

Kerschis zur Uni ...

Symmetrie in der Chemie und Mathematik - das Beispiel Benzol

Dennis Bucker, Leopold Haffner, Marcel Lücke, Oliver Reif, Roman Schmeichel, Martin Selch, Alexander Stemmler, Sebastian Vaas (alle G1C, Schuljahr 2008/09)

Symmetrioperationen

Das ebene Benzol-Molekül (C_6H_6) wird auf seine Symmetrieelemente und mögliche Symmetrieelemente untersucht:

Symmetrieelement Identität (E):

Diese Symmetrieelemente belässt das Molekül in seiner Ausgangslage, d.h. es wird nicht verändert.

=> Jedes Molekül besitzt dieses Symmetrieelement, also auch Benzol

Symmetrieelement Rotation (C_n):

Das Molekül wird solange gedreht, bis man wieder den Ausgangszustand erreicht hat. Die Anzahl der Drehungen bestimmt die Zähligkeit der sog. Drehachse. Man erkennt, dass Benzol sechs zweizählige und eine sechszählige Drehachse besitzt.

Für die höchstzählige Hauptdrehachse gilt:

$$n = \frac{360^\circ}{\text{Drehwinkel}} = \frac{360^\circ}{60^\circ} = 6$$

Symmetrieelement Inversion (i):

Im Inversionszentrum i wird jedes Atom des Benzolmoleküls gespiegelt und in ein ihm äquivalentes Atom überführt. Das Inversionszentrum liegt also der Mittelpunkt aller 6 C-Atome.

Spiegelung (σ):

Das Benzolmolekül weist mehrere vertikale Spiegelebenen σ_v sowie eine horizontale Spiegelebene σ_h auf.

Drehspiegelung (S_n):

Die Drehspiegelung ist eine Kombination von mehreren Symmetrieelementen. Sie besteht aus einer Spiegelung an einer Ebene und einer Drehung um eine Achse.

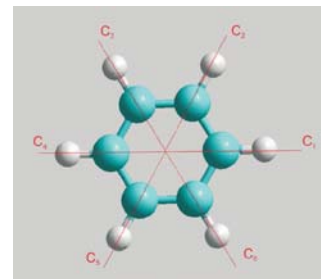


Abb. 1: Das nebenstehende Bild zeigt das organische Benzol-Molekül C_6H_6 . In dieser Darstellung sind die Kohlenstoffatome von C_1 bis C_6 durchnummeriert.

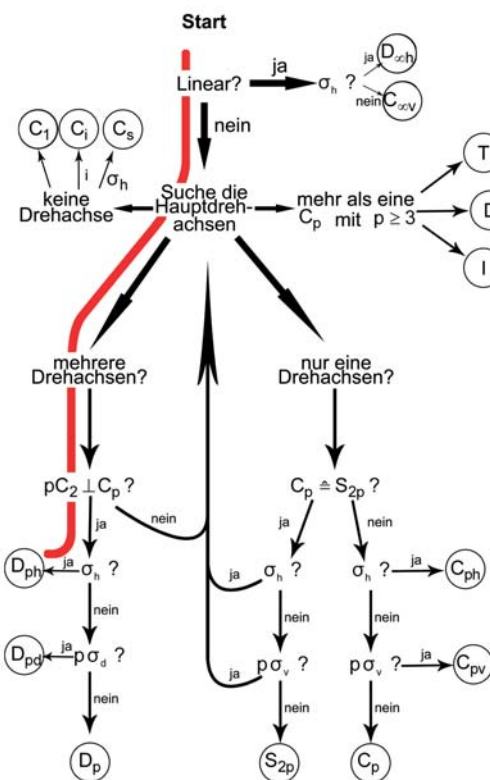
Punktgruppen

In der Punktgruppe werden alle Symmetrieelemente eines Moleküls erfasst. Damit lässt sich auf einfache Weise die Symmetrie eines Moleküls beschreiben.

Kennt man die Symmetrie eines Moleküls, so lassen sich z. B. spektroskopische Eigenschaften der Verbindung vorhersagen.

Mit einem einfachen Flussdiagramm lässt sich jedes Molekül einer Punktgruppe zuordnen. Wie dieses Flussdiagramm funktioniert, zeigen wir anhand von Benzol.

Flussdiagramm zur Ermittlung der Punktgruppe eines Moleküls:



Zuerst überprüft man, ob Benzol linear ist.

Da es nicht linear ist, geht es weiter mit der Suche nach den Hauptdrehachsen.

Benzol hat mehrere Drehachsen

Benzol hat sechs 2-zählige Drehachsen, die senkrecht auf der 6-zähligen Hauptdrehachse liegen. p hat den Wert 6.

Eine horizontale Spiegelebene (σ_h) ist vorhanden.

Ergebnis: Benzol gehört damit zur Punktgruppe D_{6h} .

Modellieren mit Matrizen

Um Symmetrieelemente mathematisch zu erfassen, benötigt man ein neues mathematisches Werkzeug: Die Matrizen

Am Beispiel der Drehung und der Spiegelung sollen die jeweiligen Matrizen beschrieben werden:

Drehung in einer Ebene

Ein Punkt $P(x, y_2)$ wird um den Winkel α gedreht. Die Koordinaten des Bildpunktes werden mit Hilfe der Drehmatrix berechnet:

$$D_{\alpha} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix}$$

Zu einer Drehung um 60° gehört also die Matrix:

$$C_{60^\circ} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Spiegelung an einer Geraden

Ein Punkt P wird an der Geraden $y = m \cdot x$ gespiegelt. Die Koordinaten des Bildpunktes werden mit Hilfe der Spiegelmatrix berechnet:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \frac{1-m^2}{m^2+1} & \frac{2m}{m^2+1} \\ \frac{2m}{m^2+1} & \frac{m^2-1}{m^2+1} \end{pmatrix}$$

Spiegelt man den Punkt $C_1(1|0)$ an der Geraden $y = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot x$

$$C_1(1|0) \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1-\frac{1}{3}}{\frac{1}{3}+1} \\ \frac{2 \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}}{\frac{1}{3}+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2/3}{4/3} \\ \frac{2/\sqrt{3}}{4/3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} = C_2$$

