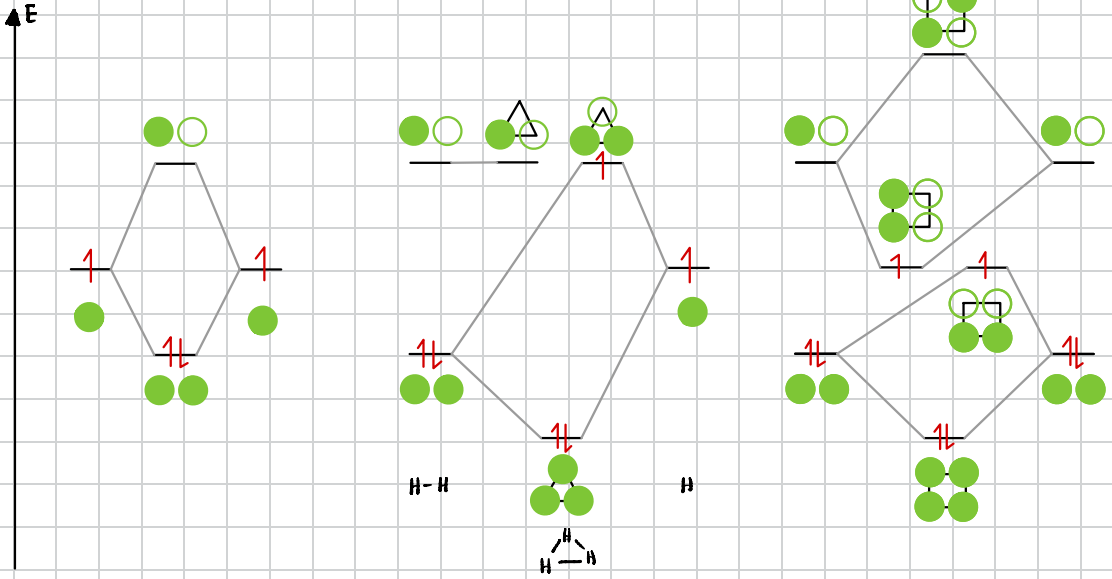
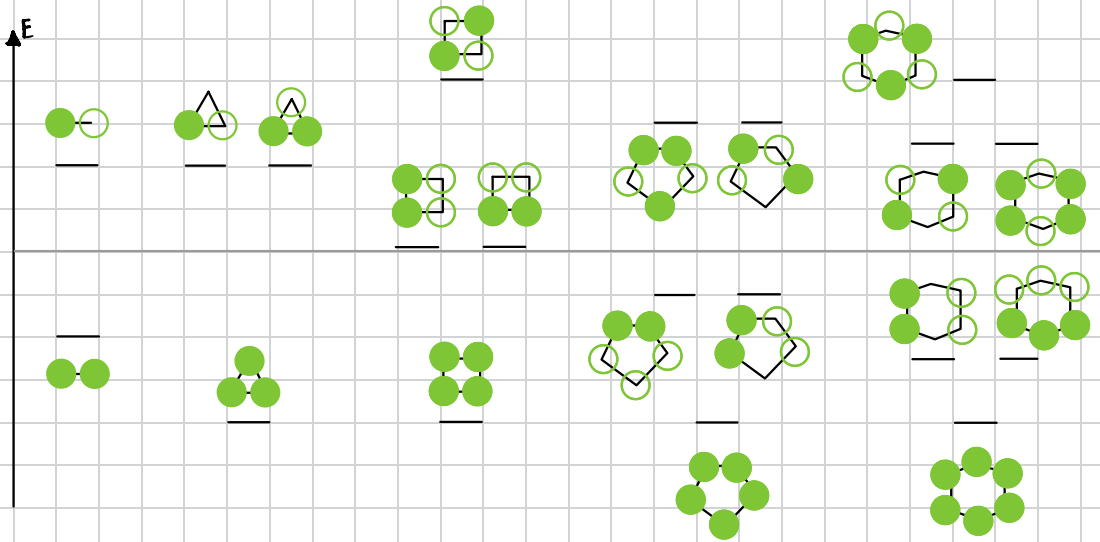


ÜS 6 - Symmetrie III

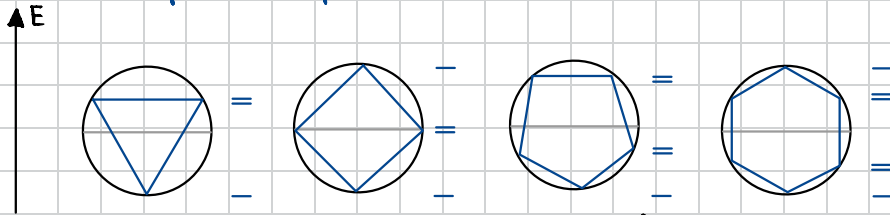
Häufig ist es beim Kombinieren zweckmässig das Zentralatom mit allen kombinierten Ligandenorbitalen zu kombinieren. Dafür machen wir zuerst unsere Kombinationen für die Liganden. Zumeist kombinieren wir s-Orbitale bei den Liganden, weswegen wir die alle für die gängigen Symmetrien herleiten.



Es ergeben sich demnach folgende Aufspaltungsmuster für die H-Fragmente.



Die MO-Diagramme von cyclisch planaren Molekülen lassen sich schnell herleiten, indem das entsprechende Polygon mit Spitze nach unten in einen Kreis gezeichnet wird. Die Eckpunkte entsprechen den Orbitalen.



Wir leiten nun das MO-Diagramm von NH_3 einmal trigonal planar und einmal trigonal pyramidal her und sehen dann anhand der Elektronenbesetzung welches die günstigere Struktur ist.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2'$	σ_h	$2C_3$	$3C_2''$	Koord.	Quadr.	Rot.
A_1'	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2	
A_2'	1	1	-1	1	1	-1			R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	x, y	x^2-y^2, xy	
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1			
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1	z		
E''	2	-1	0	-2	1	0		xz, yz	A_x, A_y

C_{3v}	E	$2C_3$	$3C_2$	Koord.	Quadr.	Rot.
A_1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2	
A_2	1	1	-1			R_z
E	2	-1	0	x, y	x^2-y^2, xy, xz, yz	A_x, A_y

