



01.05.

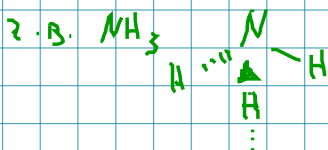
# PC 14 - Schwingungsspektroskopie

## 4. Molekulare Symmetrie

### 4.1 Klassifizierung

Begriffe: Symmetrieeoperation  $\rightarrow$  überführt Molekül in sich selbst (z.B. Rot., Spiegelung)

Symmetrieelement (SE)  $\rightarrow$  Punkt / Linie / Ebene, bzgl. derer SO ausgeführt wr. d. (z.B. Rot.-Achse)



SO: Rot., Spiegelungen  
SE: 3-zähl. Rot.-Achse, Spiegelebenen

$\rightarrow$  Punktgruppe

SO  
Identität E  
Rotation  
n-zählig ( $360/n$ )

SE  
ganzes Molekül  
n-zählige Rot.-Achse  
 $C_n$   
 $\rightarrow$  größte Zähligkeit = Hauptdrehachse

Beispiel  
CFClI Br



NH3  $C_3$   
H2O  $C_2$



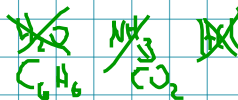
Spiegelung

Spiegelebene  
 $\sigma$   
 $\sigma \parallel$  Hauptdrehachse:  $\sigma_v$   
 $\sigma \perp$  Hauptdrehachse:  $\sigma_h$   
 $\sigma$  zw.  $C_2$ -Achsen:  $\sigma_d$

(Folien: Symmetrie - Klassifizierung)

Punktspiegelung (Inversion)

Inversionszentrum  $i$



Drehspiegelung  
1.) Rot. um  $C_n$   
2.)  $\sigma \perp C_n$

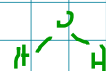
Drehspiegelachse  $S_n$   
 $\rightarrow S_2 = i$



$\Rightarrow$  Konsequenzen: Polarität, polares Molekül  $\rightarrow$  Dipolmoment



$\hookrightarrow$  entlang Rot.-Achse  
 $\hookrightarrow$  innerhalb Spiegelebene



(Folien: Schema zur Bestimmung von Punktgruppen)

H2O ( $C_{2v}$ ), NH3 ( $C_{3v}$ ), Benzol:  $D_{6h}$ , Ethin (symmetrisch):  $D_{\infty h}$



## 4.2 Definition einer Gruppe (Matrixrechnung)

Menge Elemente, für die gilt:

(1.)  $RS = T$

(2.)  $(RS)T = R(ST)$  Assoziativgesetz

(3.) Einheitselement  $E: ES = S$

(4.) inverses Element  $S^{-1}: SS^{-1} = E$

Bsp a) ganze Zahlen, Verknüpfung über Addition  $\rightarrow$  Gruppe?  $\checkmark$

b) ganze Zahlen, Verknüpfung über Multiplikation  $\rightarrow$  Gruppe?  $\times \rightarrow \times$

(kein inverses Element)

c) 3 Symmetrieeoperationen  $D_1 = \text{Drehung um } 0^\circ$   
 $D_2 = \text{Drehung um } 120^\circ$   
 $D_3 = \text{Drehung um } 240^\circ$   $\rightarrow$  Gruppe?

$D_3 D_2 = D_1$   ~~$D_2$~~

$\hookrightarrow$  verschiedene Kombinationen  $\rightarrow$  Multiplikationstafel

	$D_1$	$D_2$	$D_3$
$D_1$	$D_1$	$D_2$	$D_3$
$D_2$	$D_2$	$D_3$	$D_1$
$D_3$	$D_3$	$D_1$	$D_2$

$\rightarrow$  (1.)  $\checkmark$

$(D_3 D_2) D_1 = D_3 (D_2 D_1) \rightarrow$  (2.)  $\checkmark$

$E? \rightarrow D_1 \rightarrow$  (3.)  $\checkmark$

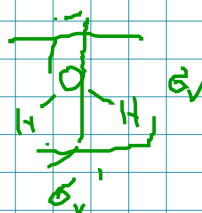
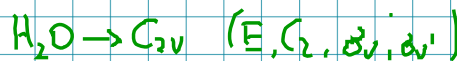
$(D_3^{-1} D_3 = E) \rightarrow D_3^{-1} = D_2 \rightarrow$  (4.)  $\checkmark$

$\hookrightarrow$  Symmetrische Moleküle

weitere Eigenschaften:

- Anzahl Elemente  $\rightarrow$  Ordnung
  - $RS = SR$  (Kommutativgesetz)  $\rightarrow$  Abelsche Gruppe
  - gleiche Multiplikationstafel  $\rightarrow$  isomorph
- \* Elemente = Symmetrieeoperationen  
 Abelsche Gruppe!

Bsp: Multiplikationstafel



	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$E$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$C_2$	$C_2$	$E$	$\sigma_v'$	$\sigma_v$
$\sigma_v$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$	$E$	$C_2$
$\sigma_v'$	$\sigma_v'$	$\sigma_v$	$C_2$	$E$

$\rightarrow$  Pingo