

Lösungen zum Übungsblatt 10

Aufgabe 1

a) vierbeiniger, rechteckiger Tisch

- C_2 -Achse senkrecht zur Tischplatte in der Tischmitte
- zwei Spiegelebenen σ_v , die die C_2 -Achse enthalten und je zwei Seiten der Tischplatte halbieren

b) vierbeiniger, quadratischer Tisch

- C_4 -Achse senkrecht zur Tischplatte in der Tischmitte (schließt die C_2 -Achse aus a) mit ein)
- vier Spiegelebenen σ_v , zusätzlich zu a) gibt es zwei weitere Spiegelebenen entlang der Diagonalen der Tischplatte

c) dreibeiniger Hocker

- C_3 -Achse parallel zu den Beinen durch die Mitte der Sitzfläche
- drei Spiegelebenen σ_v , die die C_3 -Achse und jeweils ein Bein enthalten

d) Stuhl

- eine Spiegelebene, die den Stuhl parallel zu den Beinen und senkrecht zur Rückenlehne halbiert

e) Würfel ohne Zahlen

- sechs C_2 -Achsen durch die Mittelpunkte zweier gegenüberliegender Kanten
- drei C_4 -Achsen durch die Mittelpunkte zweier gegenüberliegender Flächen
- vier C_3 -Achsen entlang der vier Raumdiagonalen
- Inversionszentrum i in der Würfelmitte
- insgesamt neun Spiegelebenen, davon drei parallel zu den Würfelflächen (σ_h) und sechs diagonal dazu (σ_d)
- die C_4 -Achsen sind gleichzeitig S_4 -Drehspiegelachsen
- die C_3 -Achsen sind gleichzeitig S_6 -Drehspiegelachsen

f) Der Würfel mit Zahlen besitzt keines der zu bestimmenden Symmetrieelemente.

Aufgabe 2

a) Xe

- eine Kugel enthält alle der angegebenen Symmetrieelemente
- unendlich viele C_∞ -Achsen durch den Mittelpunkt, die gleichzeitig Drehspiegelachsen sind (S_∞)
- ein Inversionszentrum im Mittelpunkt
- unendlich viele Spiegelebenen, die den Mittelpunkt enthalten
- drei Translationsfreiheitsgrade, keine Rotations- oder Schwingungsfreiheitsgrade

b) XeF₄

- quadratisch-planares Molekül
- zwei C_2 -Achsen durch F-Xe-F und zwei im 45°-Winkel dazwischen
- C_4 -Achse senkrecht zur Molekülebene durch Xe
- i auf dem Xenonatom
- eine σ_h -Spiegelebene in der Molekülebene und je zwei Spiegelebenen senkrecht zur Molekülebene, die die jeweilige C_2 -Achsen enthalten, also zwei σ_v und zwei σ_v
- die C_2 -Achsen sind gleichzeitig S_2 - und die C_4 -Achsen S_4 -Drehspiegelachsen
- drei Translations-, drei Rotations- und $3n-6 = 9$ Schwingungsfreiheitsgrade

c) SF₆

- oktaedrisches Molekül
- drei C_4 -Achsen durch je zwei gegenüberliegende Eckpunkte
- vier C_3 -Achsen durch die Mittelpunkte zweier gegenüberliegender Dreiecke
- sechs C_2 -Achsen, die je zwei gegenüberliegende Kanten halbieren
- Inversionszentrum auf dem S-Atom
- neun Spiegelebenen, drei σ_h durch je vier Ecken und sechs σ_d durch je zwei Ecken und zwei Kantenmittelpunkte
- die C_4 -Achsen sind gleichzeitig S_4 -Drehspiegelachsen
- die C_3 -Achsen sind gleichzeitig S_6 -Drehspiegelachsen
- drei Translations-, drei Rotations- und $3n-6 = 15$ Schwingungsfreiheitsgrade

d) HBr

- lineares Molekül
- C_∞ -Achse entlang der Bindungsachse
- unendlich viele Spiegelebenen σ_v , die die C_∞ -Achse enthalten
- drei Translations-, zwei Rotationsfreiheitsgrade und $3n-5=1$ Schwingungsfreiheitsgrad

e) H₂O₂

- gewinkelttes Molekül mit einem Diederwinkel von 111°
- C_2 -Achse senkrecht zur O-O-Bindung entlang der Winkelhalbierenden des Diederwinkels
- drei Translations-, drei Rotations- und $3n-6 = 6$ Schwingungsfreiheitsgrade

f) H₂C₂

- lineares Molekül
- C_∞ -Achse entlang der Molekülachse
- unendlich viele C_2 -Achsen senkrecht zur Molekülachse durch das Inversionszentrum
- Inversionszentrum i zwischen den beiden Kohlenstoffatomen
- eine Spiegelebene σ_h senkrecht zur Molekülachse, die das Inversionszentrum beinhaltet und unendlich viele Spiegelebenen σ_v , die die C_∞ -Achse enthalten
- die C_∞ -Achse ist gleichzeitig S_∞ -Drehspiegelachse
- drei Translations-, zwei Rotations- und $3n-5 = 7$ Schwingungsfreiheitsgrade

g) NH₃

- trigonal-pyramidales Molekül
- eine C_3 -Achse durch das Stickstoffatom und die Mitte des durch die Wasserstoffatome aufgespannten Dreiecks
- drei σ_v -Spiegelebenen, die die C_3 -Achse und je ein Wasserstoffatom enthalten
- drei Translations-, drei Rotations- und $3n-6 = 6$ Schwingungsfreiheitsgrade

h) BH₃

- trigonal-planares Molekül
- eine C_3 -Achse senkrecht zur Molekülebene durch das Boratom
- drei C_2 -Achsen entlang jeder B-H-Bindung
- eine σ_h -Spiegelebene in der Molekülebene und drei σ_v senkrecht dazu, die die C_3 -Achse und je ein Wasserstoffatom enthalten

- die C_3 -Achse ist gleichzeitig S_3 -Drehspiegelachse
- drei Translations-, drei Rotations- und $3n-6 = 6$ Schwingungsfreiheitsgrade

i) C_3O_2

- lineares Molekül
- C_∞ -Achse entlang der Molekülachse
- unendlich viele C_2 -Achsen senkrecht zur Molekülachse durch das Inversionszentrum
- Inversionszentrum i auf dem mittleren Kohlenstoffatom
- eine Spiegelebene σ_h senkrecht zur Molekülachse, die das Inversionszentrum beinhaltet und unendlich viele Spiegelebenen σ_v , die die C_∞ -Achse enthalten
- die C_∞ -Achse ist gleichzeitig S_∞ -Drehspiegelachse
- drei Translations-, zwei Rotations- und $3n-5 = 10$ Schwingungsfreiheitsgrade

Aufgabe 3

Für nicht-lineare Moleküle gilt für die Anzahl der Schwingungsfreiheitsgrade S :

$$S = 3n - 6$$

Dabei steht n für die Anzahl der Atome im Molekül.

Die Alkane besitzen die allgemeine Summenformel C_kH_{2k+2} . Demnach ergibt sich für die Anzahl der Atome n :

$$n = k + 2k + 2 = 3k + 2$$

Eingesetzt in die Gleichung für S erhält man:

$$S = 3 \cdot (3k + 2) - 6 = 9k$$

Für die Alkene gilt die Summenformel C_kH_{2k} . Für n ergibt sich:

$$n = k + 2k = 3k$$

Somit resultiert ein S von:

$$S = 3 \cdot 3k - 6 = 9k - 6$$

Für die Alkine gilt die Summenformel C_kH_{2k-2} . Hier muss das Ethin (C_2H_2 , also $k=2$) extra betrachtet werden, da Ethin das einzige lineare Alkin ist. Für lineare Moleküle gilt für die Anzahl der Schwingungsfreiheitsgrade:

$$S = 3n - 5$$

Da Ethin aus 4 Atomen aufgebaut ist, ergibt sich für S :

$$S = 3 \cdot 4 - 5 = 7$$

Alle anderen Alkine ($k > 2$) sind nicht-lineare Moleküle. Für n gilt:

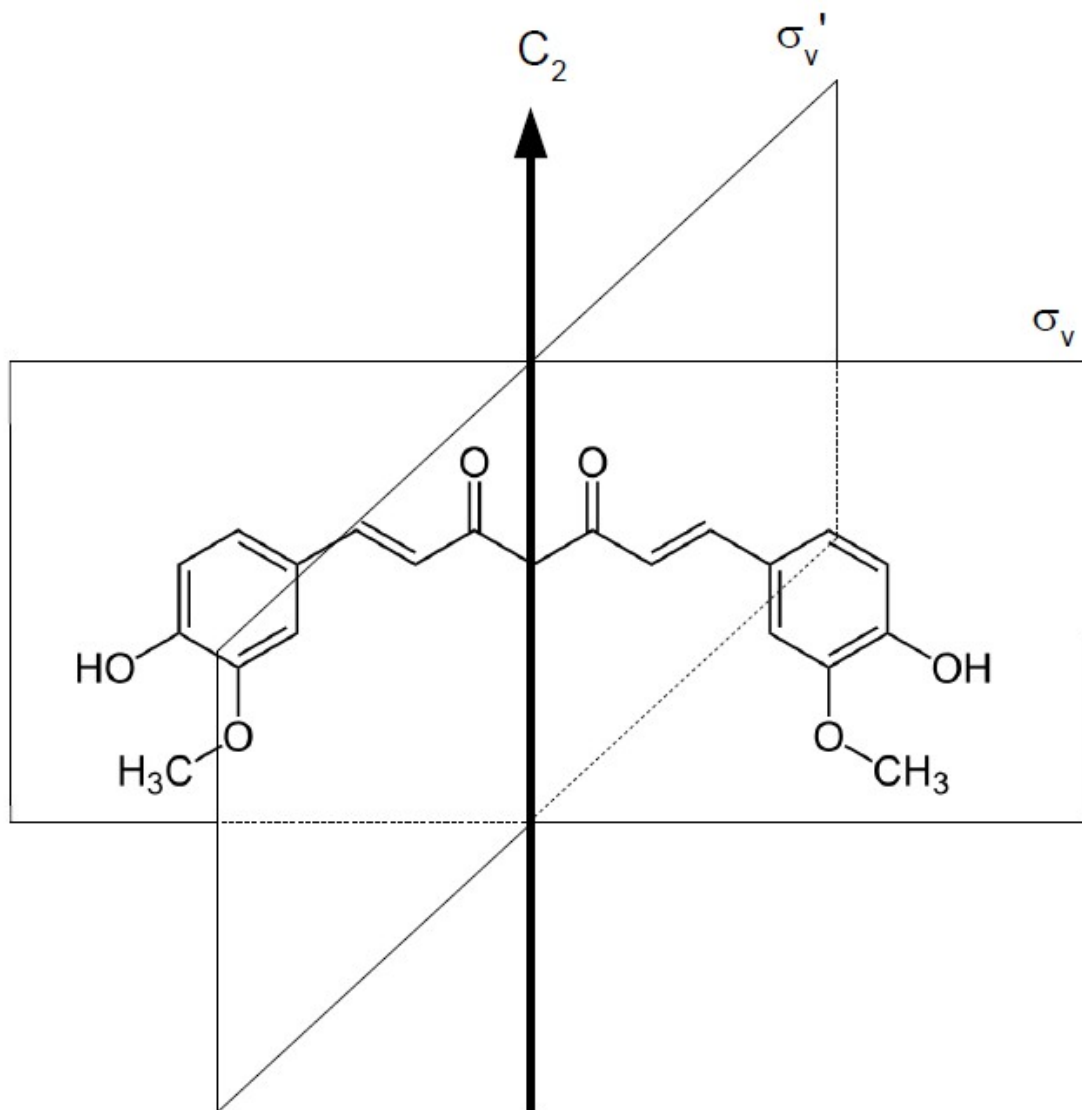
$$n = k + 2k - 2 = 3k - 2$$

Und für S gilt schlussendlich:

$$S = 3 \cdot (3k - 2) - 6 = 9k - 6 - 6 = 9k - 12$$

Aufgabe 4

Das Molekül Curcumin ist in der folgenden Abbildung zusammen mit allen Symmetrieelementen dargestellt.



Mit diesen Symmetrieelementen gehört Curcumin zur Punktgruppe C_{2v} . Damit hat es dieselbe Punktgruppe wie Wasser!