Chương 4

ỨNG DỤNG LÍ THUYẾT NHÓM TRONG CẤU TẠO CHẤT

4.1 Lí thuyết tóm lược

Lí thuyết nhóm về đối xứng phân tử giữ một vị trí quan trọng đặc biệt đối với hoá học lượng tử. Vì vậy nắm chắc khái niệm về đối xứng sẽ giúp chúng ta hiểu sâu sắc hơn về bản chất cấu tạo phân tử.

4.1.1 Khái niệm về đối xứng

Một vật thể hoặc một phân tử gọi là đối xứng nếu sau khi ta thực hiện một số phép biến đổi nào đó, ta lại được vật thể hay phân tử đó không khác về mặt vật lí so với chúng ở trạng thái ban đầu.

Có thể nói ứng với một cấu trúc hình học xác định, phân tử có tính đối xứng xác định.

4.1.2 Các yếu tố đối xứng và các phép đối xứng phân tử

Do phân tử là một hệ hữu hạn nên chúng tồn tại hai phép đối xứng cơ bản là:

a) Phép quay hệ thống một góc xác định chung quanh trục đối xứng.

b) Phép phản chiếu qua một mặt phẳng xác định.

Ứng với 2 phép đối xứng này người ta có các yếu tố đối xứng tương ứng sau:

+ Trục đối xứng và phép quay C_n. Đó là phép quay chung quanh một trục với góc bằng $\frac{2\pi}{n}$.

+ Mặt đối xứng và phép phản chiếu σ.

Khi phản chiếu các nguyên tử đi qua một mặt phẳng phân tử ta có phép phản chiếu σ. Bằng phép phản chiếu này các hạt nhân nguyên tử trong phân tử đều đưa về những vị trí tương đương dẫn đến một mặt đối xứng σ với 3 trường hợp.

* σ_h- mặt đối xứng thẳng góc với trục đối xứng chính.

* σ_v- mặt đối xứng chứa trục đối xứng chính.

* σ_d- mặt đối xứng đi qua đường chéo.

+ Quay quanh một trục rồi phản chiếu qua một mặt phẳng thẳng góc với trục S_n. Phép quay C_n quanh một trục đi qua phân tử với góc $\frac{2\pi}{n}$ và phản chiếu các nguyên tử qua một mặt phẳng thẳng góc với trục dẫn tới phép phản chiếu quay S_n.

+ Tâm đối xứng và phép đảo chuyển I.

Phép đối xứng này sau khi thực hiện sẽ không có một sự thay đổi nào. Nói chung bất kì một phân tử nào cũng đều có đối xứng đơn vị (đối xứng hoàn nguyên I).

4.1.3 Khái niệm về nhóm

a) Định nghĩa

Người ta coi một nhóm là tập hợp G các phần tử A, B, C... kí hiệu là G [A, B, C...] và tuân theo 4 điều kiện (luật hợp thành) sau:

* Tích AB của 2 phần tử A, B bất kì $\in$ G cũng là phần tử $\in$ G, nghĩa là phép nhân có tính chất kín.

* Phép nhân trong nhóm có tính kết hợp:

$(AB)C = A(BC)$ với mọi A, B, C $\in$ G

* Trong nhóm có một phần tử duy nhất là phần tử đơn vị, kí hiệu là E sao cho:

$AE = EA = A \ \forall \ A \in G$

* Mỗi phần tử A thuộc G có một phần tử nghịch đảo, kí hiệu là A^{-1} cũng thuộc G sao cho:

$AA^{-1} = A^{-1}A = E$

b) Nhóm điểm đối xứng

Tập hợp các phép đối xứng với phân tử thỏa mãn 4 điều kiện của nhóm và có ít nhất một điểm không đổi sẽ lập thành nhóm điểm đối xứng.

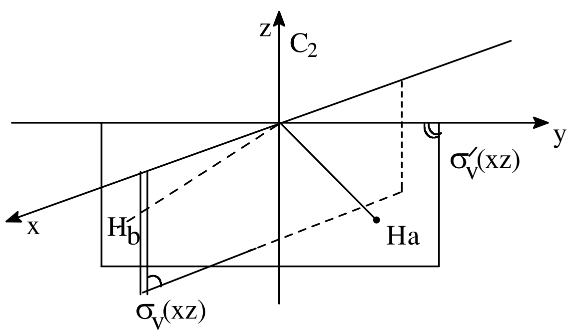
Có nhiều loại nhóm điểm đối xứng khác như sau:

Các nhóm C_n, S_n, C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nh}, O_h... (xem các bảng đặc biểu ở phần phụ lục).

4.1.4 Biểu diễn nhóm

(Ở phần này các kiến thức về ma trận và định thức sẽ được áp dụng)

Bảng nhân nhóm:



Phân tử H_2O

Thông thường người ta biểu diễn các phép đối xứng trong nhóm điểm bằng các ma trận unita.

Ví dụ nhóm C_{2v} đối với phân tử H_2O.

Các ma trận biểu diễn các phép đối xứng E, C_2, σ_v, $\sigma_{v'}$ thực hiện lên một điểm có tọa độ x, y sẽ là:

$$E\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix} \qquad \text{tức là} \qquad E\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

$$C_2\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\end{pmatrix} \qquad \text{tức là} \qquad C_2\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\-y\end{pmatrix} \qquad \text{tức là} \qquad \sigma_v\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v^{/}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\y\end{pmatrix} \qquad \text{tức là} \qquad \sigma_v^{/}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

Như vậy với 4 phép đối xứng E, C_2, σ_v, $\sigma_v^{/}$ ứng với một bộ gồm 4 ma trận:

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

làm thành một biểu diễn (kí hiệu là Γ) của nhóm C_{2v}.

Từ những phép dẫn giải ở trên ta có thể nói: Biểu diễn nhóm là một bộ các ma trận cùng cấp biểu diễn các phép đối xứng của nhóm, thỏa mãn bảng nhân nhóm:

Ví dụ: $\sigma_v^{/}.\sigma_v = C_2 \quad \begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

Bảng nhân nhóm C_{2v}

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	E

4.1.5 Biểu diễn khả quy (KQ) và biểu diễn bất khả quy (BKQ)

a) Biểu diễn khả quy (viết tắt-KQ, kí hiệu là: Γ)

Đây là biểu diễn mà tất cả các ma trận A của nó có thể đưa về dạng chéo hay giả chéo, tức là tổng trực tiếp của 2 hay nhiều ma trận có cấp nhỏ hơn nhờ một phép biến đổi đồng dạng.

$$XAX^{-1} = A' = \begin{pmatrix} A_1' & & 0 \\ & A_2' & \\ 0 & & A_3' \end{pmatrix}$$

A- ma trận bất kì của biểu diễn Γ;

A'- ma trận đồng dạng với ma trận A;

A_1', A_2', A_3'... ma trận cấp nhỏ hơn A.

Như vậy biểu diễn Γ là khả quy nếu có thể quy được thành một tổng trực tiếp nhiều biểu diễn có số chiều nhỏ hơn

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 ...$$

b) Biểu diễn bất khả quy (kí hiệu Γj)

Đây là một biểu diễn không thể quy được thành biểu diễn có số chiều nhỏ hơn nhờ một phép biến đổi đồng dạng.

c) Đặc biểu của biểu diễn

Một biểu diễn KQ ta có thể chéo hóa các ma trận để quy thành một tổng trực tiếp các biểu diễn BKQ.

$$\Gamma = \sum a_i \Gamma_i$$

a_i là số lần biểu diễn BKQ có mặt trong biểu diễn KQ.

Đặc biểu của biểu diễn đối với phép đối xứng R, kí hiệu là $\chi(R)$, tức là vết của ma trận biểu diễn phép R.

Để tính hệ số a_i ta áp dụng biểu thức sau:

$$a_i = \frac{1}{g}\sum h_R \chi(R)\chi_i(R),$$

trong đó:

g- bậc của nhóm điểm đối xứng;

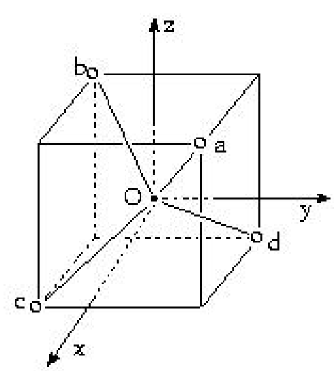
h_R- bậc của lớp (số nguyên tố có trong một lớp);

$\chi(R)$- đặc biểu của biểu diễn KQ;

$\chi_i(R)$- đặc biểu của biểu diễn BKQ đối với phép đối xứng R.

4.2 Bài tập áp dụng

4.1. Áp dụng phương pháp đối xứng hãy xác định các biểu thức toán học tương ứng cho các obitan lai hoá đối với phân tử CH_4 (dạng lai hoá sp^3).



Cốc AO-lai hoả trong
phõn tử CH_4

Trả lời

Đối với phân tử CH_4, 1AO-s và 3AO-2p của cacbon tổ hợp với nhau để tạo ra 4AO-sp^3. Như vậy, mỗi AO-sp^3 có $\frac{1}{4}$ tính chất AO-s và $\frac{3}{4}$ tính chất AO-p hay $\frac{1}{4}$ tính chất của mỗi AO (p_x,p_y,p_z).

Từ điều dẫn luận trên đây đã chỉ ra rằng tổ hợp các hệ số c_i có giá trị tuyệt đối là:

$$\sqrt{\frac{1}{4}} = \frac{1}{2}.$$

Để dễ hình dung dấu của các hàm lai hoá ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 và ϕ_4 ta biểu diễn phân tử CH_4 trên hình lập phương abcd với với hệ toạ độ x, y, z và ở mỗi đỉnh của tứ diện hướng của các trục sẽ là: a (1, 1, 1); b (–1, –1, 1); c (1, –1, –1); d (–1, +1, –1). Các hệ số của các AO-p_x, p_y, p_z sẽ có dấu "+" hay "–" là tuỳ thuộc vào các điểm a, b, c, d.

Từ lập luận này ta dễ dàng viết được các hàm lai hoá:

$$\phi_1 = \phi_a = \phi(1, 1, 1) = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z)$$

$$\phi_2 = \phi_b = \phi(-1, -1, 1) = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z)$$

$$\phi_3 = \phi_c = \phi(1, -1, -1) = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\phi_4 = \phi_d = \phi(-1, +1, -1) = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z)$$

hoặc dưới dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

4.2. Ở trạng thái cơ bản, người ta đã biết phân tử metan có cấu trúc tứ diện đều (dạng AB_4) và cacbon thuộc dạng lai hoá sp^3. Trên cơ sở các hàm obitan lai hoá đã biết hãy:

a) Biểu diễn các obitan đối xứng hoá bằng hình vẽ và bằng biểu thức toán học.

b) Xây dựng giản đồ năng lượng MO cho phân tử CH_4.

Trả lời

a) Ở bài số **4.1** ta đã tìm được các hàm lai hoá cho phân tử CH_4 là:

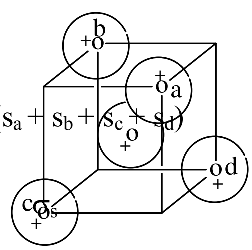
$$\begin{pmatrix} \phi_a \\ \phi_b \\ \phi_c \\ \phi_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

Đây là ma trận unita, nghịch đảo của ma trận này là ma trận chuyển vị, vì vậy các obitan đối xứng hoá có thể viết như sau:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_s \\ \Sigma_x \\ \Sigma_y \\ \Sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_a \\ s_b \\ s_c \\ s_d \end{pmatrix}$$

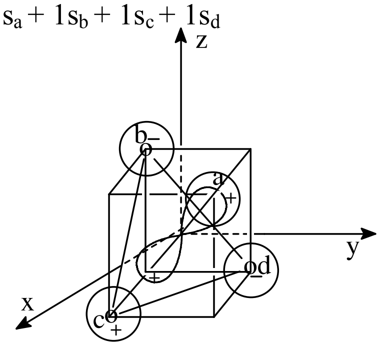
hay:

$$\Sigma_s = \frac{1}{2}(s_a + s_b + s_c + s_d)$$



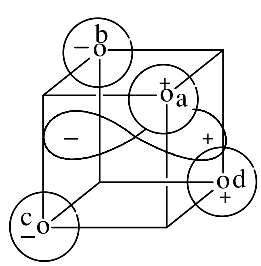
$1s_a + 1s_b + 1s_c + 1s_d$

$$\Sigma_x = \frac{1}{2}(s_a - s_b + s_c - s_d)$$



σ_x

$1s_a + 1s_c - 1s_b - 1s_d$

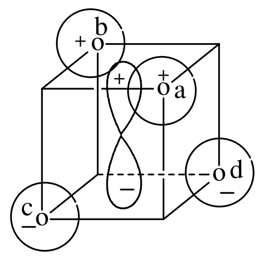


$\sum_y = \frac{1}{2}\ (s_a - s_b - s_c + s_d)$

σ_y

$1s_a + 1s_d - 1s_b - 1s_c$

$\sum_z = \frac{1}{2}(s_a + s_b - s_c - s_d)$



σ_z

$1s_a + 1s_b - 1s_c - 1s_d$

b) Tiếp theo, sự tổ hợp AO-2s của C với tổ hợp đối xứng hoá $\sum_s$ sẽ cho một MO liên kết σ_s và 1 MO phản liên kết σ_s^*

$$\sigma_s = c_1 2s + c_2\Sigma_s \quad ; \quad \sigma_s^* = c_1^{/}\ 2s - c_2^{/}\ \Sigma_s$$

Một cách hoàn toàn tương tự sự tổ hợp AO-2p_x, 2p_y và 2p_z của C với tổ hợp đối xứng hoá Σ_x, Σ_y và Σ_z ta sẽ có:

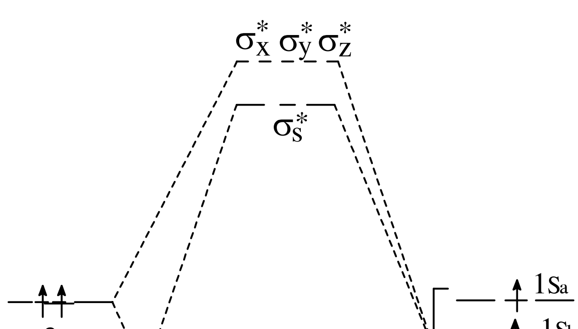
$$\sigma_x = c_3 2p_x + c_4\Sigma_x \quad ; \quad \sigma_x^* = c_3^{/} 2p_x - c_4^{/}\Sigma_x$$

$$\sigma_y = c_5 2p_y + c_6\Sigma_y \quad ; \quad \sigma_y^* = c_5^{/} 2p_y - c_6^{/}\Sigma_y$$

$$\sigma_z = c_7 2p_z + c_8\Sigma_z \quad ; \quad \sigma_z^* = c_7^{/} 2p_z - c_8^{/}\Sigma_z$$

Kết quả này được biểu diễn bằng giản đồ năng lượng MO như sau:

Các obitan	Các obitan	Các obitan
nguyên tử C	phân tử CH_4	nguyên tử H



9

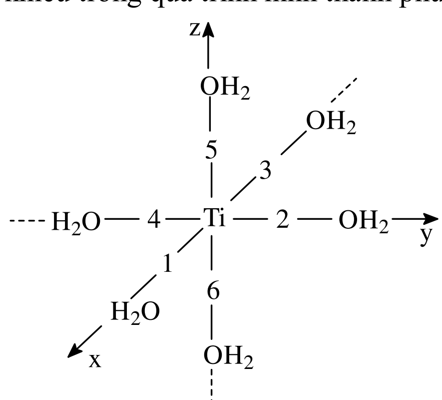
Giản đồ năng lượng các MO của CH_4

4.3. Dựa vào phép đối xứng hãy viết các biểu thức đại số tương ứng cho các obitan lai hoá đối với phức bát diện $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$thuộc dạng lai hoá d^2sp^3.

Trả lời

Từ kiến thức cấu tạo chất đại cương ta biết rằng phức $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$có cấu trúc bát diện. Ion Ti^{3+}có 6 AO là: 3 $d_{x^2-y^2}$, 3 d_{z^2}, 4s và $4p_x$, $4p_y$, $4p_z$ tham gia xen phủ với các AO-phối tử để tạo ra liên kết σ.

Theo hình vẽ này ta thử xem các AO hoá trị d, s và p của Ti^{3+} sẽ tổ hợp như thế nào và các hệ số đóng góp bằng bao nhiêu trong quá trình hình thành phức chất.



Trước tiên, các hàm lai hoá hướng theo trục z được kí hiệu là $\phi(5) = \phi(+z)$ và $\phi(6) = \phi(-z)$. Rõ ràng trong trường hợp này AO-3 d_{z^2}, 4s và $4p_z$ được chọn có phần đóng góp với d_{z^2} là $\frac{2}{6} = \frac{1}{3}$; với s là $\frac{1}{6}$ và với p là $\frac{1}{2}$ (dấu tuỳ thuộc vào các thuỳ của AO). Như vậy ta có thể viết:

$$\phi(5) = \phi(+z) = \frac{1}{\sqrt{3}} d_{z^2} + \frac{1}{\sqrt{6}} s + \frac{1}{\sqrt{2}} p_z$$

$$\phi(6) = \phi(-z) = \frac{1}{\sqrt{3}} d_{z^2} + \frac{1}{\sqrt{6}} s - \frac{1}{\sqrt{2}} p_z$$

Tiếp theo ta xét các obitan lai hoá d^2sp^3 hướng dọc theo trục $4p_x$; các hàm lai hoá được kí hiệu là $\phi(1) = \phi(+x)$ và $\phi(3) = \phi(-x)$. Ở đây phần đóng góp của AO-s là $\frac{1}{6}$ và AO-p_x là $\frac{1}{2}$. Phần đóng góp của các AO-d có phần phức tạp hơn chút ít. Đối với các AO-d_{z^2} đã đóng góp cho AO lai hoá $\phi(5)$ và $\phi(6)$ là $\frac{1}{3} \times 2 = \frac{2}{3}$. Phần còn lại là $\frac{1}{3}$ được chia đều cho cả 4 AO-lai hoá $\phi(1)$, $\phi(2)$, $\phi(3)$ và $\phi(4)$ nên mỗi hàm lai hoá chỉ nhận được $\frac{1}{12}$ phần đóng góp của d_{z^2}. AO-$d_{x^2-y^2}$ hướng dọc theo trục x và y nên phần đóng góp là $\frac{1}{4}$ (dấu phụ thuộc vào thuỳ của AO). Như vậy ta có:

$$\phi(1) = \phi(+x) = \frac{1}{\sqrt{6}} s - \frac{1}{\sqrt{12}} d_{z^2} + \frac{1}{2} d_{x^2-y^2} + \frac{1}{\sqrt{2}} p_x$$

$$\phi(3) = \phi(-x) = \frac{1}{\sqrt{6}} s - \frac{1}{\sqrt{12}} d_{z^2} + \frac{1}{2} d_{x^2-y^2} - \frac{1}{\sqrt{2}} p_x$$

$$\phi(2) = \phi(+y) = \frac{1}{\sqrt{6}} s - \frac{1}{\sqrt{12}} d_{z^2} - \frac{1}{2} d_{x^2-y^2} + \frac{1}{\sqrt{2}} p_y$$

$$\phi(4) = \phi(-y) = \frac{1}{\sqrt{6}} s - \frac{1}{\sqrt{12}} d_{z^2} - \frac{1}{2} d_{x^2-y^2} - \frac{1}{\sqrt{2}} p_y$$

$$\phi(5) = \phi(+z) = \frac{1}{\sqrt{6}} s + \frac{1}{\sqrt{3}} d_{z^2} + \frac{1}{\sqrt{2}} p_z$$

$$\phi(6) = \phi(-z) = \frac{1}{\sqrt{6}} s + \frac{1}{\sqrt{3}} d_{z^2} - \frac{1}{\sqrt{2}} p_z$$

Các AO-lai hoá này cũng có thể được biểu diễn dưới dạng ma trận đại số sau:

$$\begin{pmatrix} \phi(x) \\ \phi(-x) \\ \phi(y) \\ \phi(-y) \\ \phi(z) \\ \phi(-z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ d_{z^2} \\ d_{x^2-y^2} \\ \phi_x \\ \phi_y \\ \phi_z \end{pmatrix}$$

4.4. Khảo sát phân tử phức $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$ người ta biết nó có cấu trúc bát diện, ion Ti^{3+} có các lai hoá dạng d^2sp^3. Căn cứ vào các hàm lai hoá đã xác định ở bài số **4.3** hãy:

a) Biểu diễn các obitan đối xứng hoá bằng hình vẽ và bằng biểu thức toán học.

b) Từ kết quả thu được ở câu a) thiết lập giản đồ MO cho phân tử phức nói trên.

Trả lời

Sử dụng các hàm lai hoá đã xác định được ở bài số **4.3**

$$\begin{pmatrix} \phi(x) \\ \phi(-x) \\ \phi(y) \\ \phi(-y) \\ \phi(z) \\ \phi(-z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ d_{z^2} \\ d_{x^2-y^2} \\ \phi_x \\ \phi_y \\ \phi_z \end{pmatrix}$$

ta nhận thấy đây là ma trận vuông và là ma trận unita. Khi nghịch đảo ma trận này sẽ cho ta ma trận chuyển vị tương ứng. Vậy ta có các obitan đối xứng hoá sau:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_s \\ \Sigma_{z^2} \\ \Sigma_{x^2-y^2} \\ \Sigma_x \\ \Sigma_y \\ \Sigma_\Sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma(x) \\ \sigma(-x) \\ \sigma(y) \\ \sigma(-y) \\ \sigma(z) \\ \sigma(-z) \end{pmatrix}$$

Ở đây σ(x), σ(–x)... là các AO của phối tử H_2O chiếm giữ tại các đỉnh của bát diện theo chiều của trục toạ độ đã quy định.

Ta có thể rút ra từ ma trận nghịch đảo thành các obitan đối xứng hoá như sau:

$$\sum_s = \frac{1}{\sqrt{6}}[\sigma(x) + \sigma(-x) + \sigma(y) + \sigma(-y) + \sigma(z) + \sigma(-z)]$$

$$\sum_{z^2} = \frac{1}{2\sqrt{3}}[-\sigma(x) - \sigma(-x) - \sigma(y) - \sigma(-y) + 2\sigma(z) + 2\sigma(-z)]$$

$$\sum_{x^2-y^2} = \frac{1}{2}[\sigma(x) + \sigma(-x) - \sigma(y) - \sigma(-y)]$$

$$\sum_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\sigma(x) - \sigma(-x)]$$

$$\sum_{p_y} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma(y) - \sigma(-y)]$$

$$\sum_{p_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma(z) - \sigma(-z)]$$

Để dễ dàng nhận biết sự hình thành liên kết phối tử trong phức khảo sát ta tiến hành tổ hợp giữa AO của ion nguyên tử trung tâm Ti^{3+} và AO-đối xứng hoá thông qua hình vẽ như sau: