

Symétrie moléculaire, théorie des groupes

Une **opération de symétrie** est une action qui laisse un objet identique après son application. Chaque opération de symétrie possède un **élément de symétrie**, qui sera un axe un plan ou un point suivant l'opération effectuée. Le nombre d'éléments de symétrie s'appelle aussi **l'ordre** du groupe de symétrie.

E	l'identité. L'opération identité consiste à ne rien faire, l'élément associé est la molécule dans son entier. Toutes les molécules ont au moins cet élément
C_n	la rotation d'ordre n, c'est à dire d'un angle de $2\pi/n$ laisse la molécule inchangée. Certaines molécules ont plusieurs axes de symétrie; dans ces cas l'axe qui a la plus grande valeur de n est appelé l'axe principal. Par convention, les rotations s'effectuent dans le sens inverse des aiguilles d'une montre
σ	le plan de symétrie. La réflexion au travers de ce plan laisse la molécule inchangée. Dans une molécule qui contient également un axe de rotation, si le plan contient cet axe, il est noté σ_v . Si le plan est perpendiculaire à cet axe, il sera noté σ_h . Un plan bissecteur de deux axes de rotation C_2 sera noté σ_d
i	le centre d'inversion. L'inversion au travers de ce centre de symétrie laisse la molécule inchangée. L'inversion consiste à projeter tous les points au travers de ce centre
S_n	la rotation impropre d'ordre n (rotation/réflexion). Cette opération consiste en une rotation d'ordre n suivie par une réflexion dans un plan perpendiculaire à cet axe. S_1 est équivalent à une réflexion, S_2 à une inversion.

Si deux opérations d'un groupe sont appliquées successivement, le résultat est une autre opération du même groupe. Les opérations qui sont liées les unes aux autres par une autre opération du groupe appartiennent à la même **classe**.

Une molécule ne peut posséder tous les éléments de symétrie, aussi on groupe les molécules possédant les mêmes éléments de symétrie, et on les classe par rapport à ces éléments. Ces groupes de symétrie sont appelés **groupes ponctuels**.

Par exemple : le groupe ponctuel C_{3v}

C_{3v}	E	$2C_3(z)$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

- Il y a 6 éléments de symétrie (E, $2C_3$, $3\sigma_v$) donc l'ordre est de 6. Il y a 3 classes d'élément de symétrie (nb de colonnes)
- Sur cette ligne, toutes les opérations ont une valeur de 1, il s'agit d'une représentation irréductible totalement symétrique (toujours la première ligne).
- Sur cette ligne, l'opération identité donne une valeur égale à 2 : il s'agit d'une dégénérescence.