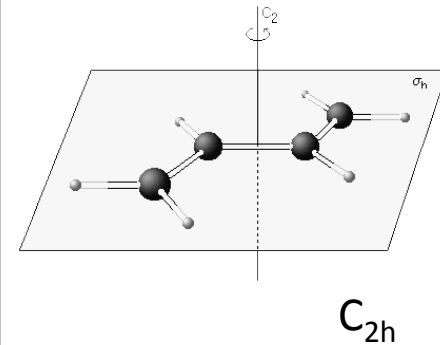
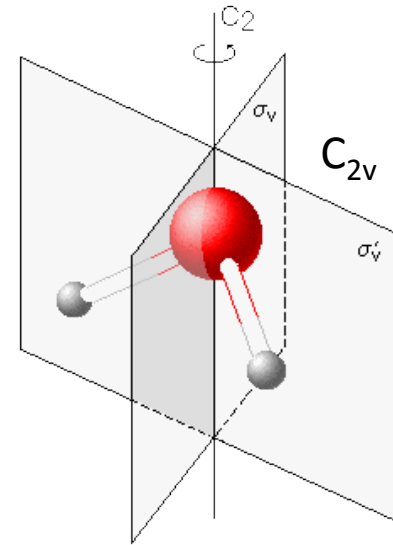
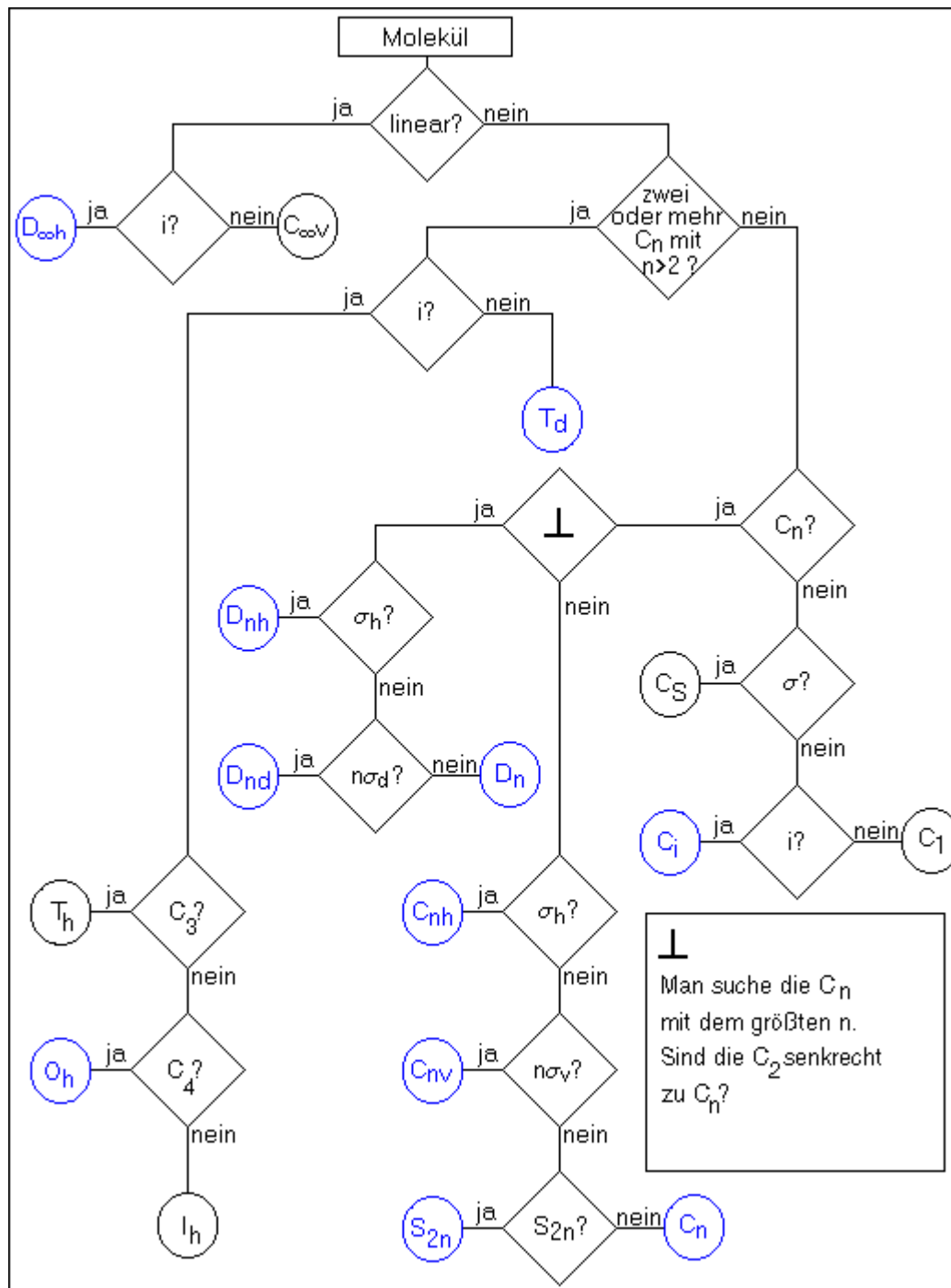
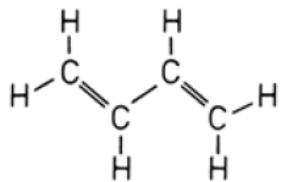
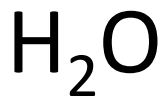
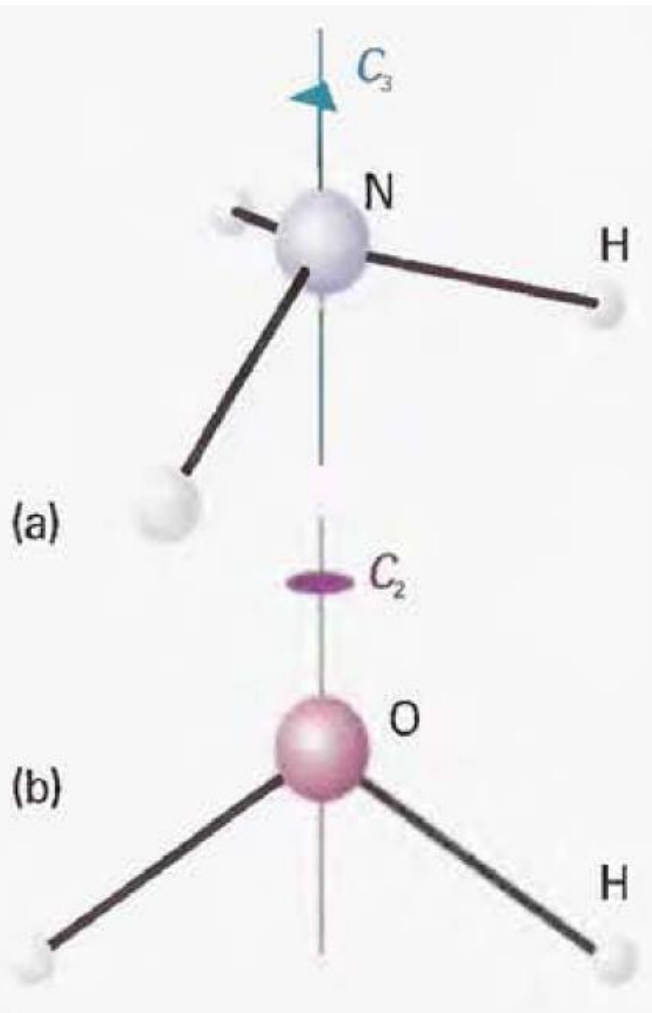


Punktgruppen/Symmetriebetrachtung

- ❖ Chiralität
- ❖ Dipolmoment
- ❖ Rotationsübergänge
- ❖ Aktivität von Schwingungen
- ❖ Elektronische Übergänge und deren Polarisation
- ❖ Konstruktion von Molekülorbitalen
- ❖ Chemische Reaktivität (Woodward-Hoffmann)



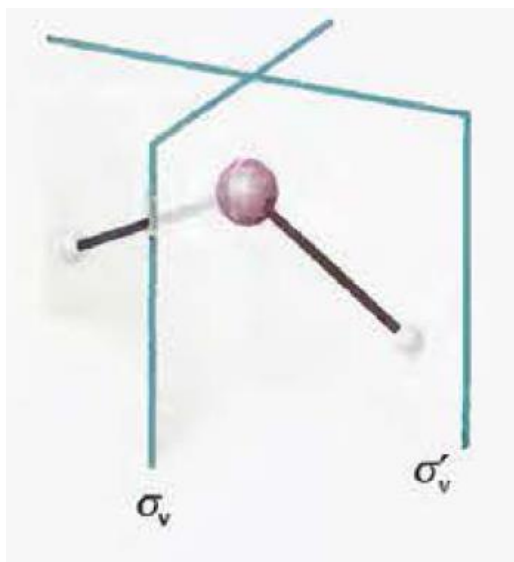
Symmetrieelemente



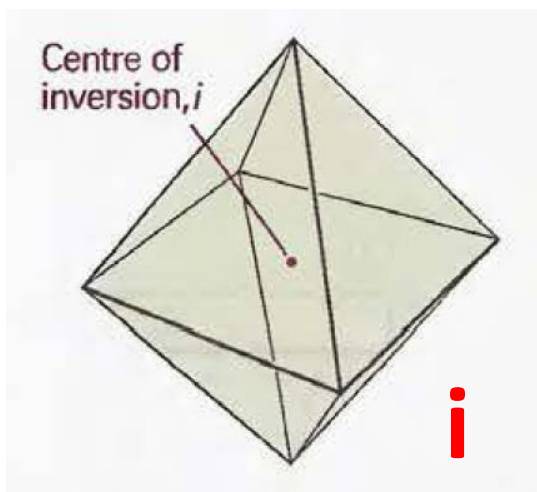
C_n

	Name	Aktion
E	Identität	Drehung um 360° , lässt Molekül unverändert
C_n	n-zählige Drehachse	Drehung um $360^\circ/n$ Drehachse mit höchstem n heißt Hauptdrehachse
i	Inversionszentrum	Punktspiegelung am Inversionszentrum
σ	Spiegelebene	Spiegelt jedes Atom an einer Ebene (<u>vertikal</u> : Spiegelebene enthält Hauptdrehachse; <u>horizontal</u> : Spiegelebene senkrecht zur Hauptdrehachse; <u>diagonal/diedrisch</u> : halbiert Winkel zwischen zwei zur Hauptdrehachse senkrechten C_2 -Achsen)
S_n	n-zählige Drehspiegelachse	Drehung um $360^\circ/n$ und Spiegelung an Ebene senkrecht zur Drehachse

Symmetrieelemente

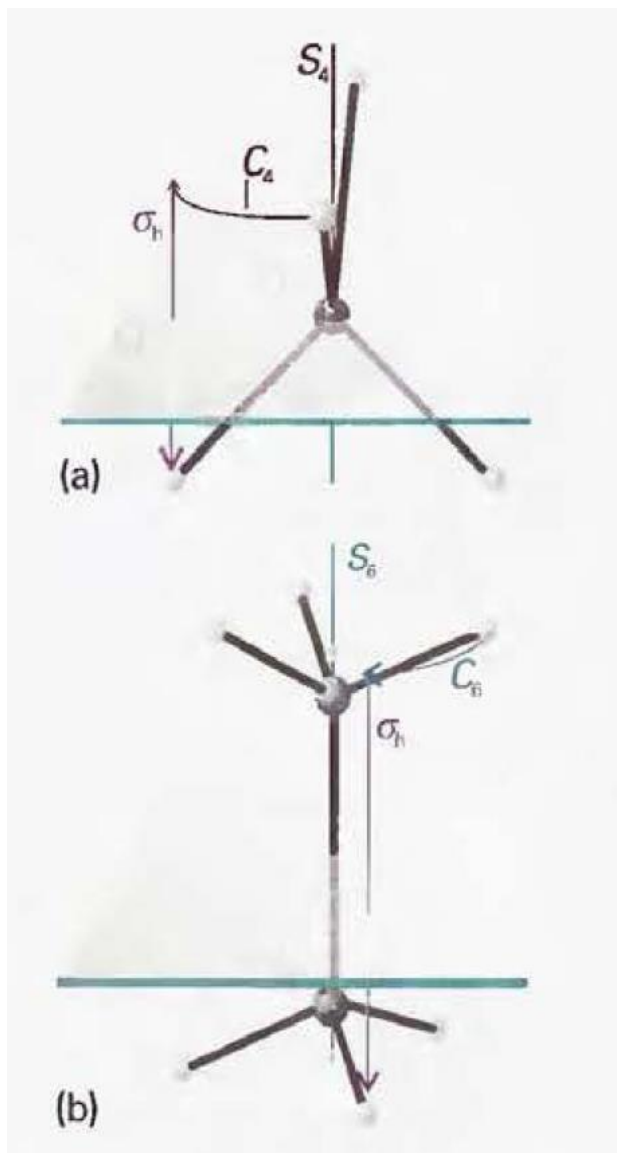


σ



	Name	Aktion
E	Identität	Drehung um 360° , lässt Molekül unverändert
C_n	n-zählige Drehachse	Drehung um $360^\circ/n$ Drehachse mit höchstem n heißt Hauptdrehachse
i	Inversionszentrum	Punktspiegelung am Inversionszentrum
σ	Spiegelebene	Spiegelt jedes Atom an einer Ebene (<u>vertikal</u> : Spiegelebene enthält Hauptdrehachse; <u>horizontal</u> : Spiegelebene senkrecht zur Hauptdrehachse; <u>diagonal/diedrisch</u> : halbiert Winkel zwischen zwei zur Hauptdrehachse senkrechten C_2 -Achsen)
S_n	n-zählige Drehspiegelachse	Drehung um $360^\circ/n$ und Spiegelung an Ebene senkrecht zur Drehachse

Symmetrieelemente



	Name	Aktion
E	Identität	Drehung um 360° , lässt Molekül unverändert
C_n	n-zählige Drehachse	Drehung um $360^\circ/n$ Drehachse mit höchstem n heißt Hauptdrehachse
i	Inversionszentrum	Punktspiegelung am Inversionszentrum
σ	Spiegelebene	Spiegelt jedes Atom an einer Ebene (<u>vertikal</u> : Spiegelebene enthält Hauptdrehachse; <u>horizontal</u> : Spiegelebene senkrecht zur Hauptdrehachse; <u>diagonal/diedrisch</u> : halbiert Winkel zwischen zwei zur Hauptdrehachse senkrechten C_2 -Achsen)
S_n	n-zählige Drehspiegelachse	Drehung um $360^\circ/n$ und Spiegelung an Ebene senkrecht zur Drehachse

S_n

Symmetriegruppe von H₂O

Gruppenordnung

h = 4

(Summe der Multiplizitäten)

Symmetrieklassen

(Symmetrieeoperation, Multiplizität; bspw. „1*E“)

Charaktere der
irreduziblen
Darstellung (A₁)

irreduzible
Darstellungen
(Mulliken-
Symbole für
Symmetrierass
en)

C_{2v}	E	C ₂ (z)	σ _v (xz)	σ _v (yz)	linear, rotations	quadratic
A ₁	1	1	1	1	z	x ² , y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	xy
B ₁	1	-1	1	-1	x, R _y	xz
B ₂	1	-1	-1	1	y, R _x	yz

- A symmetrisch bei Drehung um Hauptdrehachse
- B antisymmetrisch bei Drehung um Hauptdrehachse
- E zweidimensionale Darstellung
- T (F) dreidimensionale Darstellung