

IAC



RWTHAACHEN
UNIVERSITY

Computeranwendungen in der Chemie - Punktgruppen

Ulli Englert

ullrich.englert@ac.rwth-aachen.de

Gliederung

1. Begriffe

- 1.1. Einführung
- 1.2. Was ist Symmetrie?
- 1.3. Was ist Struktur?
- 1.4. Was ist eine Gruppe?
- 1.5. Stereographische Projektion

2. Punktsymmetrie

- 2.1. Symmetrioperationen und -elemente im Schoenflies-System
- 2.2. Einfache Punktgruppen C_n
- 2.3. Diedergruppen D_n
- 2.4. Platonische Körper und hochsymmetrische Punktgruppen
komplette Punktgruppensystematik!
- 2.5. Hermann-Mauguin-Systematik

3. Symmetrie in Ebene und Raum

spätestens in ASP, 4. Semester

- Moleküle ohne Achsen mit $n > 1$
 C_s , C_i oder C_1
- Moleküle mit einer Achse: Achse vertikal stellen!
 - Nordhalbkugel \neq Südhalbkugel
 - C_{nv} (lineare: $C_{\infty v}$) mit vertikalen Spiegelebenen
 - C_n ohne!
 - Nordhalbkugel = Südhalbkugel
 - C_{nh} mit horizontaler Spiegelebene
 - C_{ni} ohne horizontale Spiegelebene, mit Symmetriezentrum
 - S_n , $n = 4, 8, \dots$
- Moleküle mit einer Hauptachse C_n und $n C_2$
 - D_{nh} (lineare: $D_{\infty h}$) mit horizontaler Spiegelebene
 - D_{nd} ohne horizontale, mit diagonalen Spiegelebenen
 - D_n ohne Spiegelsymmetrie
- Moleküle mit mehreren Drehachsen höherer Zähligkeit
 - Ikosaeder (6 C_5 , daneben 10 C_3 und 15 C_2)
 I_h (mit Symmetriezentrum) oder I
 - Oktaeder (3 C_4 , daneben 4 C_3 und 6 C_2)
 O_h (mit Symmetriezentrum) oder O
 - Tetraeder (4 C_3 und 3 C_2)
 T_h (mit Symmetriezentrum) oder T_d oder T