

## RESUMEN/ABSTRACT

La forma en que se distribuyen los átomos en una molécula genera determinadas propiedades moleculares de ésta, el tipo de simetría que guarda esta distribución dará información sobre estas propiedades. La simetría molecular no siempre es sencillo determinar. El análisis de la configuración de las moléculas en el espacio requiere de ver a éstas como un objeto matemático, como un cuerpo geométrico. Esto requiere de la introducción, en el área de la estereoquímica, de conceptos geométricos como son los elementos de simetría y operaciones de simetría. En el presente trabajo se pretende expresar una molécula como una sucesión de operaciones de simetría. Además, mostrar que con esta representación los isómeros constitucionales, de inicio, ya son diferentes debido a su expresión matemática.

## INTRODUCCIÓN

La aplicación de herramientas matemáticas en el campo de la química cada vez se hace más presente. Existen libros cuyo contenido está parcialmente o totalmente dedicado a la aplicación de conceptos matemáticos al estudio de la estructura molecular [3, 4, 5, 6, 7]. También se encuentran artículos científicos que destacan y explican estas aplicaciones [9, 10, 11, 12, 13]. La simetría que guardan algunas moléculas fue motivo de atención ya de tiempo atrás. Dos isómeros con una misma fórmula estructural pero cuyos átomos están enlazados de forma diferente en el espacio dan lugar a diferentes moléculas. En particular, para los estereoisómeros, esto dio lugar a la introducción de isómeros cis-trans, que debido a problemas de los sustituyentes se ha ido abandonado esta nomenclatura para hacer uso de la notación E/Z que, a nuestro criterio, también tiene deficiencias para ubicar a dos isómeros, su diferencia con la nomenclatura cis-trans es la prioridad del sustituyente. Este pequeño asunto se muestra con un ejemplo concreto.

Aclaremos que cuando se escriba la palabra grupo nos referimos a los grupos funcionales del área de la química. En el caso de que se le asocie otro contenido se mencionará. En el presente trabajo se da el concepto de componentes equivalentes en una estructura molecular intentando ampliar el concepto de sustituyentes (átomos o grupos). La definición de átomos equivalentes se puede encontrar en [1]. Aquí explicamos el concepto de componentes equivalentes, y decimos que estos son aquellos que 1) son del mismo tipo, 2) en la molécula en estudio un componente puede ser obtenido del otro por medio de una operación de simetría. Para ilustrar mostramos el siguiente ejemplo donde se considera que la molécula se encuentra en el espacio tridimensional. Ver fig. 1.

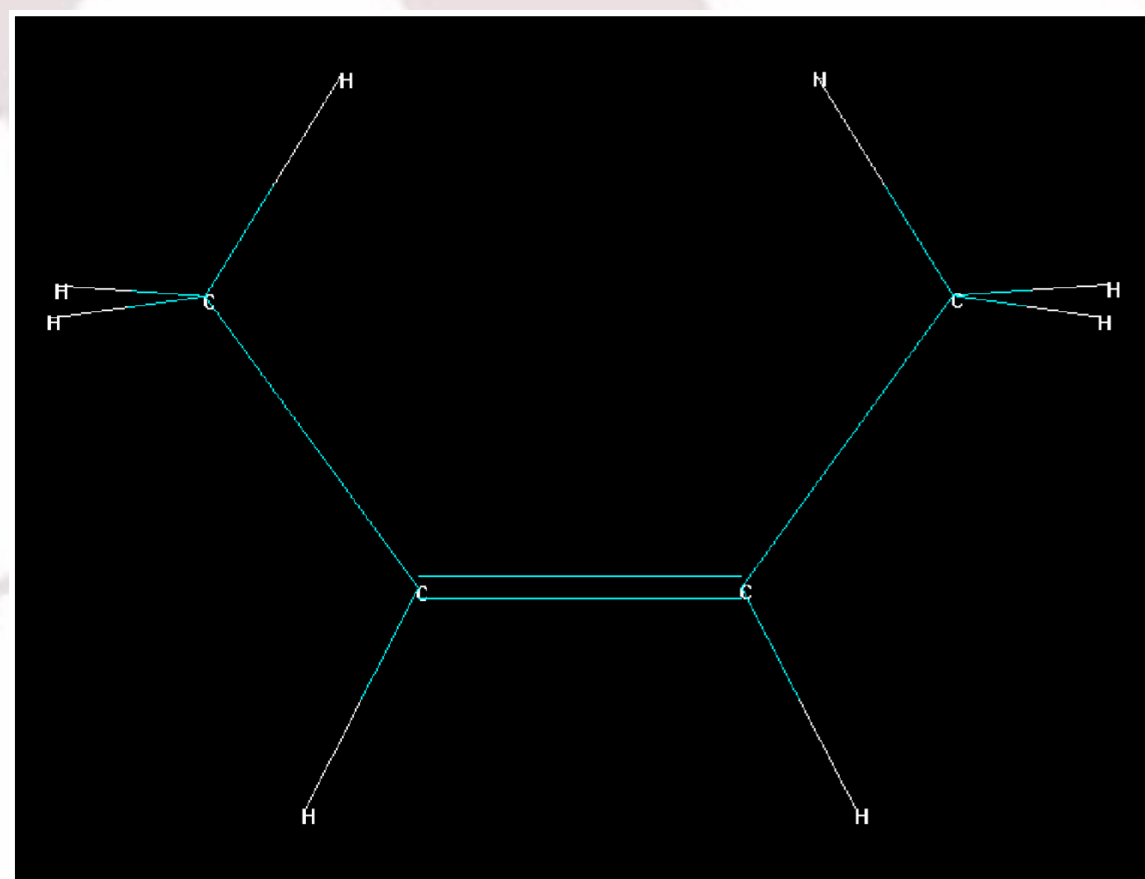


Fig. 1. Molécula C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

## METODOLOGÍA

En el presente trabajo llamamos molécula a un conjunto finito de puntos conectados y distribuidos en el espacio tridimensional. Este conjunto de puntos a su vez se dividirá en subconjuntos cuyos componentes de cada uno tendrán características propias, y su diferencia consistirá en su posición en el espacio respecto a un sistema de referencia. Considerando la simetría de los componentes cada subconjunto aún puede dividirse. Así, por ejemplo, la molécula H<sub>2</sub>O está formado por dos conjuntos A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub> cuyos componentes se señalan a continuación

$$A_1 = \{2 \text{ Hidrógenos}\} = \{h^1, h^2\}; A_2 = \{1 \text{ Oxígeno}\} = \{o^1\}$$

En la notación anterior se enumeran los puntos del mismo tipo, el subíndice superior lo representa. En el caso de que haya muchos puntos del mismo tipo se usa la notación:

$$\{x^j, j = \overline{1, n}\}$$

lo cual indica que hay n puntos del mismo tipo.

La molécula CH<sub>4</sub> está formado por dos conjuntos A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, los cuales son

$$A_1 = \{1 \text{ Carbono}\} = \{c^1\}; A_2 = \{4 \text{ Hidrógenos}\} = \{h^j, j = \overline{1, 4}\}$$

Las transformaciones son matrices con las cuales se realizan las operaciones de simetría. La expresión matemática de las matrices se puede hallar en la literatura [8]. La notación para estas operaciones son las usadas en [1] y son las siguientes:

TABLA 1.  
ELEMENTOS DE SIMETRÍA, OPERACIONES DE SIMETRÍA Y SUS SIMBOLOS.

Elemento de simetría	Operación de simetría	Símbolo
Punto	Inversión	<i>i</i>
Plano	Reflexión	$\sigma, E$
Eje	Rotación	<i>C</i>
Eje impropio	Rotación más Reflexión	<i>S</i>

Hablemos un poco sobre su contenido. La transformación identidad se denota con la letra *E*. Explicamos las operaciones *C*,  $\sigma$ , *i*, *S*.

El símbolo general de la rotación es *C<sub>n</sub>* donde el subíndice significa que se rota el componente un ángulo  $\frac{2\pi}{n}$  en dirección antihorario. Así, la expresión *C<sub>2</sub>* significa que se rota el componente un ángulo  $\frac{2\pi}{2} = \pi$ .

La operación de reflexión la denotamos con el símbolo  $\sigma$ , con un subíndice inferior señalamos el plano correspondiente de la operación. Por ejemplo, una reflexión respecto al plano *YZ* lo representaremos de la siguiente manera:

$$\sigma_{YZ}$$

La operación de inversión *i* es una operación de simetría respecto a un punto, y esta puede ser sustituida por la operación *S<sub>2</sub>* que se explica a continuación.

El símbolo general para el eje impropio es *S<sub>n</sub>* y consiste en una rotación un ángulo  $\frac{2\pi}{n}$  seguido de una operación de reflexión a un plano perpendicular al eje de rotación. Si consideramos que se aplica una rotación respecto al eje *Z*, entonces *S<sub>2</sub>* significa una operación de rotación respecto al eje *Z* un ángulo  $\pi$  seguido de una operación de reflexión respecto al plano *XY*. Para más información se puede consultar [1].

En nuestro estudio el eje de rotación será siempre el eje *Z* si no se menciona otra indicación.

Los componentes de la molécula los representaremos con las letras: *a, b, c, ...* dependiendo de la letra con que se simboliza el componente. Por ejemplo, el Hidrógeno con la letra *h*, el Oxígeno: *o*, etc

La forma general de las matrices es

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

que al aplicarla a algún componente  $a^i = (a_1^i, a_2^i, a_3^i)$  de la molécula, la operación tendrá la forma

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^i \\ a_2^i \\ a_3^i \end{pmatrix}$$

transformando el componente  $a^i = (a_1^i, a_2^i, a_3^i)$  en uno simétrico a él:  $a^2 = (a_1^2, a_2^2, a_3^2)$ , es decir,

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^i \\ a_2^i \\ a_3^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^2 \\ a_2^2 \\ a_3^2 \end{pmatrix}$$

Como se escribió en la expresión anterior, los componentes de la molécula se representaran como  $a^j = (a_1^j, a_2^j, a_3^j)$ , es decir, como un punto en el espacio con coordenadas  $(a_1, a_2, a_3)$ .

## RESULTADOS

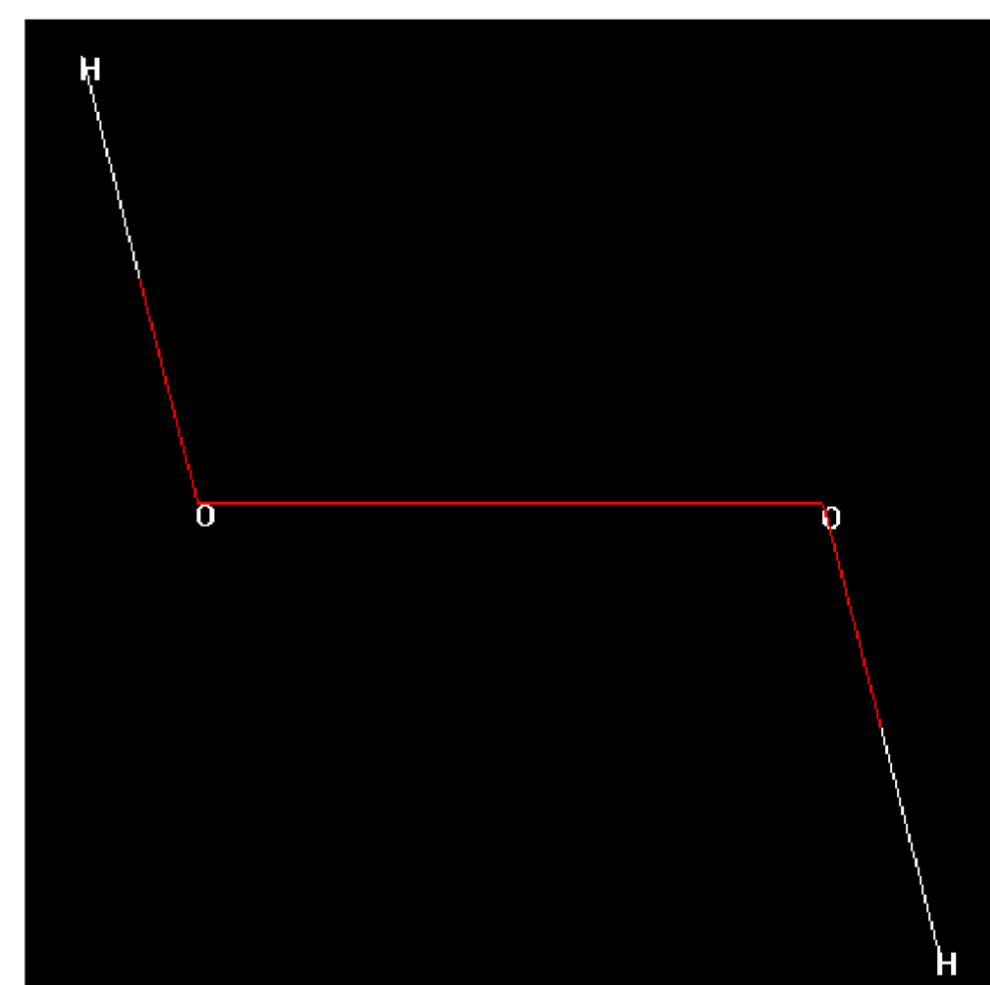


Fig. 2. Molécula H<sub>2</sub>O.

Iniciemos analizando una molécula sencilla, la molécula del agua oxigenada H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Ver fig. 2. El hidrógeno lo representaremos con la letra *h* y el oxígeno con la letra *o*. Considerando que podemos manejar los ejes del sistema coordenado, tomemos el plano *XY* en dirección del enlace *O - O*, y como punto de referencia el origen con coordenadas (0,0,0) a la mitad del enlace. Coloquemos un átomo de oxígeno en el punto  $o^1 = (o_1^1, o_2^1, o_3^1) = (o_1^1, 0, 0)$  y un átomo de hidrógeno  $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (h_1^1, 0, h_3^1)$ . Aplicando el siguiente conjunto de operaciones se forma la estructura molecular en estudio.

$$T_1\{o^1\} + T_3\{h^1\} \quad (3)$$

La operación *T<sub>1</sub>* es una reflexión a través del plano *YZ* con la cual obtenemos el elemento  $o^2$  a partir del elemento  $o^1$ . *T<sub>2</sub>*, *T<sub>3</sub>* son también operaciones de reflexión. *T<sub>2</sub>* se aplica respecto al plano *YZ*, mientras que la operación *T<sub>3</sub>* se aplica respecto al plano *XY*. En otras palabras:  $T_1 = T_2 = \sigma_{YZ}$ ;  $T_3 = \sigma_{XY}$ . Como la obtención del elemento  $h^2$  es resultado de la aplicación sucesiva de las transformaciones *T<sub>2</sub>* y *T<sub>3</sub>*, escribiremos esta composición de operaciones como una sola que representamos como *T*:

$$T_3\{T_2\{h^1\}\} = (T_3 \circ T_2)\{h^1\} = T\{h^1\}$$

Por tanto, (3) será representada como

$$T_1\{o^1\} + T\{h^1\}$$

Desglosamos éste ejemplo. Presentamos las matrices y los respectivos elementos de simetría. Los números que aparecen en el desglose representando la posición de los componentes no son los que en realidad deben ser. Solamente hacemos uso de ellos debido a la funcionalidad del paquete computacional que ocupamos, pero estos pueden ser cambiados en cualquier momento.

Obtenemos el componente simétrico de  $o^1$ .

Las matrices de reflexión respecto a los planos *XY* y *YZ* son

$$\sigma_{XY} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{YZ} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

respectivamente. La matriz identidad tiene la forma:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Aplicamos  $\sigma_{YZ}$  al componente  $o^1 = (o_1^1, 0, 0) = (1, 0, 0)$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

y obtenemos su simétrico  $o^2 = (-o_1^1, 0, 0) = (-1, 0, 0)$ .

Para hallar el componente simétrico de  $h^1$  procederemos de dos maneras, señalando que la primera de ellas no la consideraremos pues obtenemos componentes de paso que no forman parte de la estructura pero solamente por detalle la explicamos. La primera manera es aplicando sucesivamente dos operaciones de reflexión. En la segunda manera multiplicamos dichas matrices para aplicar una sola operación, obteniendo el mismo resultado.

Y bien, aplicamos  $\sigma_{YZ}$  al componente  $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (1.5, 0, -1)$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Este es el momento en que obtenemos un componente de paso que no forma parte de la estructura molecular. A éste componente de paso ahora aplicamos la operación  $\sigma_{XY}$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

obteniendo el resultado requerido.

Explicamos la segunda forma. Multiplicamos las dos matrices  $\sigma_{XY} \circ \sigma_{YZ}$  y obtenemos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Aplicamos esta nueva matriz al punto inicial  $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (1.5, 0, -1)$

## CONCLUSIONES

Como se señaló en el desarrollo del presente escrito, una molécula puede tener más de un conjunto de simetrías. Dependiendo del conjunto elegido, el número de operaciones varía considerando los componentes simétricos. Es de interés aquella representación que proporcione más información sobre sus propiedades. Por otro parte, para resaltar la utilidad de la expresión matemática para las estructuras moleculares, escribiremos la expresión (4) de forma más compacta. Recordemos que esta expresión tiene la forma

$$T_1\{h^1\} + T_2\{h^4\} + T_3\{c^1\} + T_4\{c^2\}$$

Usando la notación sigma, escribimos:

$$\sum_{k=1}^4 T_k\{a^k\}$$

donde  $a^1 = h^1$ ;  $a^2 = h^4$ ;  $a^3 = c^1$ ;  $a^4 = c^2$

Como también se mencionó, no todas las moléculas tienen componentes simétricos; pero en la mayoría de las veces esta simetría está escondida, es una simetría escondida al ojo humano pero que con herramientas matemáticas es posible hallarla, como es el caso del último ejemplo analizado.

## REFERENCIAS

- [1] Cotton F. B. Chemical Applications of Group Theory. 1990. USA.
- [2] Leroy Wade. Química Orgánica. 2004. España.
- [3] Zorkii P.M., Afonina N.N. Simetría Molecular y de Cristales. 1979. URSS.
- [4] Porai-Koshitsa M.A. Simetría Molecular y Estructuras Cristalinas. 1986. URSS
- [5] David J. Willock. Milecyllau Symmetry. 2009. United Kingdom.
- [6] Donald A. McQuarrie., John D. Simon. Physical Chemistry: a molecular approach. 1997. USA.
- [7] Trinajstić, N. Chemical Graph Theory. 1992. CRC Press. USA.
- [8] Modenov P. S. Geometría Analítica. 1969. Ed. Ciencia. URSS.
- [9] M. Ramírez, I. Ochoa. The Use of Transformations for a Better Correlation and Prognosis of Physicochemical Properties of Benzene Derivatives. Ingeniería y Tecnología Facultad de Ingeniería BUAP. Año 9. No. 19. Octubre 2013-Marzo 2014. Puebla, México.
- [10] Bulanova, A. V.; Kharitonova, A. G.; Row, K. H. Connection of Topological Characteristics with Physicochemical Parameters of Benzoic Acid Derivatives. Revista de la Universidad de Samara, Rusia. No. 2(36). 2005. Rusia.
- [11] Mario Ramírez Mendoza, Iaias Ochoa Landín, Ma. Guadalupe Hernández Linares. Aplicación de herramientas matemáticas para el análisis de compuestos químicos. Ingeniería y Tecnología Facultad de Ingeniería BUAP. V. 1, No. 21., 2015. Puebla, México.
- [12] A. Nandy, M. Harle, S. Basak. Mathematical Descriptors of DNA sequences: development and applications. General Papers. Arkivie. 2006.
- [13] M. Randich, J. Zupan, A. Balaban, D. Vikić-Topić, D. Plavšić. Graphical Representation of Proteins. Chem. Rev. 2011.