

ÜS 5 - Symmetrie

(to be cont. in Lin. Alg., AC I, AC II, AC III
Analytik
P22
...)

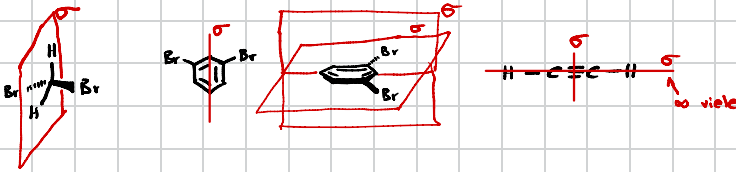
Symmetrie ist im Allgemeinen ein Thema, welches auch durch das ganze Studium begleitet wird und ist meines Erachtens nach mit Konformationsanalyse das wichtigste Thema von AC I (oc), aber es wird eher kontraintuitiv beigebracht. In AC I macht man dann eine deutlich intuitivere Einführung in das Thema.

Symmetrieelement

In AC I (oc) gibt es vier Symmetrieelemente. Diese sind Bewegungen/Operationen die am Molekül durchgeführt werden und wenn das Molekül dadurch nicht verändert wird, dann hat das Molekül dieses Symmetrieelement.

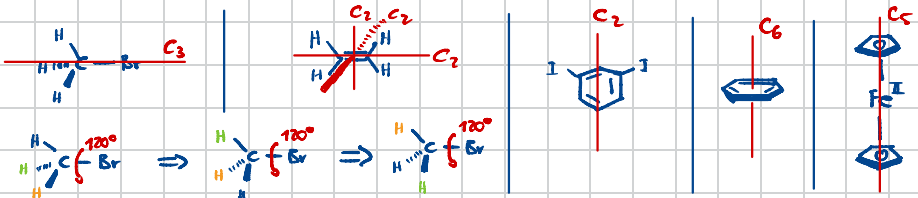
σ -Ebene

σ -Ebenen sind Spiegelebenen, die ihr durch das Molekül legen könnt. $\sigma_h, \sigma_v, \sigma_d$ sind jeweils die Positionen der σ -Ebenen im vgl. zur Hauptspiegelachse.



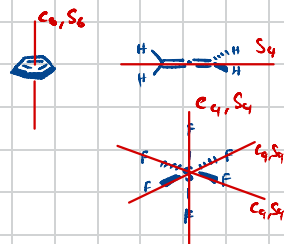
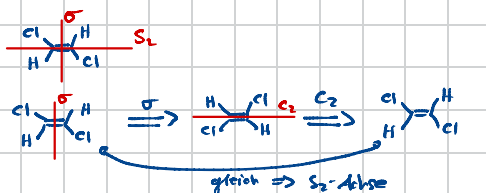
C_n -Achse

Man lege eine Achse durch das Molekül und drehe das Molekül um diese Achse. Das n in C_n bezeichnet, wie oft man das Molekül bei der Drehung wieder in seiner ursprünglichen Form erhält, also $\frac{360^\circ}{n}$. Da jedes Molekül bei $\frac{360^\circ}{1} = 360^\circ$ wieder in seiner ursprünglichen Form ist, hat jedes Molekül eine C_1 -Achse. C_1 wird deswegen auch als E (Identität) bezeichnet.



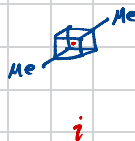
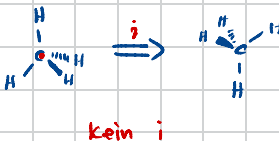
Drehspiegelachse S_n

Die Drehspiegelachse ist am schwierigsten zu sehen und am seltensten, aber zur Bestimmung der Punktgruppe auch zum Glück nur so wässrig wichtig. Es ist eine Kombination von σ -Ebene und C_n -Achse. Man lege eine Achse durch das Molekül und spiegele das Molekül an einer σ -Ebene senkrecht zur Achse. Danach drehe ich das Molekül um $\frac{360^\circ}{n}$ um die Achse.



Inversionszentrum i

Das Inversionszentrum i ist einigermaßen gut zu erkennen. Es ist ein Punkt im Molekül, an dem sich das gesamte Molekül spiegeln lässt.



Hauptdrehachsen

Höchstzählige Drehachse (wenn mehrere, dann die, die die meisten Atome bewegt.)

Nomenklatur der Spiegelebenen

σ_v : σ -Ebene in der Hauptdrehachse

σ_h : σ -Ebene senkrecht zur Hauptdrehachse

σ_d : "alles andere", formal: σ -Ebene zwischen zwei C_n -Achsen

Punktgruppen (Gruppentheorie)

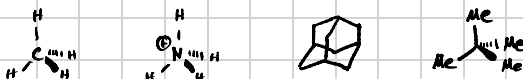
Wenn ihr alle Symmetrieelemente eines Moleküls gefunden habt, könnt ihr es einer Punktgruppe zuordnen. Man kann diese sehr formal mit einem Flow-Chart (bekommt ihr in der Prüfung) bestimmen, oder etwas intuitiver:

Zunächst schaut man, ob das Molekül tetraedisch oder oktaedrisch ist:

O_h homoeptischer Oktaeder



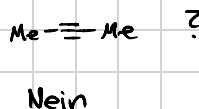
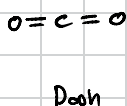
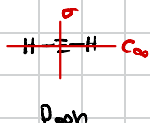
T_d homoeptischer Tetraeder



Wenn das Molekül linear ist, gelten auch etwas andere Regeln:

$C_{\infty v}$ lineare Molekül $Cl-H$

$D_{\infty h}$ lineares Molekül mit σ -Ebene senkrecht zu C_{∞}



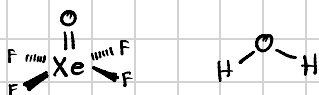
Bei allen anderen Molekülen gelten die folgenden aufsteigenden Symmetrieregeln (alle unter einem hat alle Symmetrieelemente von vorher).

C_n Hat eine Hauptdrehachse mit dem höchsten n

C_s Hat eine Spiegelebene σ

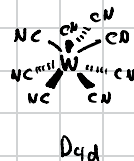
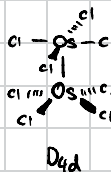
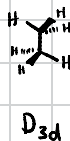
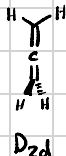
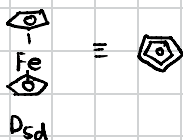
C_{nv} Pyramidal

Hat eine Hauptdrehachse C_n mit n σ -Ebenen in der Hauptdrehachse



D_{nd} Antiprismatisch

Hat eine Hauptdrehachse C_n mit n σ -Ebenen in der Hauptdrehachse und n C_2 -Achsen senkrecht zur Hauptachse



D_{nh} Prismatisch

Gleich wie D_{nd} nur mit zusätzlicher σ -Ebene senkrecht zur Hauptdrehachse (σ_h -Ebene)

