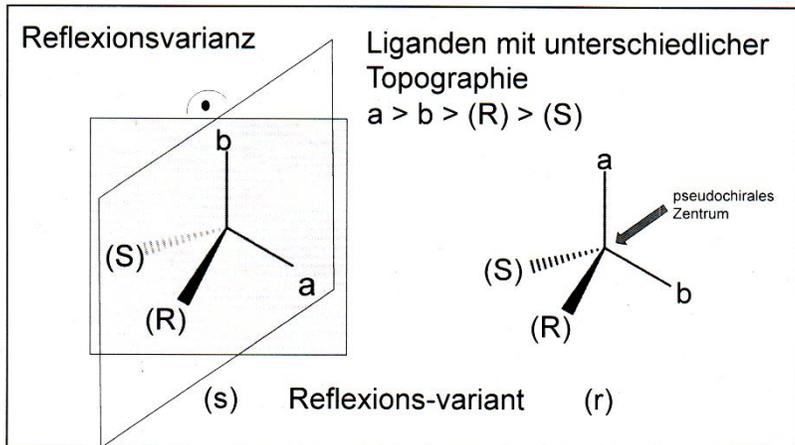
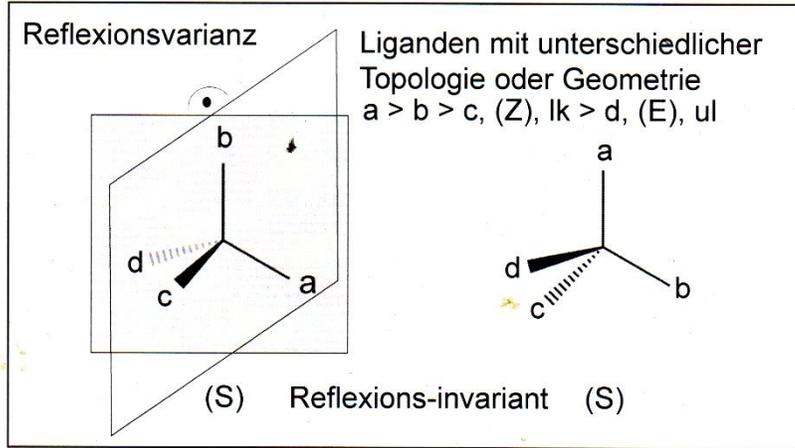
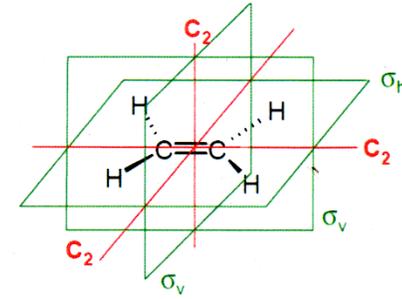


Bestimmung der Punktgruppen

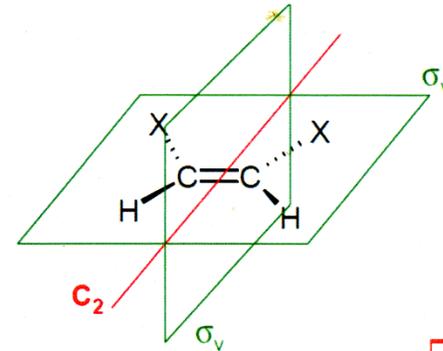


C_2H_4 oder C_2X_4
 Eine der drei C_2 -Achsen muss als bevorzugt angenommen werden: hier die senkrechte.



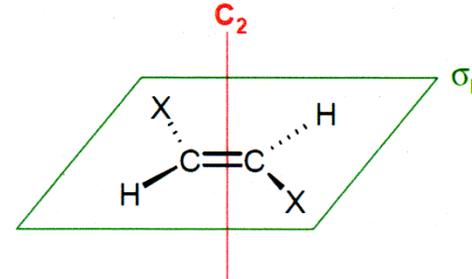
D_{2h}

$C_2H_2X_2$
 1,2-cis- X_2



C_{2v}

$C_2H_2X_2$
 1,2-trans- X_2



C_{2h}

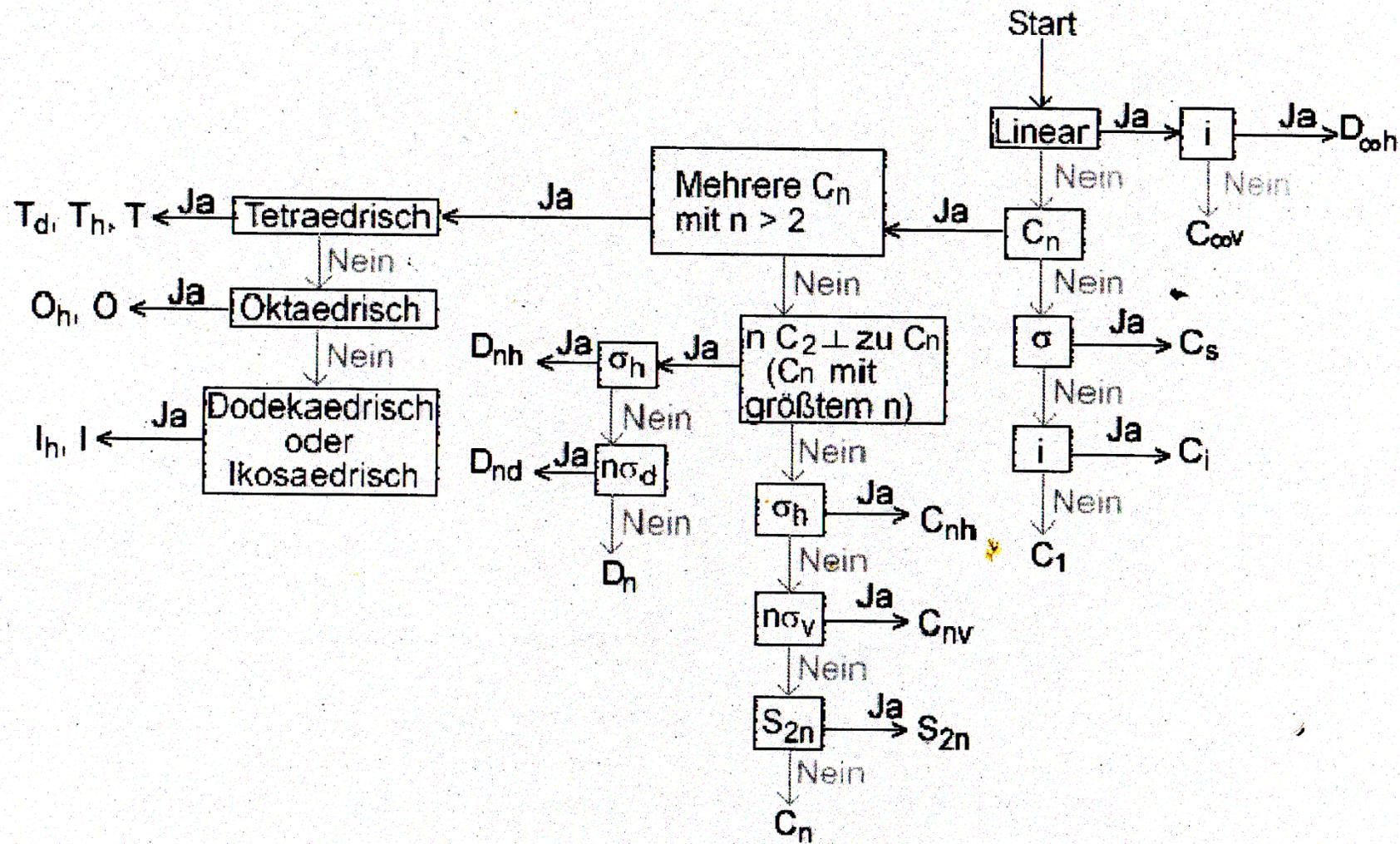
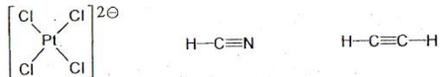
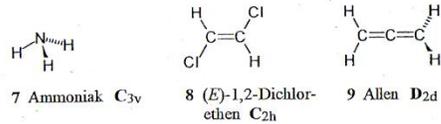
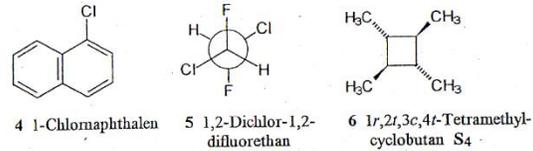
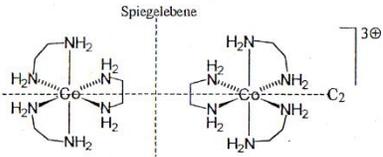
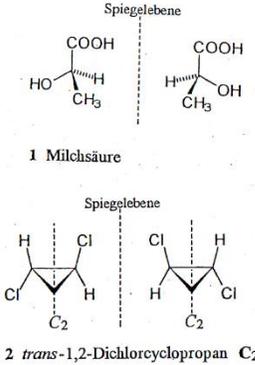


Tabelle 1.2 Punktgruppen nach Schönflies

Symbol	Symmetrieelemente	Chiralität	Beispiele
C_1	keine, asymmetrisch	chiral	1
C_n	C_n ($n > 1$), dissymmetrisch	chiral	2
D_n	$C_n, n C_2$, dissymmetrisch	chiral	3
C_s	σ	achiral	4
C_i	i	achiral	5
S_n	S_n ($n > 2$, geradzahlig)	achiral	6
C_{nv}	$C_n, n \sigma_v$	achiral	7
C_{nh}	C_n, σ_h	achiral	8
D_{nd}	$C_n, n C_2, n \sigma_v$	achiral	9
D_{nh}	$C_n, n C_2, n \sigma_v, \sigma_h$	achiral	10
$C_{\infty v}$	$C_{\infty}, \infty \sigma_v$	achiral	11
$D_{\infty h}$	$C_{\infty}, \infty \sigma_v, \sigma_h$	achiral	12
T_d	4 C_3 , 3 C_2 , 6 σ	achiral	13
O_h	3 C_4 , 4 C_3 , 6 C_2 , 9 σ	achiral	14
K_h	alle	achiral	freie Atome



Sequenzregeln 1-5 zur Rangfestlegung der Liganden

A) Topologische Eigenschaften

- 1) hohe Atom-Nr. > niedere Atom-Nr. (z.B. $Br > Cl$; $O > N > C$)
- 2) hohe Masse > niedere Masse (z.B. $D > H$; $^{14}C > ^{13}C > ^{12}C$)

B) Geometrische Eigenschaften

- 3) (Z) > (E) (z.B. cis-Prop-1-enyl > trans-Prop-1-enyl-Ligand)
- 4) lk > ul (z.B. (R/R), (S/S) > (R/S), (S/R))

C) Topographische Eigenschaften

- 5) (R) > (S); (M) > (P)

Regeln a-d zur Festlegung des hierarchischen Graphs

a) (Definition) Alle Atome eines Liganden werden nach ihrer topologischen Entfernung geordnet. Alle Atome mit identischer topologischer Entfernung bilden Sphären, die nummeriert werden (I, II, III, ... usw.). Die Atome der Sphäre I heißen proximal (p, p', p'', \dots usw.). Atome der Sphäre II, III, ... usw. sind durch 2, 3, ... usw. Bindungen vom stereogenen Zentrum getrennt.

b) (Regel) Atome der n-ten Sphäre haben höheren Rang als Atome der (n+1)-ten Sphäre.

c) (Regel) Der Rang der Atome der n-ten Sphäre folgt dem Rang der Atome der (n-1)-ten Sphäre, an die sie gebunden sind.

d) (Regel) Atome der n-ten Sphäre mit gleichem Rang wie Atome der (n-1)-ten Sphäre (an die sie gebunden sind) werden nach den Sequenzregeln 1-5 (s.o.) behandelt. Zuerst wird der gesamte Graph nach Regel 1) behandelt. Falls keine Entscheidung möglich ist, wird der gesamte Graph nach Regel 2) behandelt; usw.

Beispiel rechts:

1. Sequenzregel 1) Rang nach Atom Nr. ($Cl > O > C > H$):
 - 1.1. Sphäre I: $p = p'$ (keine Entscheidung) \rightarrow
 - 1.2. Sphäre II: $(C, C, H) = (C, C, H)'$ (keine Entscheidung) \rightarrow
 - 1.3. Sphäre III: zuerst Atome an C_{II-1} : $(C, H, H) = (C, H, H)'$ (keine Entscheidung) \rightarrow dann Atome an C_{II-2} : $(O, C, H) = (O, C, H)'$ (keine Entscheidung) \rightarrow
 - 1.4. Sphäre IV: zuerst Atome an O_{III} , da $O > C$: $(H) = (H)'$ (keine Entscheidung) \rightarrow dann Atome an C_{III-1} : $(C, H, H) = (C, H, H)'$ (keine Entscheidung) \rightarrow dann Atome an C_{III-2} : $(C, H, H) < (Cl, C, H)'$ \rightarrow

Entscheidung: rechter Ligand > linker Ligand \rightarrow (R)!

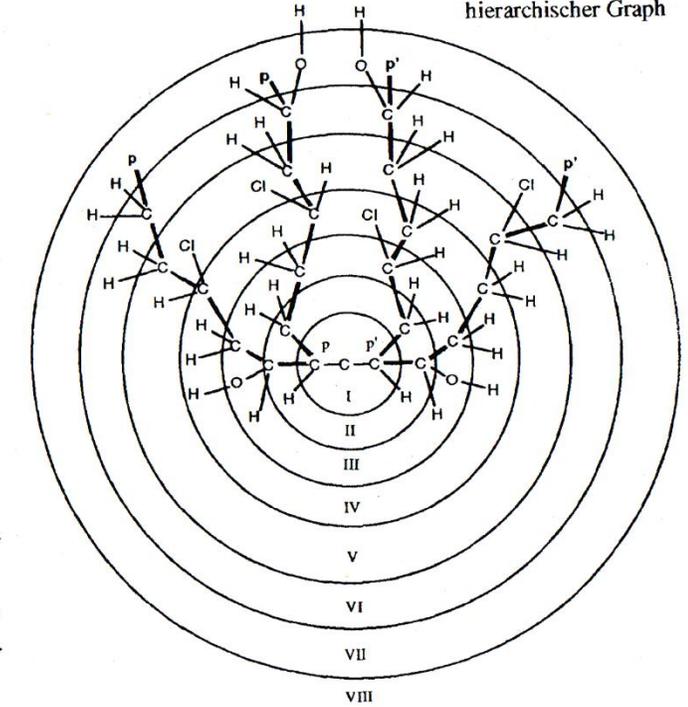
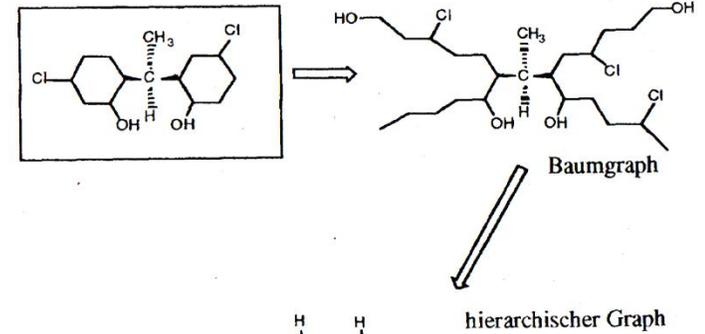




Table 1. Cores and Types of Stereogenic Units

Cores	Chirality Units ^a	"Pseudoasymmetric" Units ^a
stereogenic center		
(1)	chirality center <i>R/S</i> 	"pseudoasymmetric" center <i>r/s</i>
stereogenic axis		
(2)	trigonal-trigonal chirality axis <i>M/P</i> 	"pseudoasymmetric" axis <i>m/p</i>
(3)	trigonal-digonal Analogous: A or B ≡ (o)	
(4)	trigonal-tetrahedral 	
stereogenic double bond		
(5)		

^a More appropriate may be the terms stereogenic units of type 1 and 2.

