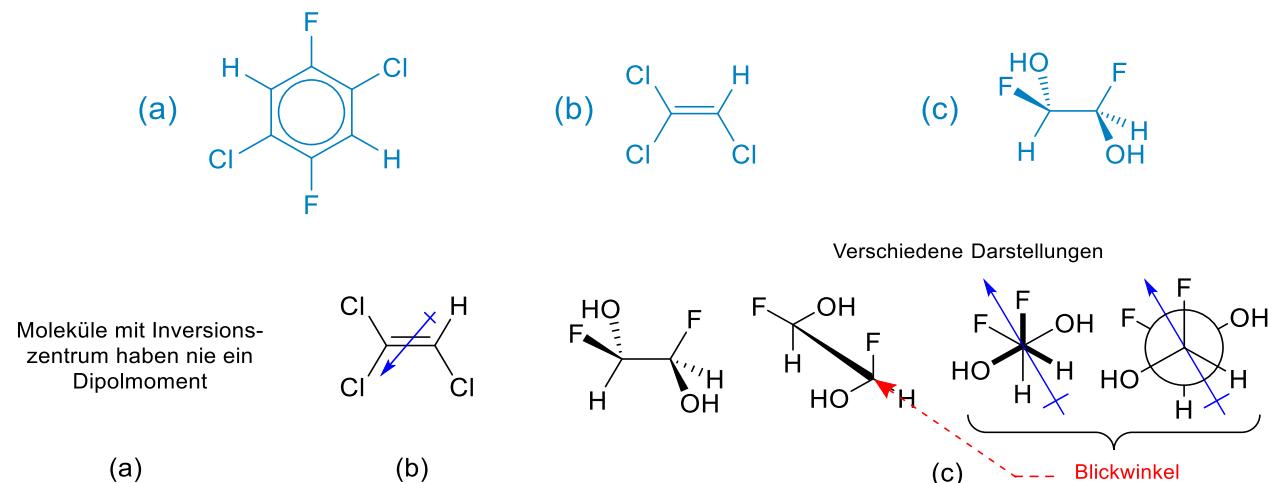


6 Symmetrielehre

6.1 Dipolmoment

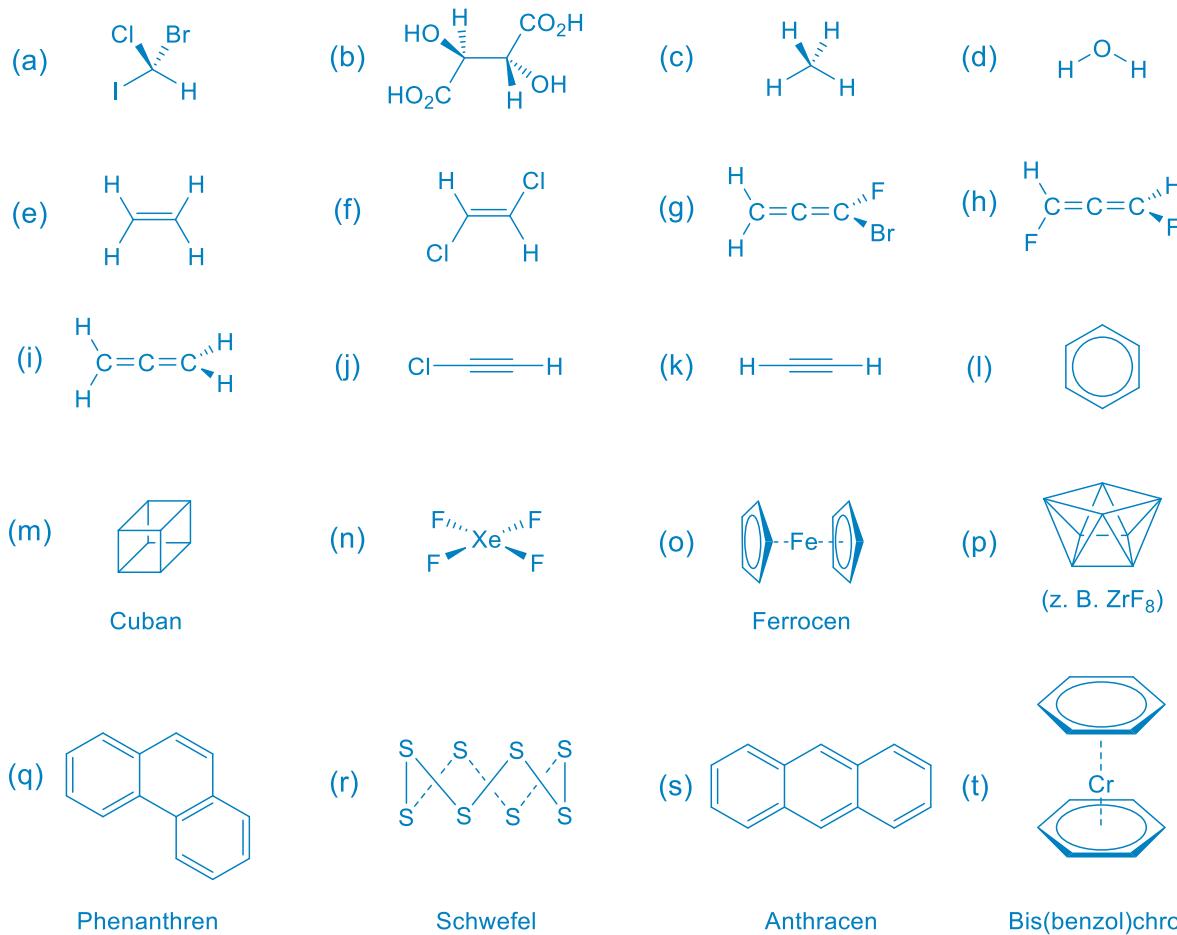
Welche der folgenden Moleküle haben ein Dipolmoment?



Der Vektor des Dipolmoments in Molekül (c) geht sicher durch die Mitte der C–C Bindung. Die genaue Richtung auf der Ebene senkrecht zur C–C Bindung ist jedoch von der Konformation abhängig.

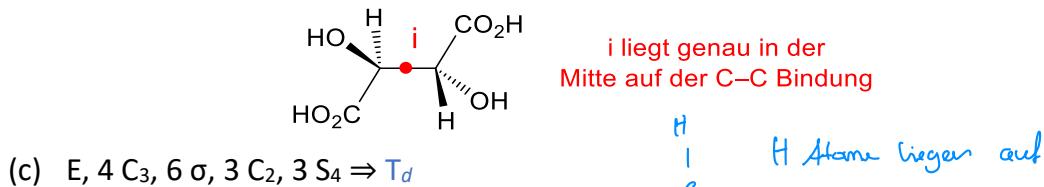
6.2 Symmetrieelemente und Punktgruppen

Bestimmen Sie die Symmetrieelemente und Punktgruppen folgender Verbindungen:

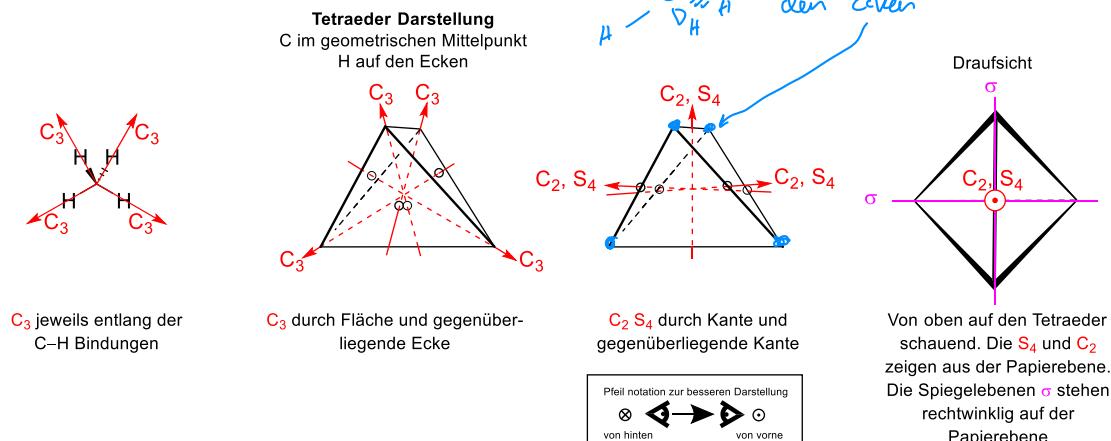


Die Symmetrieelemente, die in den Strukturen eingezeichnet sind, liegen in der Papierebene, ausser es ist anders spezifiziert.

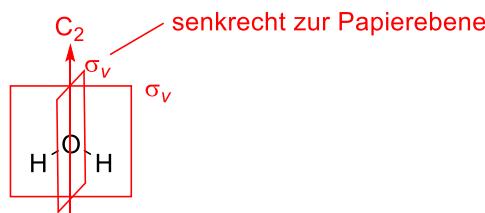
- (a) E, $C_1 \Rightarrow C_1$
 (b) E, i $\Rightarrow C_i$



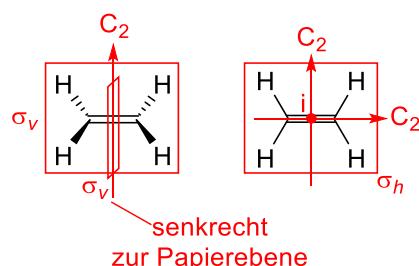
- (c) E, 4 C_3 , 6 σ , 3 C_2 , 3 $S_4 \Rightarrow T_d$



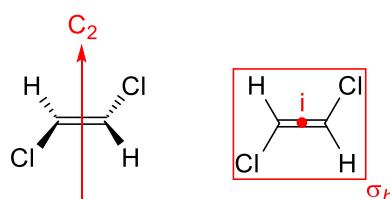
- (d) E, 1 C_2 , 2 $\sigma_v \Rightarrow C_{2v}$



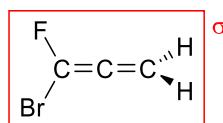
- (e) E, 1 C_2 , 2 C_2' , 2 σ_v , 1 σ_h , i $\Rightarrow D_{2h}$

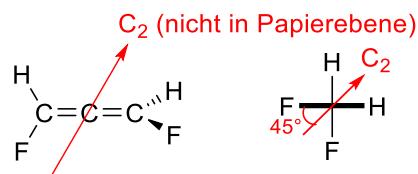
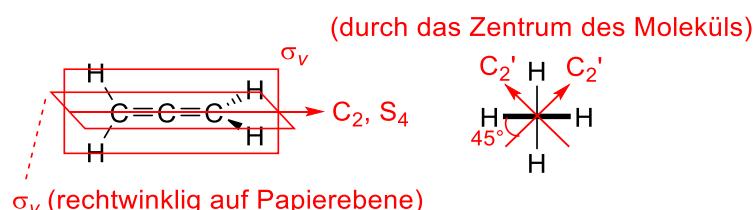
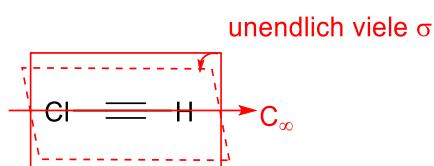
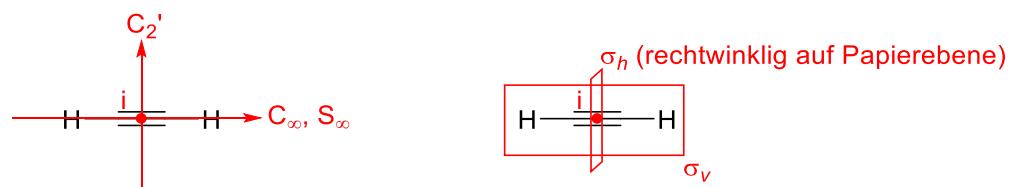
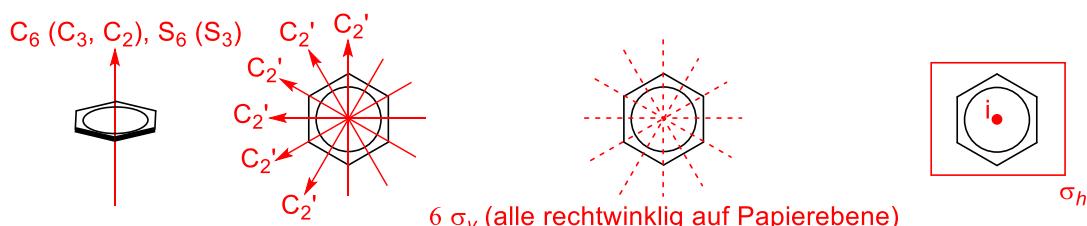
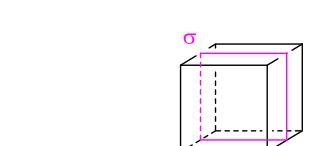
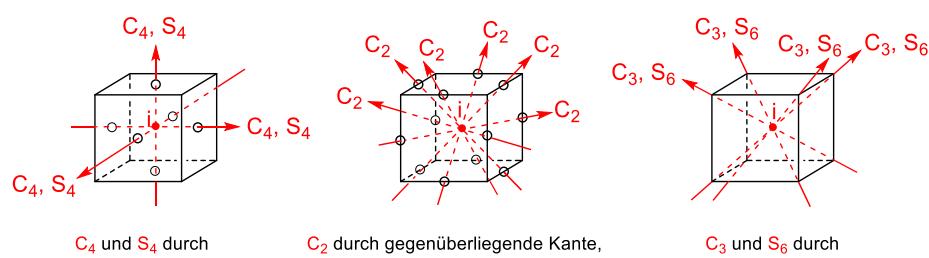
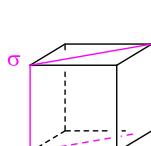


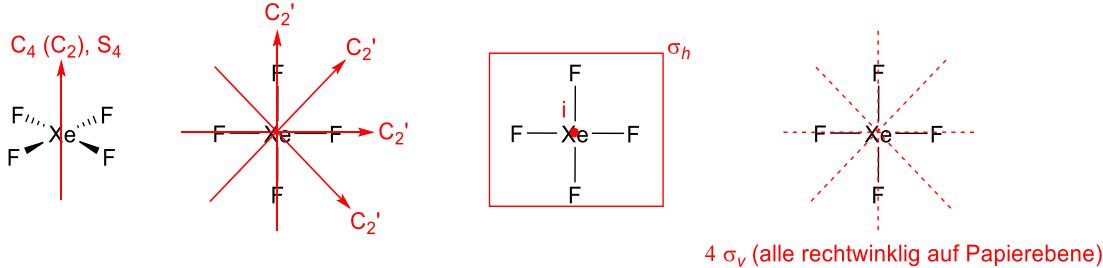
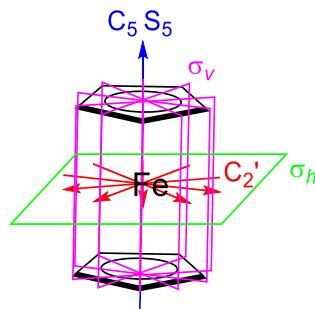
- (f) E, 1 C_2 , 1 σ_h , i $\Rightarrow C_{2h}$



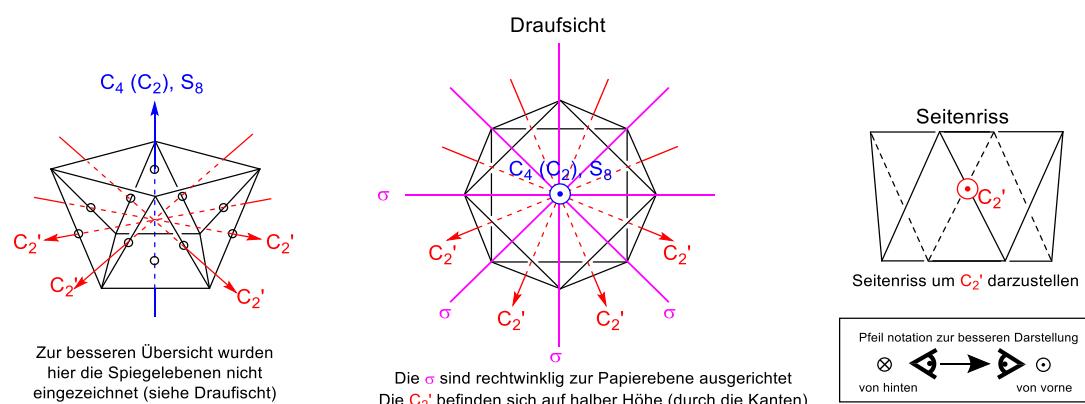
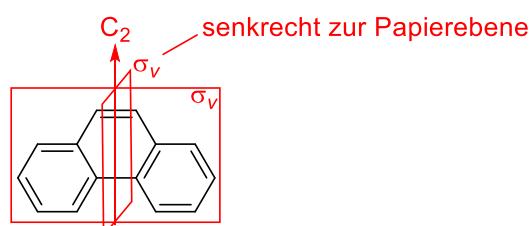
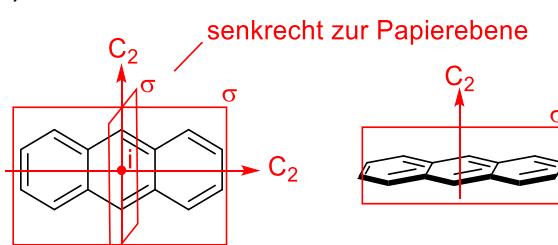
- (g) E, 1 $\sigma \Rightarrow C_s$



(h) E, 1 C₂ \Rightarrow C₂(i) E, 1 C₂, 2 C_{2'}, 2 σ_v, 1 S₄ \Rightarrow D_{2d}(j) E, 1 C_∞, ∞ σ_v \Rightarrow C_{∞v}(k) E, 1 C_∞, ∞ C_{2'}, 1 σ_h, ∞ σ_v, i, S_∞ \Rightarrow D_{∞h}(l) E, C₆ (C₃, C₂), 6 C_{2'}, 6 σ_v, σ_h, S₆ (S₃), i \Rightarrow D_{6h}(m) E, 3 C₄ (C₂), 4 C₃, 6 C₂, 9 σ, 3 S₄, 4 S₆, i \Rightarrow O_h3 σ durch die Mitte der Flächen
(parallel zu den Flächen)6 σ durch Diagonalen
gegenüberliegender Flächen

(n) E, C_4 (C_2), 4 C_2' , S_4 , σ_h , 4 σ_v , i $\Rightarrow D_{4h}$ (o) E, C_5 , 5 C_2' , S_5 , 5 σ_v , $\sigma_h \Rightarrow D_{5h}$ 

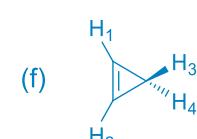
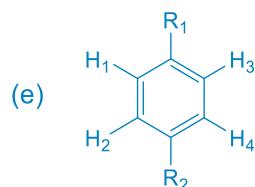
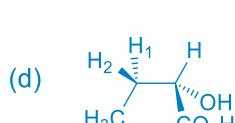
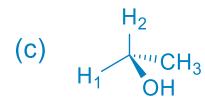
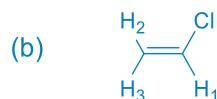
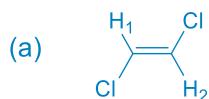
Anmerkung: Die σ Ebenen der D_{nd} Gruppen können auch als σ_d Ebenen bezeichnet werden, sobald sie die Hauptachse C_n enthalten und die Winkel zwischen den C_2 Achsen halbieren.

(p) E, C_4 (C_2), 4 C_2' , S_8 , 4 $\sigma \Rightarrow D_{4d}$ (q) E, C_2 , 2 $\sigma_v \Rightarrow C_{2v}$ (r) E, C_4 , C_2 , 4 C_2' , S_8 , 4 $\sigma \Rightarrow D_{4d}$, siehe Aufgabe (p)(s) E, C_2 , 2 C_2' , 2 σ_v , 1 σ_h , i $\Rightarrow D_{2h}$ (t) E, C_6 , C_3 , C_2 , 6 C_2' , σ_h , 6 σ_v , i, S_3 , $S_6 \Rightarrow D_{6h}$, siehe Aufgabe (l).

6.3 Topizität

Die Topizität beschreibt die Unterscheidbarkeit von Atomen oder Gruppen in einem Molekül zueinander, d.h. ihre Äquivalenz oder Nichtäquivalenz. Sie spielt in der Spektroskopie, insbesondere der NMR-Spektroskopie, eine besonders wichtige Rolle (siehe Analytik-Vorlesungen).

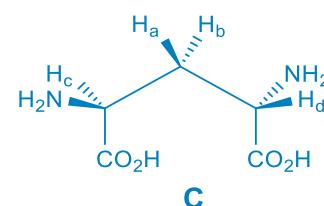
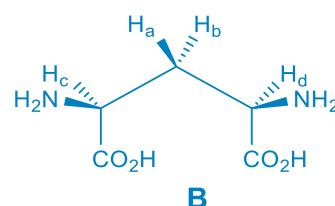
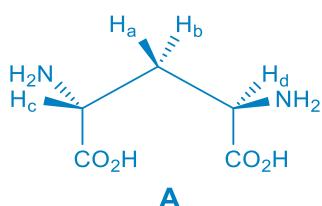
1. Geben Sie die Topizitäten aller nummerierten H-Atome zueinander an.



- (a) homotop
- (b) H₁:H₂ und H₁:H₃ verschieden, H₂:H₃ diastereotop
- (c) H₁:H₂ enantiotop
- (d) H₁:H₂ diastereotop
- (e) H₁:H₃ und H₂:H₄ homotop, Rest verschieden
- (f) H₁:H₂ und H₃:H₄ homotop, Rest verschieden

2. Erledigen Sie die folgenden Aufgaben:

- (a) Bestimmen Sie die Symmetrieelemente für die 2,4-Diaminoglutarsäuren **A**, **B** und **C** (ohne Berücksichtigung der Markierung (a, b, c, d) für die H-Atome).



A – C₂, **B** – σ, **C** – C₂

- (b) Geben Sie jetzt die Topizitäten für die markierten Wasserstoffatome in **A**, **B** und **C** an.

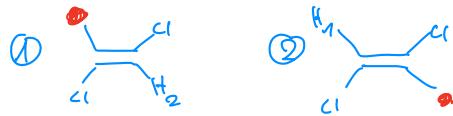
Molekül	A	B	C
H _a zu H _b	homotop	diastereotop	homotop
H _a zu H _c	verschieden	verschieden	verschieden
H _b zu H _c	verschieden	verschieden	verschieden
H _c zu H _d	homotop	enantiotop	homotop

- (c) Geben Sie an, welche Moleküle chiral bzw. achiral sind und wie sich die Moleküle zueinander verhalten (*i* = identisch, *e* = enantiomer, *d* = diastereomer, *v* = verschieden).

6.3 Topizität

Ich mache es so:

- Ich erstelle 2 neue Moleküle, wobei ich jeweils 1 H austausche



- Sind die neuen Moleküle verschieden sind es auch die H's.

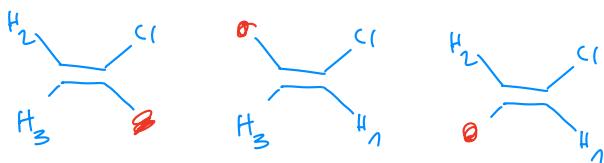
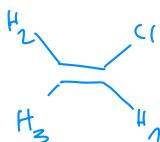
identisch \equiv homotop

enantiomeren \equiv enantiotop

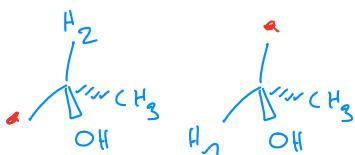
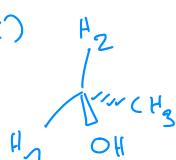
diastereomere \equiv diastereotop

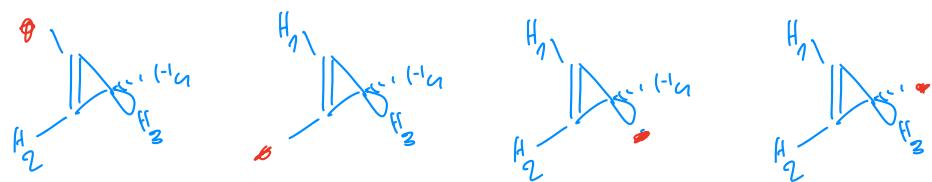
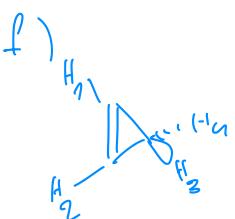
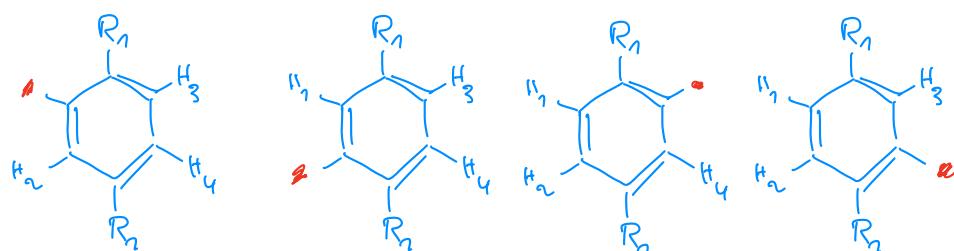
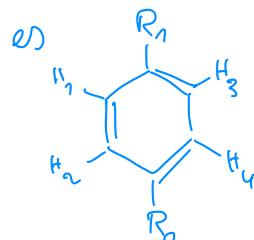
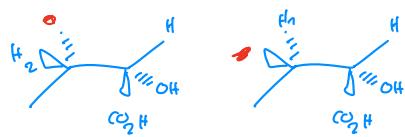
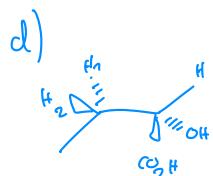
- Nur die H's austauschen die wir betrachten ①

b)

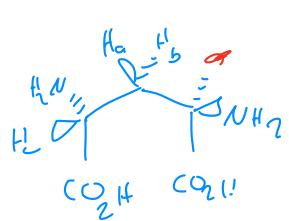
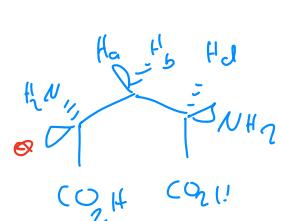
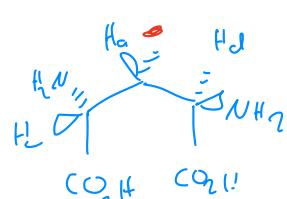
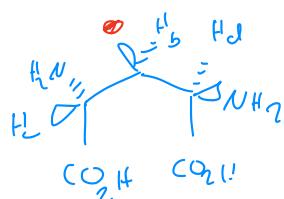
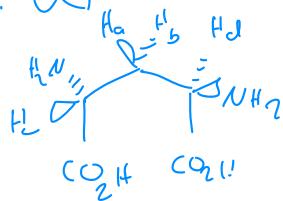


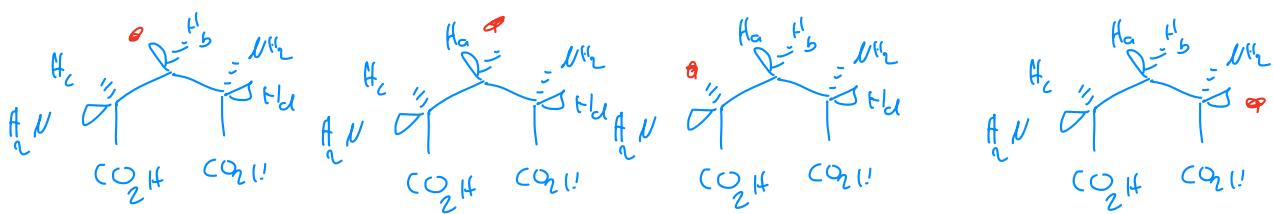
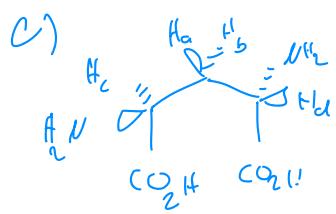
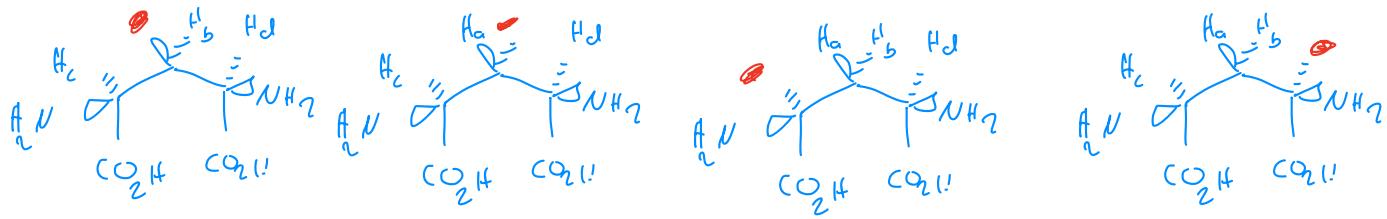
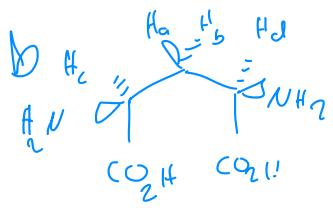
c)





2. a) brachte die NH₂ Ausrichter





Molekül	chiral	achiral	zu A	zu B	zu C
A	✓			d	e
B		✓			d
C	✓				

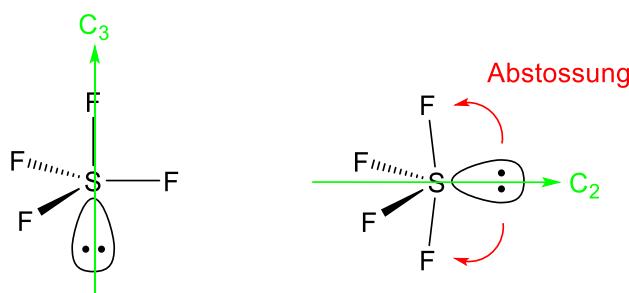
- (d) Welche Moleküle besitzen ein Dipolmoment? (Bedenken Sie die freie Drehbarkeit um Einfachbindungen.)

A, B und C besitzen ein Dipolmoment.

6.4 Spezielle Symmetrien

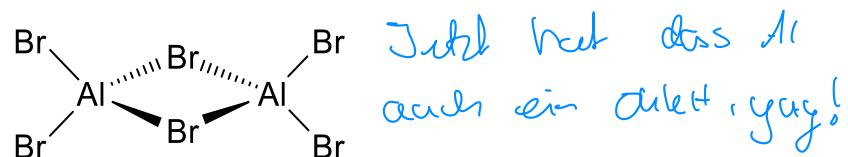
1. Warum hat SF_4 die Symmetrie C_{2v} und nicht C_{3v} ?

SF_4 ist ein Molekül mit fünf "Struktur aktiven" Liganden am Schwefel. Das legt eine trigonal bipyramidale Struktur nahe und die Frage lautet, ob das freie Elektronenpaar eine axiale oder äquatoriale Position einnimmt. Man muss davon ausgehen, dass der Platzbedarf der unterschiedlichen Liganden nicht gleich gross ist. Das freie Elektronenpaar braucht mehr Platz und ist deswegen äquatorial positioniert (rechts). Dabei drückt es die axialen Fluoratome weg.



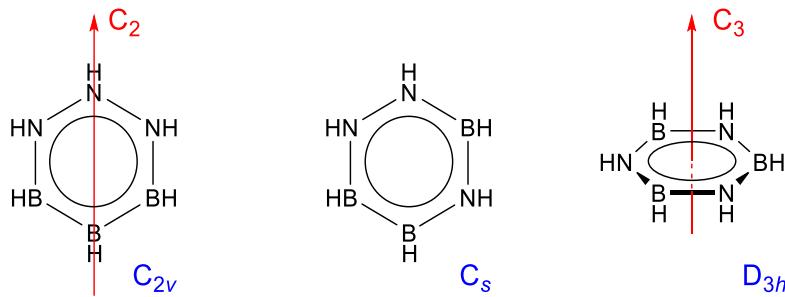
2. Wie kann man die D_{2h} Symmetrie von $AlBr_3$ erklären?

$AlBr_3$ ist eine amphotere Verbindung und bildet Lewis-Säure-Base Dimere.



3. Das sogenannte "anorganische Benzol" mit der Summenformel $B_3N_3H_6$ hat die gleiche Struktur wie Benzol. Was sind die benzolähnliche Isomere von $B_3N_3H_6$? Können Sie eine eindeutige Strukturzuweisung machen, wenn Sie wissen, dass eine D_{3h} Symmetrie vorliegt?

Die elektronisch stabilste Anordnung mit abwechselnd Bor- und Stickstoffatomen im Ring ist auch die experimentell gefundene Struktur mit D_{3h} Symmetrie. Alle anderen Anordnungen führen zu Molekülen, die anderen Punktgruppen angehören.

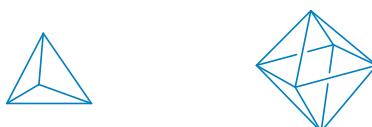


4. Warum kann man bei vielen vierfachkoordinierten Metallkomplexen leicht bestimmen, ob sie tetraedrische oder quadratisch planare Strukturen haben? (Denken Sie an die Topizitäten.)

Bei vierfach koordinierten Komplexen liegt meist eine tetraedrische oder eine quadratisch planare Geometrie vor. Bei der tetraedrischen Geometrie hat jeder Ligand drei geometrisch äquivalente Nachbarn. Im quadratisch planaren Fall kann man zwischen zwei benachbarten und einem gegenüberliegenden Liganden unterscheiden. Das führt schon bei MA_2B_2 Systemen zu zwei Stereoisomeren.



5. Zeichnen Sie an dem gleichmässigen Tetraeder die C_2 und S_4 Achsen ein. Zeichnen Sie am gleichmässigen Oktaeder je eine C_4 , C_3 , C_2 und S_6 Achse ein.



Die kleinen Kreise in der Graphik zeigen, wo die Achsen durch die Flächen stossen oder Kanten kreuzen.

