

PROGRAMA DE CÓMPUTO PARA LA DETERMINACIÓN DE REPRESENTACIONES IRREDUCIBLES DE MOLÉCULAS PERTENECIENTES A LOS GRUPOS PUNTUALES C_{2v} , T_d , D_{4h} Y O_h

María Guadalupe Hernández Acevedo,¹
Juan Carlos Ramírez² y Enrique González Vergara¹

Sección dedicada al intercambio de "software" e ideas sobre la computación aplicada a problemas de química.

Hoy en día, el uso de los conceptos y notaciones de simetría se ha generalizado en la bibliografía. Solamente se necesita revisar algunas publicaciones recientes de química, para percatarnos del uso extendido de un lenguaje basado en los símbolos de Mulliken (σ , π , A_{1g} , e_g , T_{2g} , T_{2u} , etcétera), mismo que resulta incomprensible para aquellos químicos que no han tenido contacto con las aplicaciones de la Teoría de Grupos y los conceptos de simetría en química (Davidson, 1991).

Explotar la simetría molecular resulta fundamental tanto para comprender la espectroscopía como para introducirse en los cálculos mecánico cuánticos de moléculas.

Con objeto de facilitar a los estudiantes de las licenciaturas de Química la determinación de representaciones irreducibles, dada una traza de una representación reducible, se ha desarrollado un programa que minimiza la cantidad de cálculos y el tiempo que se invierte, con la única restricción de que las moléculas pertenezcan a grupos finitos.

El programa está construido en lenguaje BASIC versión 3.22 con un total de 200 líneas de instrucción. Para su ejecución se necesita una computadora compatible con IBM, con monitor CGA, EGA, VGA ó TTL y un mínimo de 256 Kbytes de memoria y una unidad de disco de 360 Kbytes.

El programa puede ser usado en BASIC, pero al mismo tiempo ofrecemos la versión ejecutable que, aunque ocupa más memoria (aproximadamente 45 Kbytes), es de ejecución más rápida. La estructura del programa es sencilla y su funcionamiento se basa en operaciones matriciales.

Este programa permite la obtención de las representaciones irreducibles a partir de representaciones reducibles para moléculas tales como:

| | | |
|-----------------|---------------------------|------------|
| H_2O | $cis-[Co(NH_3)_4 Cl_2]^+$ | (C_{2v}) |
| $[PtCl_4]^{2-}$ | $trans-[PtCl_4 (NH_3)_2]$ | (D_{4h}) |
| NH_4^+ | MnO_4^- BF_4^- | (T_d) |
| $[PtCl_6]^{2-}$ | SF_6 CoF_6^{3-} | (O_h) |

El programa consta de un menú principal donde se escoge el tipo de geometría con la que se puede trabajar. Enseguida aparece el título de la geometría escogida dándonos el grupo puntual al que pertenece la molécula. Posteriormente aparecen todos los elementos de simetría correspondientes a dicho grupo y ahí se teclea cada valor de las trazas de la representación reducible. El programa ejecuta las operaciones correspondientes en no más de 10 segundos. Si los datos alimentados no corresponden a los de una representación reducible de ese grupo, aparece una nota que dice: si los valores calculados son fraccionarios, entonces las representaciones irreducibles son incorrectas.

El programa da la opción de seguir trabajando con él o de terminar. Esta misma secuencia se lleva a cabo para cualquier grupo puntual manejado por este programa.

Ejemplo: Encontrar las representaciones irreducibles de la representación reducible generada por los orbitales $1s$ de los hidrógenos de la molécula del H_2O , que presenta una geometría angular y que pertenece al grupo puntual C_{2v} .

Base no adaptada por simetría = $\{1s_1, 1s_2\}$

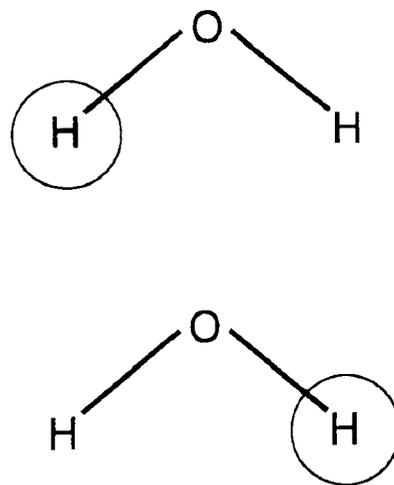


Figura 1.

(1) Maestría en Química
Centro de Química
ICBUAP
Apdo. Postal 1613,
Puebla, Pue.

(2) Escuela de Ciencias Químicas
Benemérita
Universidad Autónoma de Puebla.

Como cada uno de los orbitales 1s de cada hidrógeno permanece inalterado al aplicar la operación identidad o la reflexión sobre el plano de la molécula, pero se intercambian entre sí ante las otras dos operaciones. Entonces, los caracteres de la representación reducible son los siguientes:

| C_{2v} | E | C_2 | $\sigma_v(xz)$ | $\sigma_v(yz)$ |
|----------|-----|-------|----------------|----------------|
| χ_R | 2 | 0 | 0 | 2 |

RESOLUCIÓN MANUAL

1. Localice la tabla de caracteres para el grupo puntual C_{2v} .

2. Realice las operaciones según la fórmula siguiente:

$$\Gamma_i = \frac{1}{h} \sum_Q \chi(R) \chi_i(R) N$$

donde:

Γ_i = número de veces que la representación irreducible i aparece en la representación reducible.

h = orden del grupo

Q = es una clase del grupo

N = es el número de elementos de simetría en la clase Q

R = es una operación del grupo en la clase Q

$\chi(R)$ = es el caracter de R en la representación reducible

$\chi_i(R)$ = es el caracter de R en la i -ésima representación irreducible (Hargittai, 1987).

$$\Gamma_{A_1} = \frac{1}{4}[(2)(1)(1) + (0)(1)(1) + (0)(1)(1) + (2)(1)(1)]$$

$$= 1$$

$$\Gamma_{A_2} = \frac{1}{4}[(2)(1)(1) + (0)(1)(1) + (0)(1)(-1) + (2)(1)(-1)]$$

$$= 0$$

$$\Gamma_{B_1} = \frac{1}{4}[(2)(1)(1) + (0)(1)(-1) + (0)(1)(1) + (2)(1)(-1)]$$

$$= 0$$

$$\Gamma_{B_2} = \frac{1}{4}[(2)(1)(1) + (0)(1)(-1) + (0)(1)(-1) + (2)(1)(1)]$$

$$= 1$$

El resultado es que la representación reducible se obtiene como suma directa de las representaciones A_1 y B_2 .

$$\Gamma_i = A_1 + B_2$$

Haciendo uso del programa se obtienen estos resultados casi inmediatamente. El programa está a disposición de todos los interesados y puede reproducirse

bajo solicitud por escrito y envío de un disco flexible de 5 $\frac{1}{4}$ ".

En la figura 2 se muestran las dos combinaciones lineales de los orbitales 1s del hidrógeno que son base de cada una de estas representaciones irreducibles. 

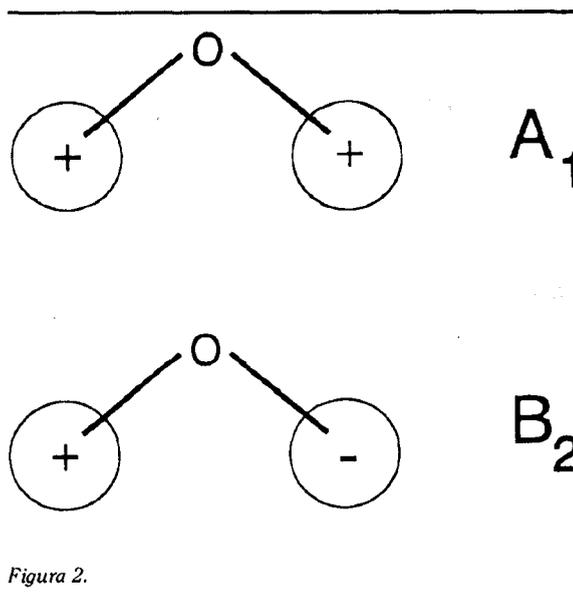


Figura 2.

BIBLIOGRAFÍA

Davidson G., *Group Theory for Chemists*, Ed. MacMillan Education, 1991.

Hargittai, I. y Hargittai, M., *Symmetry Through the Eyes of a Chemist*, VCH Publishers, New York, 1987.

QUIMOTRIVIA-REJECTA

La faceta humana de la ciencia

Max Planck se vio involucrado en una agria discusión entre Boltzmann y Ostwald acerca del aumento de la entropía. Planck nos narra en su *Autobiografía científica*:

"Finalmente Boltzmann triunfó sobre Ostwald y los partidarios de la energética, tal y como pensé que sucedería [...]. La diferencia básica entre la conducción del calor y un proceso puramente mecánico fue reconocida universalmente. Esta experiencia también me dio la oportunidad de conocer un hecho, en mi opinión notable. Una nueva verdad científica no se impone por el convencimiento de sus opositores haciéndoles reconocer la realidad; sino más bien porque algún día mueren los opositores y surge una nueva generación que ya está familiarizada con ella."