

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
K	1 H																	2 He
L	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
M	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
N	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
O	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
P	55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
Q	87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Alkalické kovy

Lanthanoidy

Přechodné kovy

Polokovy

Halogeny

Kovy alkalických zemin

Aktinoidy

Kovy

Nekovy

Vzácné plyny



PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Anorganická chemie I (a)

Tvary a symetrie molekul – VSEPR, BGS

Jan Kotek

VSEPR = Valence Shell Electron Pair Repulsion

Též Gillespieova-Nyholmova teorie.

Geometrie molekuly v základním stavu odpovídá minimální energii molekuly. K celkové energii molekuly přispívá řada složek. Z elektrostatického hlediska to jsou:

- mezielektronová repulze
- mezijaderná repulze
- přitahování elektronů a jader

VSEPR uvažuje pouze elektrostatické odpuzování valenčních elektronových párů na centrálním atomu molekuly. Valenční páry jsou:

- vazebné
- nevazebné (volné).

Princip: elektronový pár se snaží co nejvíce přiblížit k jádru a zároveň být co nejdále od ostatních elektronových párů.



VSEPR = Valence Shell Electron Pair Repulsion

Coulombova síla klesá s kvadrátem vzdálenosti, a proto se z nevazebných párů stereochemicky uplatňují pouze ty v orbitalech na „povrchu“ atomu, ns a np (mají největší hlavní kvantové číslo n , které koreluje s velikostí orbitalu). Proto VSEPR dobře popisuje geometrii kovalentních sloučenin nepřechodných prvků.

Přechodné kovy mají typicky konfiguraci $ns^0(n-1)d^n$, a elektrony v orbitalech $(n-1)d$ nejsou stereochemicky aktivní (jsou schované „uvnitř“ atomu). Situaci komplikuje velké množství koordinačně-kovalentních vazeb (zapojení d -orbitalů do MO) a částečný iontový charakter vazeb, díky čemuž je tvar koordinačních sloučenin dán sterickou náročností ligandů. VSEPR je proto pro sloučeniny přechodných prvků nevhodný s výjimkou symetrických konfigurací d^0 a d^{10} .

Princip: tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší.



VSEPR = Valence Shell Electron Pair Repulsion

Ze zjevných důvodů má smysl uvažovat pro násobné vazby jen jeden směr (σ a π vazby mezi dvěma partnery nelze rozdělit do různých směrů).

Základní tvar může být dále deformován: volné elektronové páry patří zcela centrálního atomu (jsou lokalizovány v malém prostoru AO), vazebné páry jsou sdílené s vazebným partnerem (jsou lokalizovány ve větším prostoru MO). Hustota náboje nevazebných párů je tudíž větší než hustota náboje vazebných párů. Proto repulze mezi elektronovými páry klesá v pořadí:

1. dva nevazebné (volné) elektronové páry
2. vazebný pár – nevazebný pár
3. dva vazebné elektronové páry

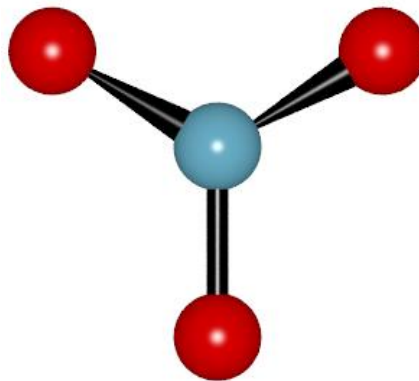


VSEPR = Valence Shell Electron Pair Repulsion

Odpuzování násobných vazeb je větší než odpuzování jednoduchých vazeb.

Odpuzování radikálových elektronů je menší než odpuzování jednoduchých vazeb.

Pro Coulombovo odpuzování mezi vazbami hraje největší roli elektronová hustota v těsném okolí centrálního atomu – zde k sobě mají elektronové hustoty různých vazeb (párů) nejblíže. Klíčová je tedy polarizace vazeb (a tedy elektronegativita vazebních partnerů).



2 valenční páry

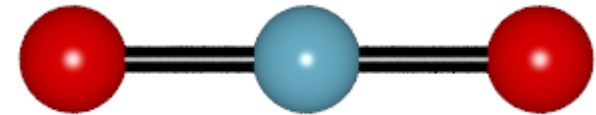
Tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší = lineární uspořádání

2 vazebné páry: AB_2

lineární uspořádání

$BeCl_2$, $MgCl_2$, ZnI_2 , $CdBr_2$, $HgCl_2$,
 CO_2 , CS_2 , NO_2^+ , N_3^- , HCN , $HOCN$, $HCCH$

MX_2 ($M = Ca, Sr$ a Ba) jsou překvapivě lomené (vliv **d**-orbitalů)



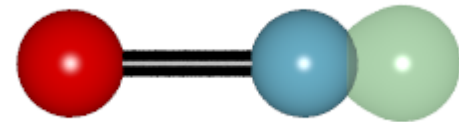
vazebný úhel = 180°

1 vazebný pár, 1 nevazebný pár: ABE

lineární uspořádání

(dvojitomové molekuly ani nemohou být jinak)

$GaCl$, $InCl$, $TlBr$

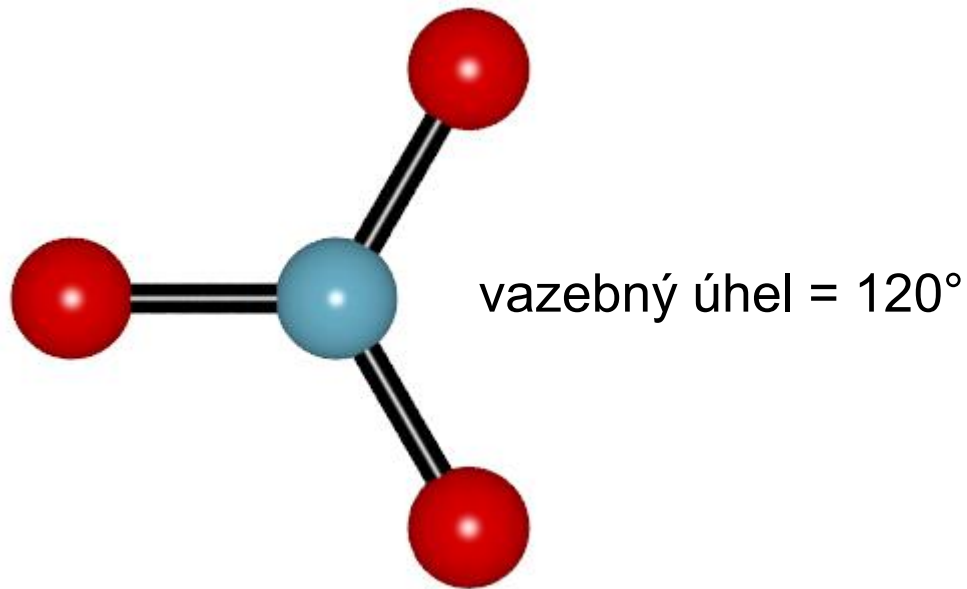


3 valenční páry

Tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší = trojúhelník

3 vazebné páry: AB_3
trojúhelník

BF_3 , BCl_3 , $GaCl_3$, $InBr_3$,
 SO_3 , $COCl_2$, NO_3^- , CO_3^{2-}



3 valenční páry

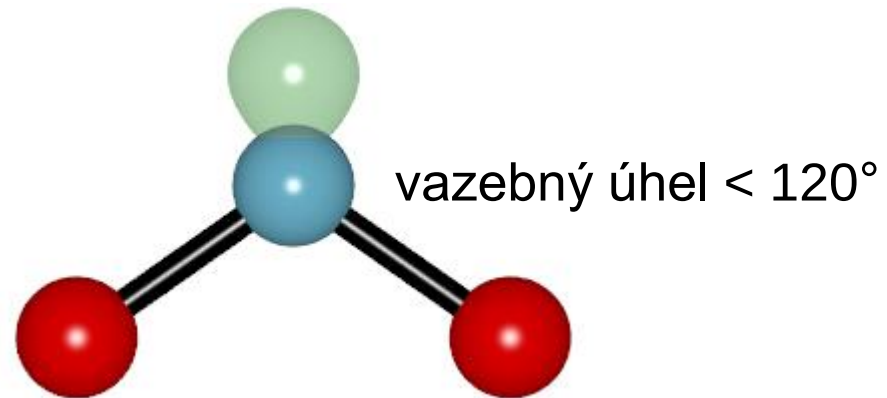
2 vazebné páry, 1 nevazebný pár: AB_2E

Pozor, název tvaru určuje hmota (tj. pozice jader atomů vazebných partnerů, nikoliv difúzní a lehké volné elektronové páry): lomené uspořádání

CCl_2 , $SnCl_2$, $PbBr_2$

O_3 , SO_2 , NO_2^-

radikál: NO_2 (134°)

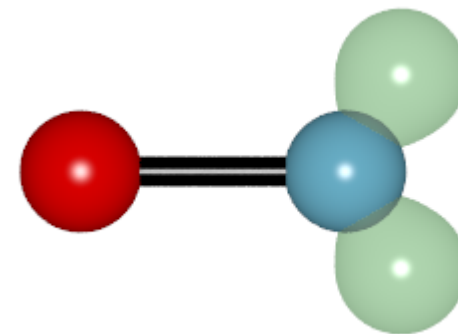


1 vazebný pár, 2 nevazebné páry: ABE_2

lineární uspořádání

(dvojatomové molekuly ani nemohou být jinak)

radikál: NO

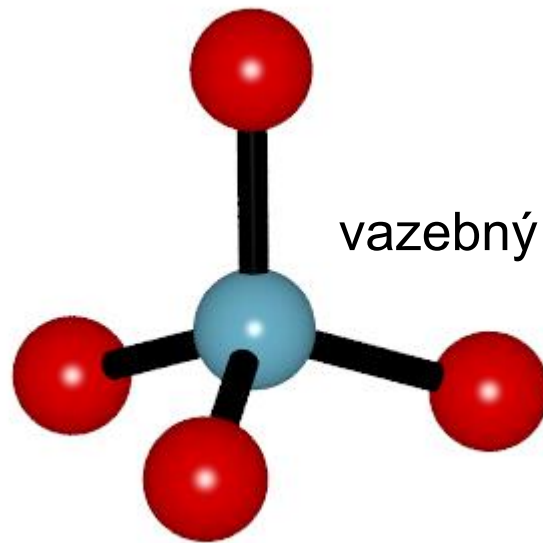


4 valenční páry

Tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší = tetraedr (čtyřstěn)

4 vazebné páry: AB_4
tetraedr (čtyřstěn)

CH_4 , CCl_4 , $SiCl_4$, $GeBr_4$, BH_4^- , BF_4^- , $AlCl_4^-$, NH_4^+ , PH_4^+ , PCl_4^+
 XeO_4 , ClO_4^- , SO_4^{2-} , $POCl_3$, PO_4^{3-}



vazebný úhel = $109,5^\circ$

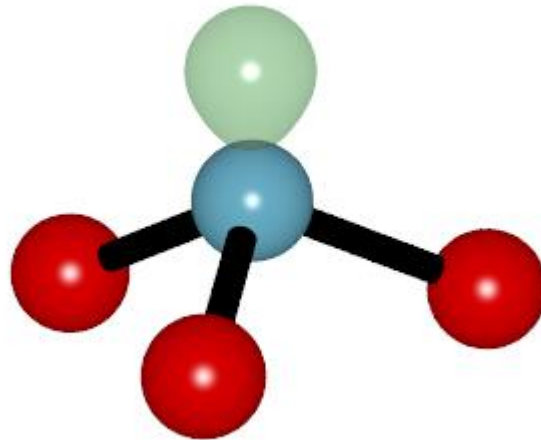
4 valenční páry

3 vazebné páry, 1 nevazebný pár: AB_3E

Pozor, název tvaru určuje hmota: trigonální (trojboká) pyramida

NH_3 , NHF_2 , PF_3 , PCl_3 , $AsCl_3$, H_3O^+ , H_3S^+

ClO_3^- , SO_3^{2-}



vazebný úhel $< 109,5^\circ$

4 valenční páry

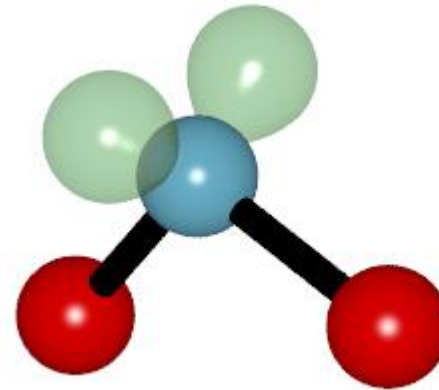
2 vazebné páry, 2 nevazebné páry: AB_2E_2

Pozor, název tvaru určuje hmota: lomené uspořádání

H_2O , OF_2 , H_2S , SCl_2 , NH_2^-

ClO_2^-

radikál: ClO_2 (117°)



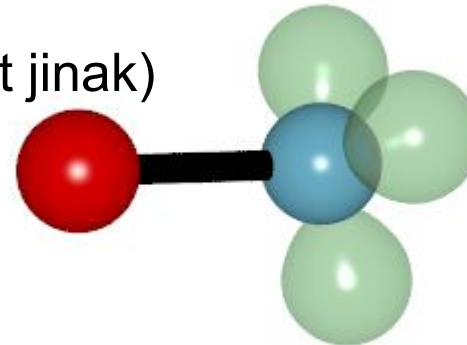
vazebný úhel $< 109,5^\circ$

1 vazebný pár, 3 nevazebné páry: ABE_3

lineární uspořádání

(dvoatomové molekuly ani nemohou být jinak)

HF , HCl , OH^- , SH^- , NH_2^-



5 valenčních párů

Tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší = trigonální (trojboká) bipyramida

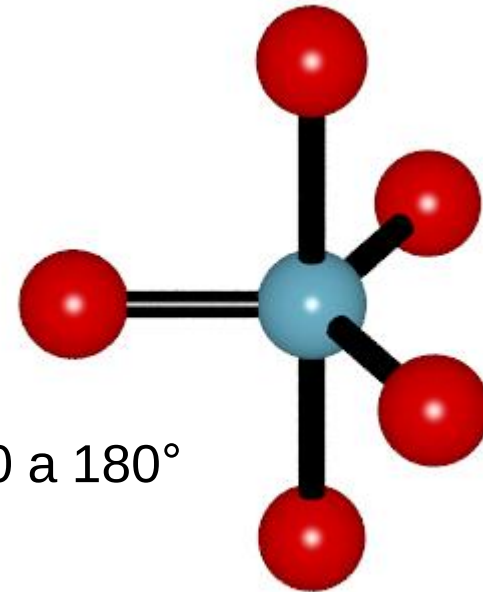
Trigonální bipyramida je z hlediska interelektronové repulze výhodnější tvar než tetragonální (čtyřboká) pyramida, byť energetický rozdíl není velký (díky tomu se v trigonální bipyramidě snadno vyměňují ekvatoriální substituenty s axiálními, tzv. Berryho pseudorotace).

U koordinačních sloučenin jsou oba tyto tvary populované zhruba stejně, včetně přechodných geometrií.

5 vazebných párů: AB_5

trigonální (trojboká) bipyramida

PF_5 , PCl_5 , PF_3Cl_2 , AsF_5 , $AsF_3(CH_3)_2$, SbF_5



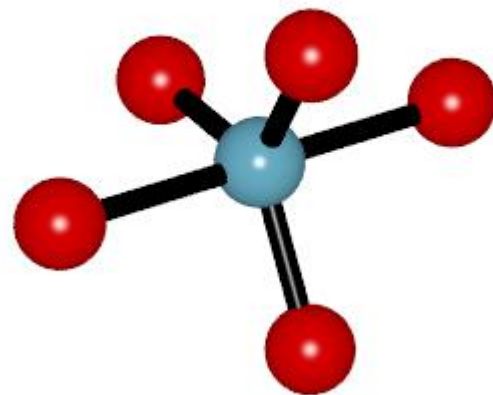
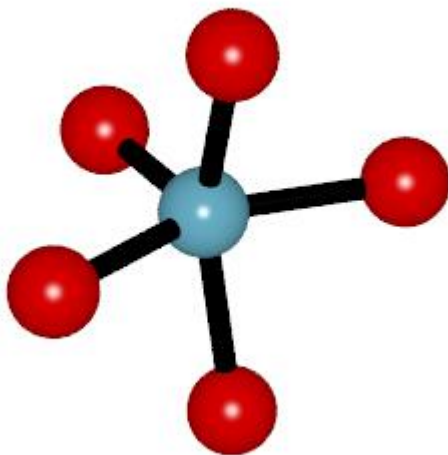
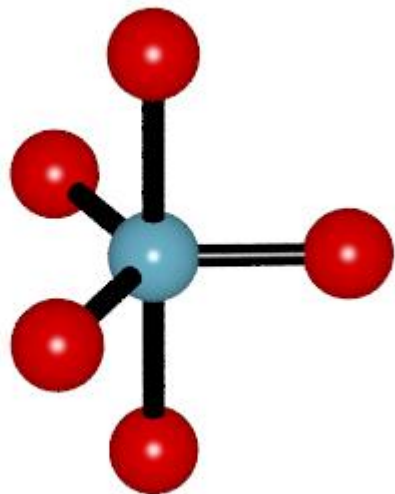
vazebné úhly = 90, 120 a 180°

5 valenčních párů

Berryho pseudorotace

Fluxionální chování trigonální bipyramidy umožňuje vzájemnou výměnu axiálních a ekvatoriálních poloh.

Důsledek: např. 1 signál v ^{19}F NMR spektru PF_5 naměřeném za běžné teploty. Teprve při ochlazení vzorku dojde k rozštěpení signálu na dva píky o intenzitě 2:3 (ax.:eq.). Btw. – tímto je prokázáno, že PF_5 je trigonální bipyramida, v případě tetragonální pyramidy by pásy měly relativní intenzity 1:4 (ax.:eq.).



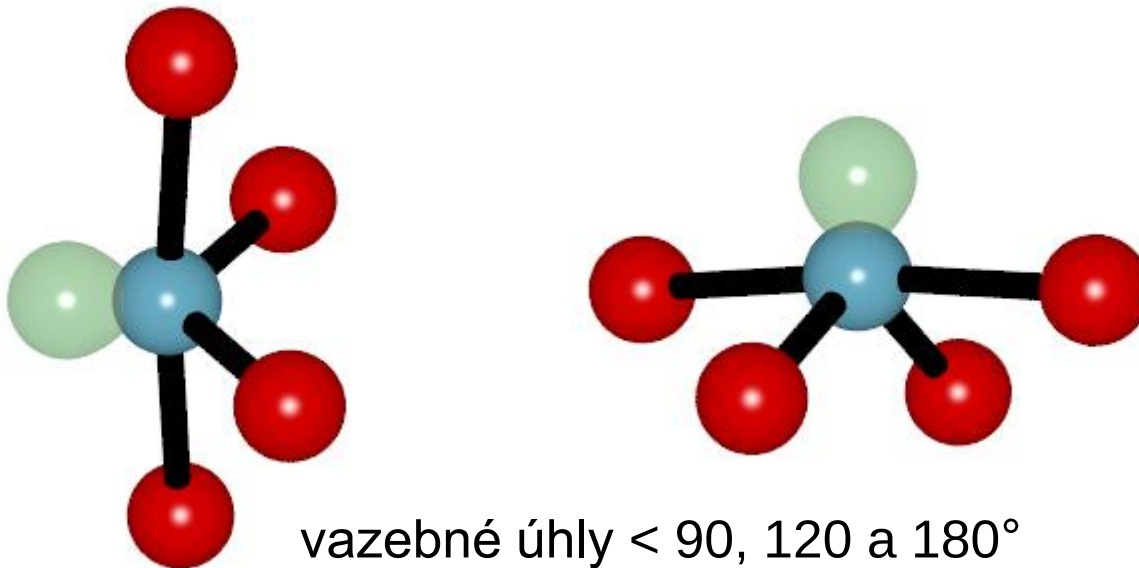
5 valenčních párů

4 vazebné páry, 1 nevazebný pár: AB_4E

Pozor, dvě možnosti, kam umístit stereochemicky náročnější volný elektronový pár. Výhodnější je ekvatoriální pozice.

Pozor, název tvaru určuje hmota: houpačka (disfenoid)

SF_4 , SeF_4 , $(CH_3)_2TeCl_2$

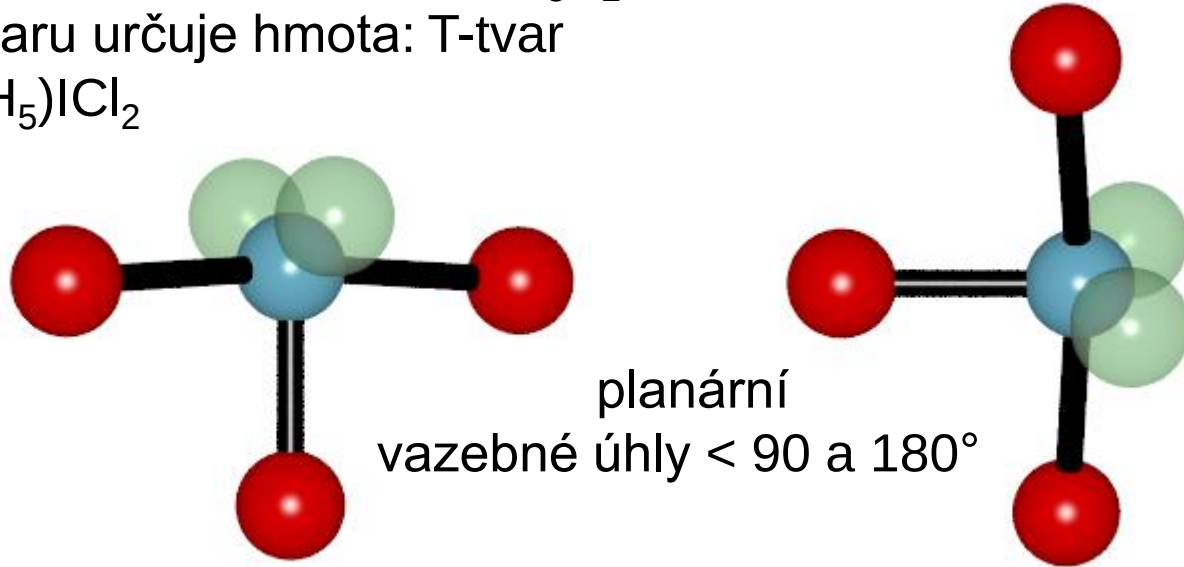


5 valenčních párů

3 vazebné páry, 2 nevazebné páry: AB_3E_2

Pozor, název tvaru určuje hmota: T-tvar

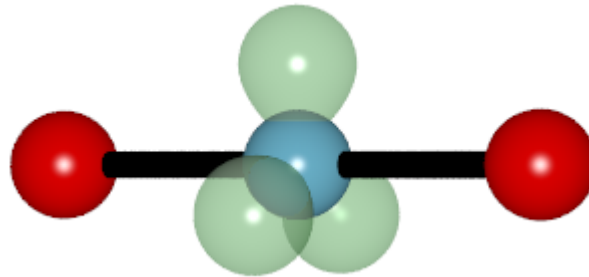
ClF_3 , BrF_3 , $(C_6H_5)ICl_2$



2 vazebné páry, 3 nevazebné páry: AB_2E_3

Pozor, název tvaru určuje hmota: lineární uspořádání

XeF_2 , $XeCl_2$, I_3^- , ICl_2^-



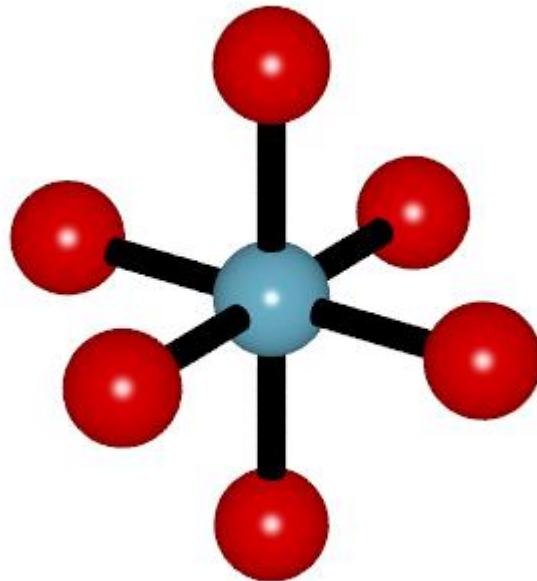
6 valenčních párů

Tvar molekuly vychází z rozmístění valenčních párů do takových směrů, aby repulze mezi nimi byla co nejmenší = oktaedr (osmistěn, pravidelná tetragonální bipyramida)

6 vazebných párů: AB_6

oktaedr

SF_6 , SeF_6 , H_6TeO_6 , PF_6^- , SiF_6^{2-} , AlF_6^{3-}



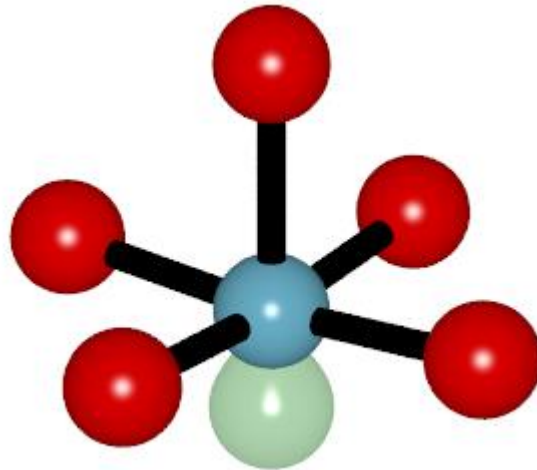
6 valenčních párů

5 vazebných párů, 1 nevazebný pár: AB_5E

Pozor, název tvaru určuje hmota: tetragonální (čtyřboká) pyramida

ClF_5 , BrF_5 , IF_5 ,

$XeOF_5$



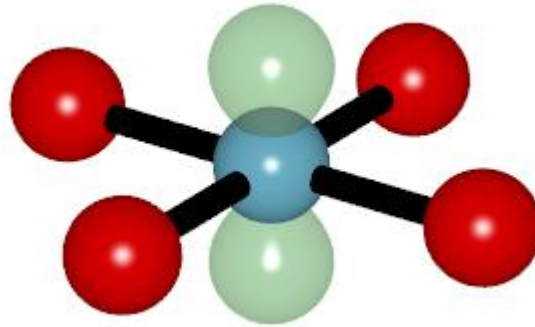
centrální atom je mírně pod základnou
vazebné úhly < 90 a 180°

6 valenčních párů

4 vazebné páry, 2 nevazebné páry: AB_4E_2

Pozor, název tvaru určuje hmota: čtverec

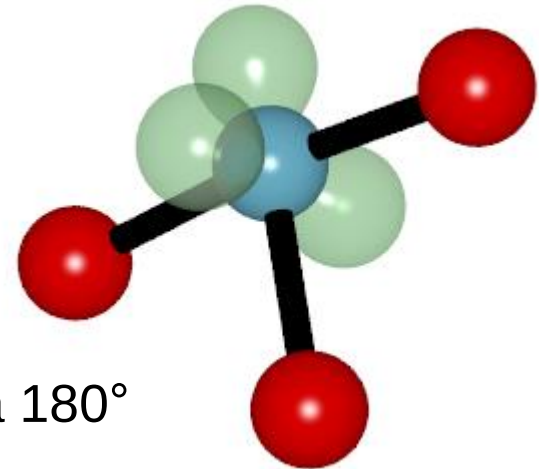
XeF_4 , ClF_4^- , ICl_4^-



3 vazebné páry, 3 nevazebné páry: AB_3E_3

Pozor, název tvaru určuje hmota: T-tvar

XeF_3^-

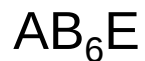
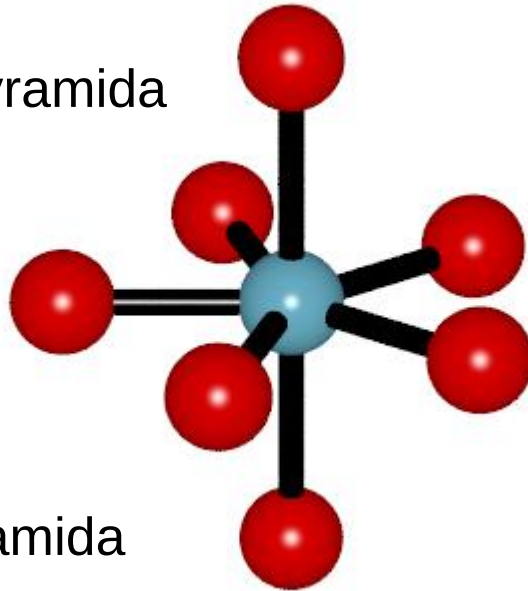


planární
vazebné úhly $< 90^\circ$ a 180°

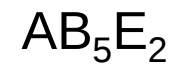
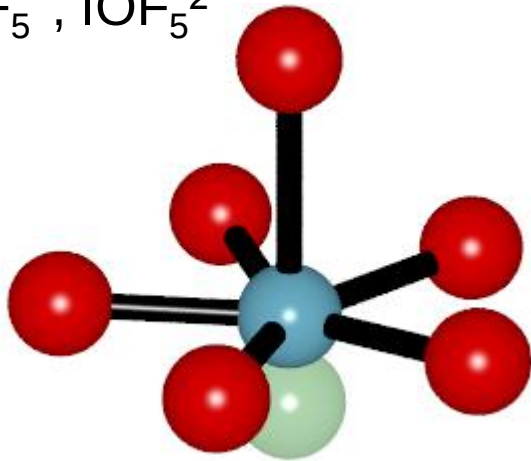
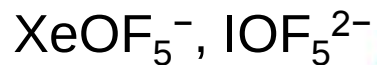
7 valenčních párů



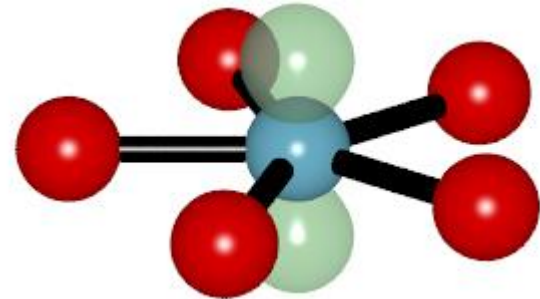
Pentagonální (pětiboká) bipyramida



Pentagonální (pětiboká) pyramida



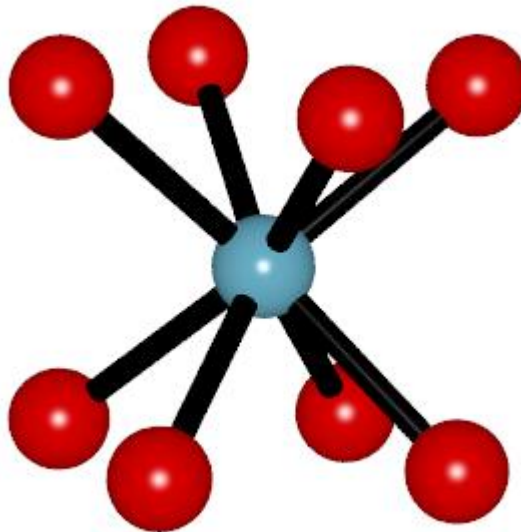
Pětiúhelník



8 valenčních párů



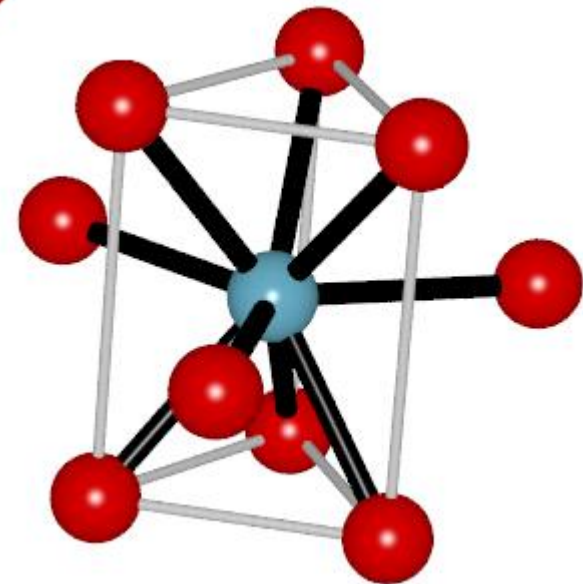
Tetragonální antiprisma
(čtvercové antiprisma,
Archimédovo antiprisma)



9 valenčních párů



Trigonální prisma se třemi přidánými vrcholy
(tříkrát očepičkovaný trojboký hranol)



7–9 valenčních párů

Malé energetické rozdíly mezi dalšími alternativními uspořádáními.

Pro sloučeniny s takto velkým počtem valenčních párů není často jeden volný elektronový pár stereochemicky aktivní.

XeF_6 , TeCl_6^{2-} a BiCl_6^{3-} mají tvar (mírně deformovaného) oktaedru, ačkoliv jsou AB_6E .

XeF_8^{2-} je tetragonální antiprisma, ačkoliv je AB_8E .

Alternativní uspořádání lze odvodit od tvaru pro menší počet valenčních párů přidáním dalšího vrcholu nad největší plochu (očepičkování, capping).

7 valenčních párů

Základní tvar: pentagonální bipyramida

Alternativy:

Oktaedr s přidáním vrcholem

Trigonální prisma s přidáním vrcholem



7–9 valenčních párů

8 valenčních párů

Základní tvar: tetragonální antiprisma

Alternativy:

Trigonální prisma se dvěma přidanými vrcholy

Dodekaedr

(Krychle je nevýhodná)

9 valenčních párů

Základní tvar: trigonální prisma se třemi přidanými vrcholy

Alternativy:

Tetragonální antiprisma s přidaným vrcholem



Bodové grupy symetrie = grupy operací symetrie

Bodové grupy symetrie se používají pro popis symetrie molekul.

Operace symetrie je operace, po jejímž provedení je objekt nerozlišitelný (ne nutně identický!) od původního objektu (tj. jedná se o transformaci molekuly, které nevede k její zdánlivé změně vzhledem k pozorovateli).

Prvek symetrie je bod (střed symetrie), přímka (osa rotace) nebo rovina (zrcadlo), vůči kterým se operace symetrie provádí.

Při všech operacích musí alespoň 1 bod zůstat nezměněn – proto bodové grupy:

- vůči středové symetrii je invariantní pouze samotný střed symetrie (bod);
- vůči rotaci jsou invariantní body, které leží na ose symetrie (nekonečně mnoho bodů);
- vůči zrcadlení jsou invariantní body, které leží na rovině symetrie (nekonečně mnoho bodů).



Bodové grupy symetrie = grupy operací symetrie

Co je to **grupa**?

Množina G , kde je zavedeno grupové násobení „ $*$ “ a platí:

uzavřenost: pro každá a a b z G je $a*b = c$ prvkem G

asociativnost: pro každá a, b, c z G je $(a*b)*c = a*(b*c)$

identita: existuje jednotkový prvek e , pro který platí:
 $a*e = e*a = a$, pro každé a z G

inverze: existuje inverzní prvek, tj. k a z G existuje inverzní prvek a^{-1} , pro který platí:
 $a*a^{-1} = a^{-1}*a = e$

(Obecně v grupách neplatí komutativnost, tj. $a*b = b*a$, byť v BGS platí.)



Operace bodové symetrie a prvky symetrie

Prvek symetrie	Operace symetrie	Schönfliesovy symboly	Hermannovy-Mauguinovy symboly
identita	rotace o 360° (2π)	E, I	1
n -četná rotační osa	rotace o $2\pi/n$	C_n	n
rovina	zrcadlení	σ	m
střed	inverze	i	$\bar{1}, -1$
n -četná rotačně-reflexní osa	rotace o $2\pi/n$ s zrcadlením v rovině kolmé na rotační osu	S_n $S_1 = \sigma, S_2 = i$	$\tilde{n}$
n -četná rotačně-inverzní osa	rotace o $2\pi/n$ následovaná inverzí	C_{ni}	$\bar{n}$

Matematický zápis operace bodové symetrie

Počáteční pozice (souřadnice x, y, z) se transformací dostane do koncového stavu (souřadnice x', y', z'). K zápisu této transformace (operace symetrie) je vhodný maticový počet:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} \cdot x + a_{12} \cdot y + a_{13} \cdot z \\ a_{21} \cdot x + a_{22} \cdot y + a_{23} \cdot z \\ a_{31} \cdot x + a_{32} \cdot y + a_{33} \cdot z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}$$

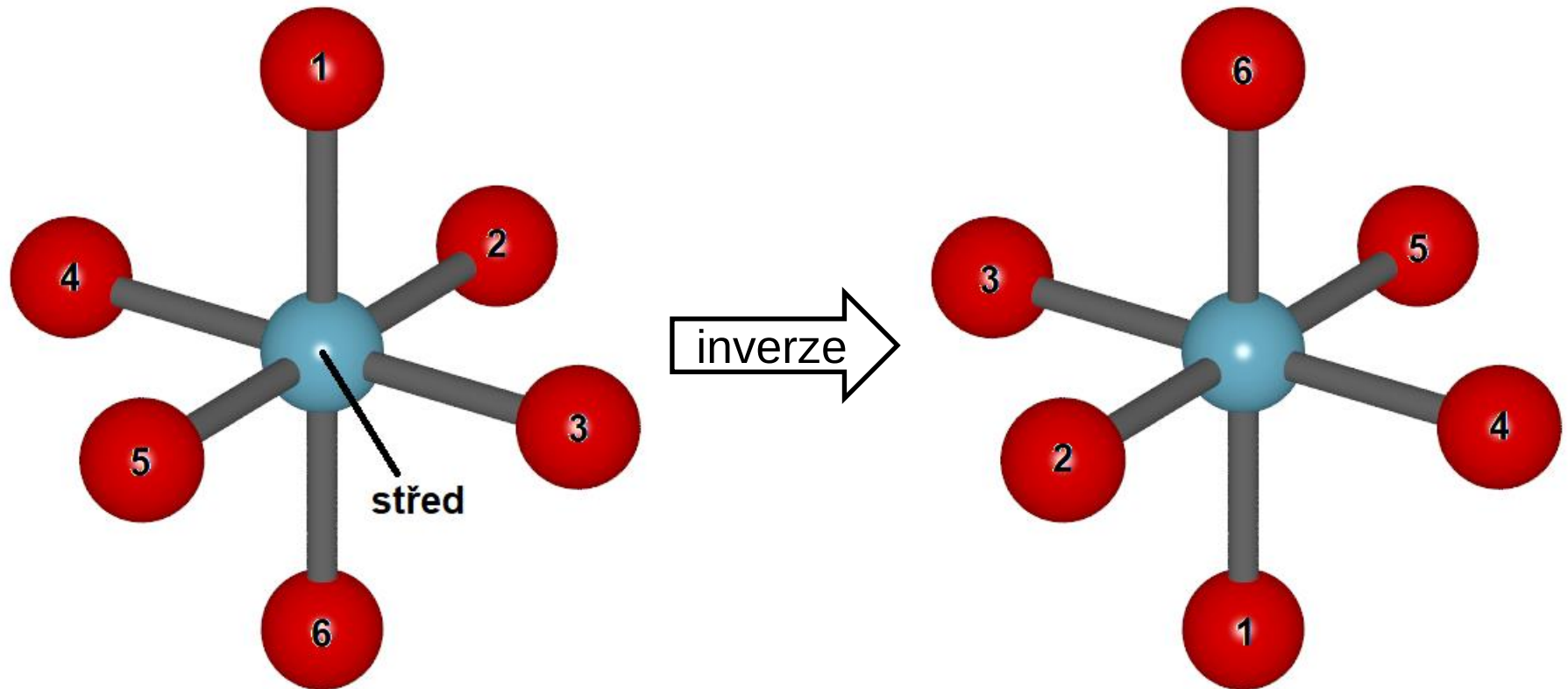
Např. pro střed symetrie, kdy se ze souřadnic (x, y, z) dostaneme zjevně do bodu $(-x, -y, -z)$, zjevně platí:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \cdot x + 0 \cdot y + 0 \cdot z \\ 0 \cdot x - 1 \cdot y + 0 \cdot z \\ 0 \cdot x + 0 \cdot y - 1 \cdot z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix}$$

Součin dvou transformačních matic je další (nová) transformační matice.

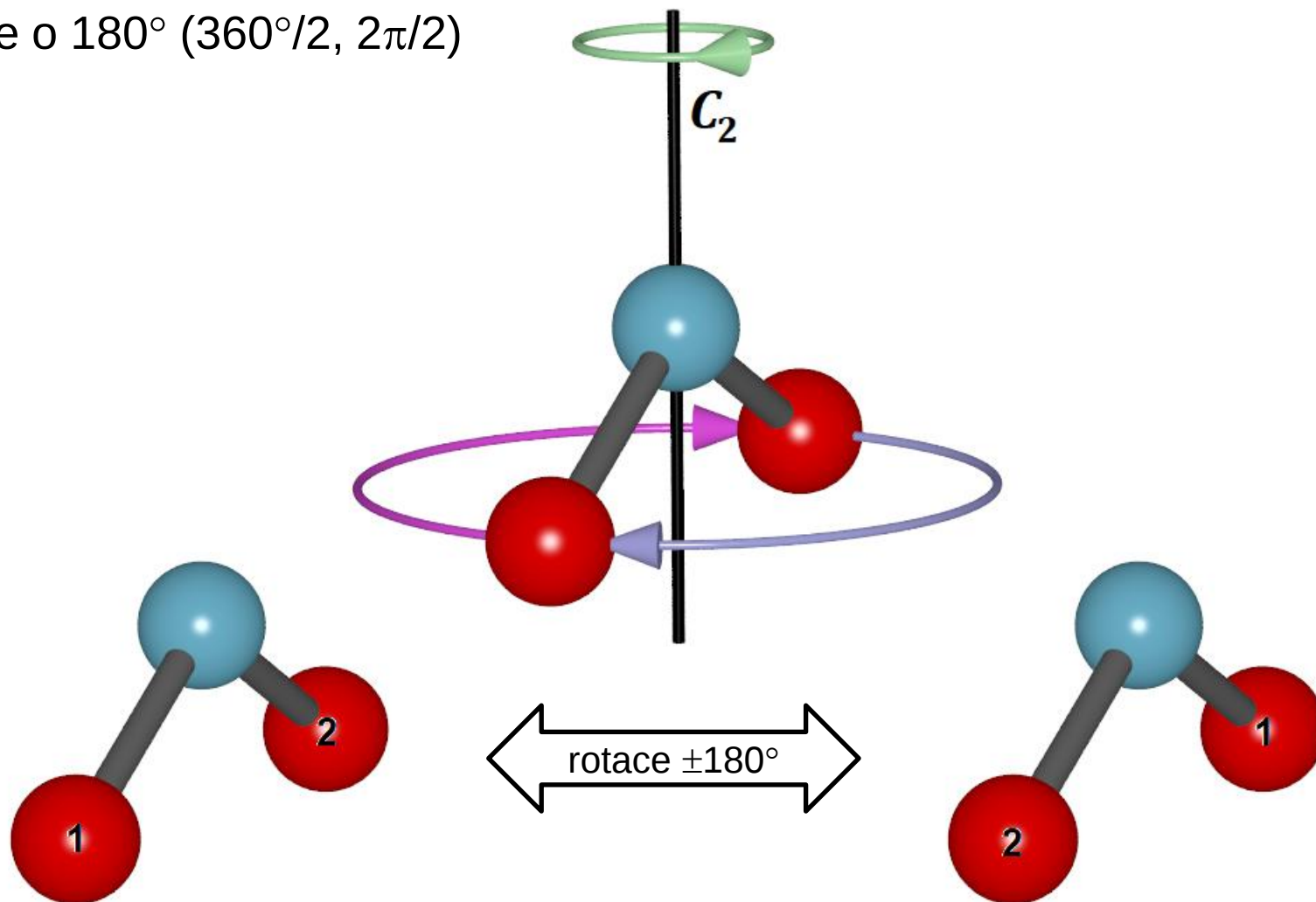


Střed (centrum) symetrie, i



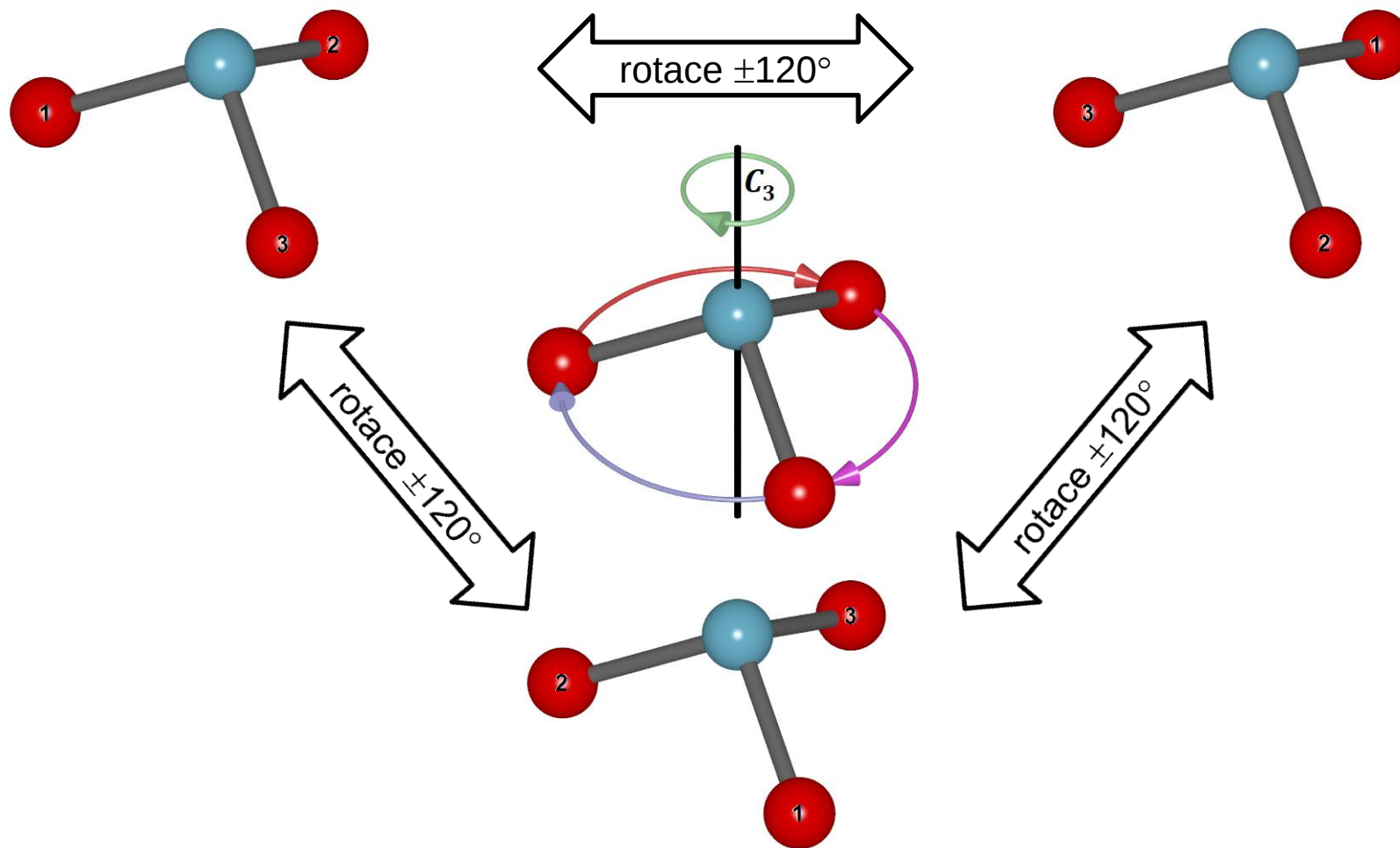
Rotační osa C_2

rotace o 180° ($360^\circ/2$, $2\pi/2$)



Rotační osa C_3

rotace o 120° ($360^\circ/3$, $2\pi/3$)



Rotační osy C_n

S vícečetnými rotačními osami symetrie se pojí více operací symetrie:

C_3 : operace C_3^1 (rotace o 120°) a C_3^2 (rotace o 240° , resp. -120°)

C_4 : operace C_4^1 (rotace o 90°), C_4^2 (rotace o 180° , tj. $C_4^2 = C_2$) a C_4^3 (rotace o 270° , resp. -90°)

C_5 : operace C_5^1 (rotace o 72°), C_5^2 (rotace o 144°), C_5^3 (rotace o 216°) a C_5^4 (rotace o 288°)

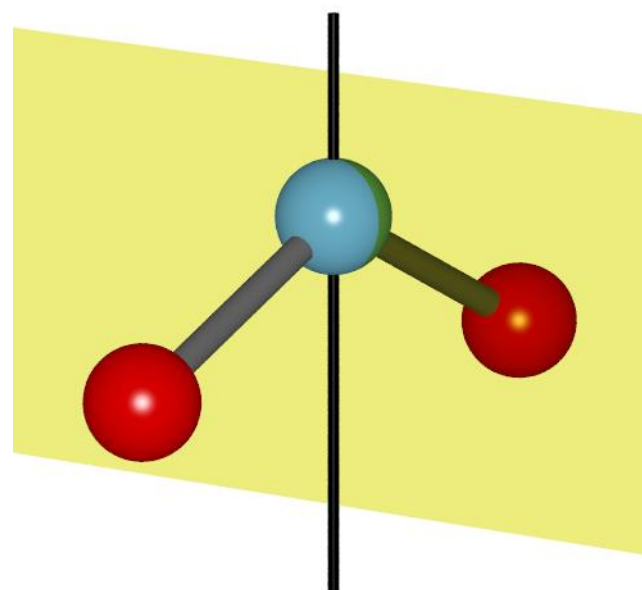
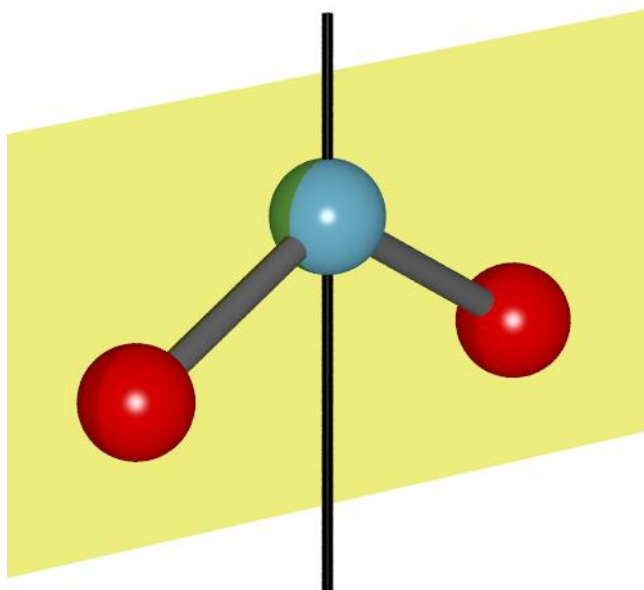
C_6 : operace C_6^1 (rotace o 60°), C_6^2 (rotace o 120° , tj. $C_6^2 = C_3^1$), C_6^3 (rotace o 180° , tj. $C_6^3 = C_2$), C_6^4 (rotace o 240° , tj. $C_6^4 = C_3^2$) a C_6^5 (rotace o 300°)

Z hlediska teorie grup (matematiky) je nutno uvažovat všechny možné operace symetrie, pro naše účely v tuto chvíli postačí „jen“ nalezení prvků symetrie.



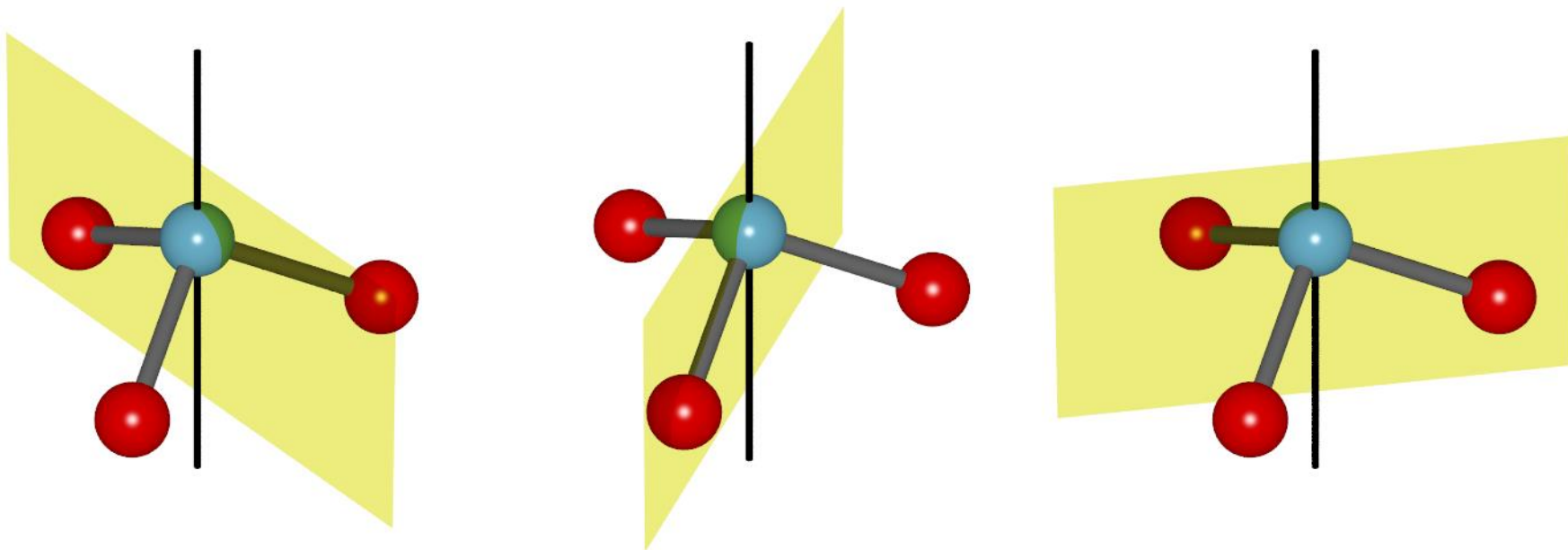
Rovina symetrie σ_v

vertikální roviny σ_v , rovnoběžné s hlavní osou
(hlavní osa = osa symetrie s nejvyšší četností)



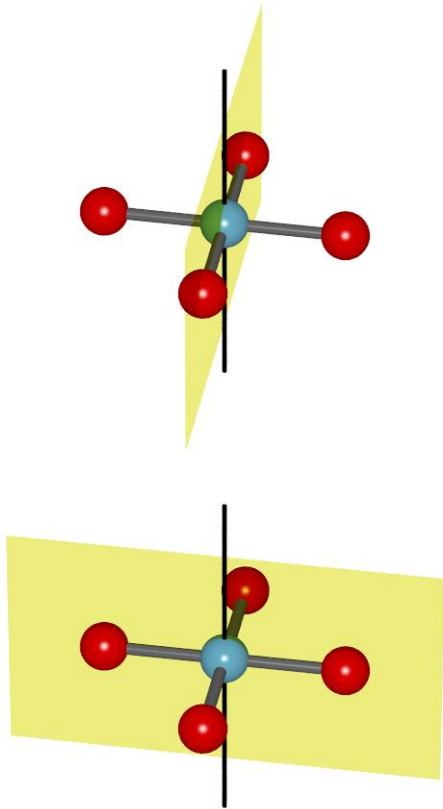
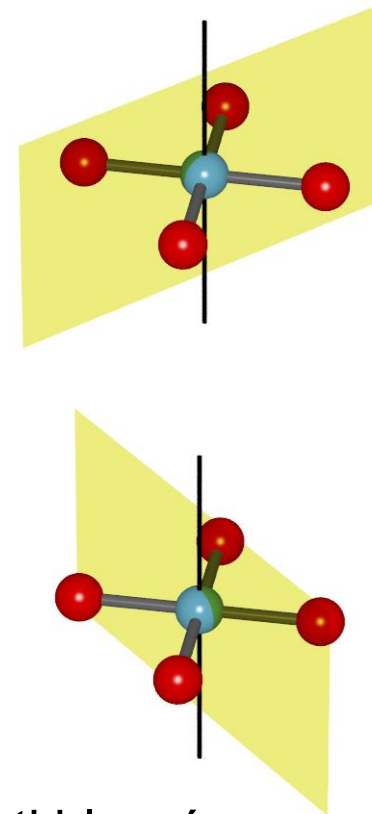
Rovina symetrie σ_v

vertikální roviny σ_v , rovnoběžné s hlavní osou



Roviny symetrie σ_v a σ_d

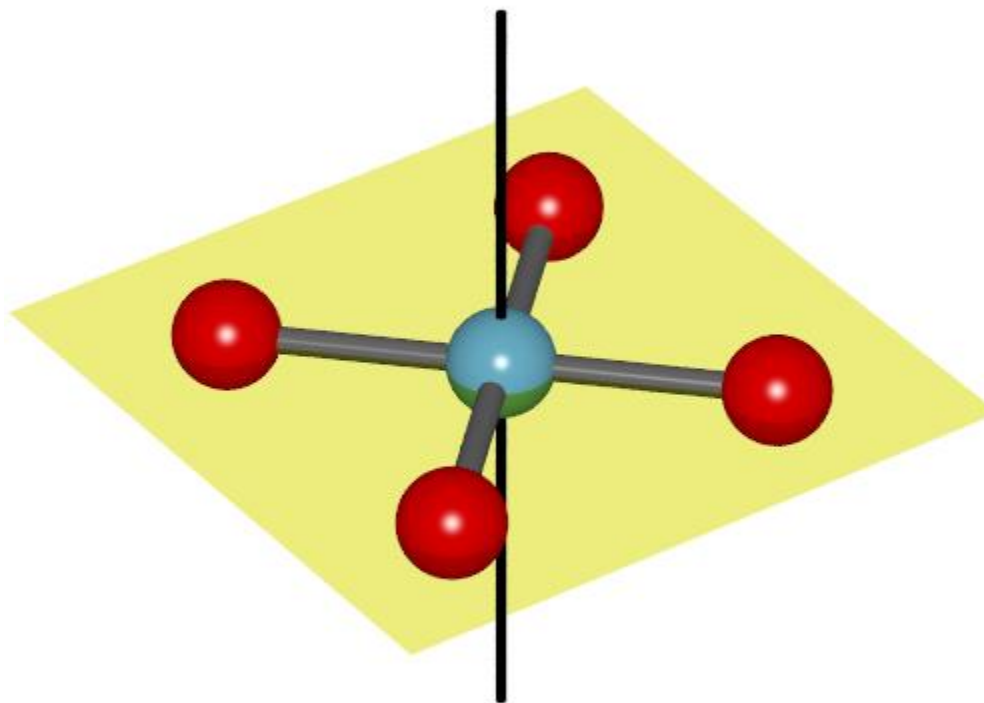
vertikální roviny σ_v a σ_d (speciální vertikální roviny, tzv. diagonální, půlí úhel vazeb), rovnoběžné s hlavní osou

 σ_v

 σ_d


celkový počet vertikálních rovin odpovídá četnosti hlavní osy

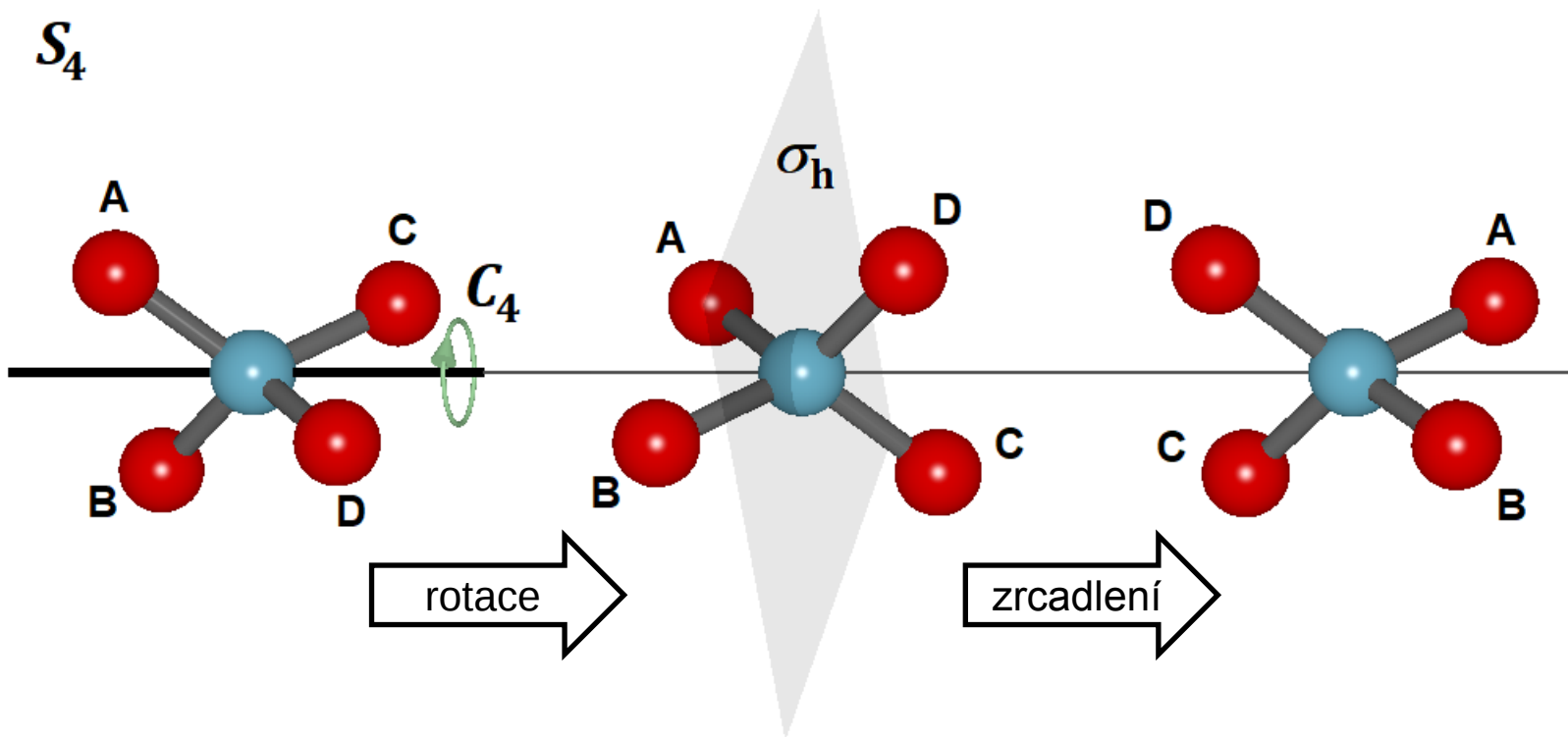
Rovina symetrie σ_h

horizontální rovina σ_h , kolmá k hlavní ose



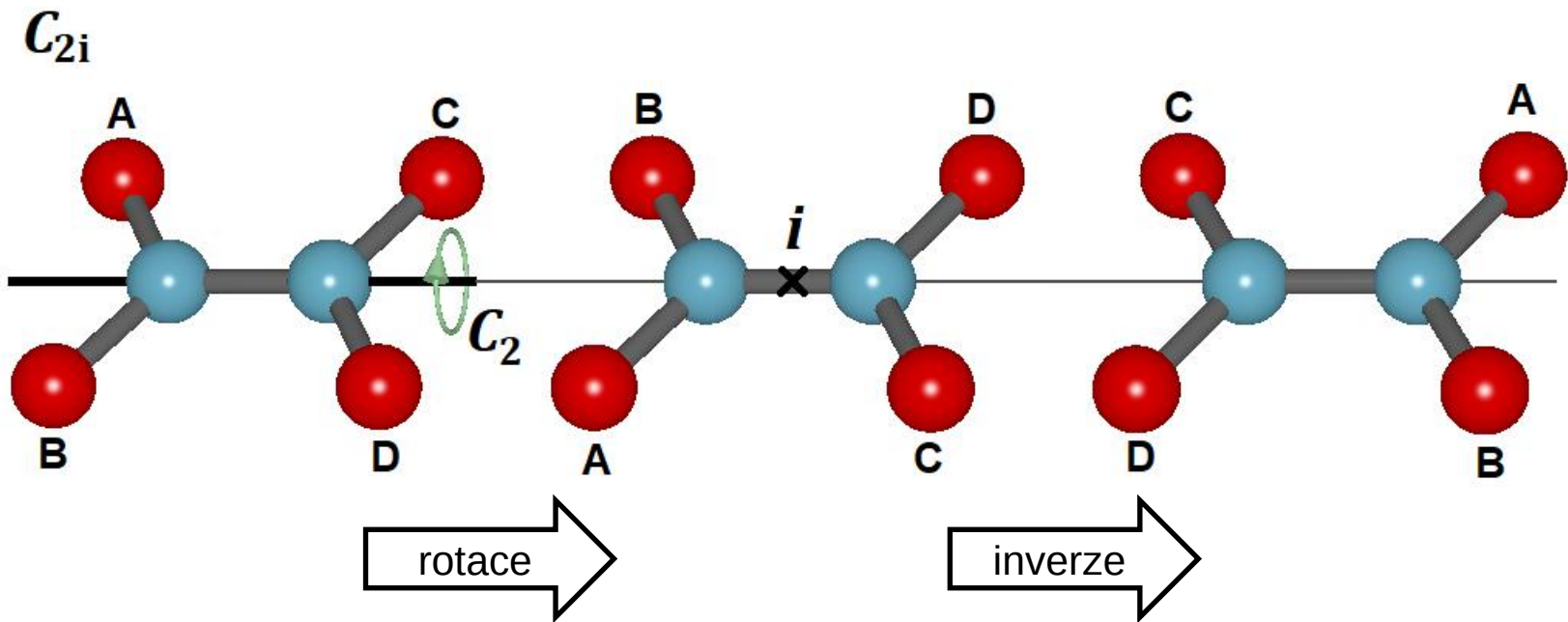
Rotačně-reflexní osa S_n

tzv. nevlastní osa, kombinace n -četné rotace a následného zrcadlení v rovině kolmé k ose

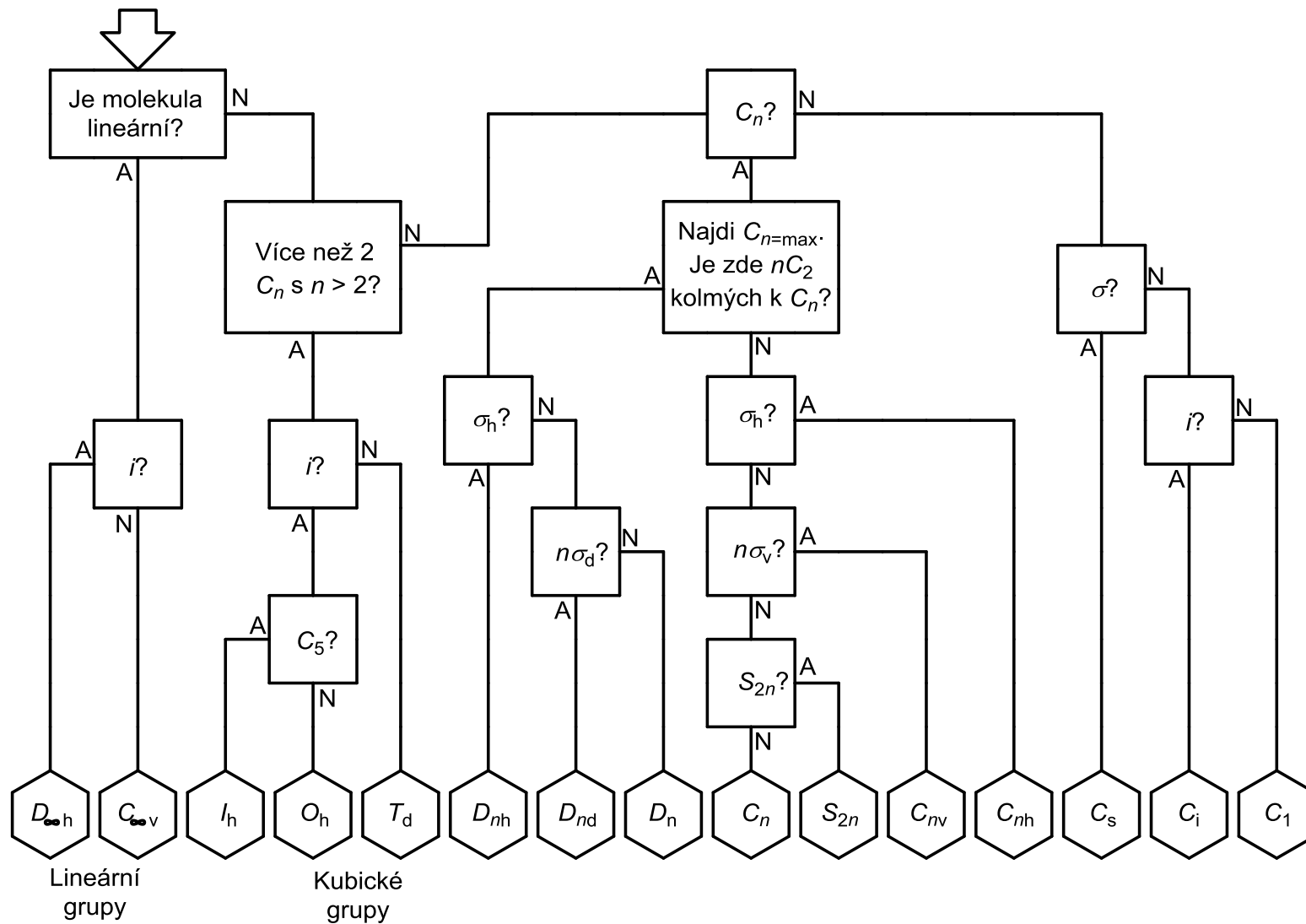


Rotačně-inverzní osa C_{ni}

tzv. nevlastní osa, kombinace n -četné rotace a následné inverze



Určení bodových grup – jednoznačné označení



Určení bodových grup – jednoznačné označení

žádný prvek symetrie kromě identity: C_1

pouze střed symetrie: C_i

pouze rovina symetrie: C_s

pouze jedna osa (= tj. zároveň hlavní osa): grupy C_n

často v kombinaci s n vertikálními rovinami: C_{nv}

speciální případ – lineární molekuly: $C_{\infty v}$

jedna osa s nejvyšší četností, k ní kolmých n dvojčetných os: D_n

často v kombinaci s n vertikálními rovinami a horizontální rovinou: D_{nh}

speciální případ – lineární molekuly: $D_{\infty h}$

více os s velkou četností:

4x C_3 : tetraedrické grupy, plná symetrie T_d

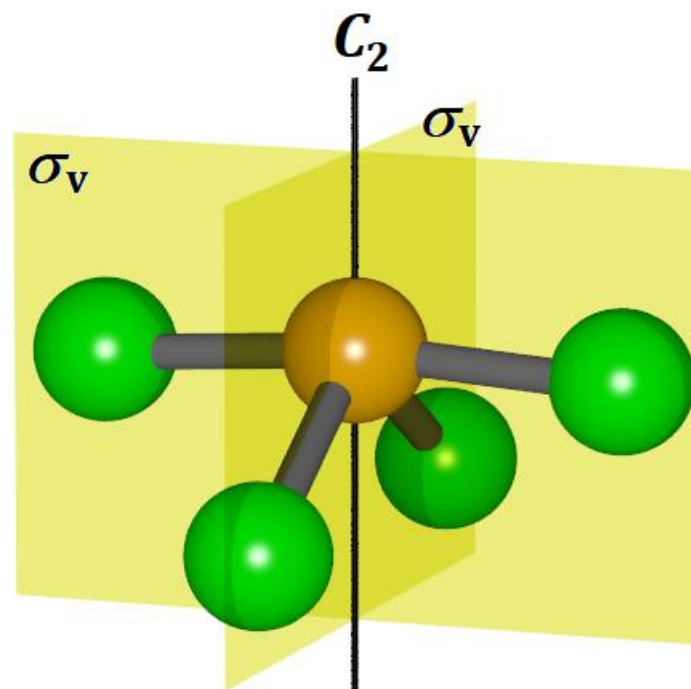
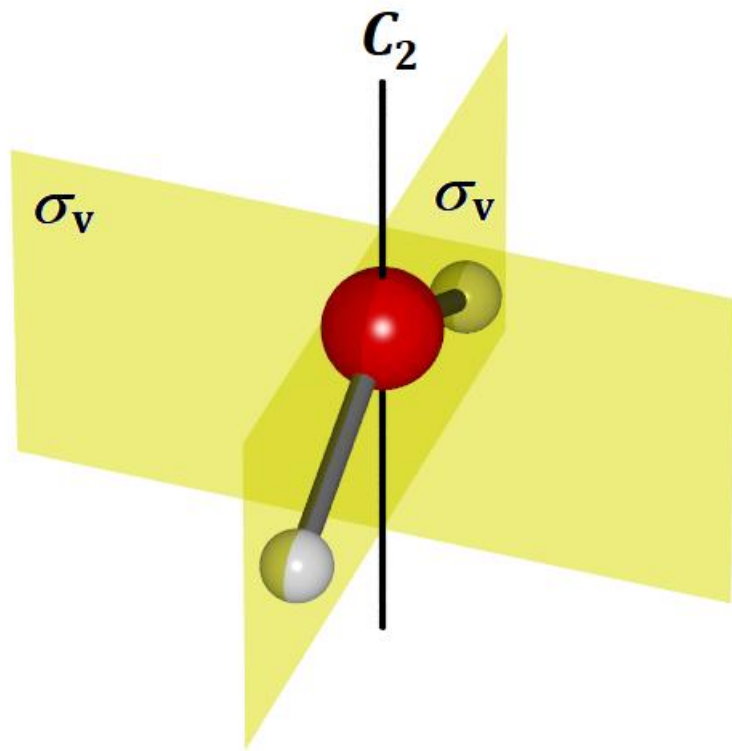
3x C_4 : oktaedrické grupy, plná symetrie O_h

6x C_5 : ikosaedr, I_h



Příklady bodových grup symetrie

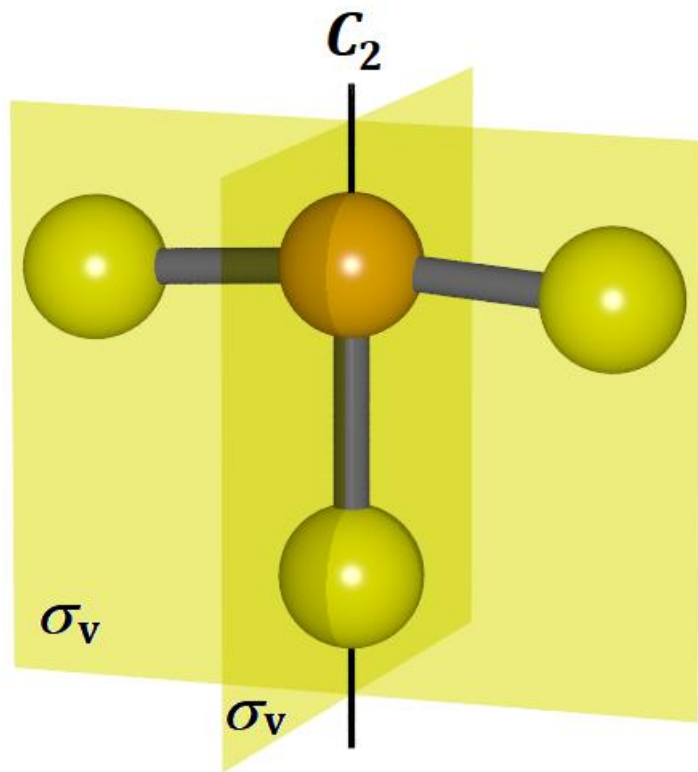
C_{2v}
 $E, C_2, 2 \times \sigma_v$



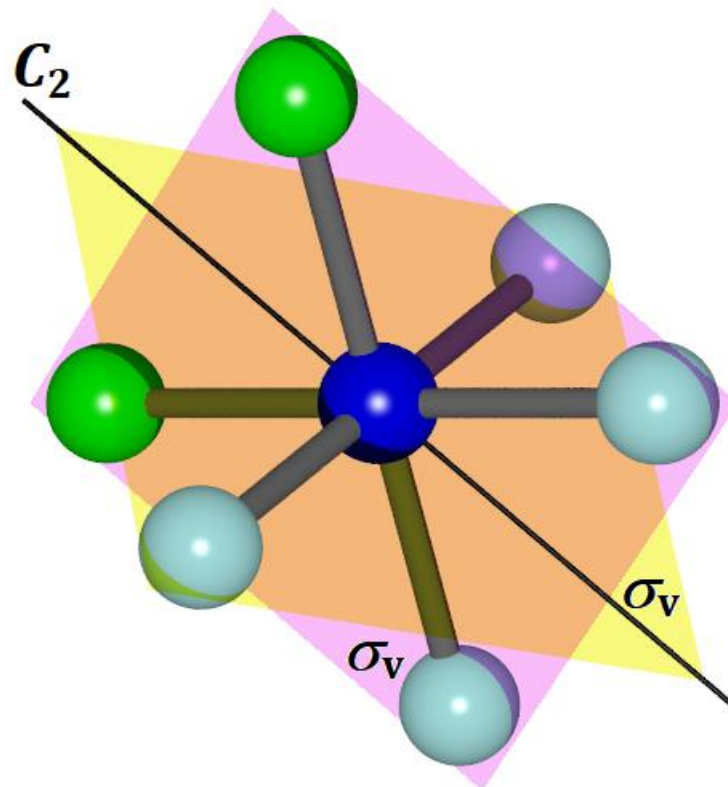
H₂O, H₂S, SCl₂, CCl₂, CH₂Cl₂, SO₂Cl₂ SF₄

Příklady bodových grup symetrie

C_{2v}
 $E, C_2, 2 \times \sigma_v$



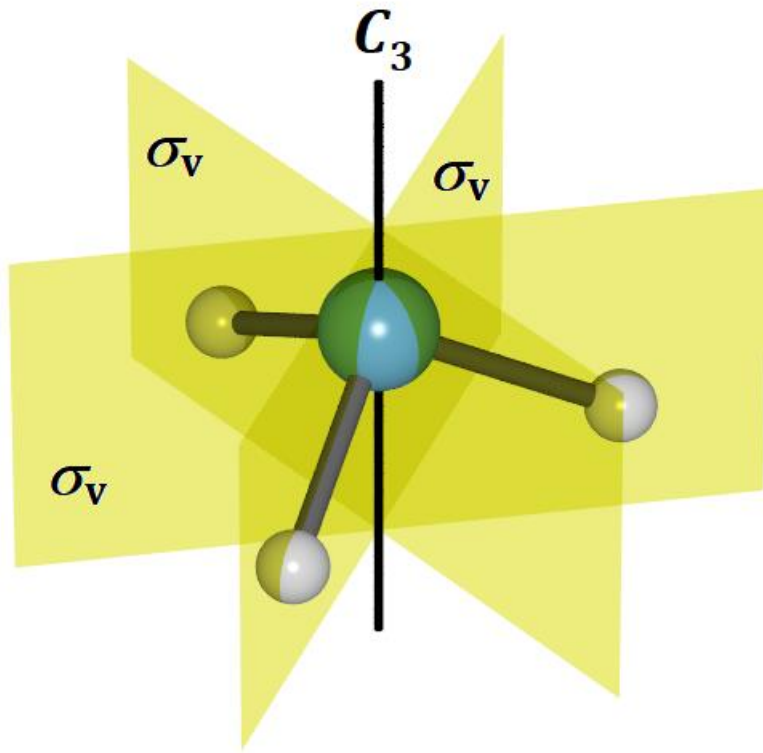
ClF_3



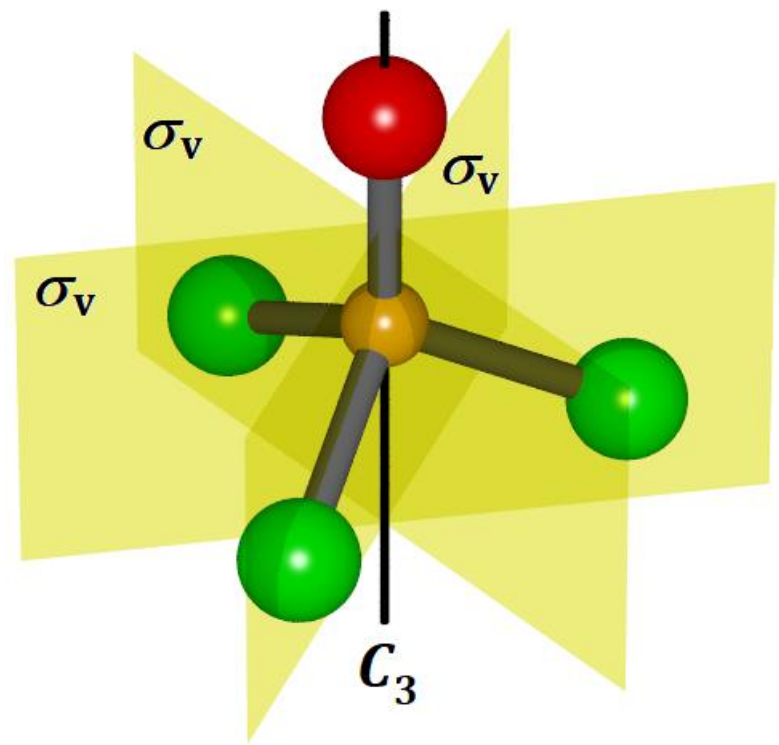
cis- $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Cl}_2]$ (zanedbání H)

Příklady bodových grup symetrie

C_{3v}
 $E, C_3, 3\sigma_v$

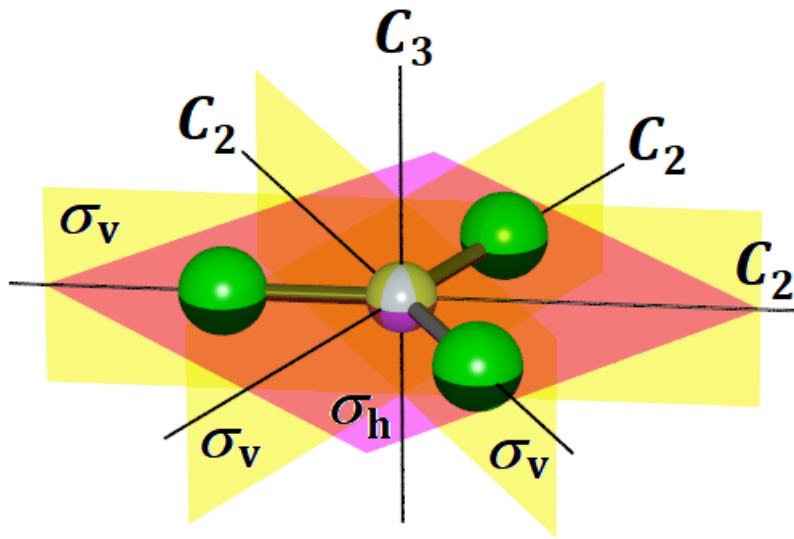
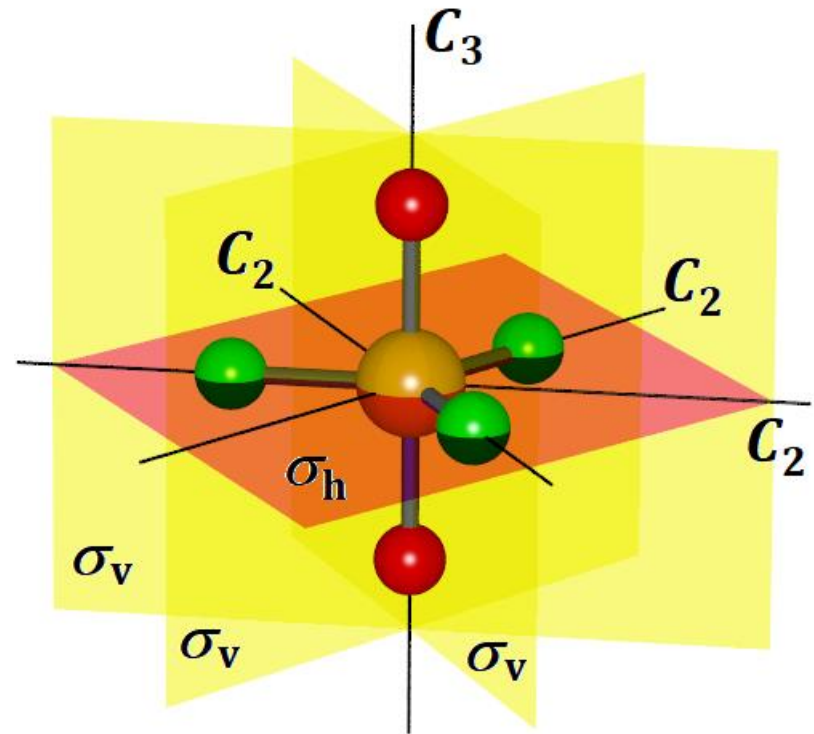


$\text{NH}_3, \text{NF}_3, \text{PH}_3, \text{PF}_3, \text{PCl}_3$



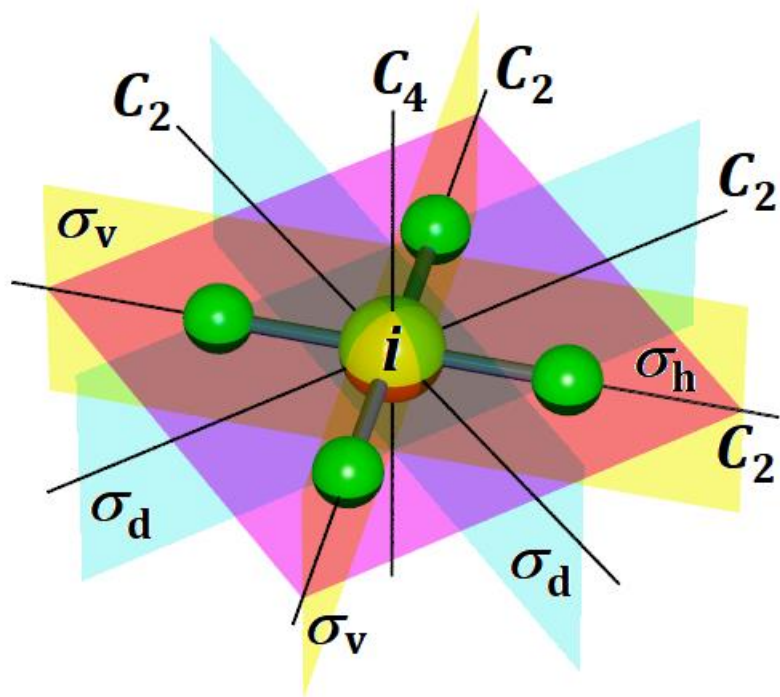
$\text{POCl}_3, \text{CHCl}_3$

Příklady bodových grup symetrie

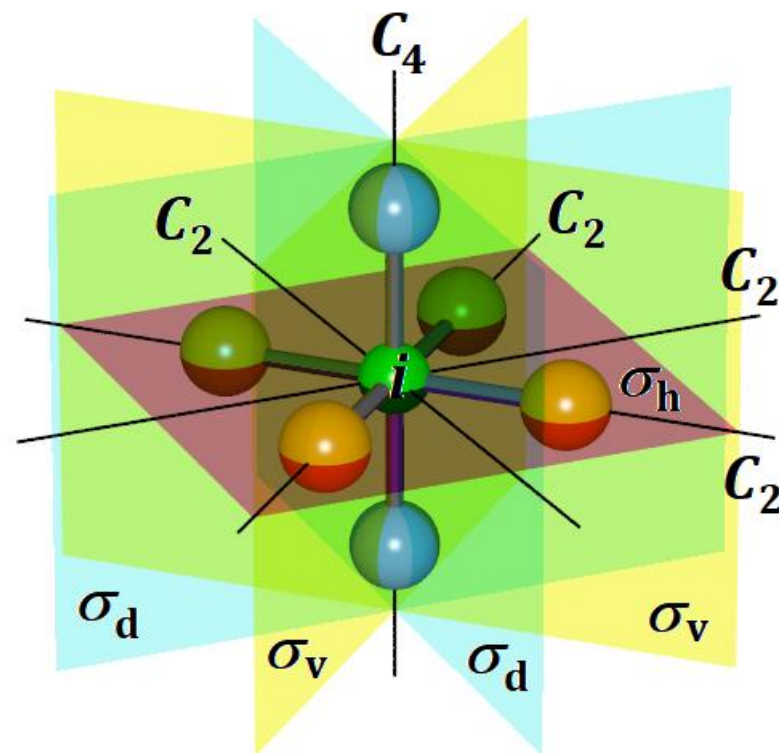
 D_{3h}
 $E, C_3, 3 \times C_2, 3 \times \sigma_v, \sigma_h$

 $\text{BF}_3, \text{NO}_3^-, \text{CO}_3^{2-}$

 $\text{PF}_5, \text{PCl}_5, \text{trans-PCl}_3\text{F}_2$

Příklady bodových grup symetrie

D_{4h}
 $E, i, C_4, 4 \times C_2, 2 \times \sigma_v, 2 \times \sigma_d, \sigma_h$



$\text{XeF}_4, [\text{PtCl}_4]^{2-}$

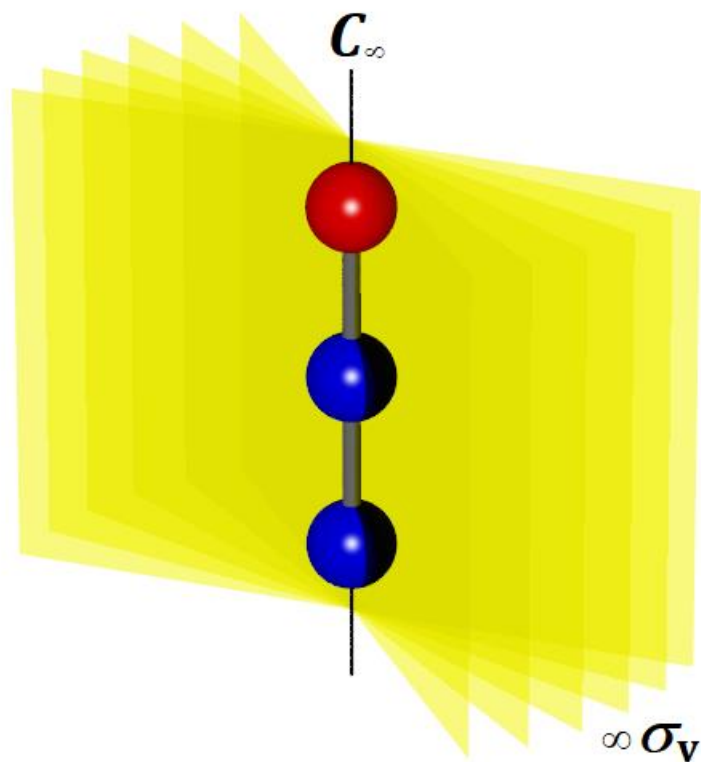


trans- $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Cl}_2]$ (zanedbání H)

Příklady bodových grup symetrie

$$C_{\infty v}$$

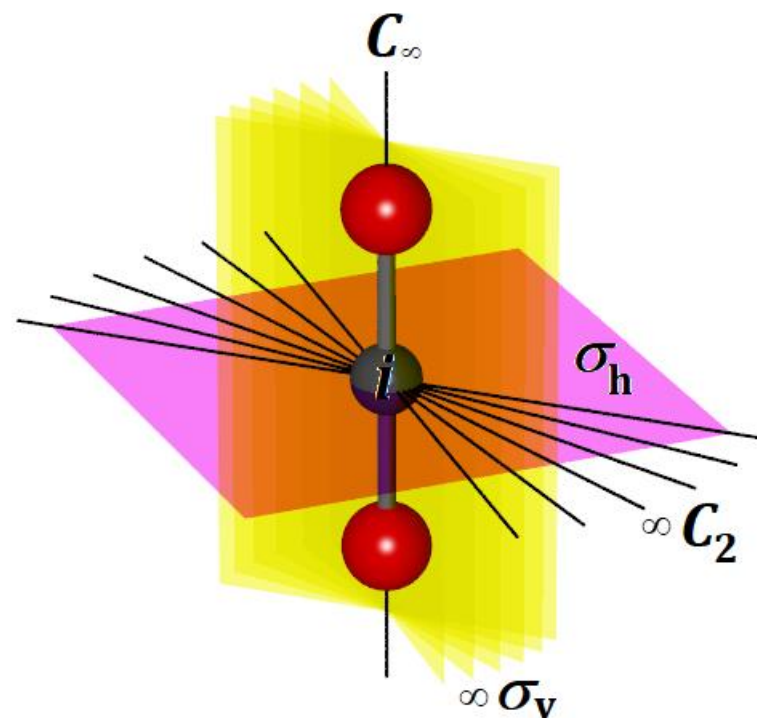
$$E, C_{\infty}, \infty \times \sigma_v$$



HCl, CO, BrCl, HCN, N₂O

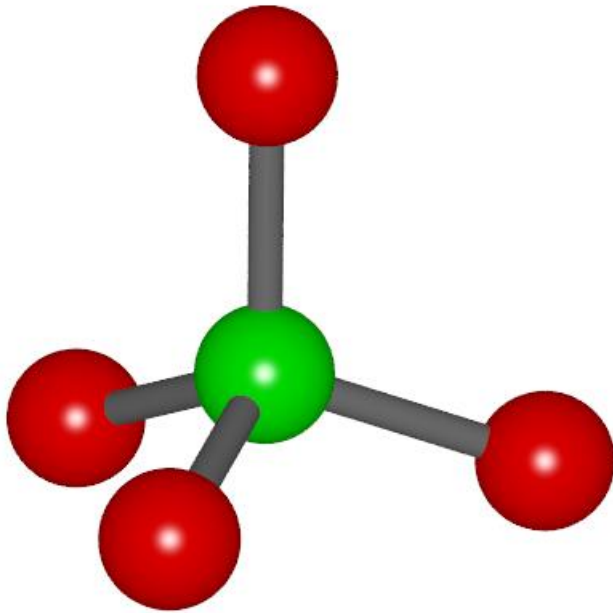
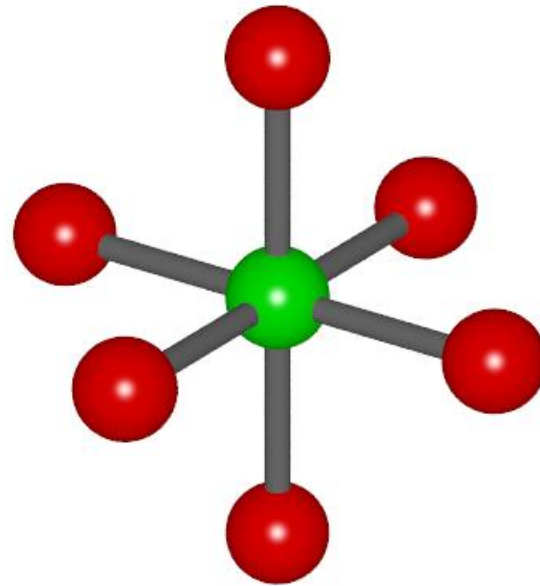
$$D_{\infty h}$$

$$E, i, C_{\infty}, \infty \times C_2, \infty \times \sigma_v, \sigma_h$$

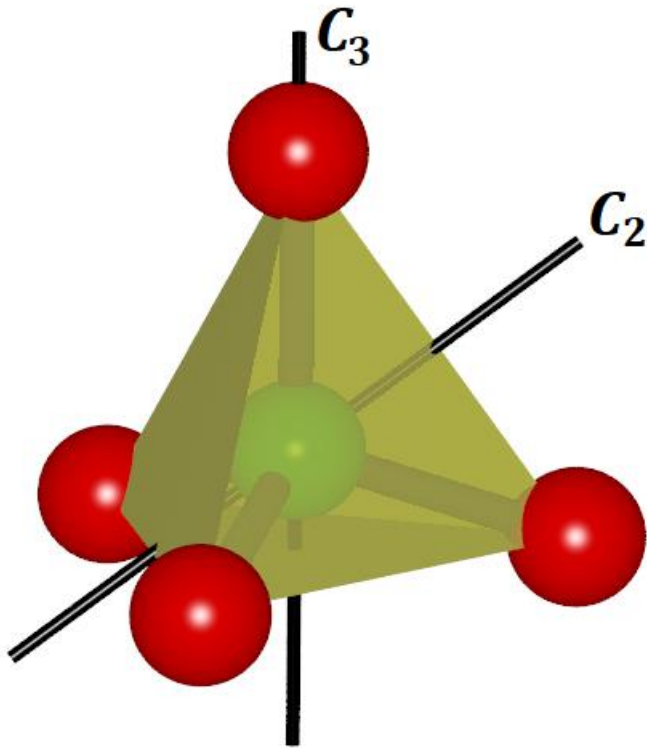
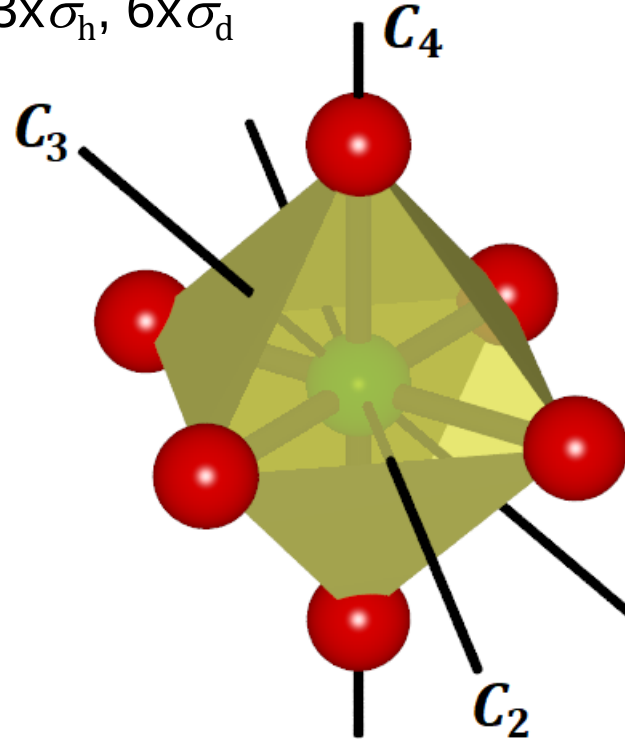


H₂, F₂, O₂, N₂, CO₂, I₃⁻, N₃⁻

Příklady bodových grup symetrie

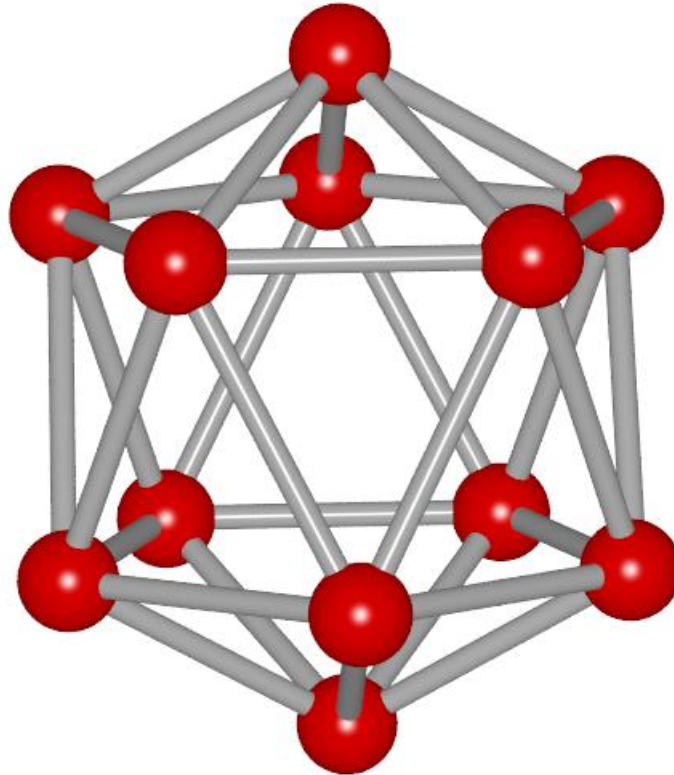
 T_d
 $E, 4 \times C_3, 3 \times C_2, 3 \times S_4, 6 \times \sigma_d$

 $\text{CH}_4, \text{SiF}_4, \text{SiCl}_4, [\text{ZnCl}_4]^{2-}$
 O_h
 $E, i, 3 \times C_4, 4 \times C_3, 6 \times C_2, 4 \times S_8, 3 \times S_4, 3 \times \sigma_h, 6 \times \sigma_d$

 $\text{SF}_6, \text{PF}_6^-, \text{SiF}_6^{2-}, [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{2,3-}$

Příklady bodových grup symetrie

 T_d
 $E, 4 \times C_3, 3 \times C_2, 3 \times S_4, 6 \times \sigma_d$

 $\text{CH}_4, \text{ClO}_4^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{PO}_4^{3-}, [\text{ZnCl}_4]^{2-}$
 O_h
 $E, i, 3 \times C_4, 4 \times C_3, 6 \times C_2, 4 \times S_8, 3 \times S_4, 3 \times \sigma_h, 6 \times \sigma_d$

 $\text{SF}_6, \text{PF}_6^-, \text{SiF}_6^{2-}, [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{2,3-}$

Příklady bodových grup symetrie

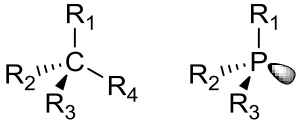
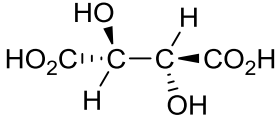
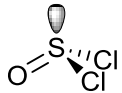
I_h
 $E, i, 6 \times C_5, 10 \times C_3, 15 \times C_2, 6 \times S_{10}, 10 \times S_6, 15 \times \sigma$



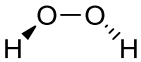
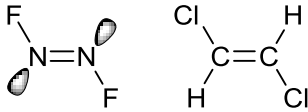
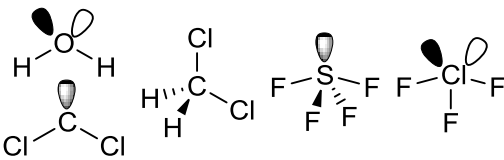
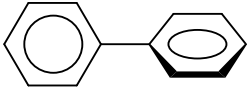
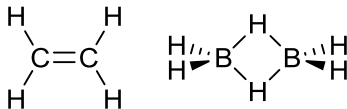
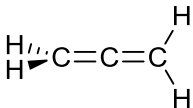
$B_{12}, C_{60}, B_{12}H_{12}^{2-}$



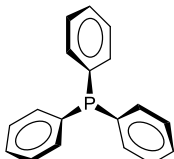
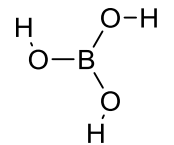
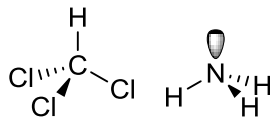
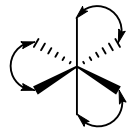
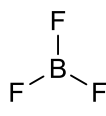
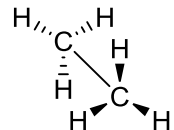
Příklady bodových grup symetrie

Bodová grupa	Prvky symetrie	Tvar	Příklady
C_1	E		CHFCIBr, PMeEtPh, opticky aktivní sloučeniny
C_i	E, i		<i>meso</i> -vinná kyselina
C_s	E, σ		NHF ₂ , SOCl ₂
$C_{\infty v}$	$E, C_{\infty}, \infty \times \sigma_v$	N=N ⁺ =O ⁻	HCl, CO, HCN, N ₂ O, COS
$D_{\infty h}$	$E, i, C_{\infty}, \infty \times C_2,$ $\infty \times \sigma_v, \sigma_h$	O=C=O ⁻ N=N ⁺ =N ⁻	H ₂ , F ₂ , O ₂ , N ₂ , C ₂ H ₂ , CO ₂ , I ₃ ⁻ , N ₃ ⁻

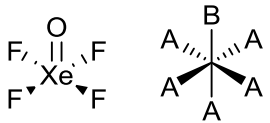
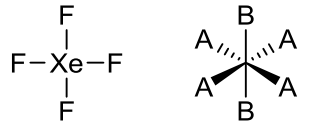
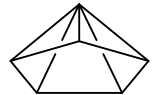
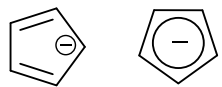
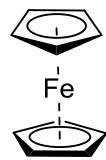
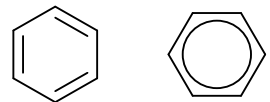
Příklady bodových grup symetrie

Bodová grupa	Prvky symetrie	Tvar	Příklady
C_2	E, C_2		H_2O_2 (kniha), NH_2NH_2
C_{2h}	E, C_2, σ_h		<i>trans</i> - N_2F_2 , <i>trans</i> - $C_2H_2Cl_2$
C_{2v}	$E, C_2, 2 \times \sigma_v$		H_2O, SO_2Cl_2 , CCl_2, SF_4, ClF_3 , <i>cis</i> - $[PtF_2Cl_2]^{2-}$
D_2	$E, 3 \times C_2$		difenyl
D_{2h}	$E, i, 3 \times C_2$, $2 \times \sigma_v, \sigma_h$		N_2O_4, B_2H_6 , <i>trans</i> - $[PtF_2Cl_2]^{2-}$
D_{2d}	$E, 3 \times C_2, S_4, 2 \times \sigma_d$		allen

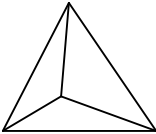
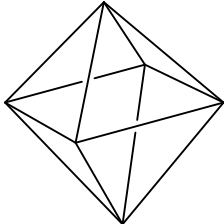
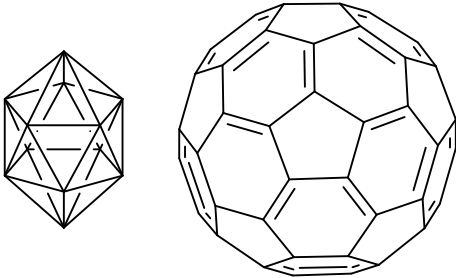
Příklady bodových grup symetrie

Bodová grupa	Prvky symetrie	Tvar	Příklady
C_3	E, C_3		PPh_3
C_{3h}	E, C_3, σ_h		H_3BO_3
C_{3v}	$E, C_3, 3 \times \sigma_v$		$NH_3, POCl_3,$ $CHCl_3$
D_3	$E, C_3, 3 \times C_2$		$[Co(en)_3]^{3+},$ $[Fe(ox)_3]^{3-}$
D_{3h}	$E, C_3, 3 \times C_2,$ $3 \times \sigma_v, \sigma_h$		BF_3
D_{3d}	$E, i, C_3, 3 \times C_2, S_6,$ $3 \times \sigma_d$		C_2H_6 (zkřížená konformace)

Příklady bodových grup symetrie

Bodová grupa	Prvky symetrie	Tvar	Příklady
C_{4v}	$E, C_4, 2\times\sigma_v, 2\times\sigma_d$		XeOF_4 , $[\text{Fe}(\text{NO})(\text{CN})_5]^{2-}$
D_{4h}	$E, i, C_4, 4\times C_2, S_4,$ $2\times\sigma_v, 2\times\sigma_d, \sigma_h$		XeF_4 , $[\text{PtCl}_4]^{2-}$, $\text{trans-}[\text{PtF}_2\text{Cl}_4]^{2-}$
C_{5v}	$E, C_5, 5\times\sigma_v$		XeOF_5^- , IOF_5^{2-}
D_{5h}	$E, C_5, 5\times C_2, S_{10},$ $5\times\sigma_v, \sigma_h$		C_5H_5^- , BrF_7
D_{5d}	$E, C_5, 5\times C_2, S_{10},$ $5\times\sigma_d$		ferrocen
D_{6h}	$E, i, C_6, 6\times C_2, S_6,$ $3\times\sigma_v, 3\times\sigma_d, \sigma_h$		C_6H_6

Příklady bodových grup symetrie

Bodová grupa	Prvky symetrie	Tvar	Příklady
T_d	$E, 4 \times C_3, 3 \times C_2, 3 \times S_4, 6 \times \sigma_d$		$\text{CH}_4, \text{SiCl}_4, \text{ClO}_4^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{PO}_4^{3-}, [\text{ZnCl}_4]^{2-}, \text{P}_4\text{O}_{10}$
O_h	$E, i, 3 \times C_4, 4 \times C_3, 6 \times C_2, 4 \times S_6, 3 \times S_4, 3 \times \sigma_h, 6 \times \sigma_d$		$\text{SF}_6, \text{PF}_6^-, \text{SiF}_6^{2-}, [\text{PtF}_6]^{2-}, [\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ (zanedbání H)
I_h	$E, i, 6 \times C_5, 10 \times C_3, 15 \times C_2, 6 \times S_{10}, 10 \times S_6, 15 \times \sigma$		$\text{B}_{12}, \text{C}_{60}, \text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$