

STEREOCHIMICA

due concetti fondamentali

CHIRALITA'

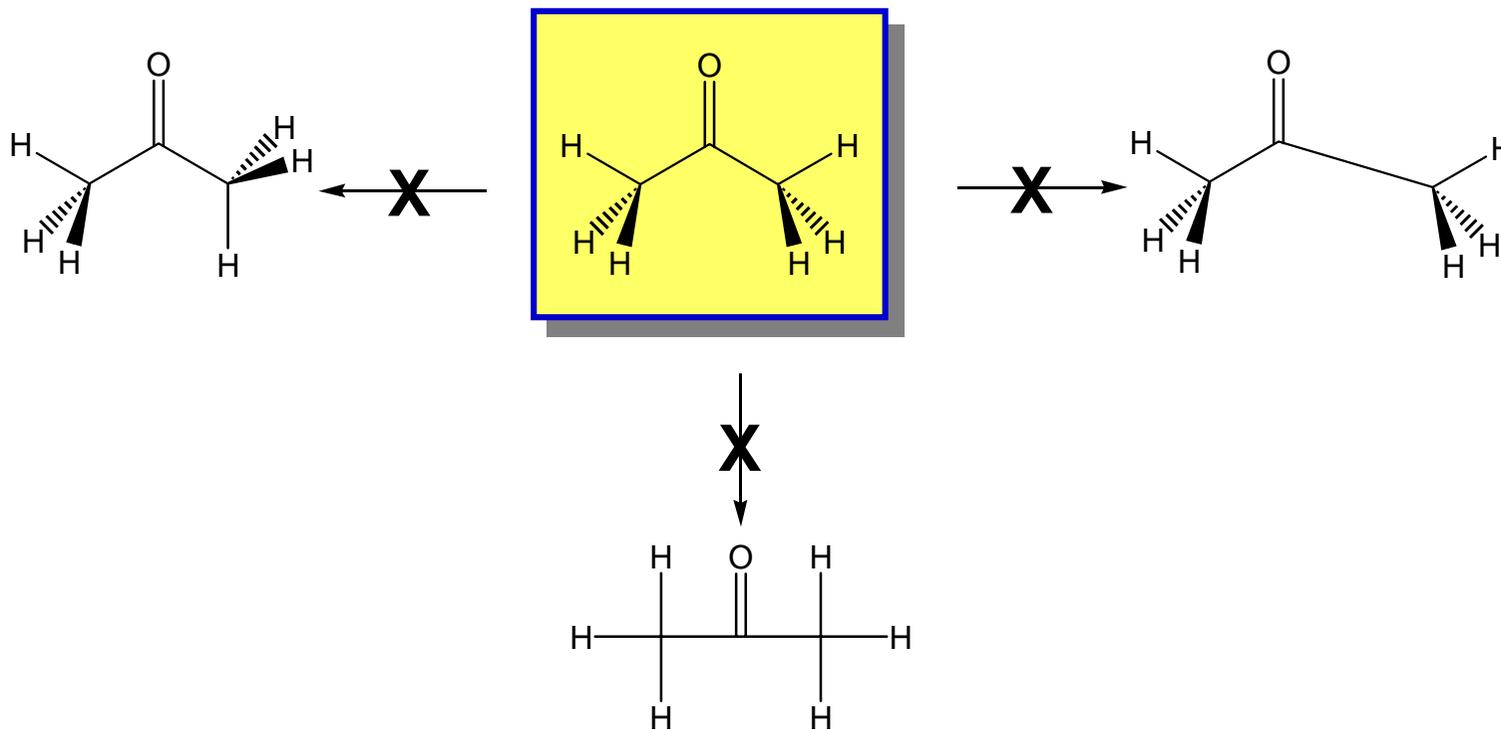
STEREOGENICITA'



SIMMETRIA

Valutazione della Simmetria di una Molecola

- ✓ La molecola deve essere rappresentata da un modello molecolare **ICONICO**, che ha la forma della molecola ma non le sue dimensioni né le sue funzioni
- ✓ Il modello molecolare deve essere **rigido ed immutabile**
- ✓ Il modello molecolare deve rappresentare la molecola nella conformazione a **più elevata simmetria**, compatibilmente con le sue caratteristiche strutturali

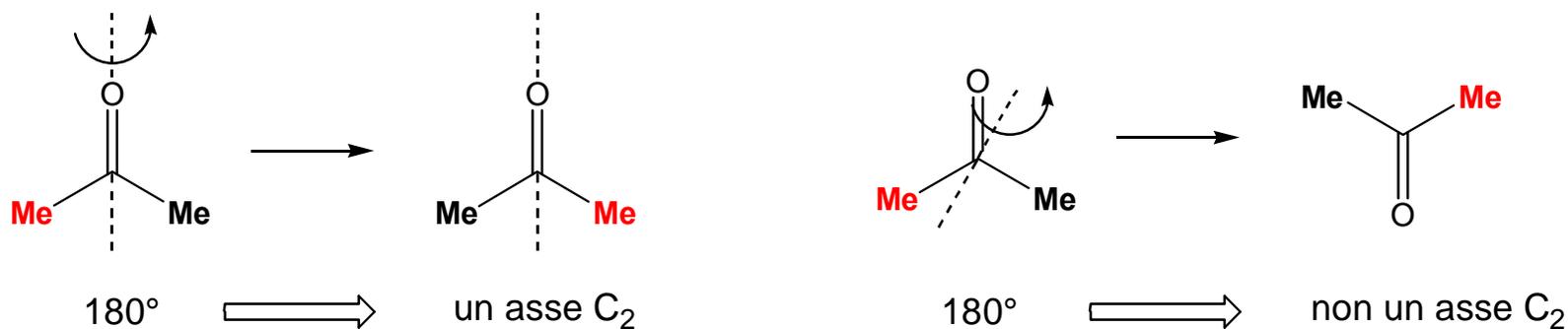


Elementi di Simmetria

Gli elementi di simmetria sono entità geometriche definite da
rette, piani, punti

Elementi di Simmetria	Operazioni	Simbolo
Asse di Rotazione Semplice o Asse Proprio	Rotazione	C
Piano di Simmetria	Riflessione	σ
Asse di Roto-Riflessione o Asse Improprio	Rotazione/Riflessione	S
Centro di Inversione	Inversione	i

Un modello possiede un certo **elemento di simmetria** se eseguendo un'**operazione di simmetria** si ottiene un modello del tutto indistinguibile dall'originale



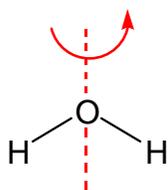
L'operazione di simmetria deve dare un modello **ISOMETRICO**



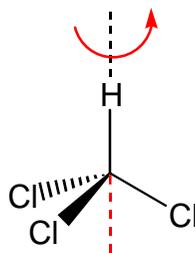
L'Operazione di Simmetria è un'**ISOMETRIA**

Asse di Rotazione Semplice o Asse Proprio C_n $1 < n < \infty$

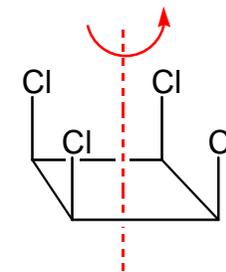
Un **asse di rotazione proprio** (C_n) è un asse che passa per l'oggetto in esame tale per cui una rotazione di $360^\circ/n$ intorno a quell'asse fornisce un modello dell'oggetto indistinguibile dall'originale



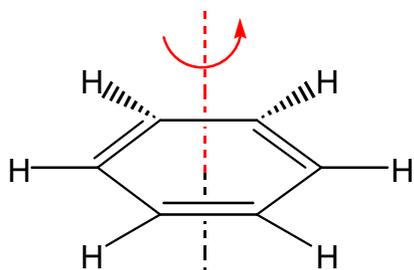
C_2



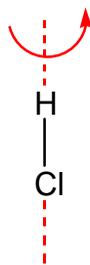
C_3



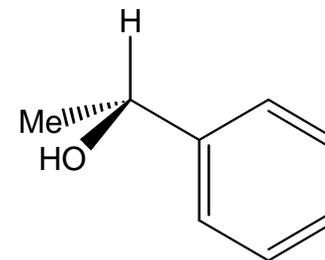
C_4



C_6



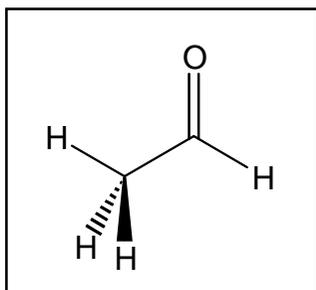
C_∞



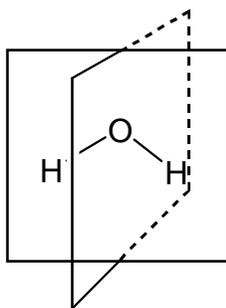
C_1

Piano di Riflessione σ

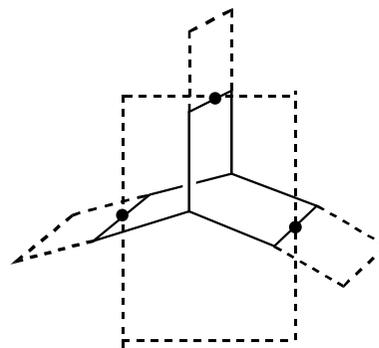
Un **piano di riflessione** (σ) è un piano che divide l'oggetto in modo che la metà del modello da una parte del piano si riflette esattamente nell'altra metà dall'altra parte del piano



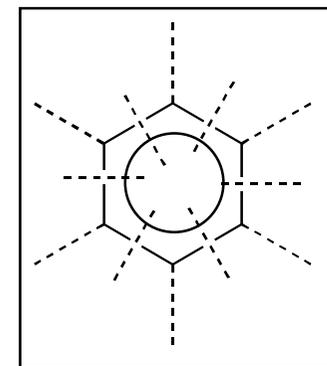
1σ



2σ

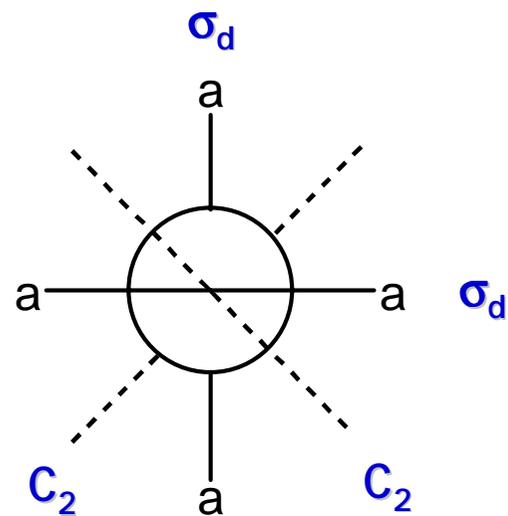
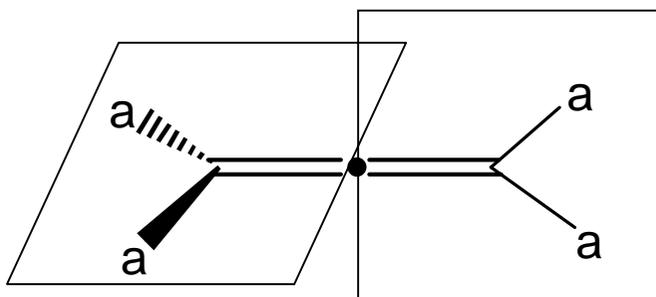
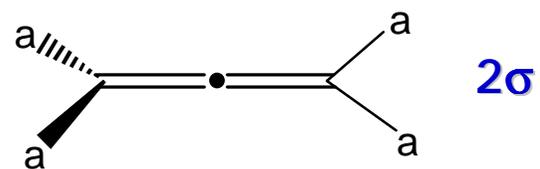
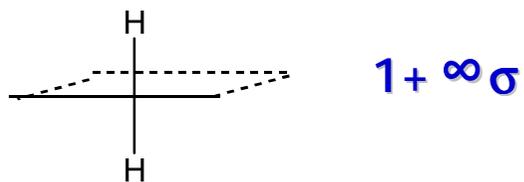


4σ



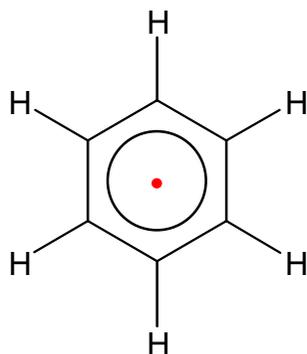
7σ

Piano di Riflessione σ

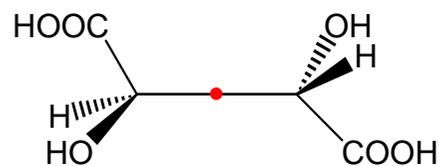


Centro di Inversione i

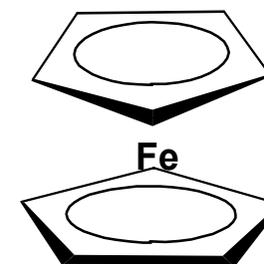
Un **centro di inversione (i)** è un punto di una molecola tale per cui muovendosi su una retta in direzioni opposte partendo da quel punto si incontrano gli stessi atomi ad uguali distanze



i nel vuoto



i su un legame

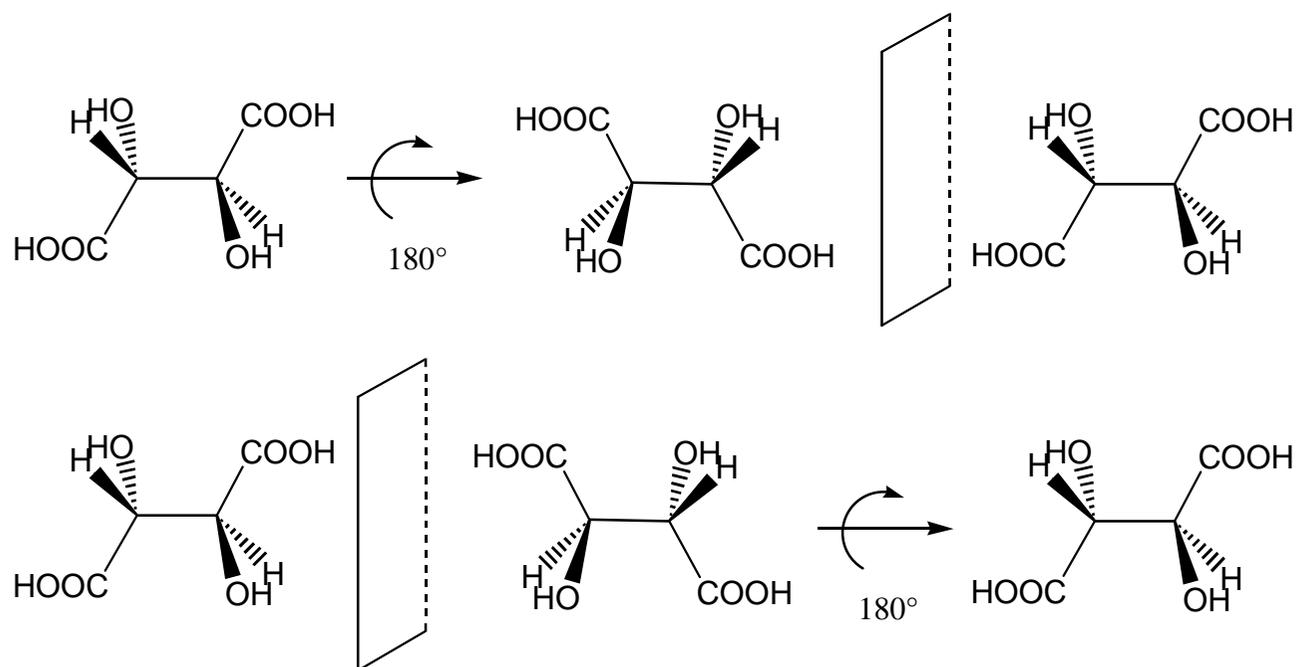


i su un atomo

Asse di Roto-Riflessione S_n

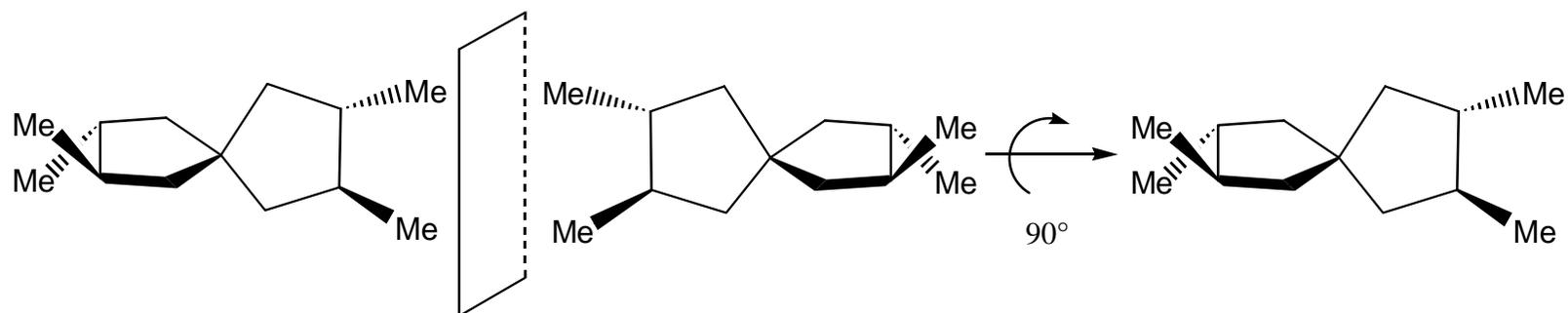
Un **asse di roto-riflessione** (S) è la combinazione di due operazioni distinte: **rotazione** rispetto ad un asse C_n seguita da una **riflessione** attraverso un piano σ_h rispetto all'asse stesso.

S_2

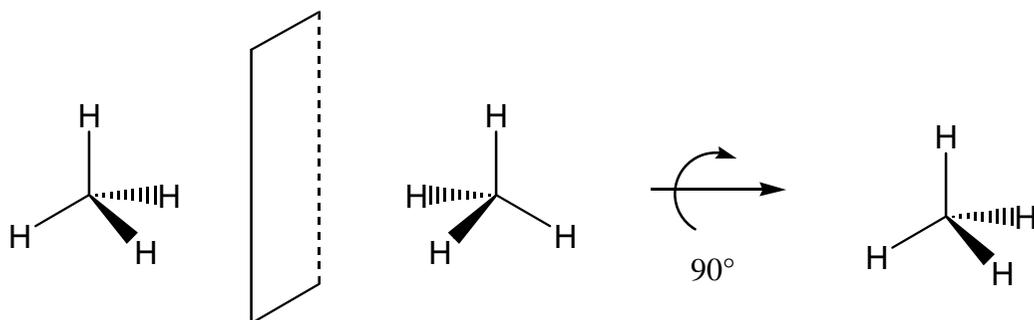


Asse di Roto-Riflessione S_n

S_4



Spirano di McCasland



Asse di Roto-Riflessione S_n

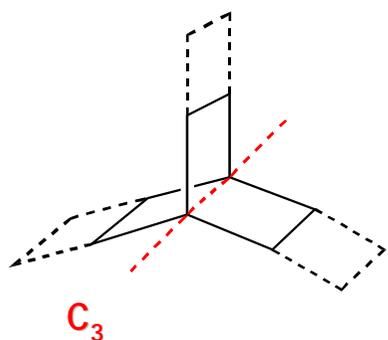
$$\text{se } n=1 \qquad S_1=\sigma$$

$$\text{se } n=2 \qquad S_2=i$$

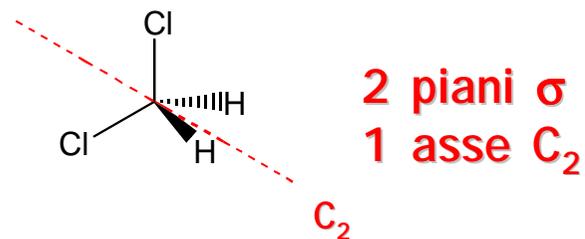
Per cui con un asse S_n si possono definire sia piani di simmetria (S_1) e centri di inversione (S_2)

Relazione tra gli elementi di simmetria

Se una molecola ha n piani di simmetria che si intersecano con un angolo di $180^\circ/n$ avrà anche un asse C_n co-lineare con l'intersezione

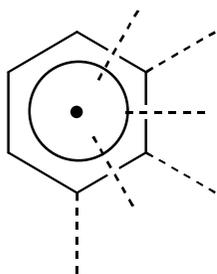


3 piani σ
1 asse C_3

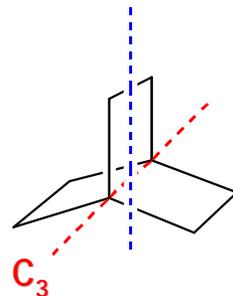


2 piani σ
1 asse C_2

Se una struttura ha n assi C_2 che si intersecano a angoli di $180^\circ/n$ allora avrà anche un asse C_n perpendicolare ai C_2 che passa sempre per l'intersezione



6 assi C_2
1 asse C_6



3 assi C_2
1 asse C_3

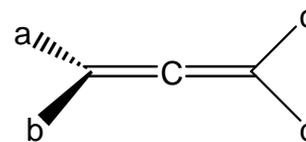
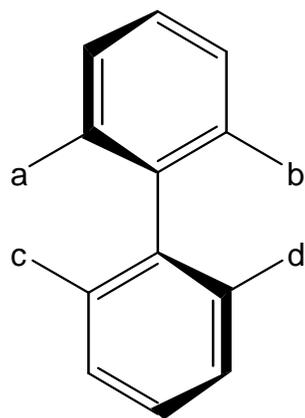
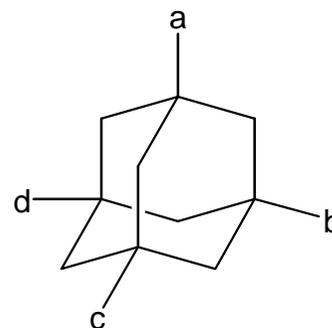
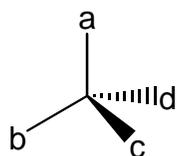
Le varie combinazioni possibili sono stati codificati in gruppi di elementi di simmetria che sono detti gruppi puntuali

Elementi di simmetria del primo ordine (C_n)

Elementi di simmetria del secondo ordine (σ , S_n , i)

Gruppi puntuali con solo elementi di simmetria del primo ordine

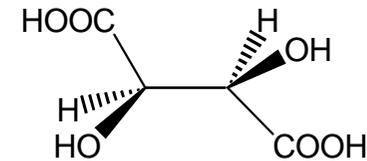
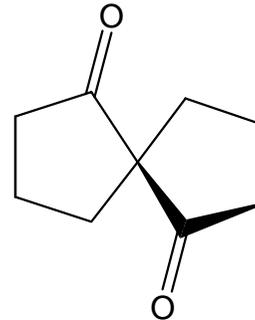
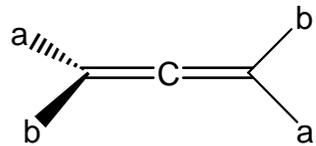
Gruppo C_1 Elementi 1 C_1 - Molecole asimmetriche



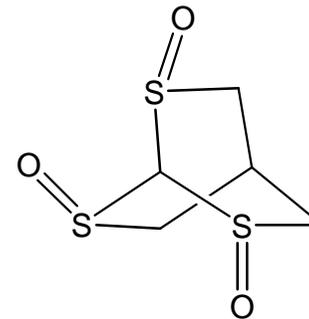
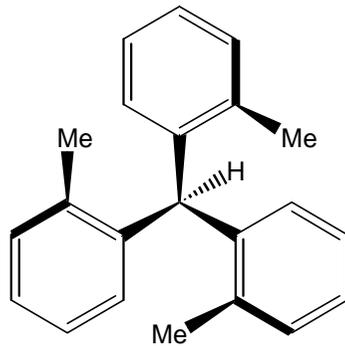
Gruppi puntuali con solo elementi di simmetria del primo ordine

Gruppo C_n Elementi 1 C_n ($n > 1$) - Molecole dissimmetriche

C_2



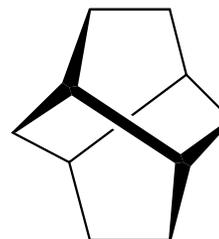
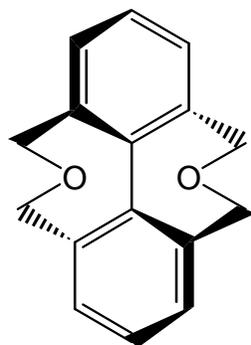
C_3



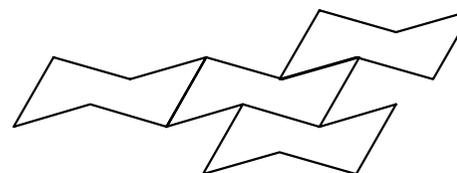
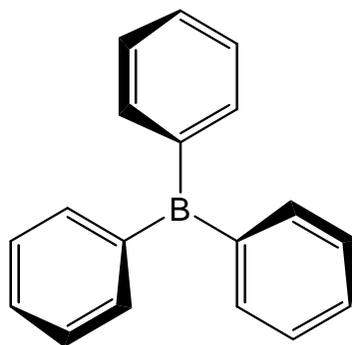
Gruppi puntuali con solo elementi di simmetria del primo ordine

Gruppo D_n Elementi $1 C_n + n C_2$ ($n > 1$) - Molecole dissimmetriche

D_2

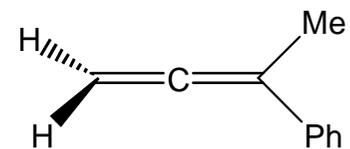
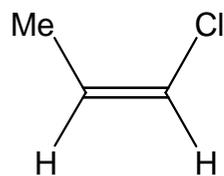
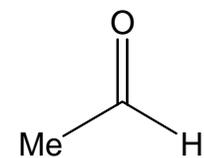
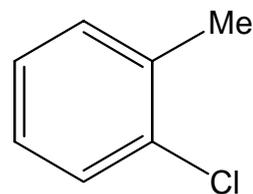
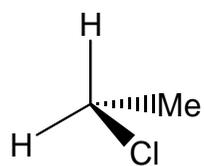


D_3



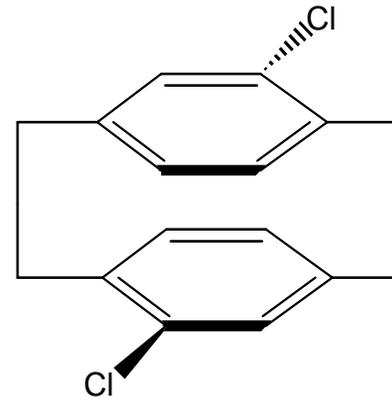
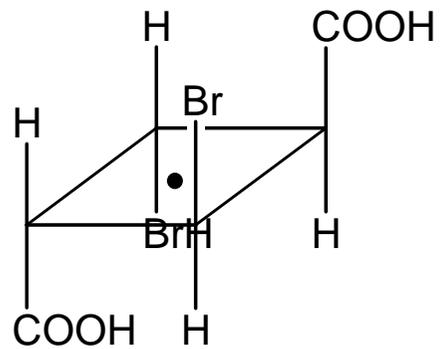
Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo C_S Elementi $\sigma=S_1$ solo un piano



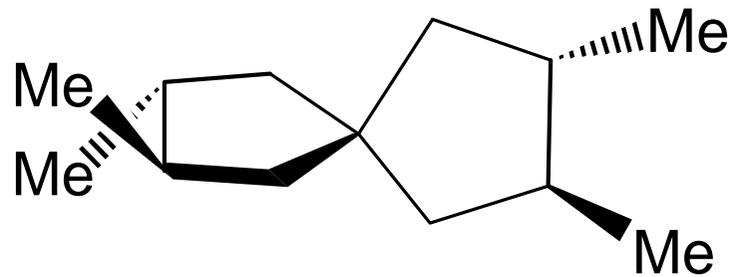
Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo C_i Elementi $i=S_2$ solo un centro di inversione



Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

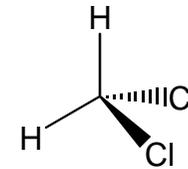
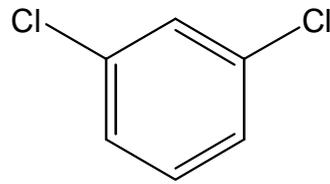
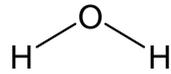
Gruppo S_n Elementi $1 S_n$ ($n > 2$) non ci sono σ o i



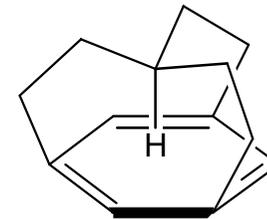
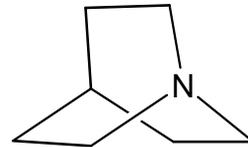
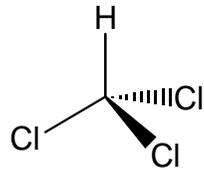
Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo C_{nv} Elementi $1 C_n + n\sigma_v$ n piani su σ

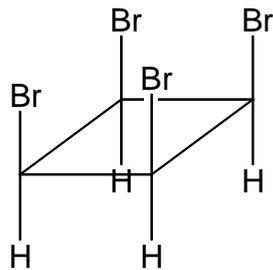
C_{2v}



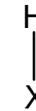
C_{3v}



C_{4v}



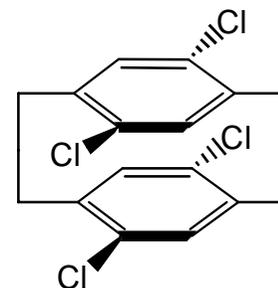
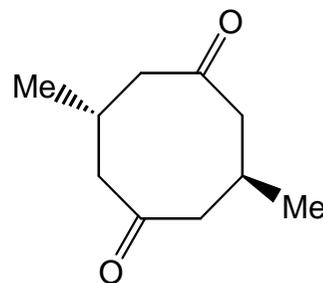
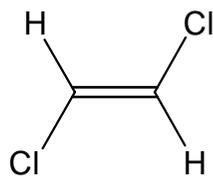
$C_{\infty v}$



Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo C_{nh} Elementi $1 C_n + \sigma_h$ per n =pari c'è anche i

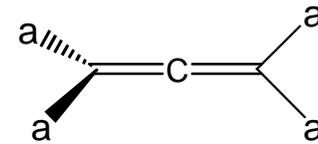
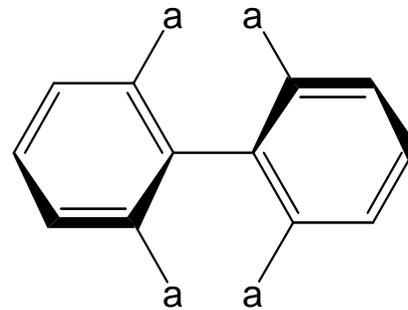
C_{2h}



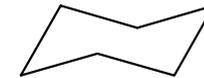
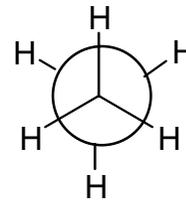
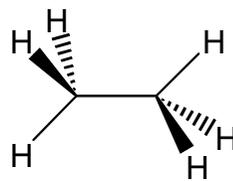
Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo D_{nd} Elementi $1 C_n + nC_2 + n\sigma_d$ per n =dispari c'è anche i

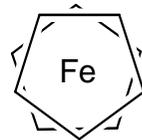
D_{2d}



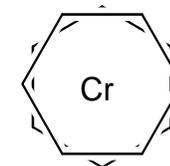
D_{3d}



D_{5d}



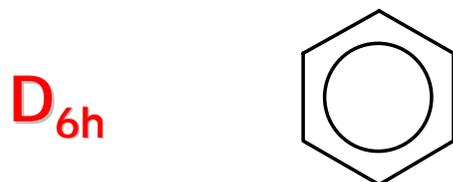
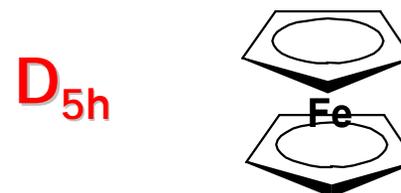
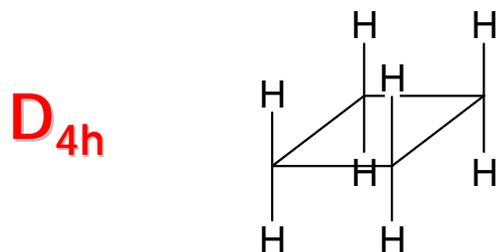
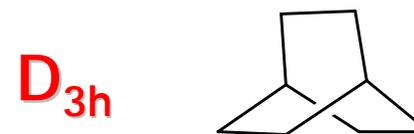
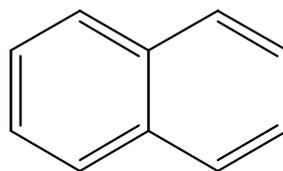
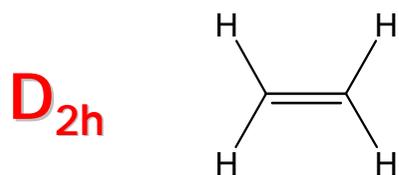
D_{6d}



Gruppi puntuali con elementi di simmetria del secondo ordine

Gruppo D_{nh} Elementi $1 C_n + nC_2 + n\sigma_v + \sigma_h$

Gruppo ad altissima simmetria



Gruppi Puntuali Principali

Gruppi Chirali		Gruppi Achirali	
Tipo di gruppo	Elementi	Tipo di gruppo	Elementi
C_1	Nessun elemento di simmetria (asimmetrico)	C_s	σ
C_n	C_n ($n > 1$) (dissimmetrico)	S_n	S_n (n pari)
D_n	C_n n C_2 (dissimmetrico)	C_{nv}	C_n , $n \sigma_v$
		C_{nh}	C_n , σ_h
		D_{nd}	C_n , $n C_2$, $n \sigma_n$
		D_{nh}	C_n , $n C_2$, $n \sigma_n$, σ_h
		T_d	4 C_3 , 3 C_2 , 6 σ
		O_h	3 C_4 , 4 C_3 , 6 C_2 , 9 σ
		K_h	Tutti gli elementi di simmetria