Övning 4.14 - Metanmolekylen

February 1, 2019

Molekylen har fullständigt tetraedrisk symmetri. Dvs att väteatomen ligger i hörnen på en regelbunden tetraeder och kolatomen ligger i tetraederns tyngdpunkt. Varje sida i tetraedern har 3 väteatomer som bildar en plan liksidig triangel. Vi kan därmed välja att placera tre väteatomen i molekylen så att de finns på planet $z = 0$ och bildar en liksidig triangel, som vi kan placera så att tyngdpunkten på triangeln är i origo. Dvs:

$$\begin{aligned} H_1 &: (1,0,0) \\ H_2 &: \left(\cos\frac{2\pi}{3}, \sin\frac{2\pi}{3}, 0\right) = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right) \\ H_3 &: \left(\cos\frac{4\pi}{3}, \sin\frac{4\pi}{3}, 0\right) = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right) \end{aligned}$$

Kolatomen och den fjärde väteatomen ligger på en normallinje till planet $z = 0$ genom tyngdpunkten för (H_1, H_2, H_3), dvs origo. Alltså

$$\begin{aligned} C &: (0,0,a) \\ H_4 &: (0,0,b) \end{aligned}$$

Alla bindningar $C - H_k$ har samma storlek och dessutom ligger kolatomen som sagt vid tetraederns tyngdpunkt. Detta innebär att $|H_1 - C| = |H_2 - C| = |H_3 - C|$ och:

$$\begin{aligned} |H_1 - C| &= \sqrt{1 + a^2} = b - a = |H_4 - C| \\ (0,0,a) &= \frac{1}{4}(H_1 + H_2 + H_3 + H_4) = \frac{1}{4}(0,0,b) \end{aligned}$$

Alltså $b = a + \sqrt{1 + a^2} = 4a$. Ur detta fås $a^2 = \frac{1}{8}$, och vidare att $(a, b) = \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}, \sqrt{2}\right)$, och $b - a = \frac{3}{4}\sqrt{2}$. Vinkeln mellan två $C - H_k$ bindningar kan räknas med hjälp av skalärprodukt, t ex : $\overline{CH_1} \cdot \overline{CH_4} = \left|\overline{CH_1}\right| \left|\overline{CH_4}\right| \cos\varphi$, vilket också kan skrivas som $= \frac{9}{8}\cos\varphi = -(b-a)a = -\frac{3}{4}\sqrt{2}\frac{1}{2\sqrt{2}}$,vilket ger $\cos\varphi = -\frac{1}{3}$ och $\varphi = 109.47°$.

I boken föreslår man att placera väteatomerna i $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$. Då finns tyngdpunkten för denna triangeln i $\frac{1}{3}(1,1,1)$ medan kolatomen och den resterande väteatomen finns längs linjen $l : t(1,1,1)$, dvs $C : c(1,1,1)$ och $H_4 : d(1,1,1)$. Villkoren att alla bindningar $C - H_k$ har samma storlek och att kolatomen ligger vid tetraederns tyngdpunkt kan uttryckas med de här koordinaterna i stället och leder till samma resultat.