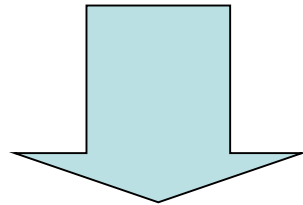


Stereochimica

DUE CONCETTI FONDAMENTALI

STEREOGENICITA'

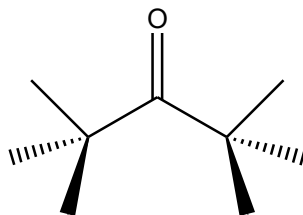
CHIRALITA'



SIMMETRIA

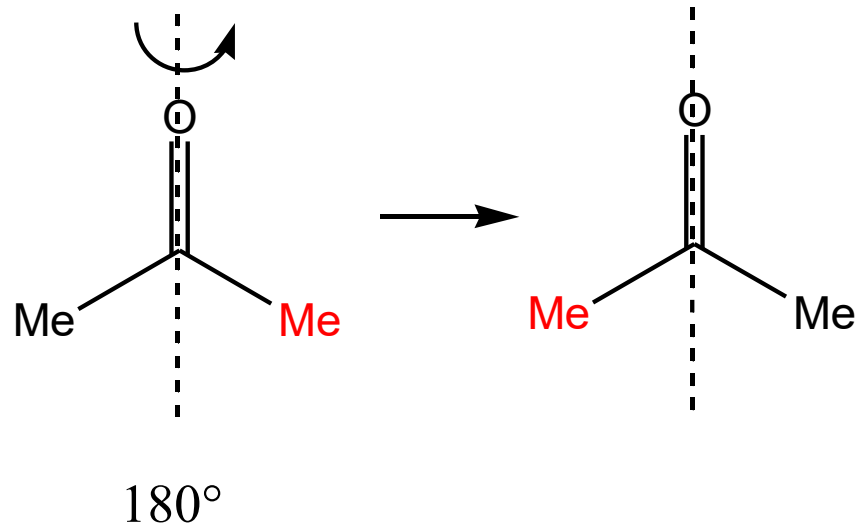
Analizzare la simmetria

- 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



Analizzare la simmetria

- Un oggetto finito (la nostra molecola rigida) possiede un elemento di simmetria se eseguendo un'operazione di simmetria si ottiene un arrangiamento del tutto indistinguibile dall'originale.

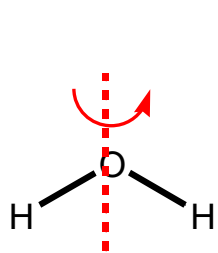


Elementi e operazioni di simmetria

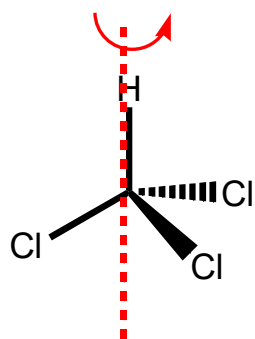
Elementi di simmetria	Operazioni di simmetria	Simbolo
Asse di rotazione semplice o asse proprio	Rotazione	C_n
Piano di Simmetria	Riflessione	σ
Asse di roto-riflessione o asse improprio	Rotazione/riflessione	S_n
Centro di inversione	Inversione	i

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

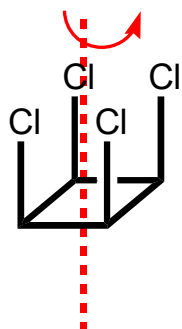
- Un asse di rotazione proprio (C_n) è un asse che passa per l'oggetto in esame, tale per cui una rotazione di $360^\circ/n$ intorno a quell'asse fornisce un arrangiamento dell'oggetto indistinguibile dall'originale



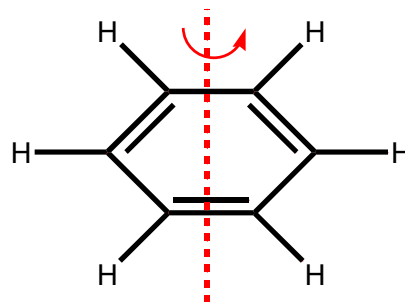
C_2



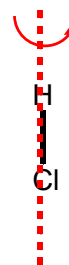
C_3



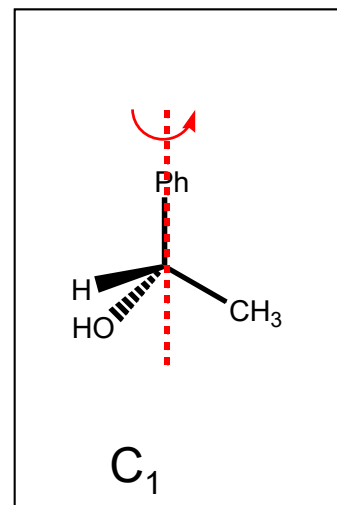
C_4



C_6



C_∞

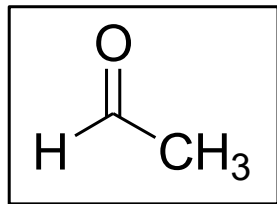


C_1

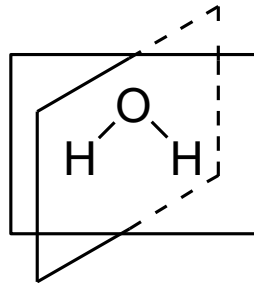
Asse di ordine maggiore: **Asse principale**

Piano di Riflessione σ

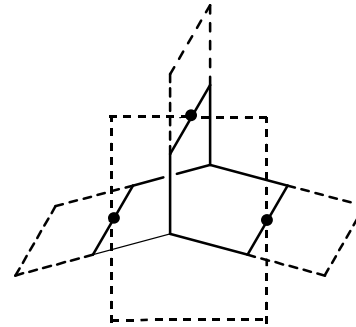
- Un piano di riflessione (σ) è un piano che divide l'oggetto in modo che la metà del modello da una parte del piano si riflette esattamente nell'altra metà dall'altra parte del piano



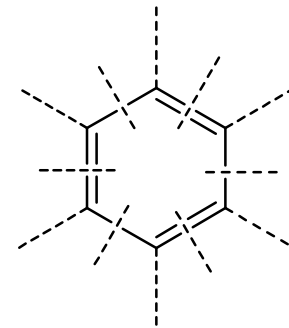
1σ



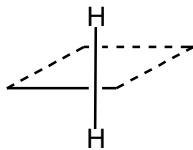
2σ



4σ

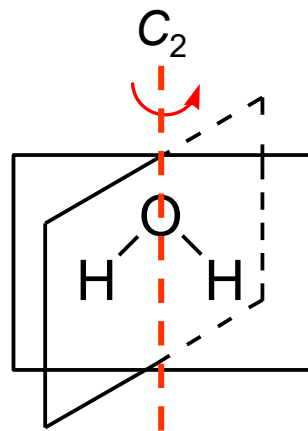


7σ

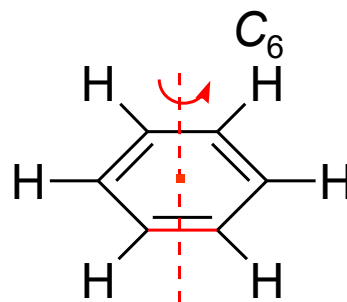


$1 + \infty\sigma$

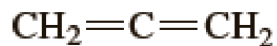
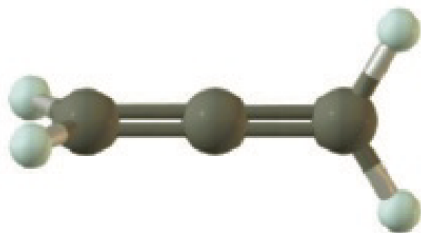
Relazione tra gli elementi di simmetria



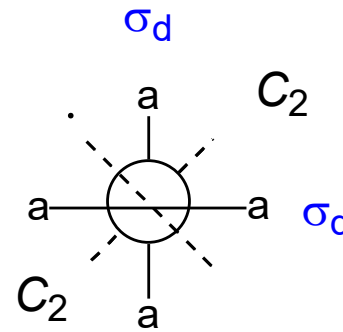
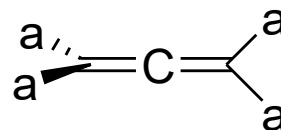
σ_v



σ_h



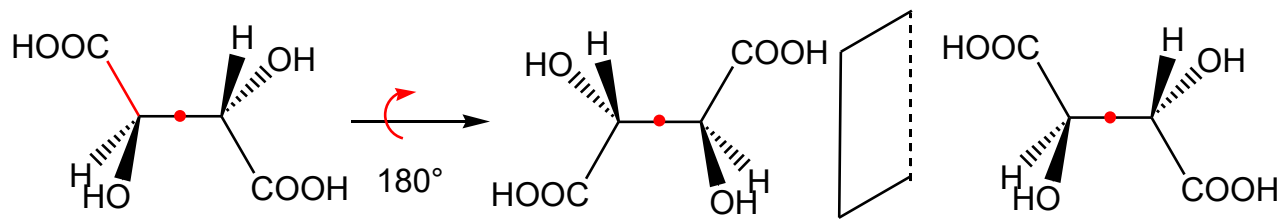
1,2-Propadiene
(Allene)



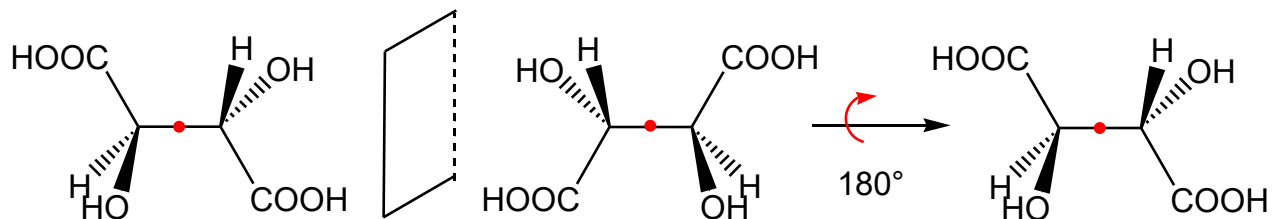
Asse di roto-riflessione o asse improprio



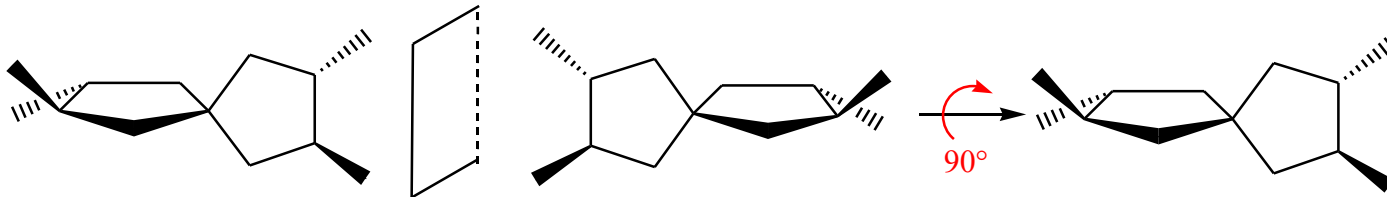
- Una roto-riflessione (asse S_n) è la combinazione di due operazioni distinte: rotazione rispetto ad un asse C_n seguita da una riflessione attraverso un piano σ_h rispetto all'asse stesso



Acido tartarico meso

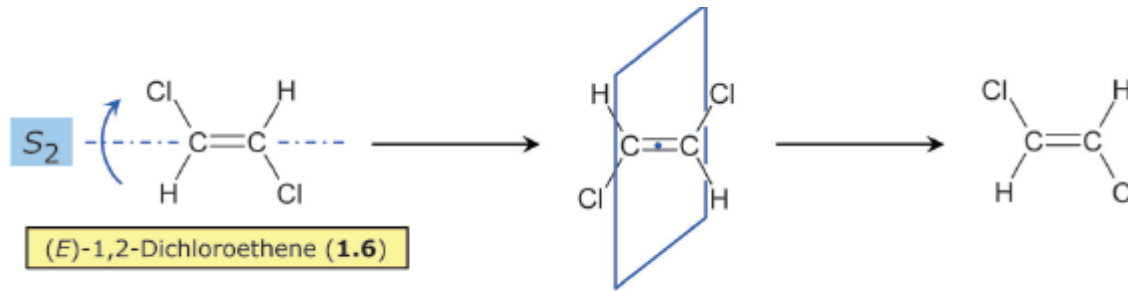


Roto-riflessione S_n



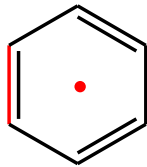
Spirano di Mc Casland

S_4

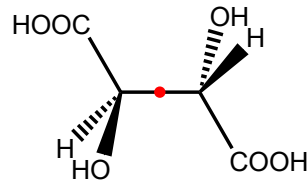


Centro di Inversione *i*

- 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

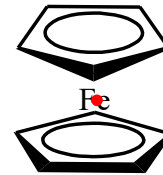


i nel vuoto



i su un legame

Acido tartarico
meso



i su un atomo

Ferrocene sfalsato

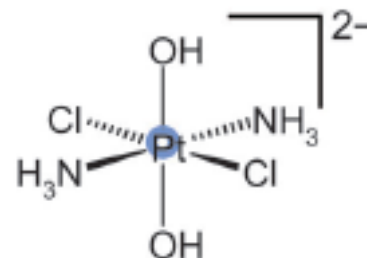
i corrisponde a S_2

Centro di Inversione i

Center of symmetry (Operation of inversion)

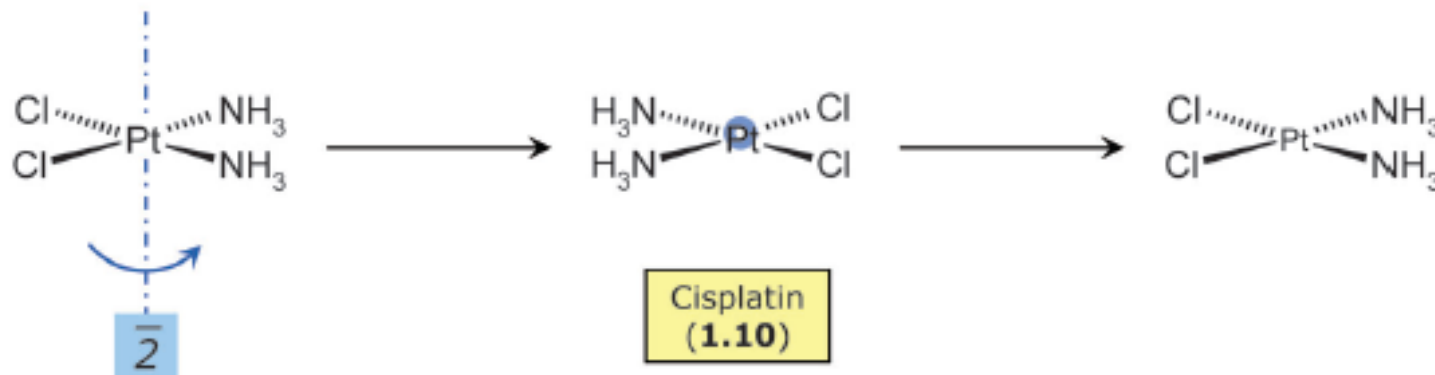


Ethene (**1.8**)



all-*trans*-(Diamino)(dichloro)(dihydroxy)platinate(IV) anion (**1.9**)

Operation of rotary inversion



Cisplatin (**1.10**)

Gruppi di punto

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

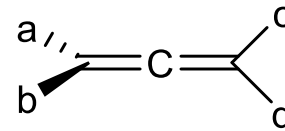
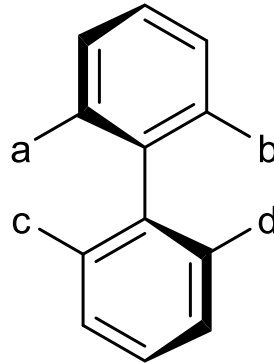
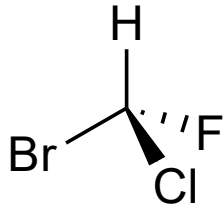
Le varie combinazioni possibili sono state codificate in gruppi di elementi di simmetria che sono detti **gruppi puntuali** o **gruppi di punto**.

Gruppi di punto chirali

1. Solo elementi di simmetria del primo ordine

Gruppo C_1

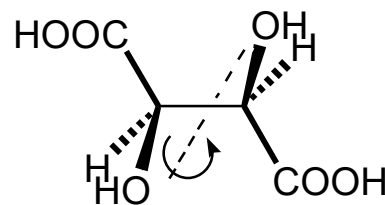
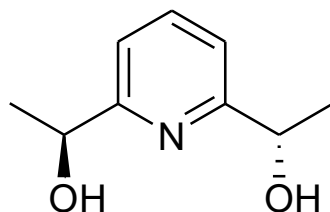
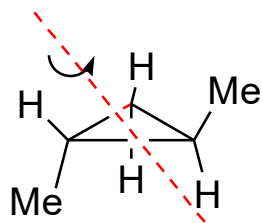
Elementi 1 C_1 - Molecole asimmetriche



Gruppi di punto chirali

Gruppo C_n

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



Raro per $n > 2$

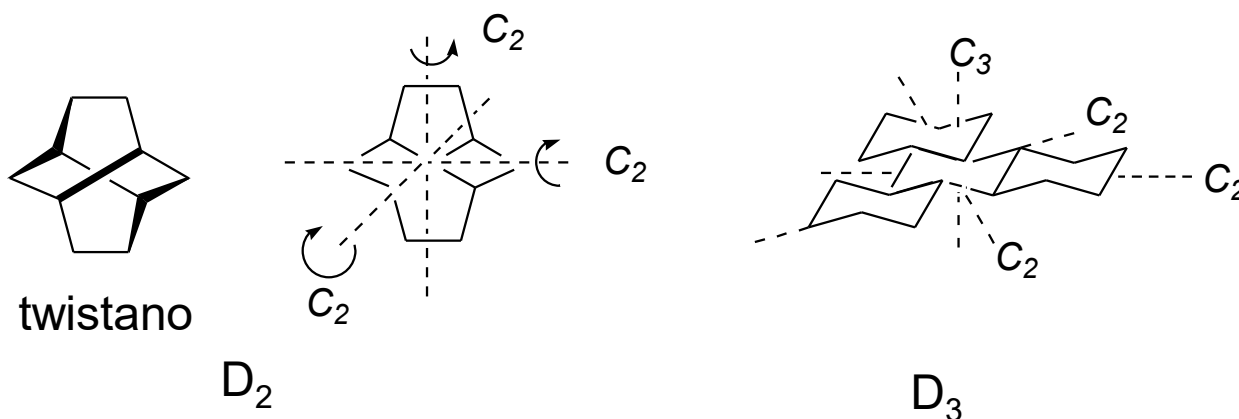
C_2

Elementi 1 C_n ($n > 1$)

Gruppi di punto chirali

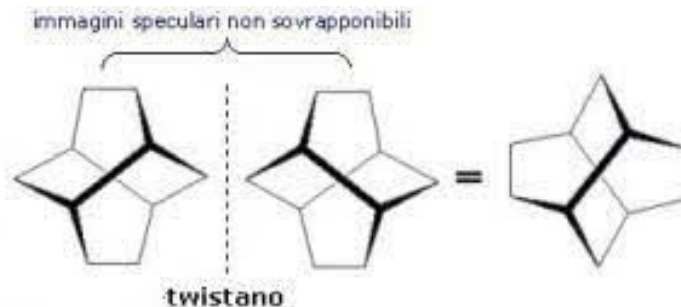
Gruppo D_n ($n > 1$) (DIEDRO)

Molecole dissimmetriche



Elementi: $1 C_n + nC_2$ ($n > 2$)
 $n=2$: no asse principale

Alleni, bifenili, spirani..



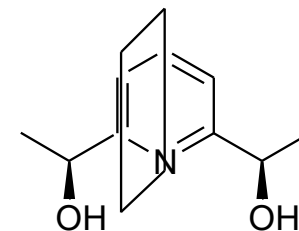
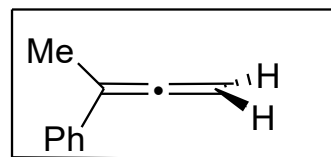
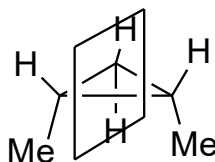
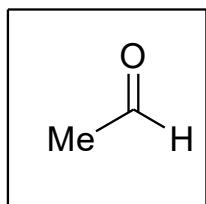
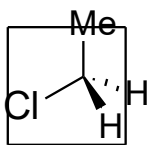
Gruppi di punto achirali

Ogni gruppo puntuale con uno o più elementi σ , i , S_n è achirale

Elementi di simmetria del secondo ordine

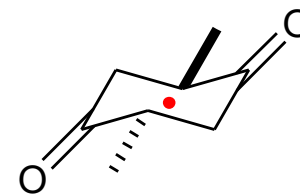
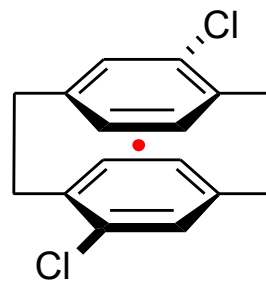
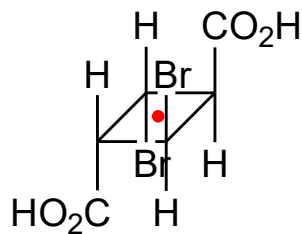
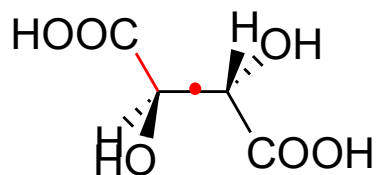
Gruppo C_s

Elementi: solo 1σ (nessun C_n) = S_1



Gruppi di punto achirali

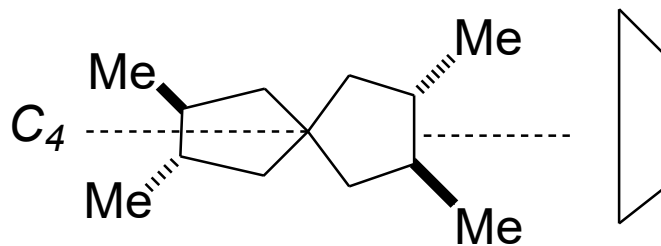
Gruppo S_n elementi: 1 S_n
 $n = 2$: Gruppo $S_2 = C_i$
Solo un centro di inversione



Gruppi di punto achirali

Gruppo S_n : elementi: 1 S_n

n pari >2 non ci sono σ o i

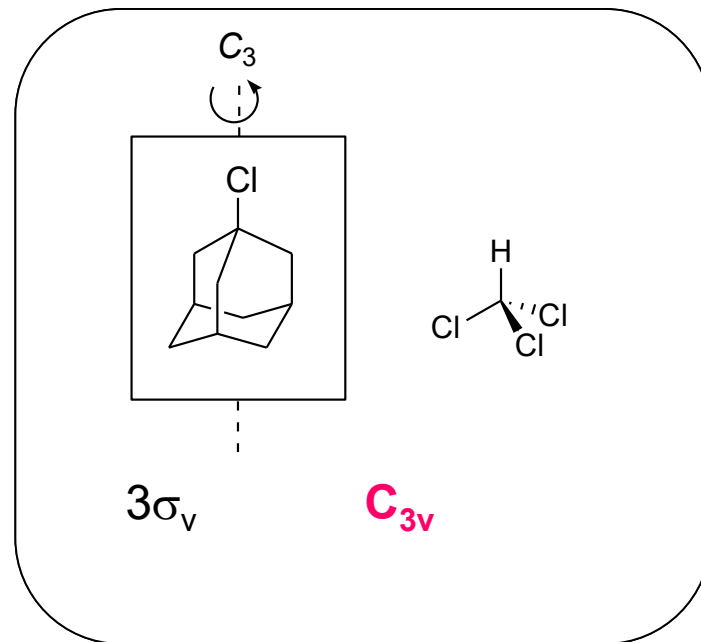
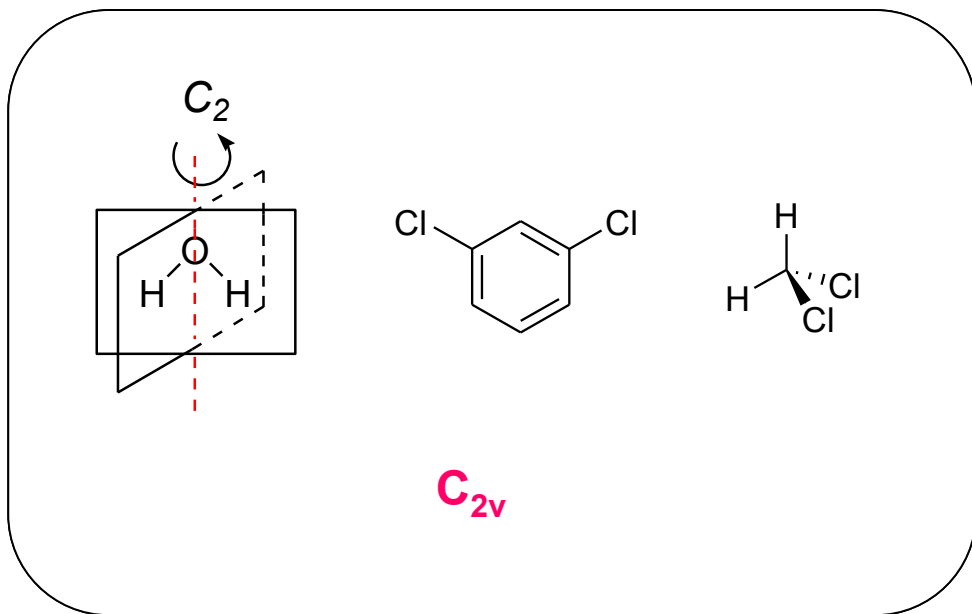


S_4

Gruppi di punto achirali

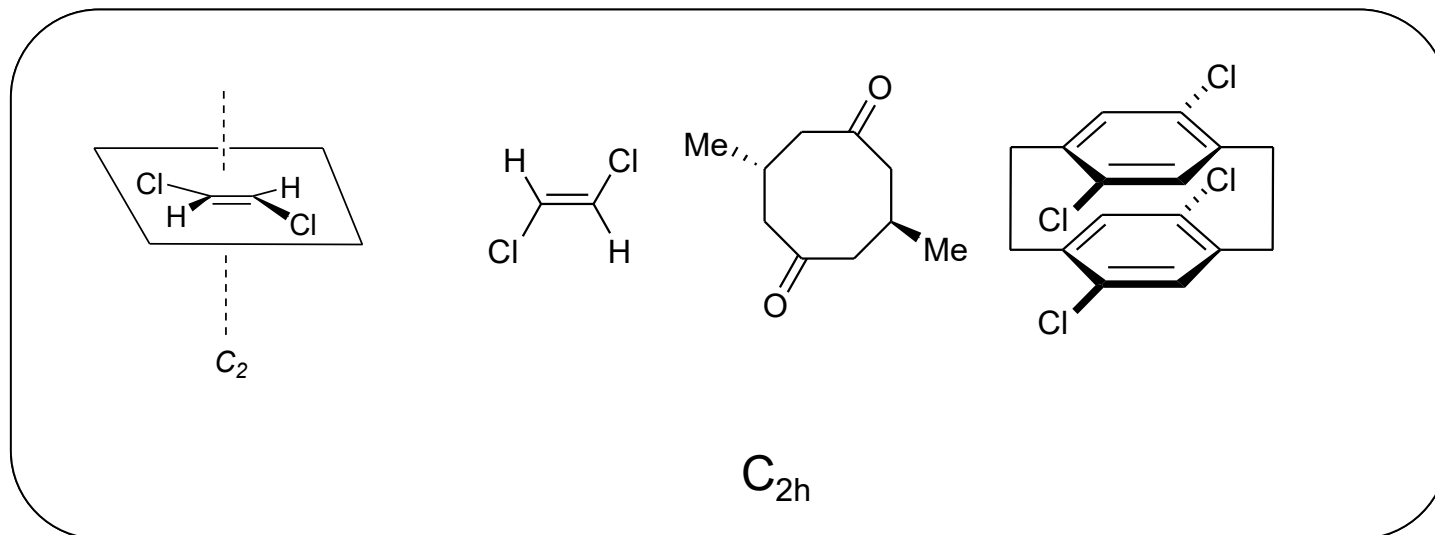
Gruppo C_{nv}

Elementi $1 C_n + n\sigma_v$



Gruppi di punto achirali

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

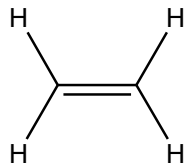


Corrisponde a S_2

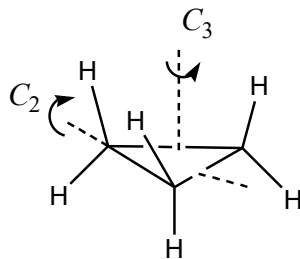
Gruppi di punto achirali

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

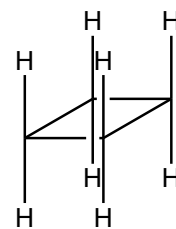
Gruppo ad altissima simmetria



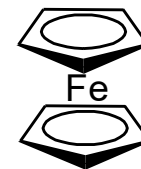
D_{2h}



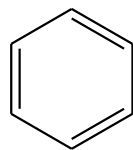
D_{3h}



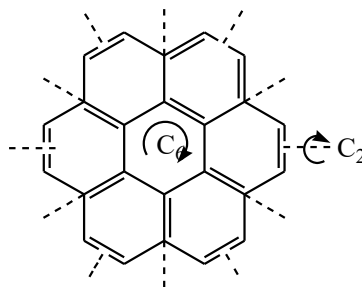
D_{4h}



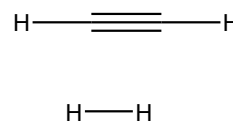
D_{5h}



D_{6h}



D_{6h}



$D_{\infty h}$

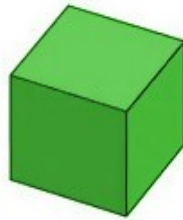
Gruppi di punto achirali

SOLIDI PLATONICI



tetraedro

T_d



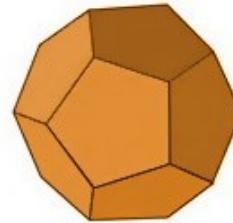
esaedro

O_d



ottaedro

O_d



dodecaedro

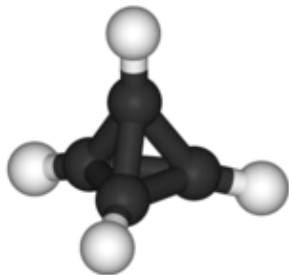
I_h



icosaedro

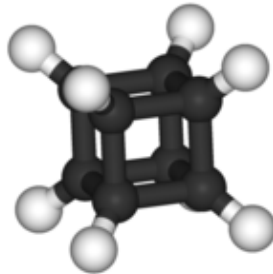
I_h

Idrocarburi platonici esistenti



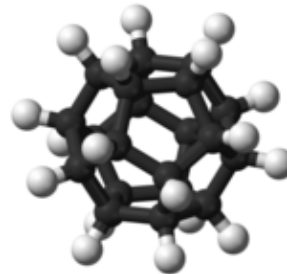
tetraedrāno

T_d



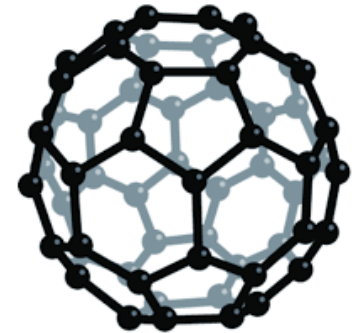
cubano

O_d



dodecaedrano

I_h



Buckminsterfullerene

I_h

Icosaedro: 20 facce a triangolo equilatero

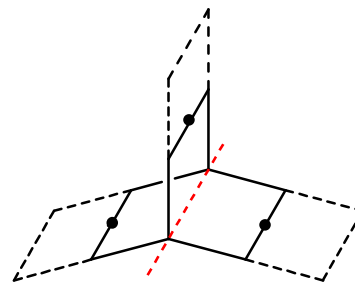
Dodecaedro: 12 facce a pentagono regolare :

Gruppi Puntuali Principali

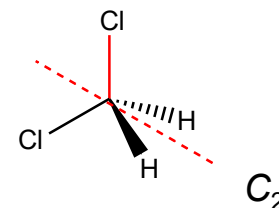
Gruppi Chirali		Gruppi Achirali	
Tipo di gruppo	Elementi	Tipo di gruppo	Elementi
C_1	Nessun elemento di simmetria (asimmetrico)	C_s	σ
C_n	C_n ($n > 1$) (dissimmetrico)	S_n	S_n (n pari)
D_n	C_n n C_2 (dissimmetrico)	C_{nv}	C_n , n σ_v
		C_{nh}	C_n , σ_h
		D_{nd}	C_n , n C_2 , n σ_n
		D_{nh}	C_n , n C_2 , n σ_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
		I_h	Tutti gli elementi di simmetria

Relazione tra assi e piani 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

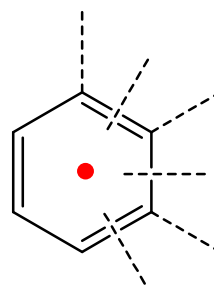


3 piani σ
1 asse C_3

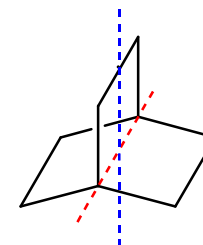


2 piani σ
1 asse C_2

- 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

Gruppi di punto chirali

Gruppo C_n

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

