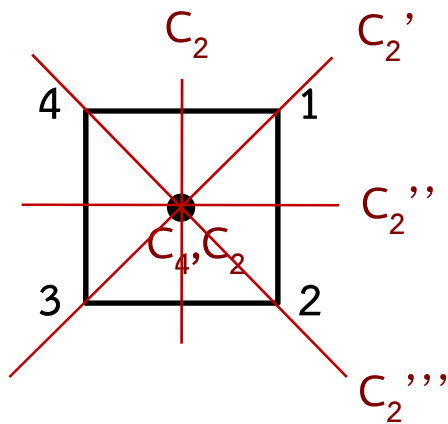
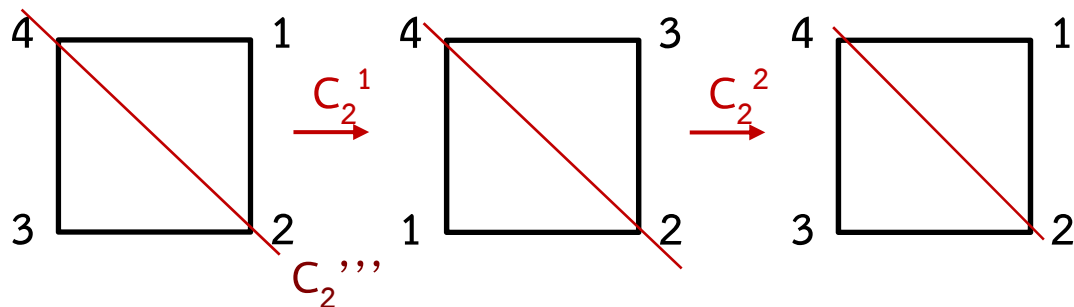
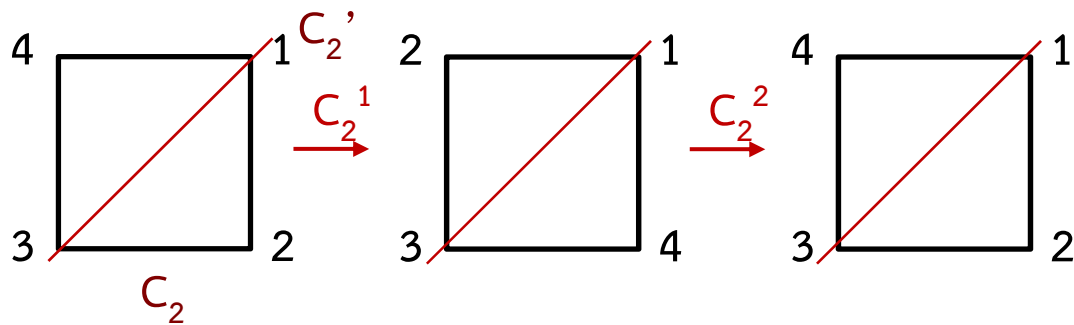
A และ A' และ $A'' \Rightarrow$ สมมูลกัน (Equivalent)

A และ $A''' \Rightarrow$ เหมือนกันทุกประการ (Identical)

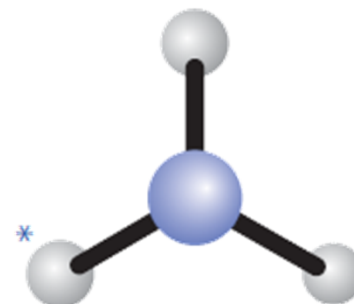
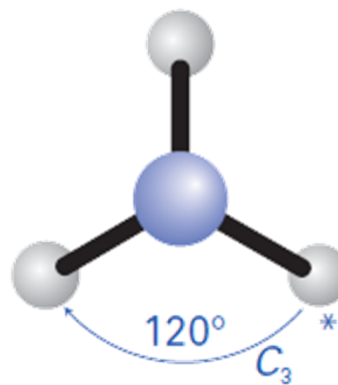
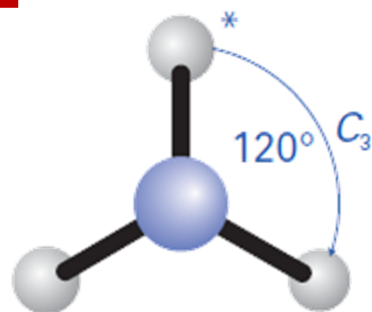
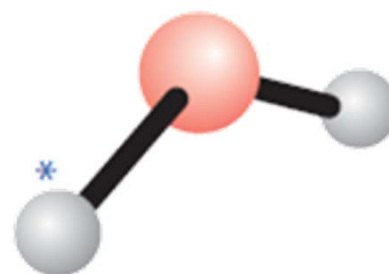
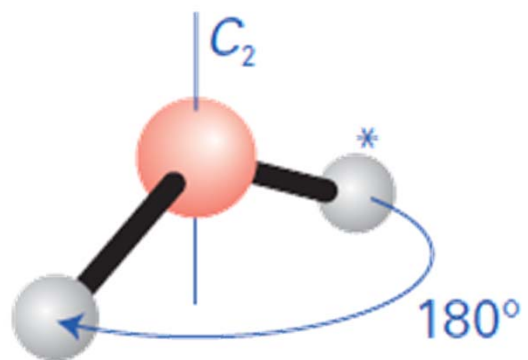


- สามเหลี่ยมด้านเท่าที่มีแกนหมุนที่แท้จริงทั้งหมด 4 แกน คือ C_3 1 แกน และ C_2 3 แกน
- แบ่งเป็น 2 กลุ่ม เรียกว่า คลาส (class)
 - Class 1: C_3 ที่ตั้งฉากกับระนาบของภาพ ทำให้เกิดการกระทำสมมาตร 2 ชนิด คือ C_3^1 และ C_3^2
 - Class 2: C_2 ที่อยู่แนวเดียวกับระนาบของภาพ ทำให้เกิดการกระทำสมมาตร 1×3 ชนิด คือ $3C_2^1$
- การกระทำสมมาตรทั้งหมดเท่ากับ $2+3 = 5$



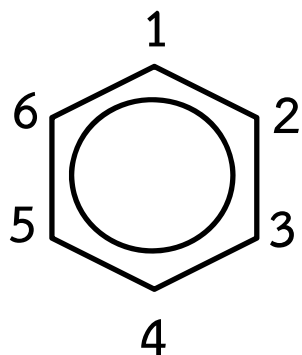
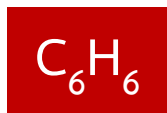


- แกนหมุนที่อยู่ ณ ตำแหน่งเดียวกัน $\Rightarrow$ โคอินซิเดนซ์ (Coincident)
- แกนหมุนสมมาตรหลัก คือ แกนหมุน C_n ที่ n มีค่าสูงสุด
- $C_n^n = E \Rightarrow$ เอกลักษณ์ (Identity)
- C_4^2 ให้ผลลัพธ์เหมือนกับ C_2^1 ดังนั้นจะนับเพียงหนึ่งครั้งเท่านั้นคือ C_2^1
- การกระทำสมมาตรทั้งหมดเท่ากับ 7 ครั้ง
(2 ครั้งจากแกน C_4 1 แกน และ 5 ครั้งจากแกน C_2 5 แกน)



ตัวอย่าง 1 จงวาดรูปแสดงตำแหน่งแกนหมุนทั้งหมดในโมเลกุลต่อไปนี้ พร้อมทั้งเขียนแสดงการกระทำสมมาตรที่เกิดจากแกนหมุนนั้น

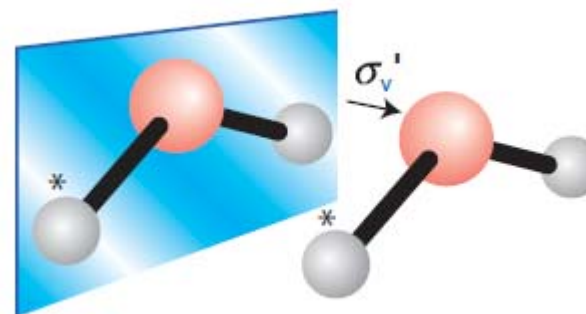
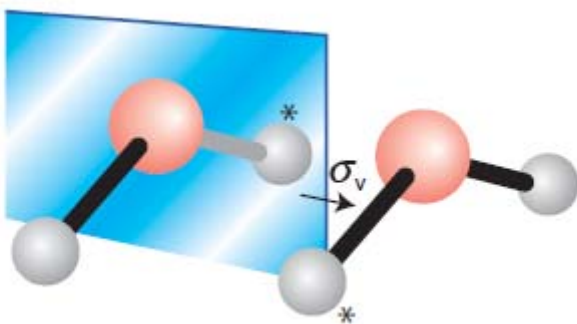




- มีแกนหมุนสมมาตรกี่แกน? ตำแหน่งใดบ้าง?
- แกนหมุนสมมาตรหลักคือแกนใด?
- แกนหมุนใดบ้างที่อยู่ coincident กัน?
- มีการกระทำสมมาตรที่เกิดจากการหมุนกี่ครั้ง? ได้แก่?

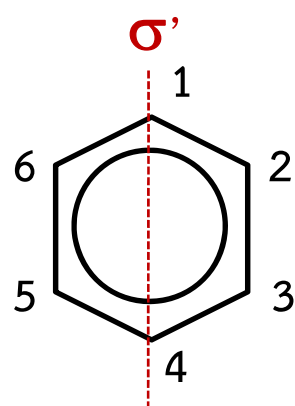
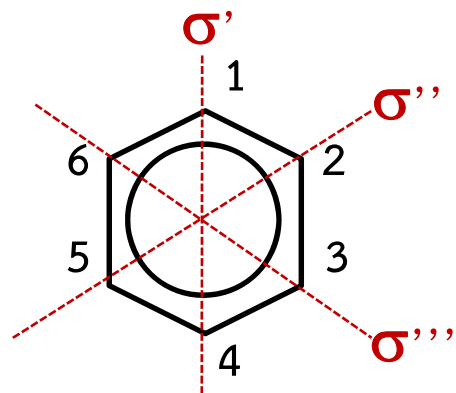
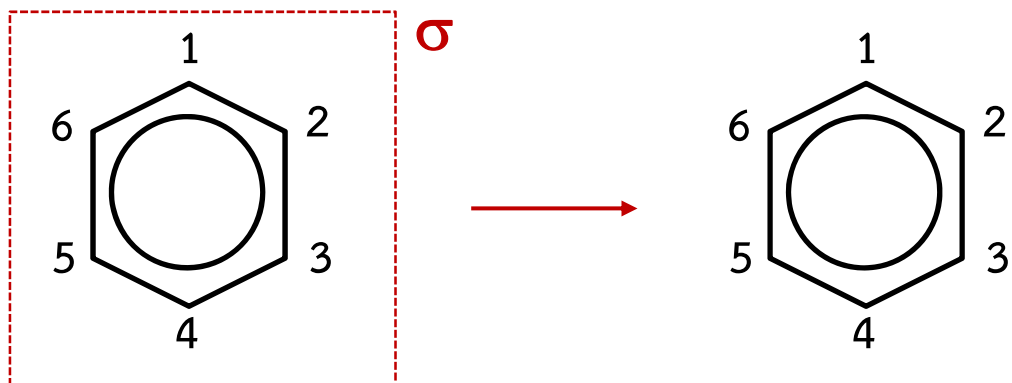
ระนาบสมมาตร (Plane of symmetry): σ

“ระนาบสมมาตรในวัตถุหรือโมเลกุลใดๆ ที่เมื่อทำการสะท้อน (reflection) ส่วนของวัตถุหรือโมเลกุลผ่านระนาบสมมาตรนี้แล้ว ทำให้ได้รูปร่างหรือภาพในกระจก (mirror image) ที่สามารถยกมาทับกับรูปร่างหรือภาพตั้งต้นได้สนิท”

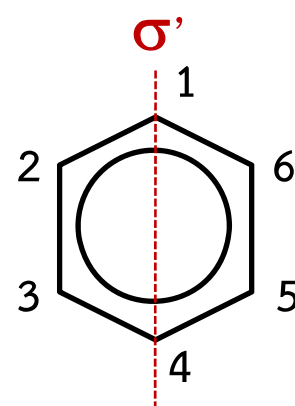


Symmetry element = ระนาบสมมาตร

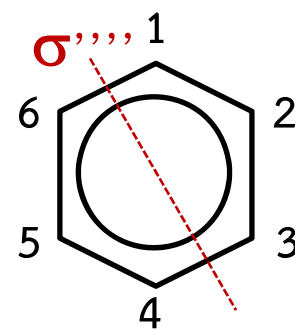
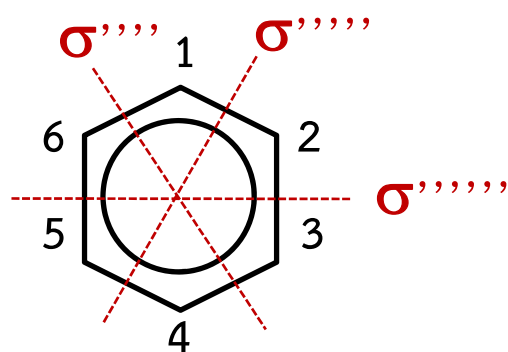
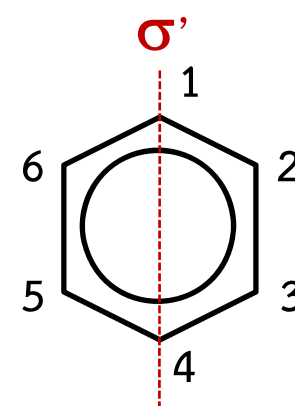
Symmetry operation = การสะท้อนในระนาบ



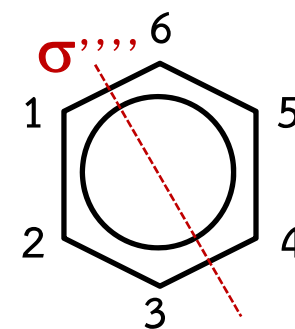
σ^1



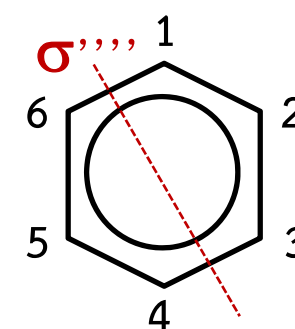
σ^2

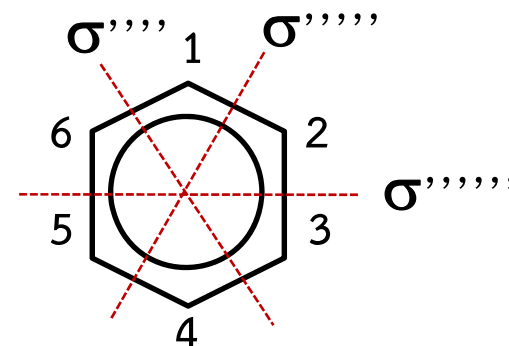
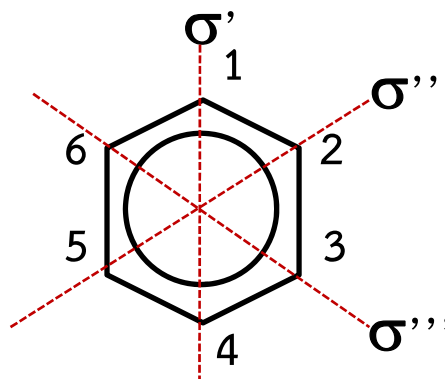
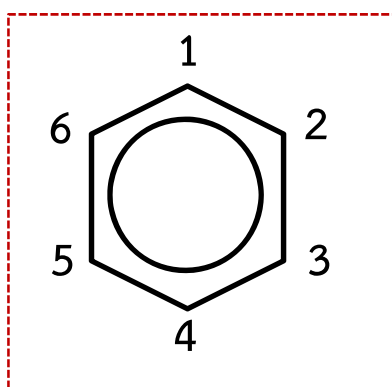


σ^1



σ^2





- โมเลกุลเบนซีนมีระนาบสมมาตร 7 ระนาบ

- $\sigma^2 = E \Rightarrow$ ไม่นับเป็นการกระทำสมมาตรของระนาบ

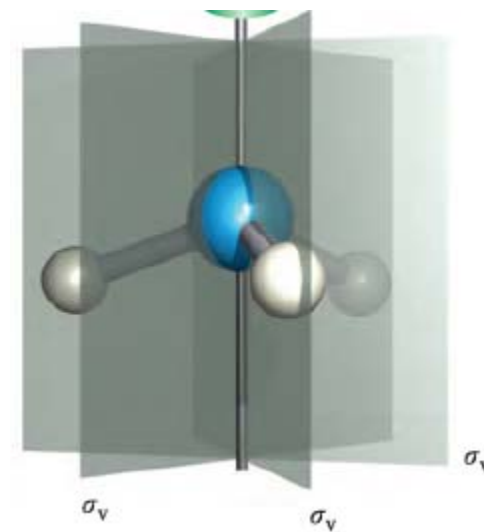
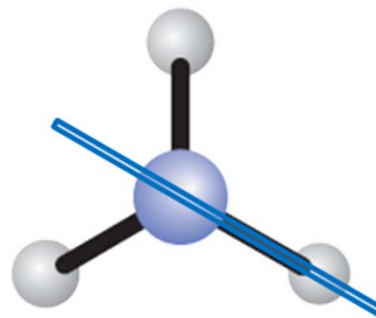
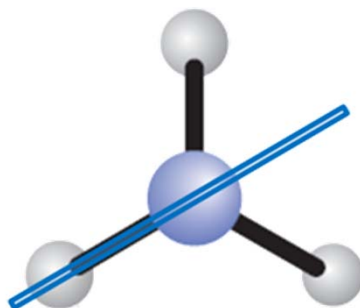
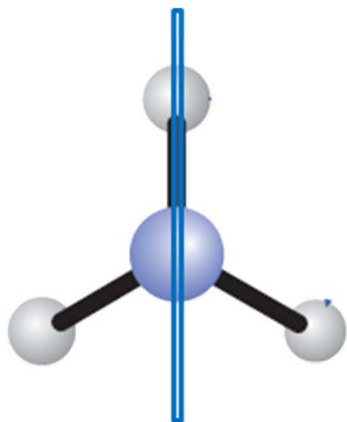
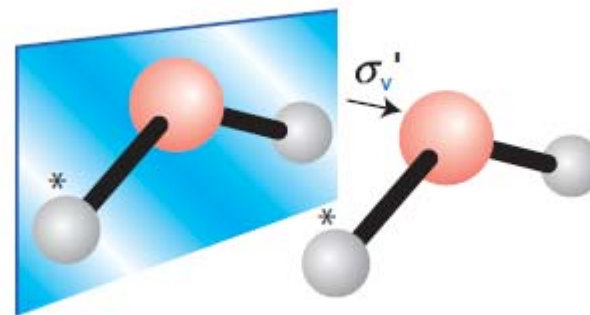
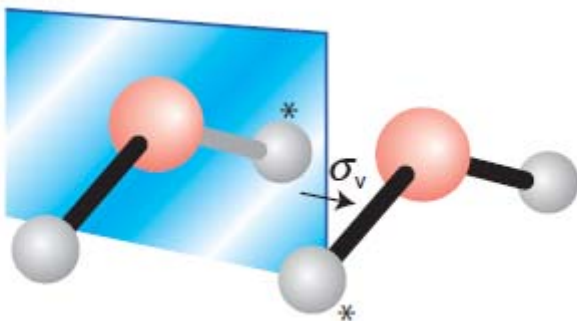
- แบ่งชนิดของระนาบสมมาตรเป็น 2 ชนิด

- ระนาบที่มีทิศทางเดียวกับแกนหมุน C_n หลัก $\Rightarrow$ ระนาบแนวตั้ง (vertical plane): σ_v

ในกรณีที่ระนาบสมมาตร σ_v แบ่งครึ่งมุมที่เกิดจากแกน C_2 สองแกนใดๆ ที่มาตัดกัน หรือ แบ่งครึ่งมุมที่เกิดจากระนาบ σ_v สองระนาบใดๆ ที่มาตัดกัน $\Rightarrow$ ระนาบไดฮีดรอล (dihedral plane): σ_d

- ระนาบที่ตั้งฉากกับแกนหมุน C_n หลัก $\Rightarrow$ ระนาบแนวนอน (horizontal plane): σ_h

- โมเลกุลเบนซีนประกอบด้วยระนาบสมมาตร 7 ระนาบ ได้แก่ $1\sigma_h$, $3\sigma_v$ และ $3\sigma_d$



ตัวอย่าง 2 จงวาดรูปแสดงตำแหน่งระนาบสมมาตรทั้งหมดในโมเลกุลต่อไปนี้ พร้อมทั้งเขียนแสดงการกระทำสมมาตรที่เกิดจากรนาบสมมาตรนั้น

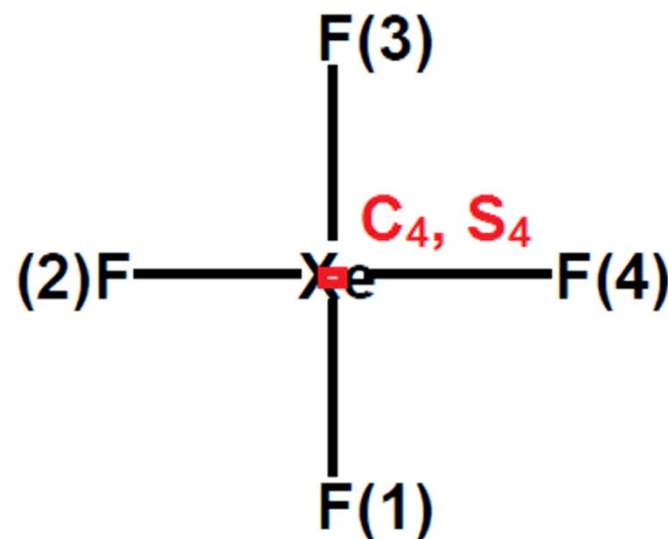
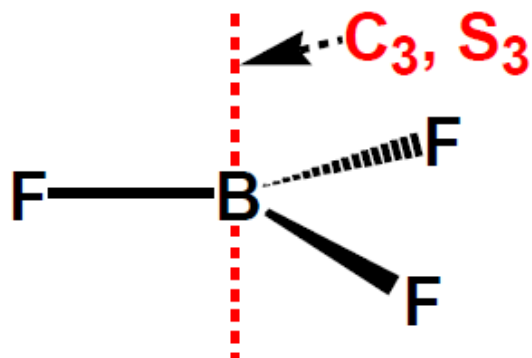


แกนหมุนสะท้อน (Improper rotation axis): S_n

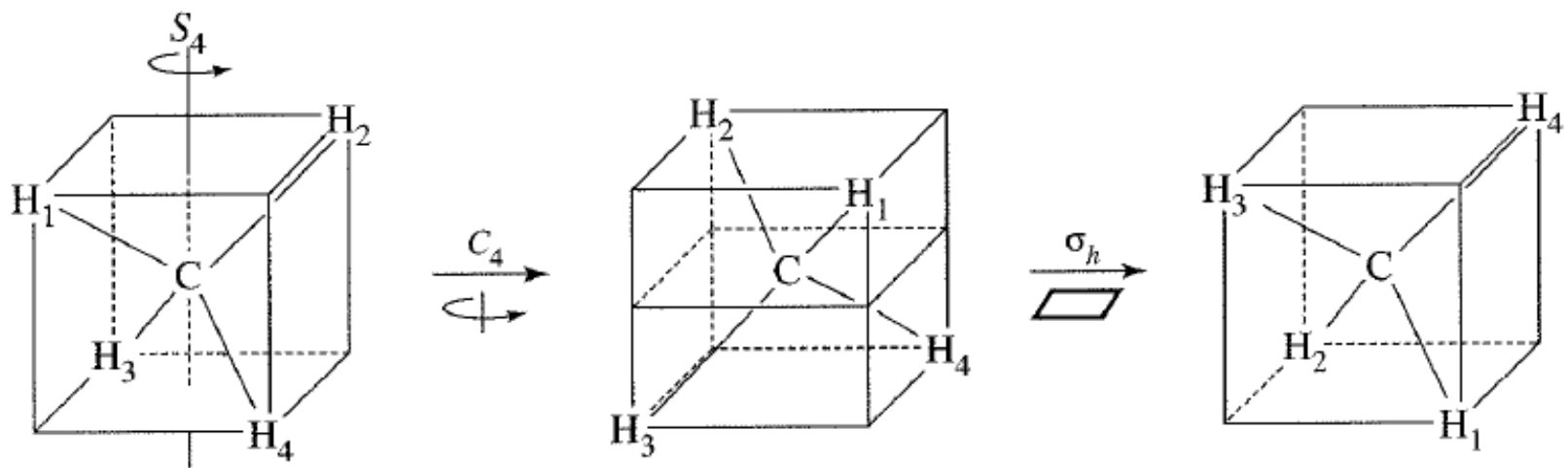
“การหมุนรอบแกนหมุนเป็นมุมเท่ากับ $360/n$ องศา แล้วตามด้วยการสะท้อนผ่านระนาบที่ตั้งฉากกับแกนหมุนที่ใช้ในขั้นตอนแรก แล้วทำให้ได้ภาพหรือรูปร่างที่สามารถยกมาทับกับภาพหรือรูปร่างตั้งต้นได้สนิท”

หมุนรอบแกน C_n + สะท้อนผ่านระนาบ σ_h

ทั้งแกนหมุนและระนาบที่เป็นองค์ประกอบของแกนหมุน-สะท้อน ไม่จำเป็น ต้องเป็น symmetry element ที่แท้จริงในโมเลกุลที่พิจารณา

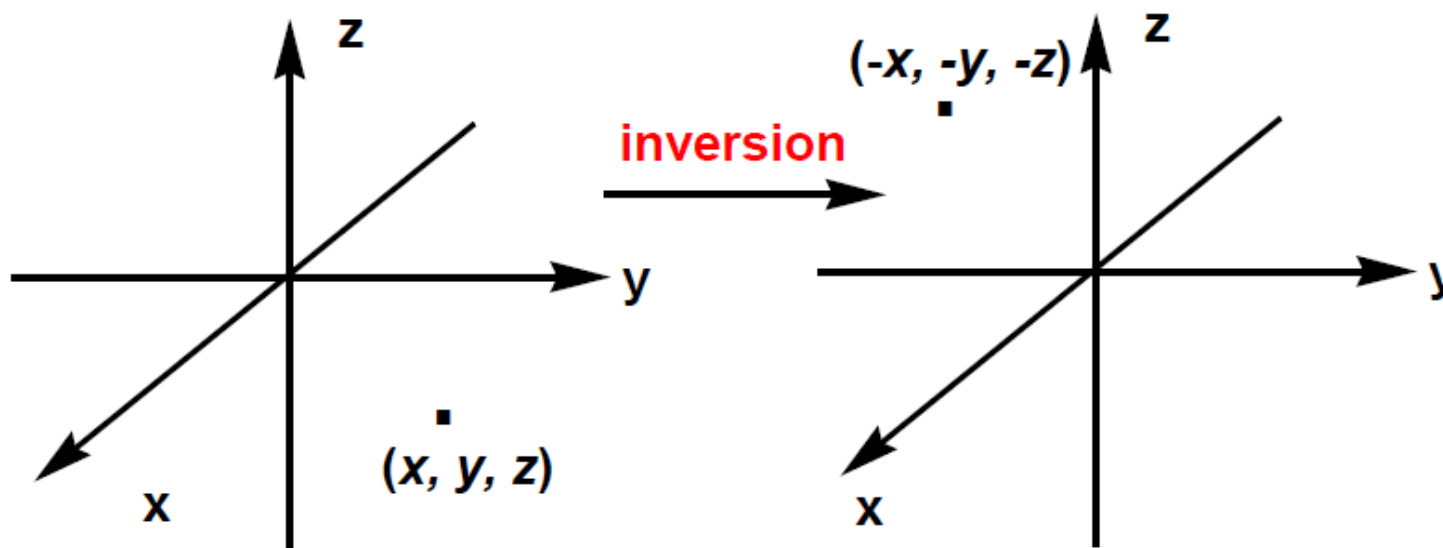


$S_4 \Rightarrow$ (1) หมุน 90 องศา ตามด้วย (2) สะท้อนผ่านระนาบที่ตั้งฉากกับแกนหมุน

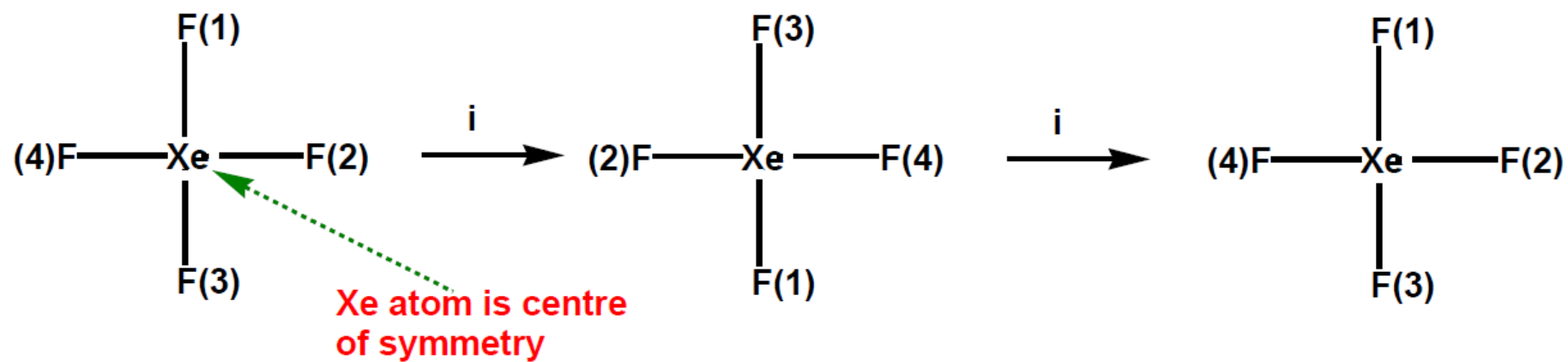
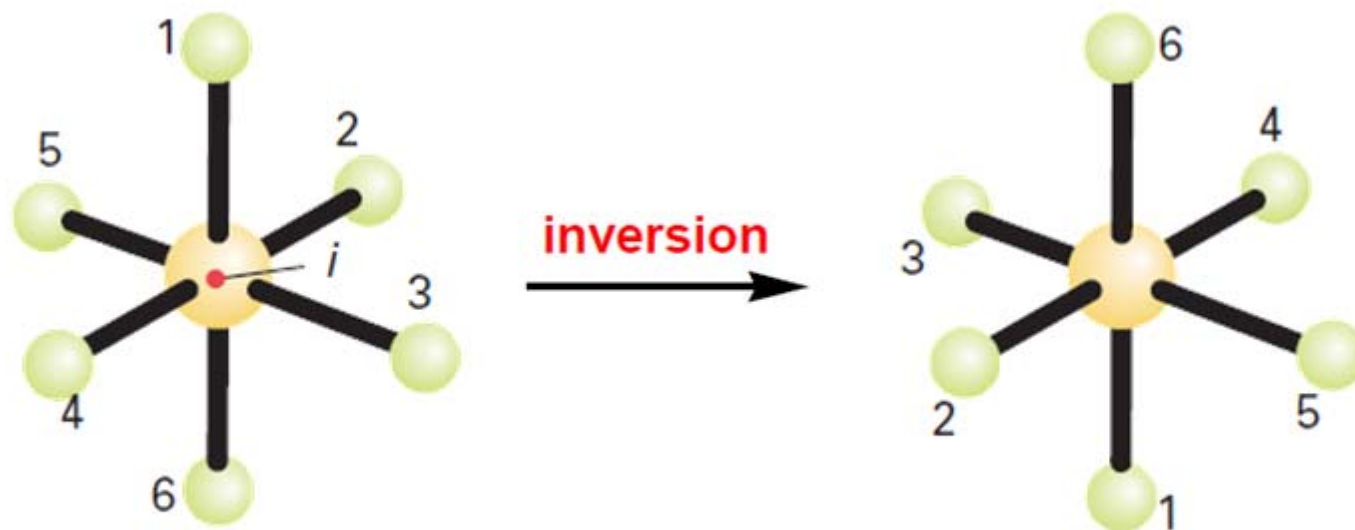


จุดศูนย์กลางสมมาตร (Inversion center): i

“จุดสมมติที่แต่ละส่วนในโมเลกุล ณ ตำแหน่ง (x,y,z) ใดๆ สามารถฉาย (project) ผ่านจุดนี้ไปยังอีกบริเวณหนึ่งของโมเลกุลที่ตำแหน่ง $(-x,-y,-z)$ ได้ และเมื่อกระทำสมมาตรผ่านจุดนี้แล้ว โมเลกุลยังคงรูปร่างเดิมไม่เปลี่ยนแปลง”

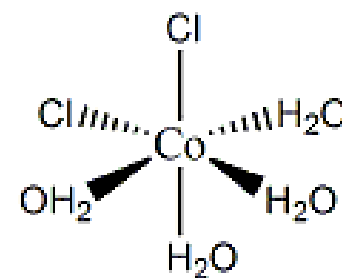
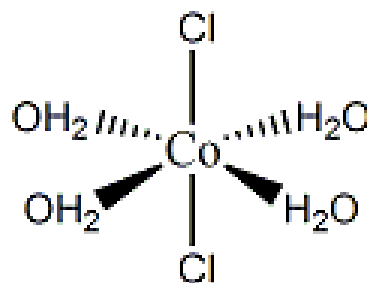
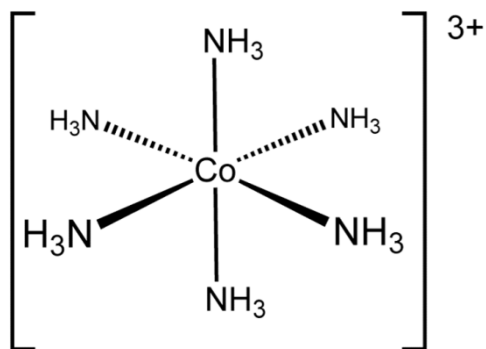
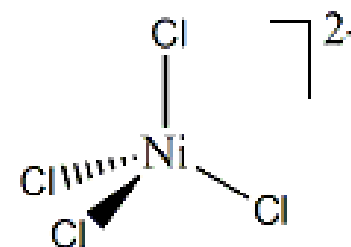
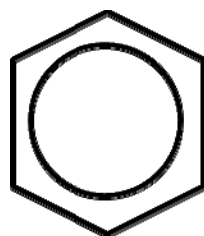
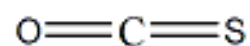
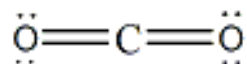


“Centrosymmetric molecule”



$$i^2 = E$$

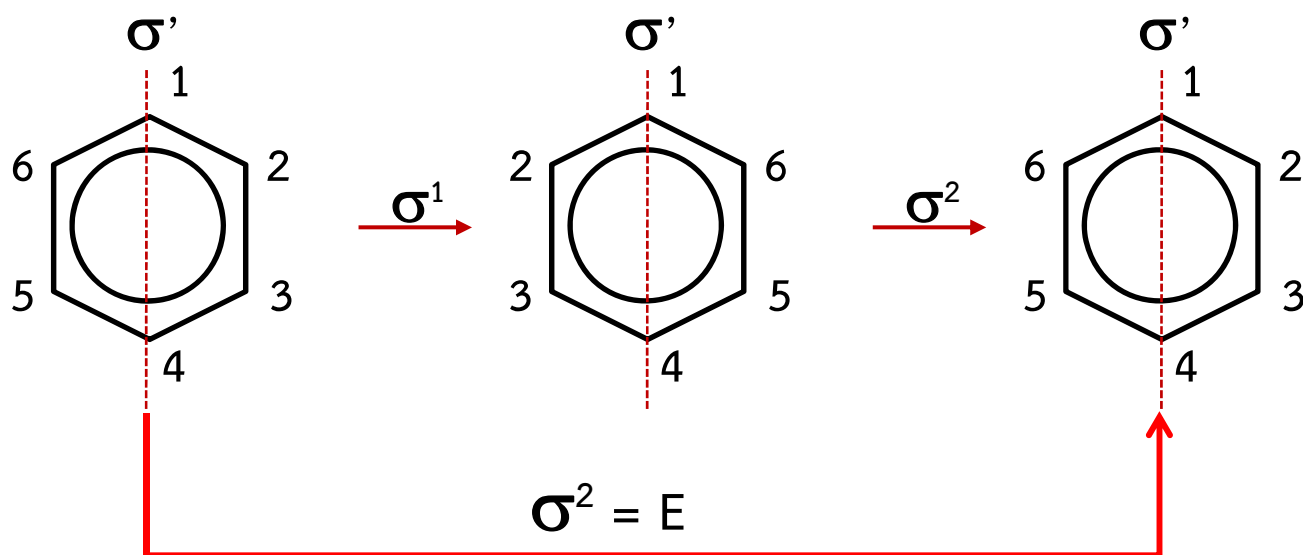
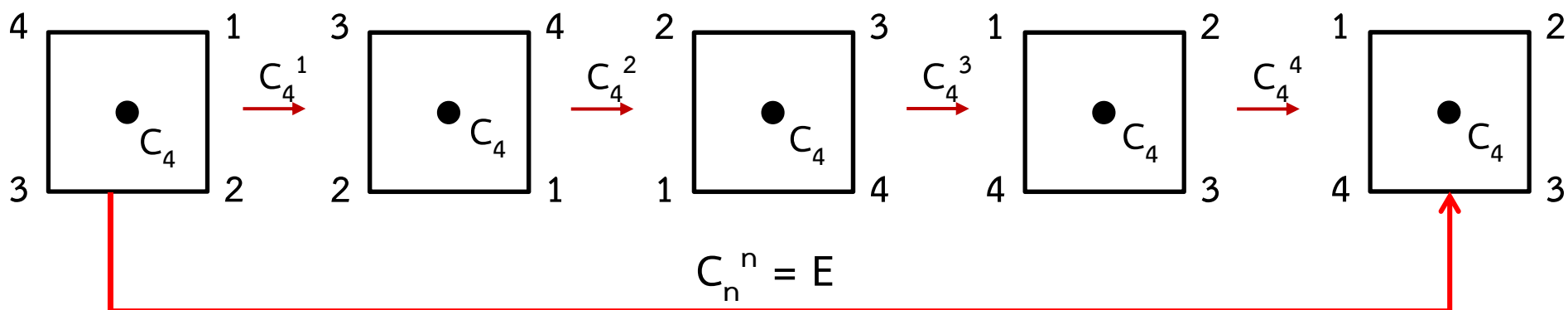
ตัวอย่าง 3 โมเลกุลต่อไปนี้มีจุดศูนย์กลางสมมาตร (Inversion center) ในโมเลกุลหรือไม่ หากมี
จงแสดงตำแหน่ง i



เอกลักษณ์ (Identity): E

“การไม่กระทำการใดๆ กับวัตถุเลย”

เป็นสมมาตรที่พบในวัตถุ รูปทรง และโมเลกุลทุกชนิด



Symmetry elements & Symmetry operations

โมเลกุล



รูปร่างโมเลกุล (VSEPR)



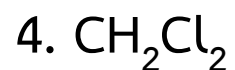
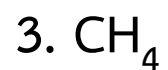
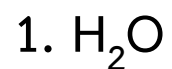
บอก Symmetry elements และ Symmetry operations ทั้งหมดได้

1. Identity $\Rightarrow$ ไม่กระทำการใดๆ
2. Proper axis (C_n) $\Rightarrow$ หมุนรอบแกน $360/n$ องศา
3. Symmetry plane $\Rightarrow$ สะท้อนผ่านระนาบ
4. Improper axis $\Rightarrow$ หมุนรอบแกน $360/n$ องศา แล้วสะท้อนผ่าน σ_h
5. Inversion $\Rightarrow$ $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$



หาพอยท์กรุป (Point group)

ตัวอย่าง 4 จงวาดรูปแสดง symmetry element ทั้งหมดที่ปรากฏในโมเลกุลต่อไปนี้



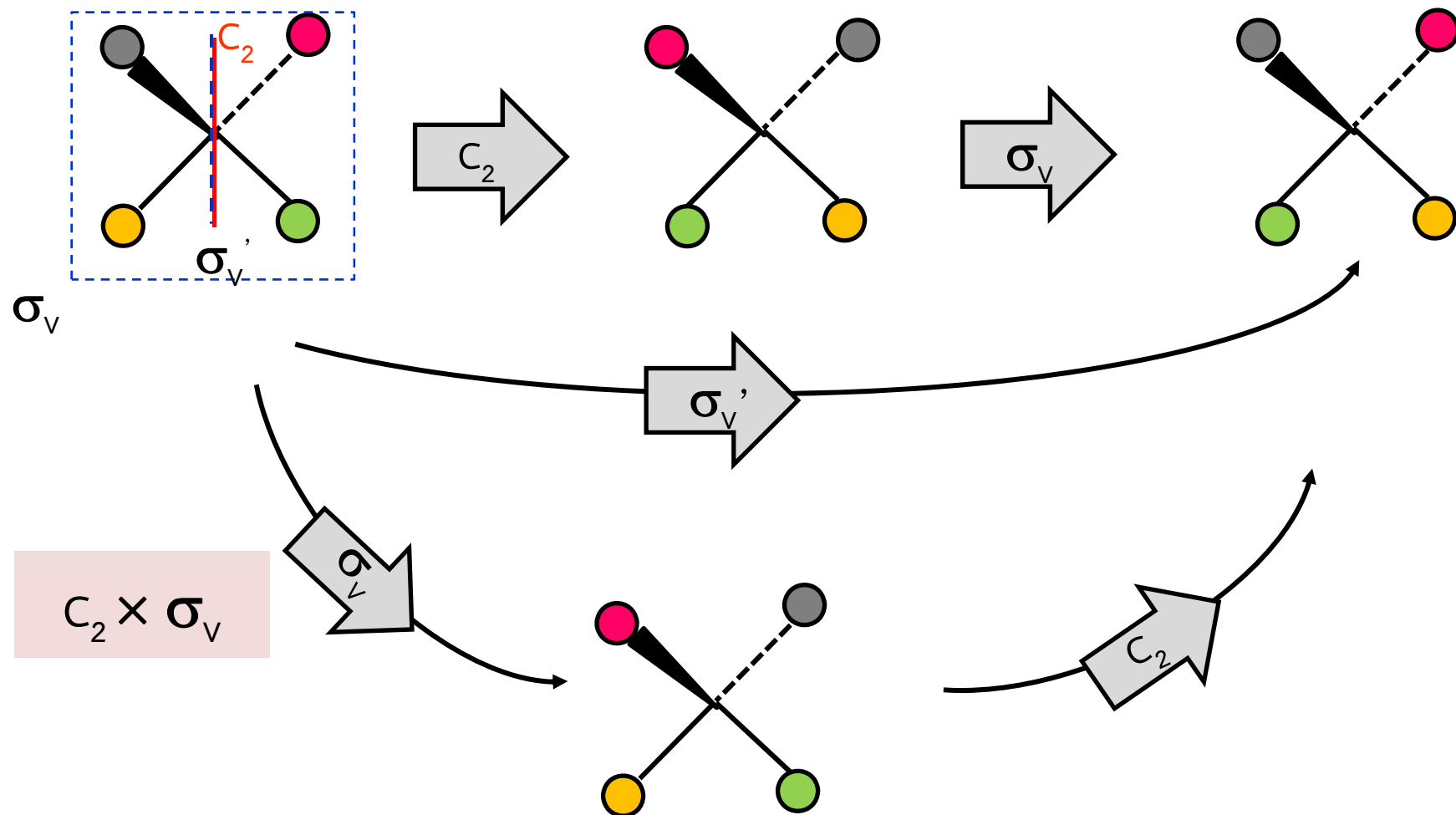
การกระทำสมมาตรแบบต่อเนื่อง

“หากกำหนดให้ A และ B แทนการกระทำสมมาตรใดๆแล้ว ซึ่งอาจเป็นการกระทำสมมาตรชนิดเดียวกันหรือต่างชนิดกันแล้ว $B \times A$ หรือ BA จะหมายถึงการกระทำสมมาตร A แล้วตามด้วยการกระทำสมมาตร B ทั้งนี้เป็นเหตุผลทางคณิตศาสตร์ เนื่องจากแนวคิดเรื่องสมมาตรนั้นมีที่มาจากทฤษฎีกลุ่ม (Group theory) ทางคณิตศาสตร์ และเรียกการกระทำดังกล่าวว่า “การกระทำสมมาตรแบบต่อเนื่อง (successive symmetry operation)”

$$A \times B \text{ หรือ } AB \Rightarrow B(1^{\text{st}}) \text{ and then } A(2^{\text{nd}})$$

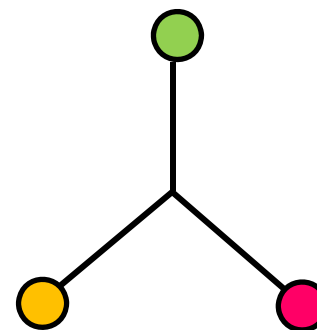
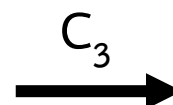
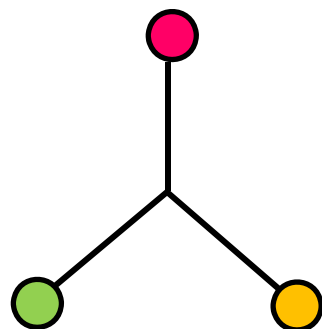
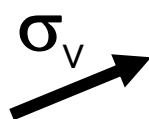
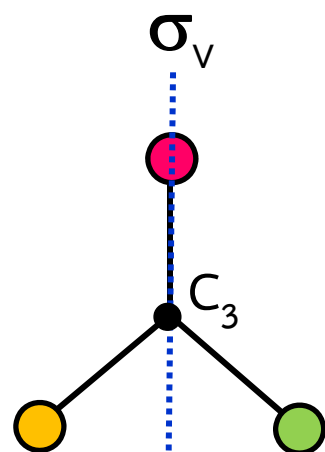
$$A \times B \times C \text{ หรือ } ABC \Rightarrow C(1^{\text{st}}), B(2^{\text{nd}}) \text{ and then } A(3^{\text{rd}})$$

$$\sigma_v \times C_2$$

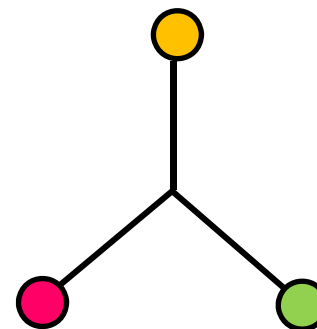
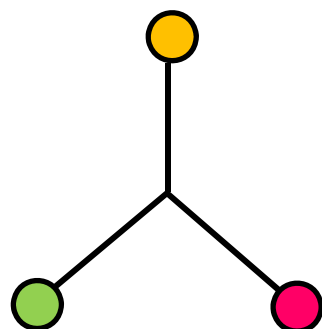
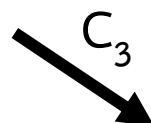


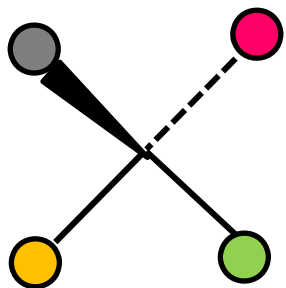
$$C_2 \times \sigma_v$$

$$C_3 \times \sigma_v$$



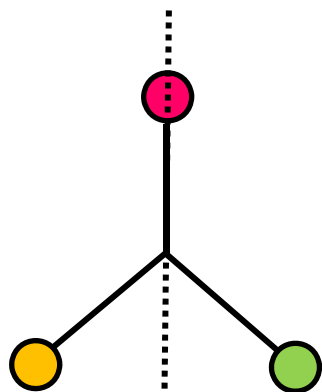
$$\sigma_v \times C_3$$





$$\sigma_v \times C_2 = C_2 \times \sigma_v = \sigma_v' \Rightarrow \text{มีสมบัติการสลับที่}$$

(commutative property)



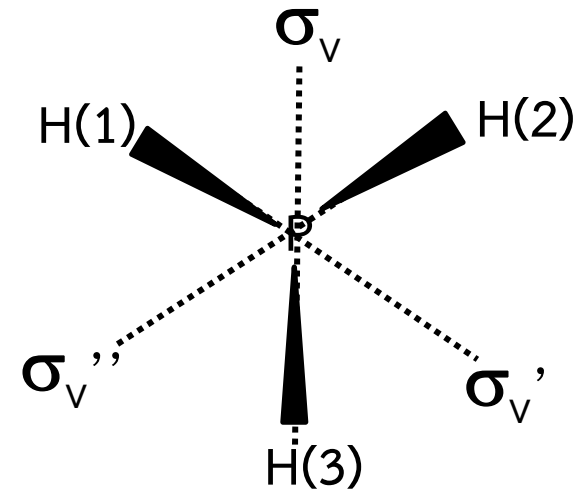
$$\sigma_v \times C_3 \neq C_3 \times \sigma_v \Rightarrow \text{ไม่มีสมบัติการสลับที่}$$

(non-commutative property)

ตัวอย่าง 5 จงแสดงการกระทำสมมาตรแบบต่อเนื่องของโมเลกุลฟอสฟีน (PH_3)

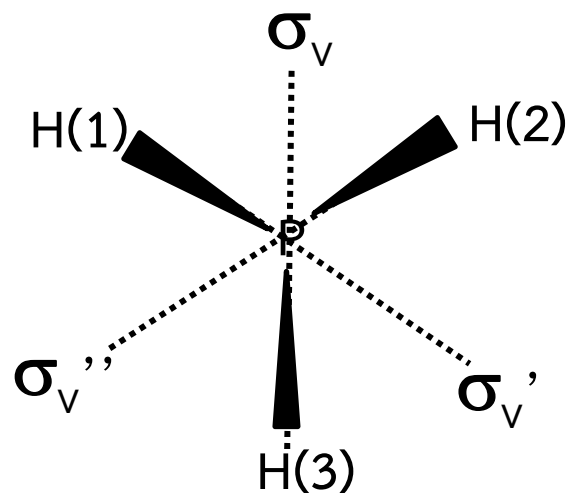
1. $C_3^1 \sigma_v$

2. $\sigma_v C_3^1$



ตัวอย่าง 6 จงแสดงการกระทำสมมาตรแบบต่อเนื่องของโมเลกุลฟอสฟีน (PH_3)

1. $C_3^1 \sigma_v \sigma_v'$
2. $(C_3^1 \sigma_v) \sigma_v'$
3. $C_3^1 (\sigma_v \sigma_v')$



$$C_3^1 \sigma_v \sigma_v' = (C_3^1 \sigma_v) \sigma_v' = C_3^1 (\sigma_v \sigma_v') \Rightarrow \text{สมบัติการรวมตัว} \\ \text{(associate property)}$$

การกระทำสมมาตรแบบผกผัน

การกระทำสมมาตรใดๆในโมเดลหรือวัตถุ จะต้องมีการกระทำสมมาตรอีกชนิดหนึ่งในโมเดลหรือวัตถุเดียวกัน ที่เป็น การกระทำสมมาตรแบบผกผัน (Inverse operation) กับ การกระทำสมมาตรนั้นเสมอ

กำหนดให้ A แทนการกระทำสมมาตร

A' แทนการกระทำสมมาตรแบบผกผัน

จะได้ว่า A และ A' เป็นการกระทำสมมาตรแบบผกผันซึ่งกันและกันก็ต่อเมื่อ

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E$$

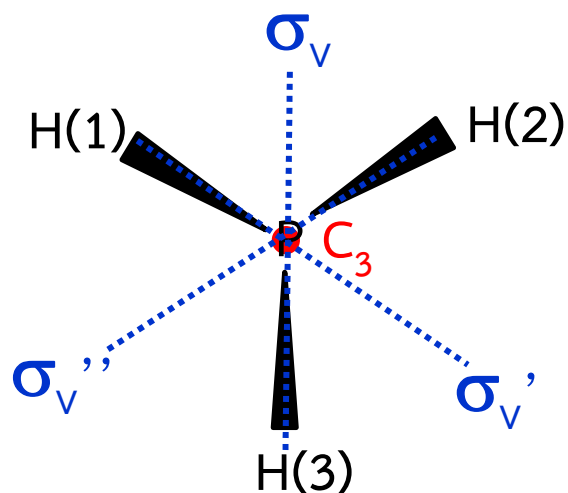
โดยที่ A และ A^{-1} จะมีสมบัติการสลับที่เสมอ

A และ B เป็น inverse operation กัน

$$\diamond AB = E$$

$$\diamond BA = E$$

ตัวอย่าง จงหาสมมาตรที่เป็นการกระทำสมมาตรแบบผกผันของ C_3^1 และ σ ในโมเลกุล ฟอสฟีน (PH_3)



จากนิยามการกระทำสมมาตรแบบผกผัน

$$C_3^1 C_3^{-1} = E$$

ดังนั้น

$$C_3^{-1} = C_3^2$$

$\therefore$ การกระทำสมมาตรแบบผกผันของ C_3^1 คือ C_3^2

ในทำนองเดียวกัน

$$\sigma \sigma^{-1} = E$$

จาก

$$\sigma \sigma = \sigma^2 = E$$

ดังนั้น

$$\sigma = \sigma^{-1}$$

นั่นคือ การสะท้อนผ่านระนาบสมมาตรเป็นการกระทำผกผันในตัวของมันเอง

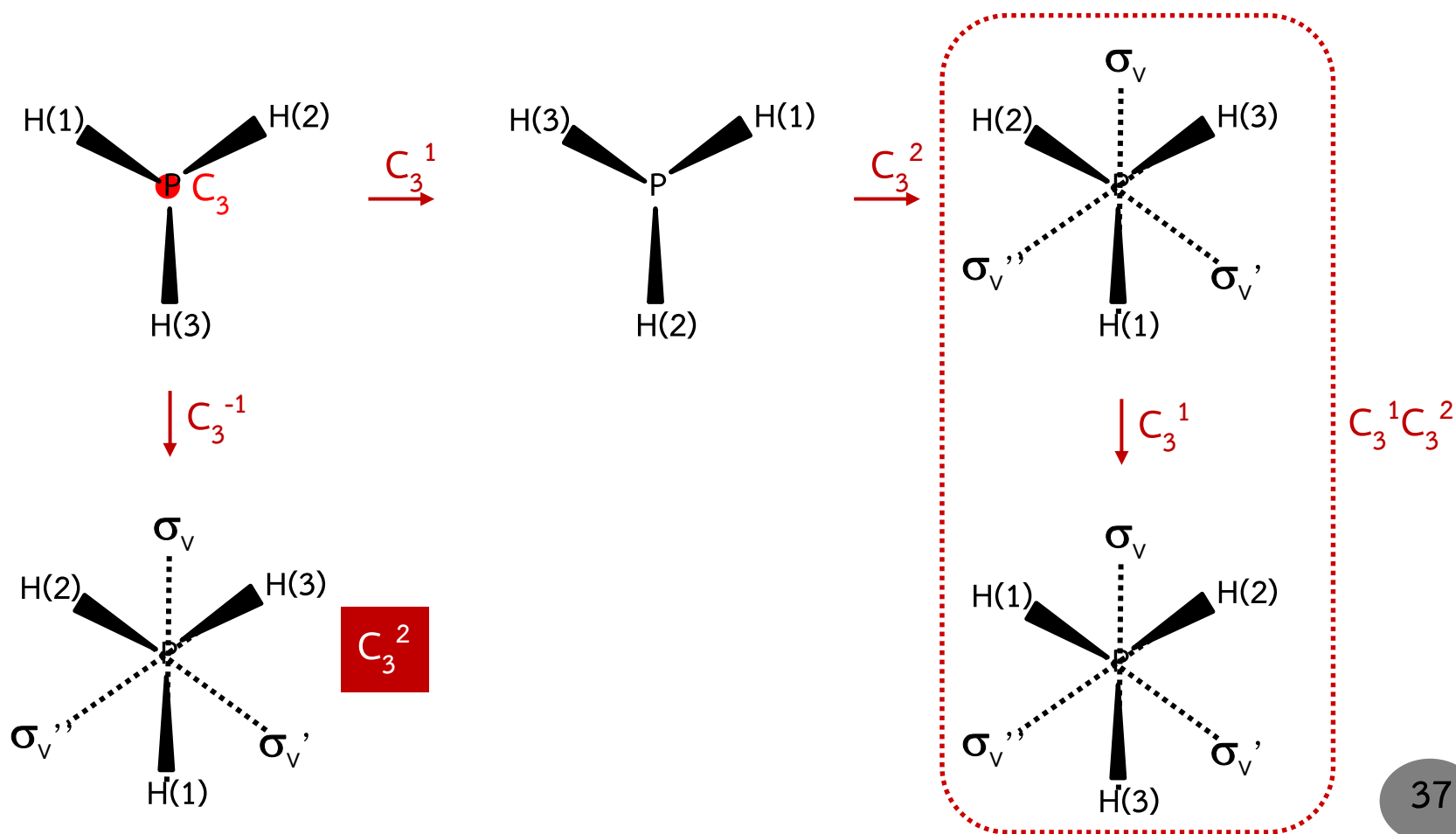
จากนิยามการกระทำสมมาตรแบบผกผัน

$$\text{เมื่อ } C_3^{-1} = C_3^2 \Rightarrow C_3^1 C_3^{-1} = E$$

$$C_3^1 C_3^2 = E$$

$$C_n^{-1} C_n^1 = E \text{ และ } C_n^{n-1} C_n^1 = E$$

ดังนั้น $C_n^{-1} = C_n^{n-1}$

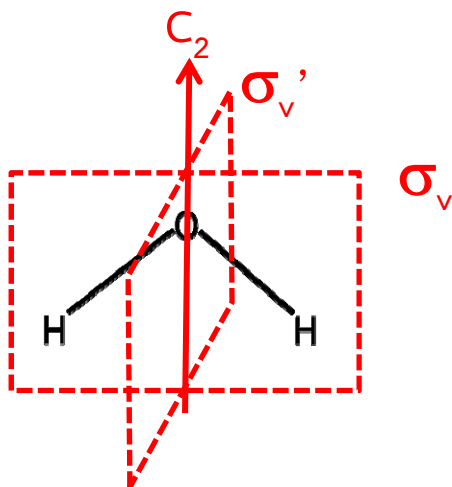


ข้อสังเกตเกี่ยวกับการกระทำสมมาตรแบบผกผัน

- เนื่องจาก $i^2 = E$
ดังนั้น $i = i^{-1}$
- เนื่องจาก $\sigma^2 = E$
ดังนั้น $\sigma = \sigma^{-1}$
- เนื่องจาก $C_n^{-1}C_n^1 = E$ และ $C_n^{n-1}C_n^1 = E$
ดังนั้น $C_n^{-1} = C_n^{n-1}$

ตารางการคูณสมมาตร

“ตารางที่ใช้ในการแสดงผลการคูณสมมาตรที่สมบูรณ์ในโมเลกุลที่พิจารณาใดๆ”



		1 st operation			
		E	C_2	σ_v	σ_v'
2 nd operation	E	EE	EC_2	$E\sigma_v$	$E\sigma_v'$
	C_2	C_2E	C_2C_2	$C_2\sigma_v$	$C_2\sigma_v'$
	σ_v	$\sigma_v E$	$\sigma_v C_2$	$\sigma_v \sigma_v$	$\sigma_v \sigma_v'$
	σ_v'	$\sigma_v' E$	$\sigma_v' C_2$	$\sigma_v' \sigma_v$	$\sigma_v' \sigma_v'$

ผลลัพธ์จากการคูณ $\Rightarrow$

	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	E

ตัวอย่าง 7 จงสร้างตารางการคูณสมมาตรสำหรับโมเลกุล NH_3

พอยท์กรุป (Point group)

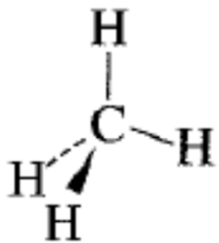
การรวบรวมการกระทำสมมาตรทั้งหมดของโมเลกุลเข้าไว้ด้วยกันเป็นเซต โดยที่เซตของการกระทำสมมาตรนี้จะมีสมบัติเป็นไปตามทฤษฎีกลุ่มทางคณิตศาสตร์ คือ

1. ผลลัพธ์ของการคูณกันกันของสมาชิก 2 ตัวใดๆในกลุ่ม จะเป็นสมาชิกในกลุ่มนั้นด้วย นั่นคือหาก $AB = C$ แล้ว ทั้ง A B และ C ต้องเป็นสมาชิกในกลุ่มเดียวกัน
2. ในกลุ่มต้องมีสมาชิกหนึ่งตัวที่มีคุณสมบัติ “commutative” กับสมาชิกอื่นๆได้ทุกตัว นั่นคือ $EA = AE = A$
3. สมาชิกในกลุ่มต้องมีสมบัติเป็นไปตามกฎ “associative law” นั่นคือ $(AB)C = A(BC) = ABC$
4. สมาชิกในกลุ่มทุกตัวจะต้องมีสมาชิกอีกตัวในกลุ่มที่เป็น “inverse” ของตัวมันเอง นั่นคือหาก $GH = HG = E$ แล้ว $G = H^{-1}$ และ $H = G^{-1}$ โดยที่ทั้ง G H และ E ต่างก็เป็นสมาชิกของกลุ่มด้วย

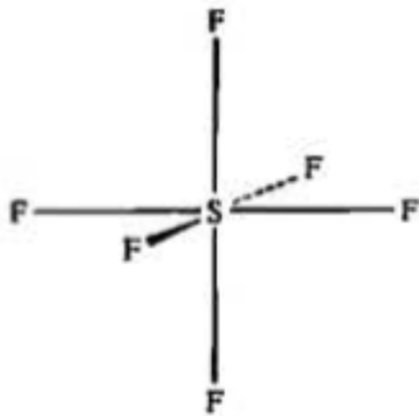
กลุ่มที่มีสามมาตรสูง (T_d , O_h , I_h)

กลุ่มที่มีแกนหมุนสมมาตร C_n ที่ $n > 2$ ตั้งแต่ 2 แกนขึ้นไป รวมทั้งกลุ่มสมมาตรของโมเลกุลที่มีรูปร่างเข้าสู่ลูกบาศก์และทรงกลม

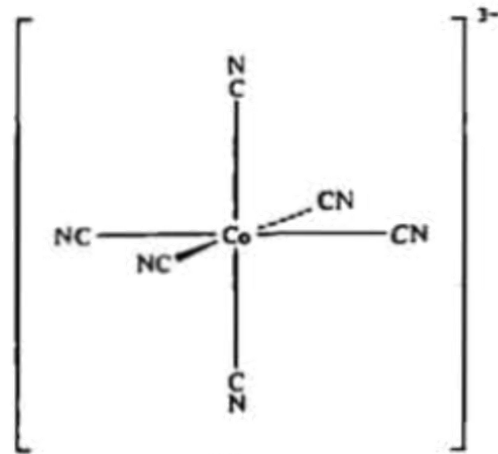
- T_d (พบในโมเลกุล tetrahedral)
- O_h (พบในโมเลกุล octahedral)
- I_h (พบในโมเลกุล Icosahedral) เช่น C_{60} และ $B_{12}H_{12}^{2-}$



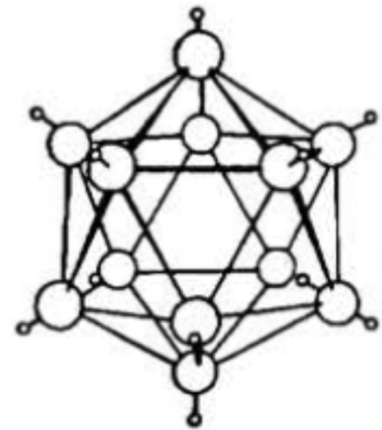
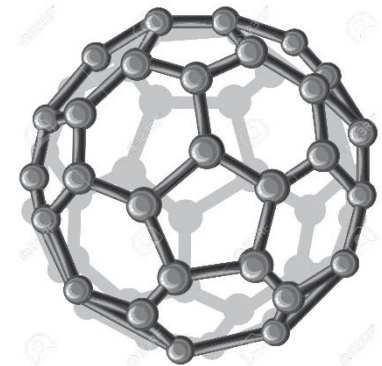
T_d



O_h



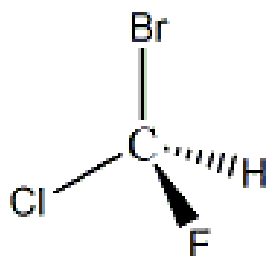
O_h



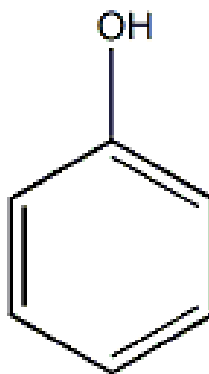
I_h

กลุ่มที่มีสามาตรต่ำ (C_1 , C_s , C_i)

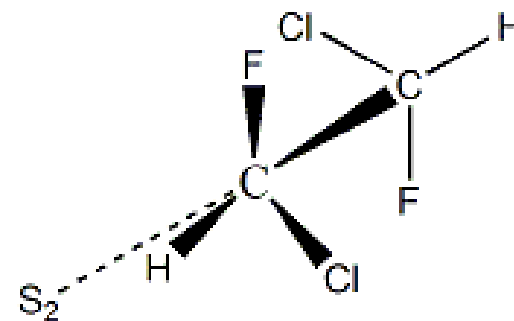
- C_1 (มีเพียง C_1 หรือ E เท่านั้น) เช่น CHFClBr
- C_s (นอกจาก E มีเพียงระนาบสมมาตรเท่านั้น) เช่น phenol
- C_i (นอกจาก E มีเพียง i เท่านั้น) เช่น ClFHC-CHFCl (stagger)



C_1



C_s



C_i

กลุ่มที่มีสามาตรปานกลาง

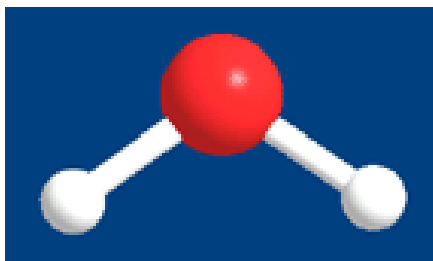
- C (กลุ่มที่มีแกนหมุนสมมาตร C_n)
 - มีแกนหมุน 1 ชนิด $\Rightarrow C_n$
 - มีแกนหมุน C_n และมี $\sigma_h \Rightarrow C_{nh}$
 - มีแกนหมุน C_n และมี $\sigma_v \Rightarrow C_{nv}$
 - โมเลกุลเส้นตรง และไม่มี i $\Rightarrow C_{\infty v}$
- D (กลุ่ม dihedral $\Rightarrow$ มีแกน C_2 จำนวน n แกน และตั้งฉากกับแกนหลัก C_n)
 - ไม่มี $\sigma \Rightarrow D_n$
 - มี $\sigma_h \Rightarrow D_{nh}$
 - มี $n\sigma_d \Rightarrow D_{nd}$
- S (กลุ่มที่มีเฉพาะแกนหมุน-สะท้อน S_n โดย n เป็นเลขคู่ตั้งแต่ 4 ขึ้นไป และไม่มีระนาบที่ตั้งฉากกับแกนหมุนนี้)

$$S_1 = C_s$$

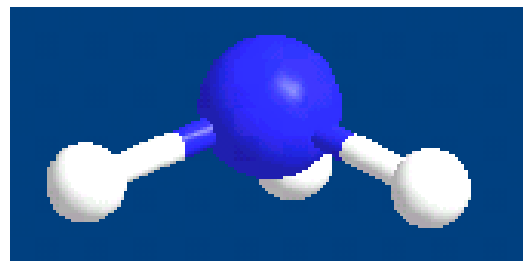
$$S_2 = C_i$$

$$S_n (n=\text{เลขคี่}) = C_{nh}$$

C_n , C_{nv} , C_{nh} Point group

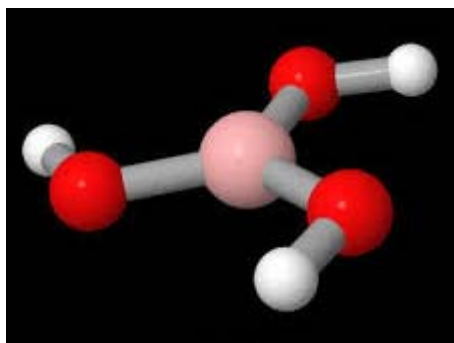


$\text{H}_2\text{O}; C_{2v}$



$\text{NH}_3; C_{3v}$

“ $C_n + n\sigma_v$ ”



$\text{B(OH)}_3; C_{3h}$

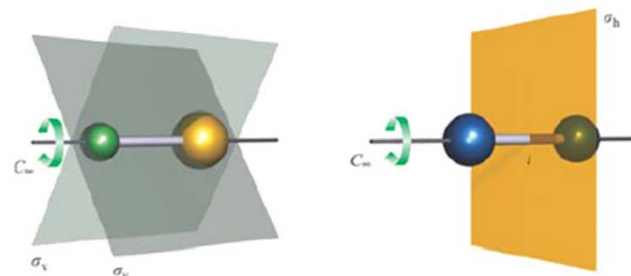
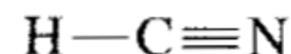
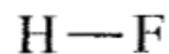
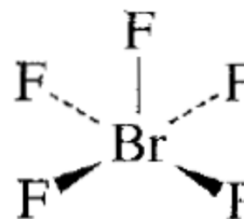
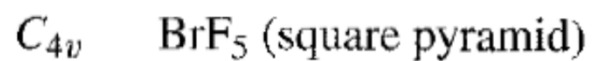
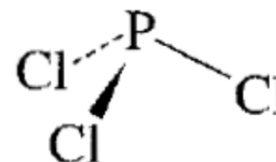
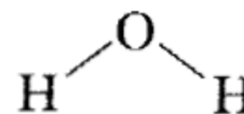
“ $C_n + \sigma_h$ ”



$\text{P(C}_6\text{H}_5)_3; C_3$

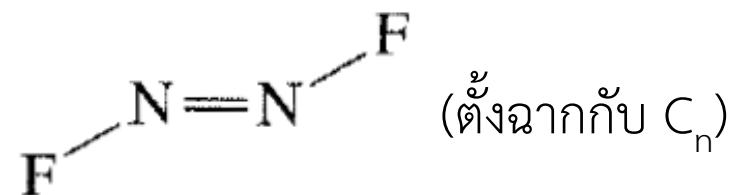
“ C_n ”

❖ $C_{nv}: C_n + n\sigma_v$ (แนวเดียวกับ C_n)

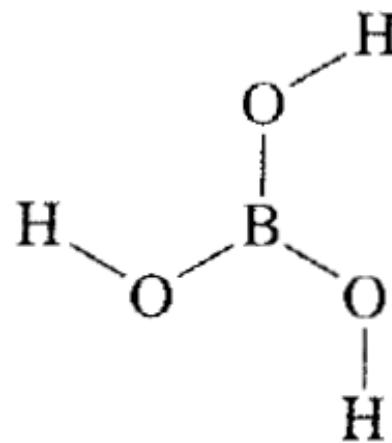


❖ $C_{nh}: C_n + \sigma_h$ (ตั้งฉากกับ C_n)

C_{2h} difluorodiazene



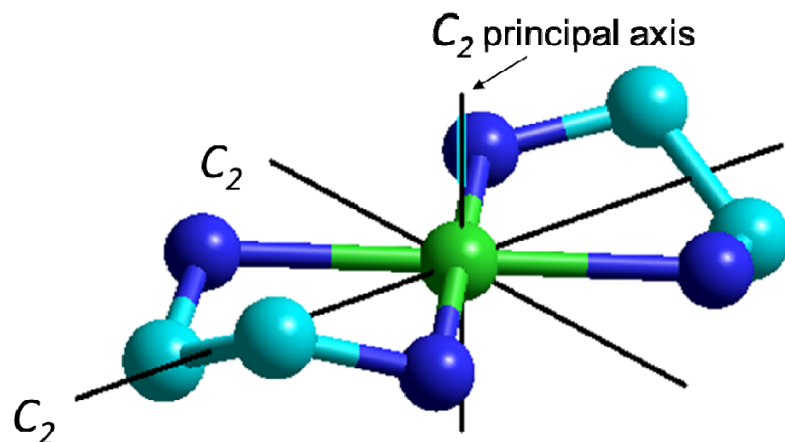
C_{3h} $B(OH)_3$, planar



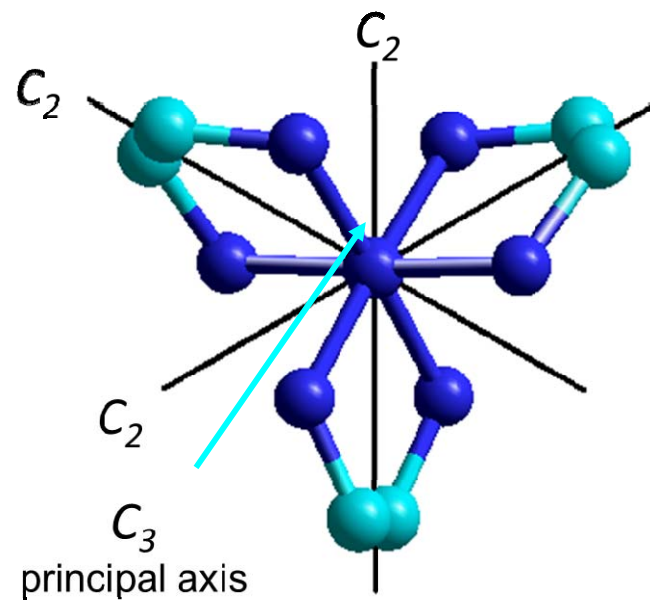
กรณี n เป็นเลขคู่ โมเลกุลจะมี i เสมอ

D_n, D_{nd}, D_{nh} Point group (“ $C_n + nC_2 \perp C_n$ ”)

❖ $D_n: C_n + nC_2 \perp C_n$



D_2



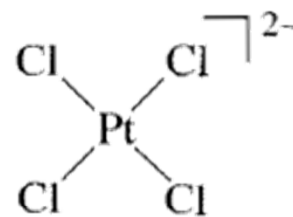
D_3

❖ $D_{nh}: C_n + nC_2 \perp C_n + \sigma_h$ (ตั้งฉากกับ C_n)

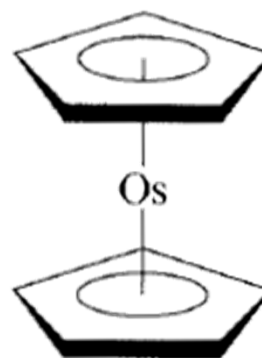
D_{3h} BF_3



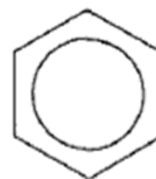
D_{4h} $PtCl_4^{2-}$



D_{5h} $Os(C_5H_5)_2$ (eclipsed)



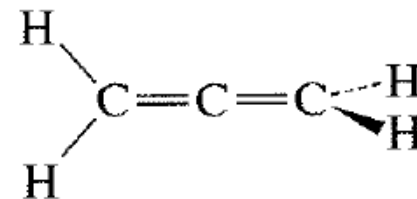
D_{6h} benzene



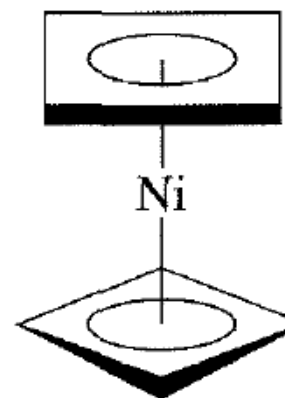
กรณี n เป็น
เลขคู่
โมเลกุลจะมี
 i เสมอ

❖ $D_{nd}: C_n + nC_2 \perp C_n + n\sigma_d$ และมี S_{2n}

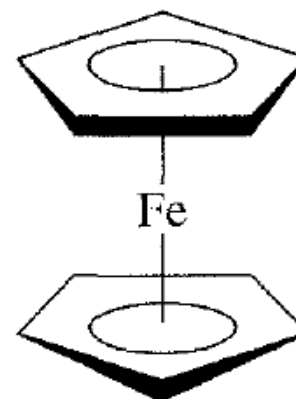
D_{2d} $H_2C=C=CH_2$, allene



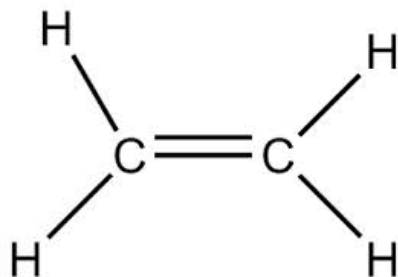
D_{4d} $Ni(\text{cyclobutadiene})_2$ (staggered)



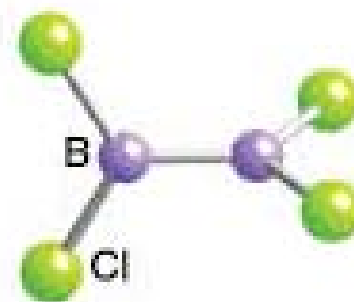
D_{5d} $Fe(C_5H_5)_2$ (staggered)



D_{nd} vs. D_{nh}



C_2H_4 ; D_{2h}

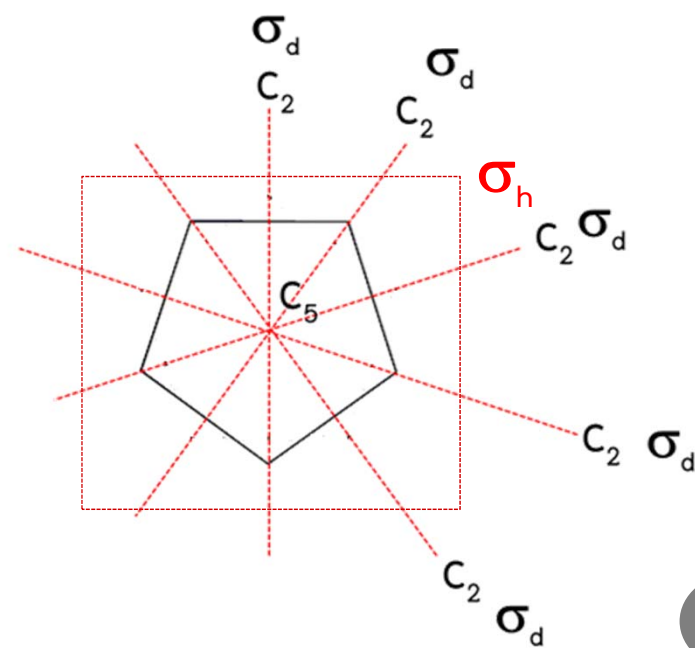
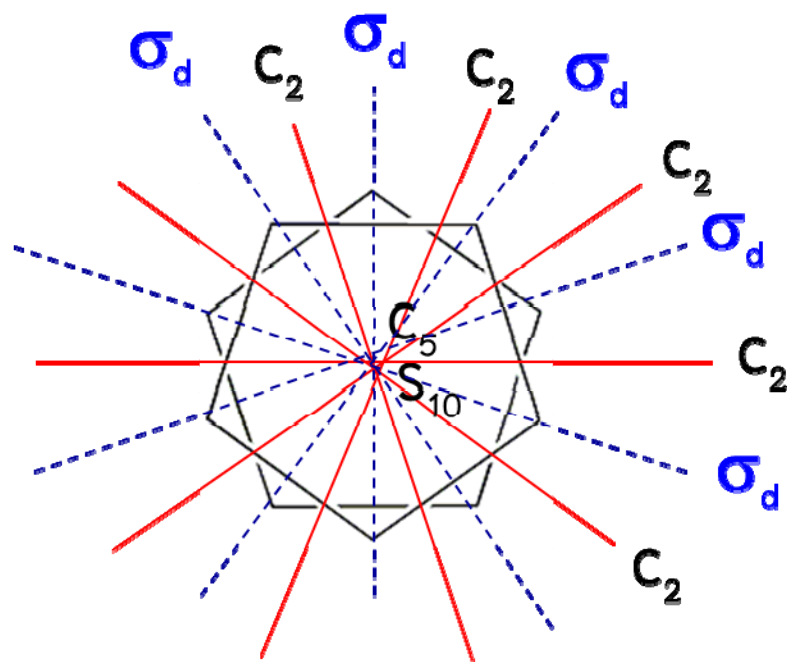
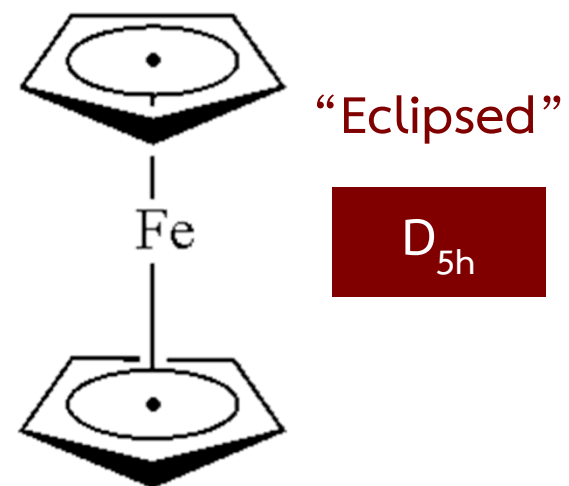
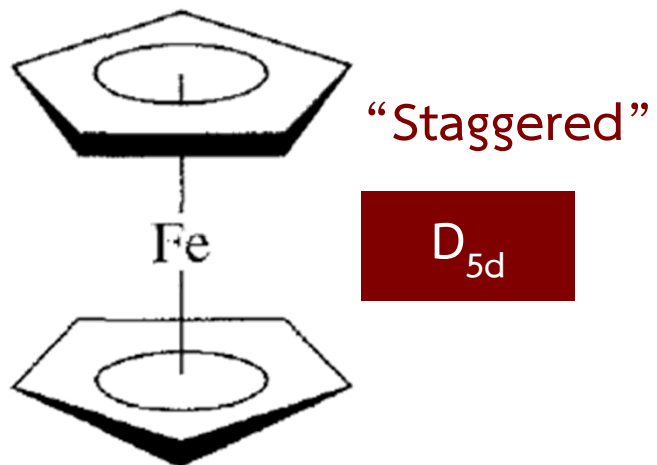


B_2Cl_4 ; D_{2d}

D_{nh} point group $\Rightarrow$ ประกอบด้วย C_n , nC_2 ที่ทุกแกนตั้งฉากกับ C_n และ σ_h

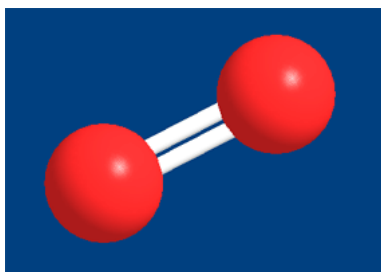
D_{nd} point group $\Rightarrow$ ประกอบด้วย C_n , nC_2 ที่ทุกแกนตั้งฉากกับ C_n , $n\sigma_d$ และ S_{2n}

D_{nd} vs. D_{nh}



$C_{\infty v}$ & $D_{\infty h}$ Point group

“linear molecule”

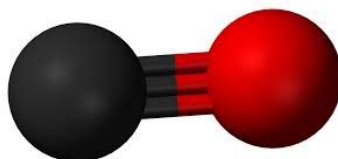


O_2 ; $D_{\infty h}$

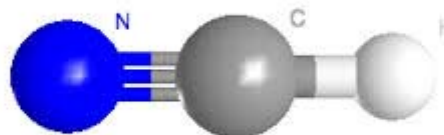


CO_2 ; $D_{\infty h}$

“ ឆ្លើយ ”



CO ; $C_{\infty v}$



HCN ; $C_{\infty v}$

“ ឆ្លើយ ”

การหาพอยท์กรุปของโมเลกุล

1. กรุปพิเศษ

- Linear: $C_{\infty v}$, $D_{\infty h}$
- Tetrahedral (T_d), Octahedral (O_h), Icosahedral (I_h)

2. ไม่มีทั้งแกน C_n และ S_n

- E (C_1), σ (C_s), I (C_i)

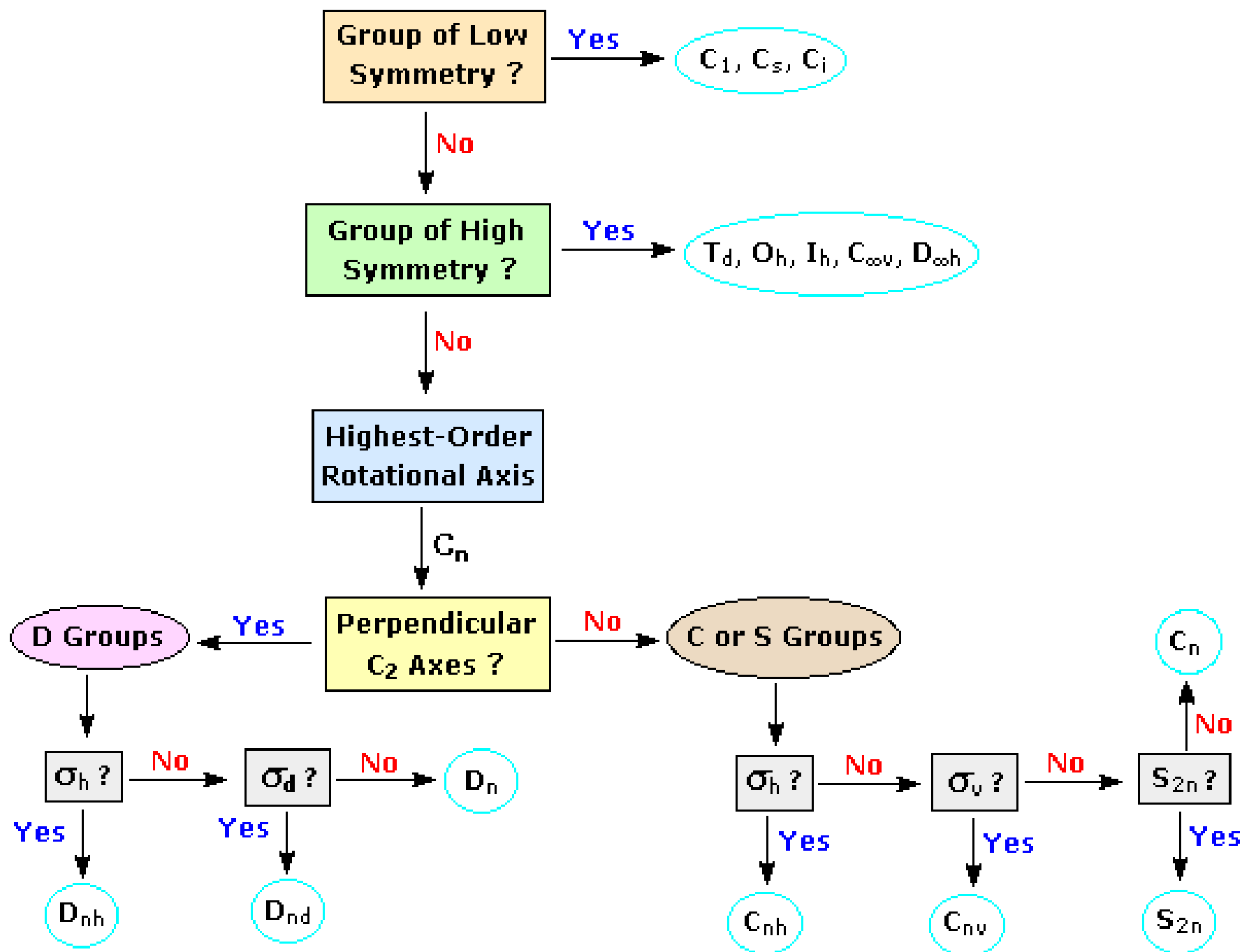
3. มีเฉพาะ S_n : S_4 , S_6 ,...

4. มี C_n แต่ไม่มี $nC_2 \perp C_n$

- ไม่มี σ (C_n)
- σ_h (C_{nh})
- $n\sigma_v$ (C_{nv})

5. มี C_n และมี $nC_2 \perp C_n$

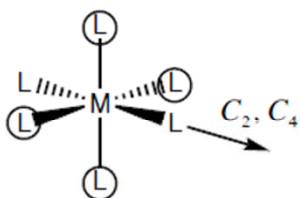
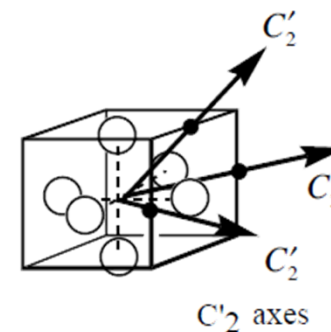
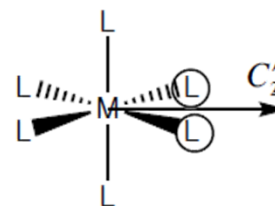
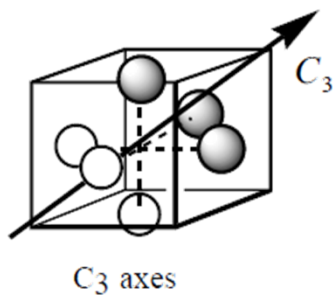
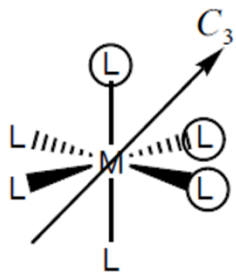
- ไม่มีกลุ่ม σ (D_n)
- σ_h (D_{nh})
- $n\sigma_d$ (D_{nd})



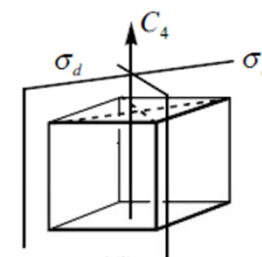
O_h point group

Symmetry elements

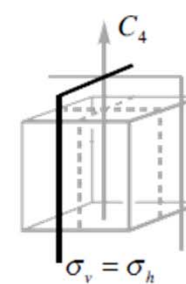
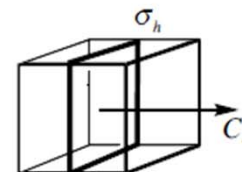
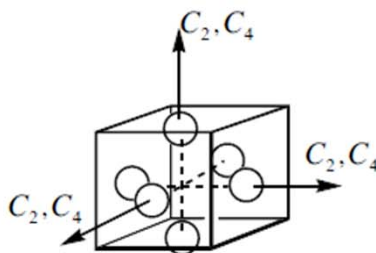
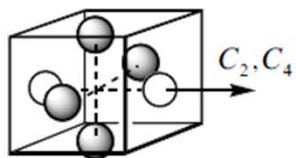
- E
- $4C_3$
- $3C_2$
- $3C_4$
- $6C_2'$
- $3S_4$
- $4S_6$
- i
- $3\sigma_h$
- $3\sigma_d$



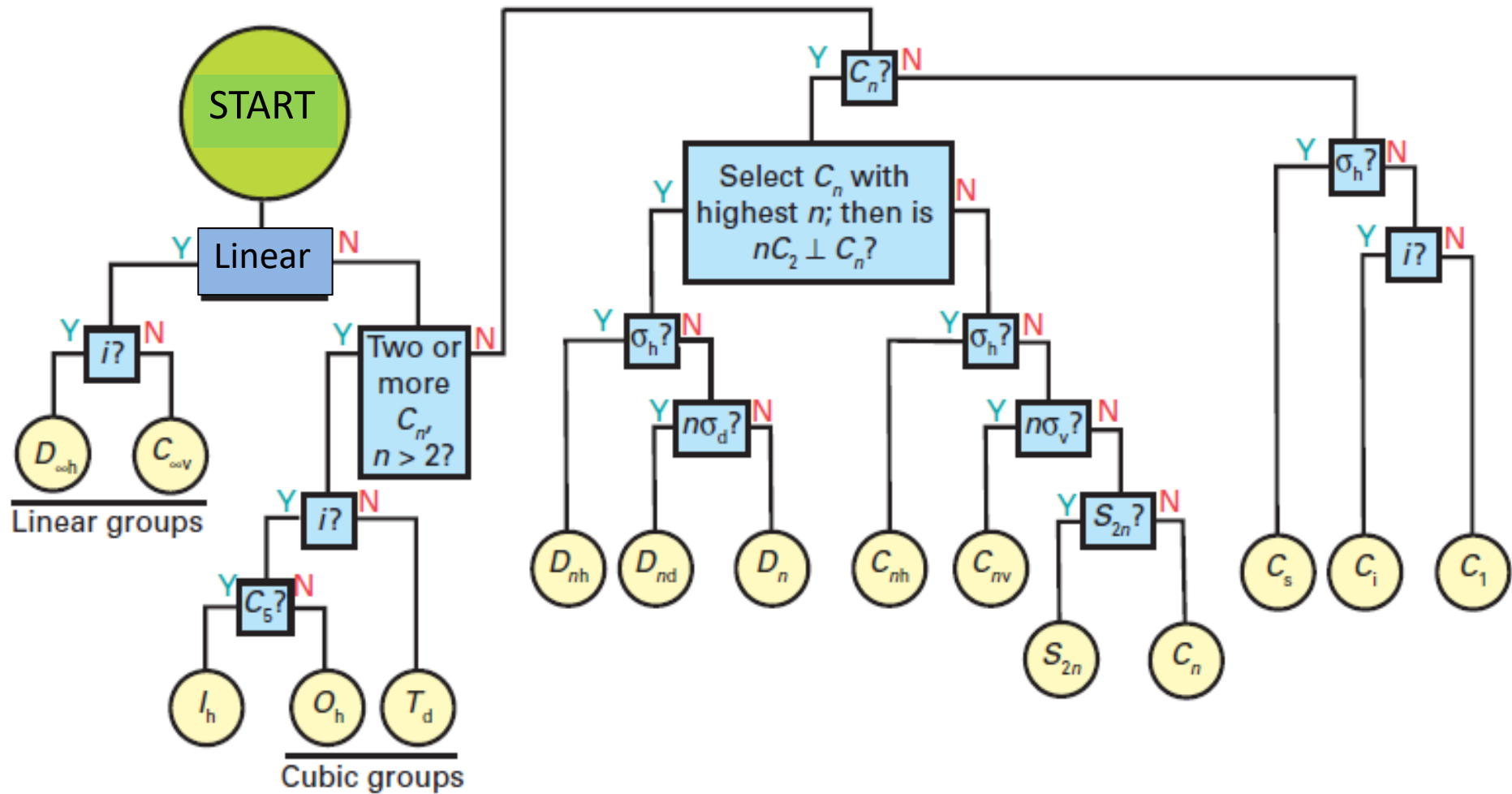
C_2 and C_4 axes



σ_d and σ_h planes



การหาพอยท์กรุปของโมเลกุลโดยใช้ “Decision tree”



ตัวอย่าง จงหาพออยท์กรุปของโมเลกุลต่อไปนี้

1. HCN
2. H₂S
3. BeF₂
4. C₆H₆
5. BF₃
6. SiCl₄
7. PCl₅
8. XeF₄
9. CH₄
10. CH₃Cl
11. CH₂Cl₂
12. SF₄
13. SF₆
14. SF₅Cl
15. *trans*-SF₄Cl₂
16. 1,2-dichlocyclopentane
17. *cis*-PtCl₂Br₂
18. *trans*-[Co(NH₃)₄(H₂O)₂]²⁺
19. C₂H₆ (staggered)
20. C₂H₆ (eclipsed)