

Simmetria

Simmetria molecolare

L'esistenza di simmetria in una molecola è espressa dalla presenza di alcune sue parti che si ripetono in modo regolare secondo schemi preordinati.

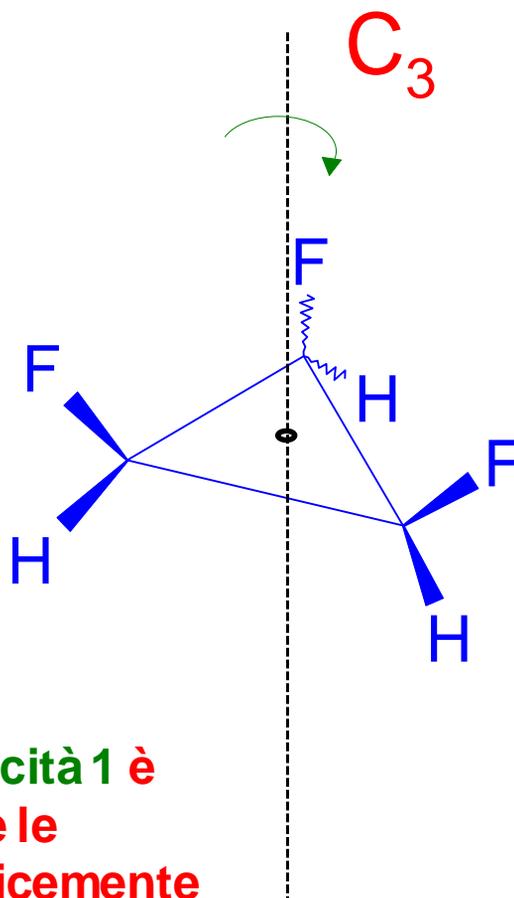
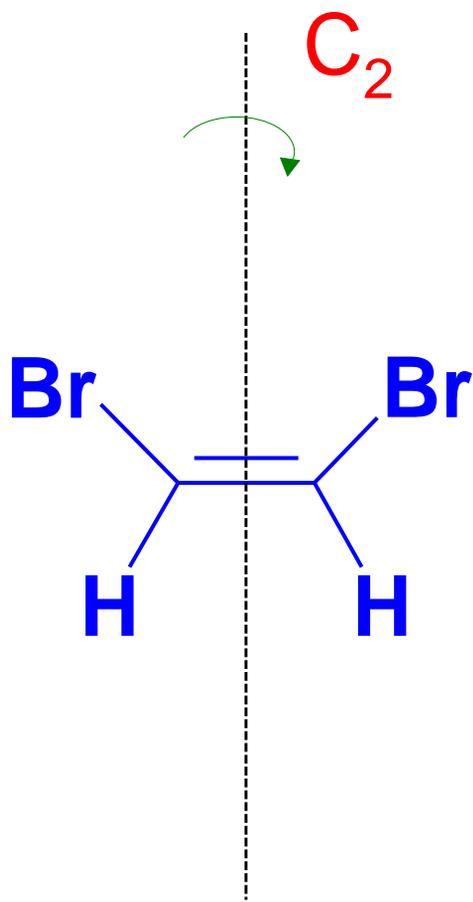
Elementi di simmetria:

1. asse proprio
2. piano di simmetria
3. centro di simmetria
4. asse alternante

Ognuno degli elementi di simmetria sopra riportati apparterrà alla molecola (cioè sarà un elemento di simmetria della molecola) se l'operazione ad esso associata porrà la molecola in una nuova disposizione spaziale indistinguibile da quella di partenza.

1. Asse proprio C_n

Si dice che una molecola possiede un asse proprio di simmetria di molteplicità n se la sua rotazione di $360/n$ gradi intorno a tale asse la dispone in una posizione indistinguibile da quella di partenza.



L'asse di simmetria di molteplicità 1 è ovviamente posseduto da tutte le molecole e corrisponde semplicemente ad una "operazione di identità". E' rappresentato col simbolo E

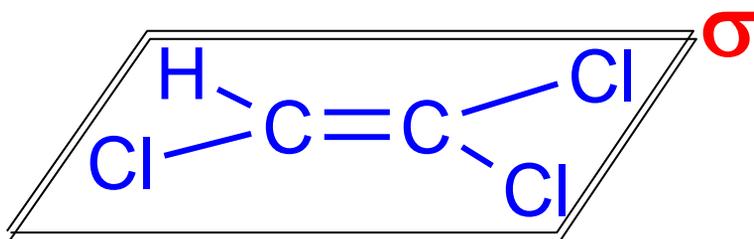
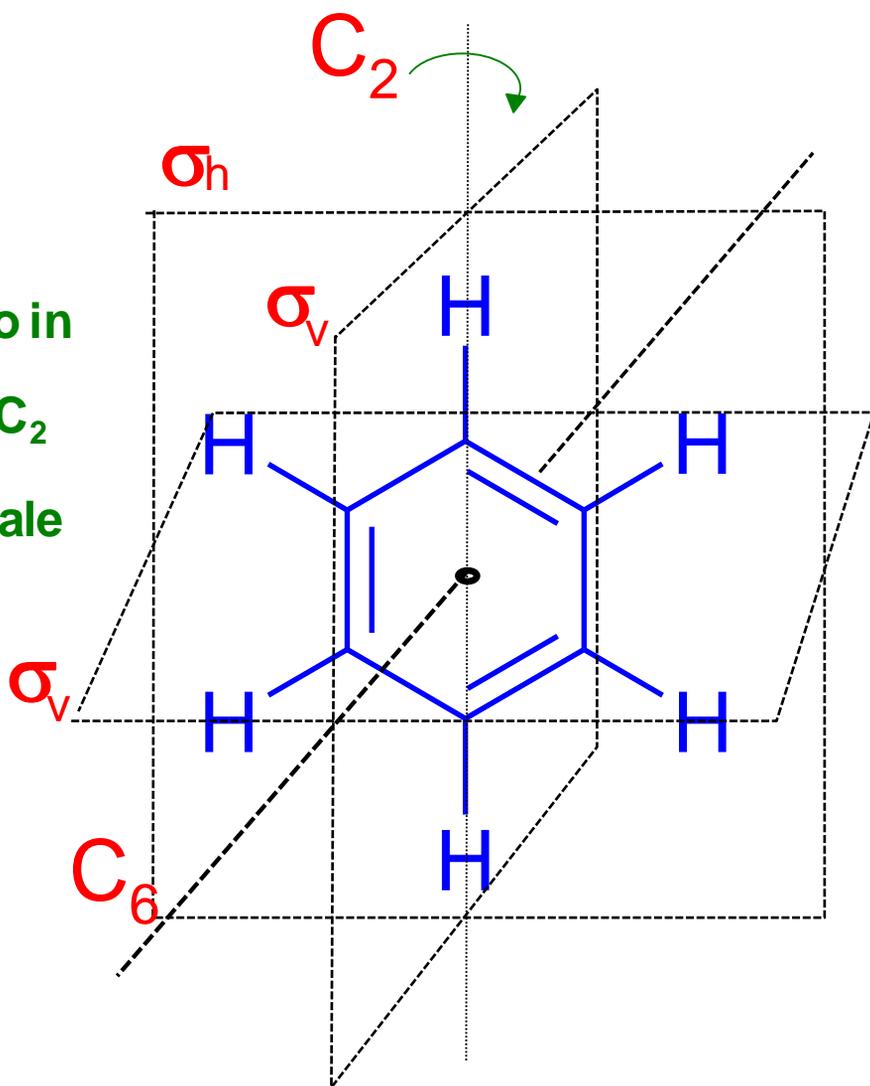
L'operazione di rotazione intorno ad un asse di simmetria è detta "operazione del 1° tipo".

2. Piano di riflessione o simmetria σ

E' un piano virtuale che divide la molecola in due parti speculari.

σ_v : piani verticali rispetto a C_2 . Si intersecano proprio in corrispondenza di C_2

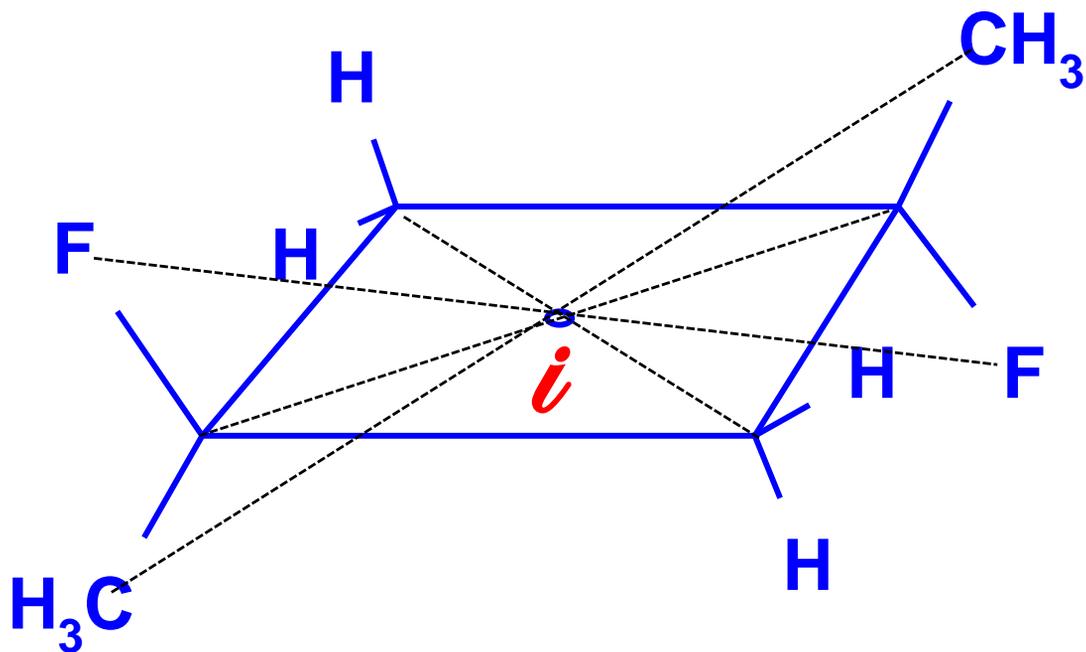
σ_h : piano orizzontale rispetto a C_2



Tutte le operazioni che comportano riflessione sono dette “operazioni del 2° tipo”.

3. Centro di riflessione o simmetria *i*

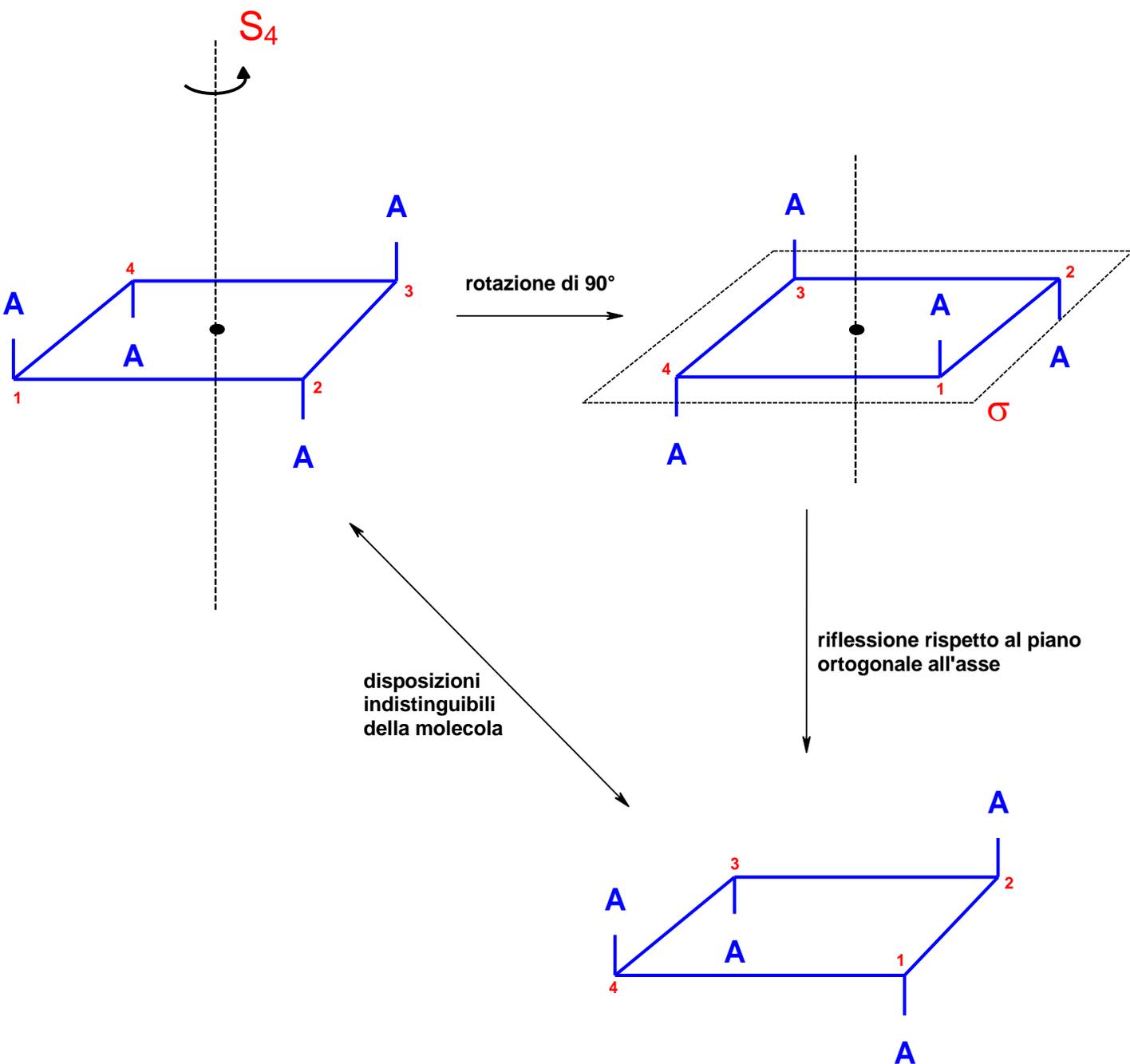
E' un punto rispetto al quale ogni atomo della molecola trova riflesso dalla parte opposta, ad uguale distanza, un altro atomo dello stesso elemento.



Anche le riflessioni rispetto ad un centro di simmetria sono “operazioni del 2° tipo”.

4. Asse alternante o improprio S_n

Una molecola possiede un asse di simmetria improprio di molteplicità n se, ruotata di $360/n$ gradi intorno ad esso e riflessa rispetto ad un piano ortogonale all'asse assume una disposizione indistinguibile da quella di partenza.



1) Un asse alternante S_1 equivale ad un piano di riflessione σ

$$S_1 = E \times \sigma$$

2) Un asse alternante S_2 equivale ad un centro di riflessione i

$$S_2 = C_2 \times \sigma = i$$

Una molecola che possieda anche solo un elemento di simmetria che comporti operazioni del 2° tipo non può essere chirale

Asse proprio: c'è?

No

Piano σ : c'è?

No

Asse improprio: c'è?

No

La molecola **non possiede elementi di simmetria** e pertanto **è asimmetrica**

Si

Asse di molteplicità n .
Verificare l'eventuale presenza di altri assi propri. Ci sono?

Si

Selezionare quello con l' n più elevato come **asse principale**

No

Piano σ_h : c'è?

Verificare se rispetto all'**asse principale** esiste un piano σ_h

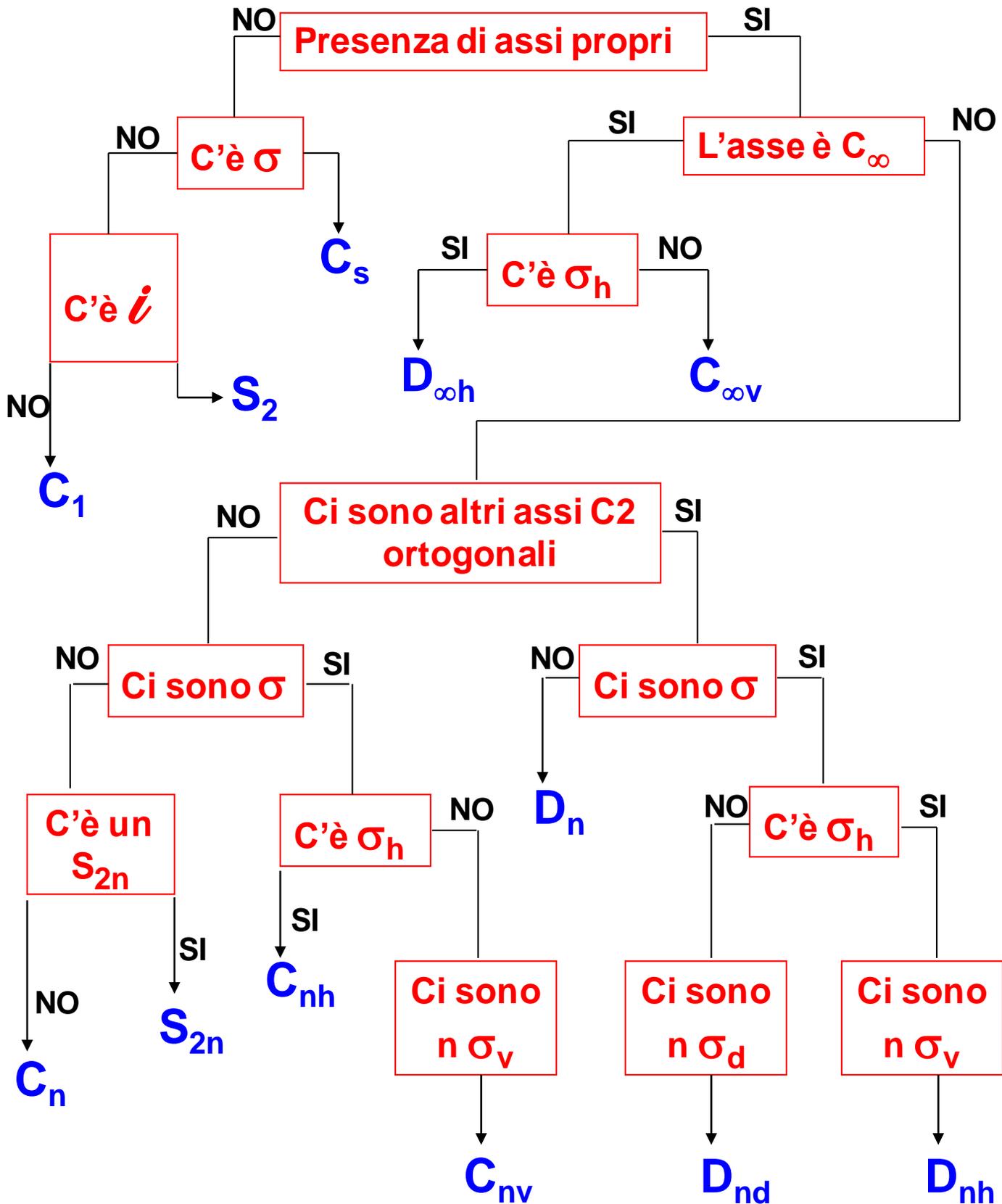
Verificare se rispetto all'**asse principale** esistono n piani σ_v

In funzione degli elementi di simmetria posseduti, le molecole possono essere collocate in diversi gruppi di simmetria, chiamati **gruppi puntuali (Point Group)**

Simmetria crescente

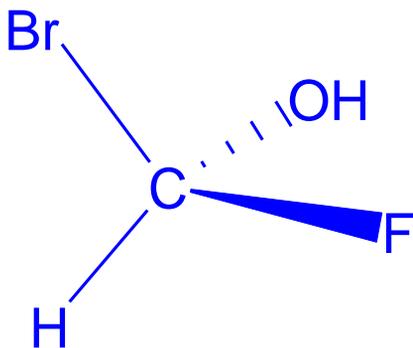
Point Group	Elementi di simmetria	Molecole (mom. dipolo)
C_1	Nessuno, solo identità E	Chirali, asimmetriche (si)
C_n	solo un asse C_n	Chirali, dissimmetriche (si)
D_n	1 asse C_n e n assi C_2	Chirali, dissimmetriche (no)
C_s	solo 1 piano σ	Achirali (si)
S_n	1 asse S_n <u>senza piani</u> σ_h	Achirali (no)
C_{nv}	1 asse C_n e n piani σ_v	Achirali (si)
C_{nh}	1 asse C_n e 1 piano σ_h	Achirali (no)
D_{nd}	1 asse C_n , n assi C_2 , n piani σ_d	Achirali (no)
D_{nh}	1 asse C_n , n assi C_2 , n piani σ_v , 1 piano σ_h	Achirali (no)

Diagramma per l'attribuzione del gruppo puntuale



1. Gruppo puntuale C_1

Tutte le molecole con 1 solo elemento di chiralità (centro, asse o piano, questi elementi verranno definiti più avanti nel programma). Queste molecole sono chirali e vengono dette **ASIMMETRICHE**

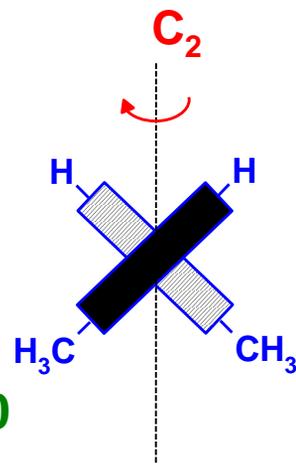
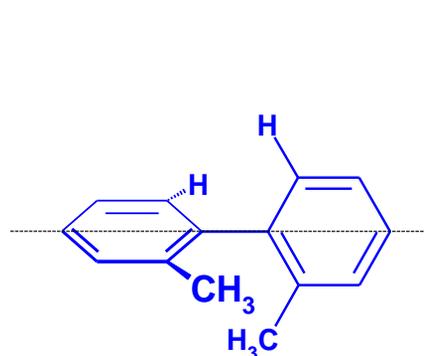
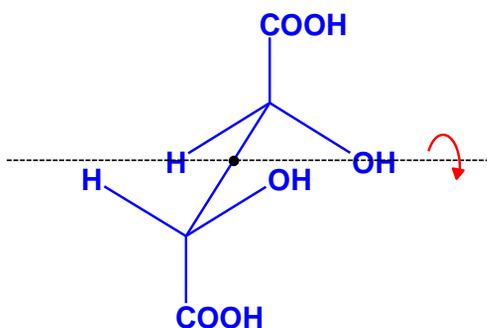


Momento di dipolo $\neq 0$
Ordine del gruppo: 1

2. Gruppo puntuale C_n

Alcune tra le molecole con più di 1 elemento di chiralità (centro, asse o piano). E' presente solo un asse C_n . Queste molecole sono chirali e vengono dette

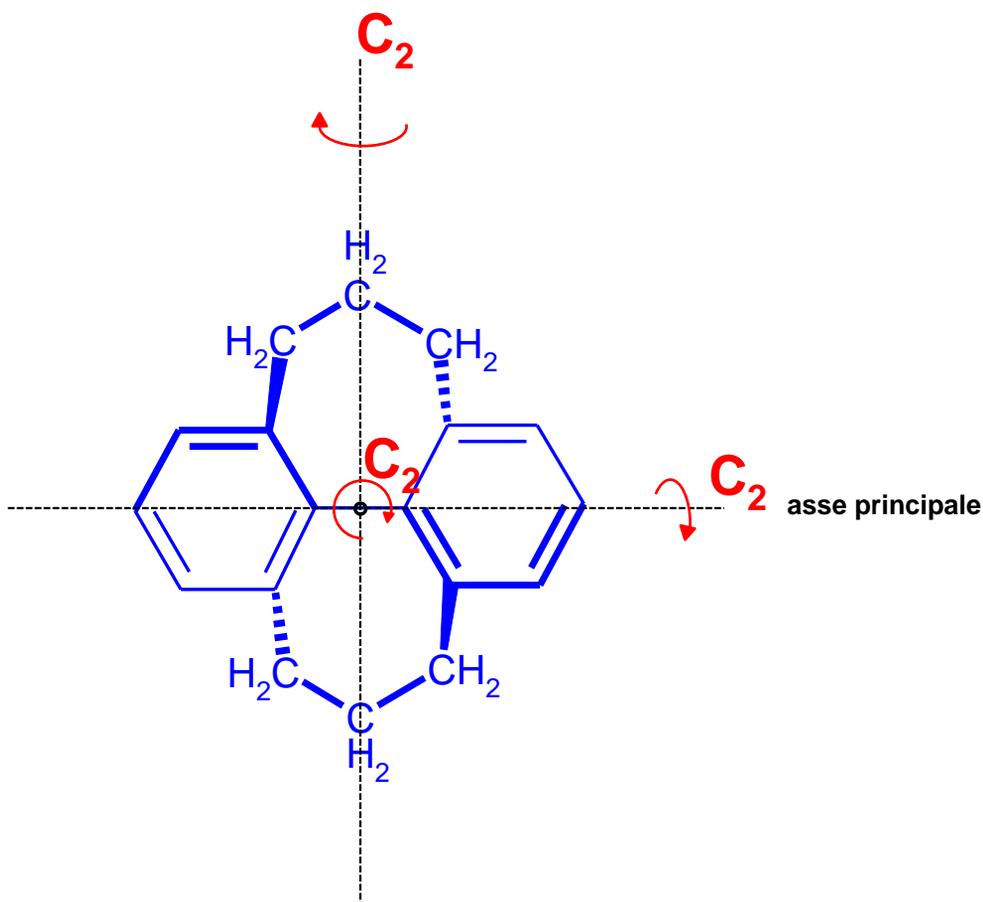
DISSIMMETRICHE



Momento di dipolo $\neq 0$
Ordine del gruppo: n

3. Gruppo puntuale D_n

E' presente 1 asse C_n e n assi C_2 disposti a 90° dal primo. L'asse proprio di più alta molteplicità è definito asse principale. Se tutti gli assi hanno molteplicità 2 allora l'asse principale sarà quello passante per il maggior numero di atomi.

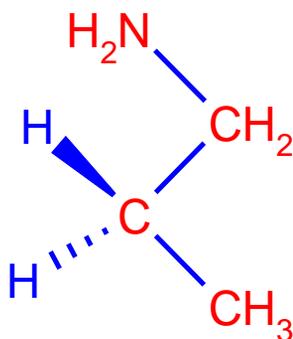
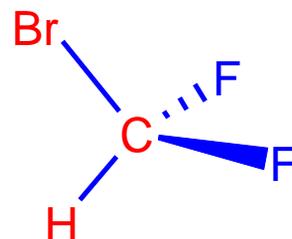
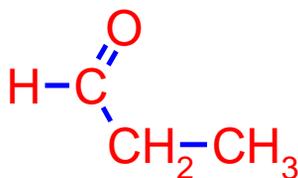
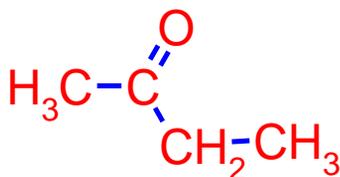
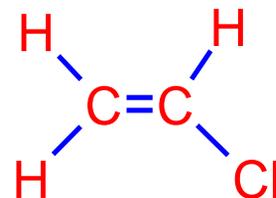
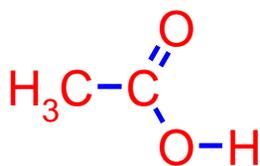
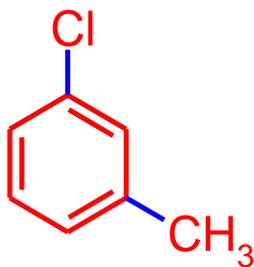


Momento di dipolo = 0

Ordine del gruppo: $2n$

4. Gruppo puntuale C_s

E' presente solo **1** piano di riflessione σ . Molecole con queste caratteristiche sono molto frequenti da incontrare.



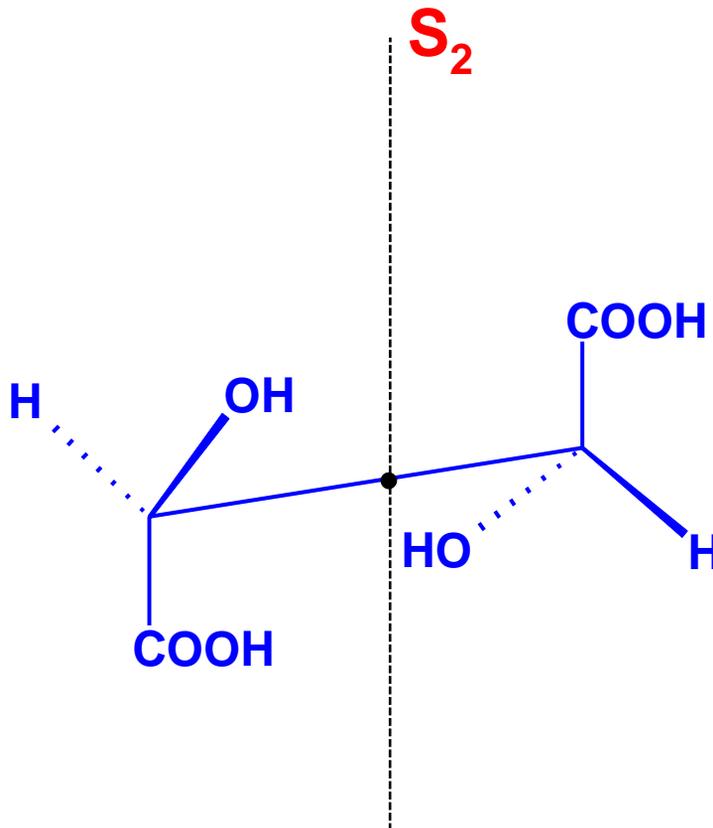
Gli atomi colorati in rosso giacciono sul piano di riflessione

Momento di dipolo $\neq 0$

Ordine del gruppo: 2

5. Gruppo puntuale S_n

E' presente 1 asse S_n , con n pari, mentre non deve essere presente un piano orizzontale rispetto all'asse. Associato all'asse alternante c'è sempre anche un asse proprio di molteplicità $n/2$

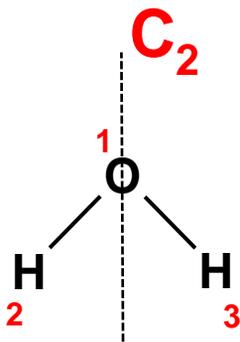


Momento di dipolo = 0

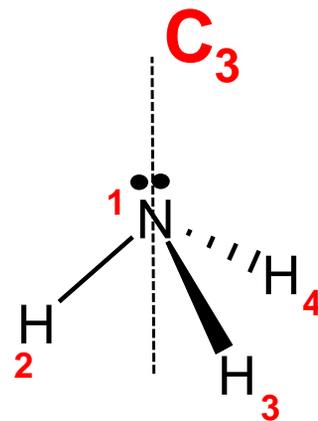
Ordine del gruppo: n

6. Gruppo puntuale C_{nv}

E' presente 1 asse proprio C_n e n piani verticali σ_v che si intersecano in corrispondenza di C_n . Molte importanti molecole appartengono a questo gruppo puntuale. Fanno parte di questo gruppo puntuale anche molecole lineari con estremità diverse



2 piani, uno secante la molecola in due parti uguali, l'altro passante per gli atomi 1, 2 e 3



3 piani, passanti rispettivamente per gli atomi 1-2, 1-3, 1-4

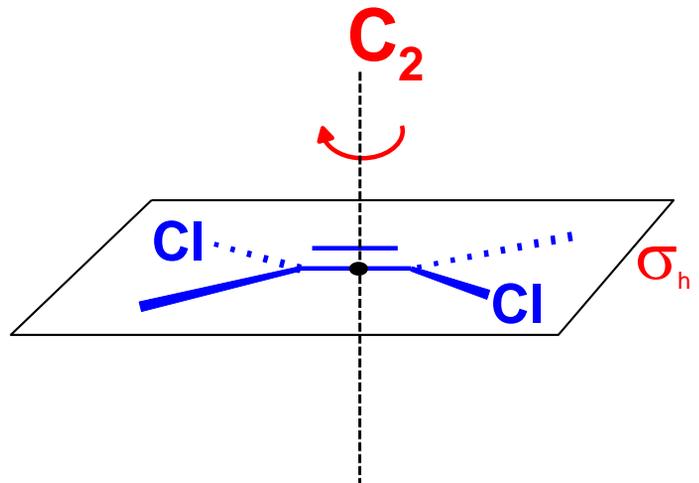
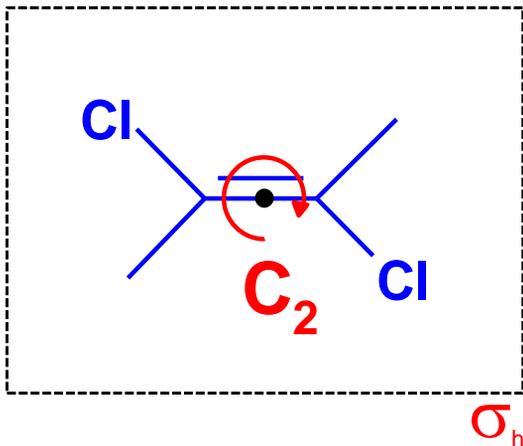
Momento di dipolo $\neq 0$

Ordine del gruppo:
 $2n$ (∞ per le lineari)



7. Gruppo puntuale C_{nh}

E' presente 1 asse proprio C_n e 1 piano orizzontale σ_h (cioè ortogonale all'asse proprio).

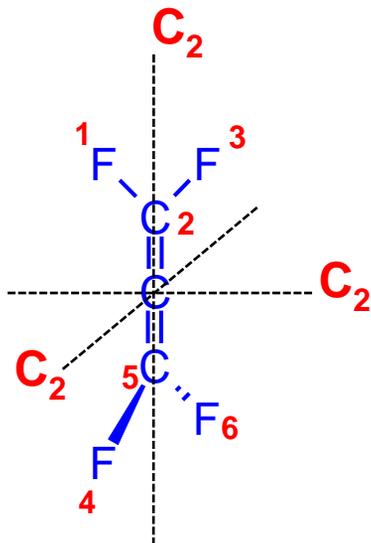


Momento di dipolo = 0

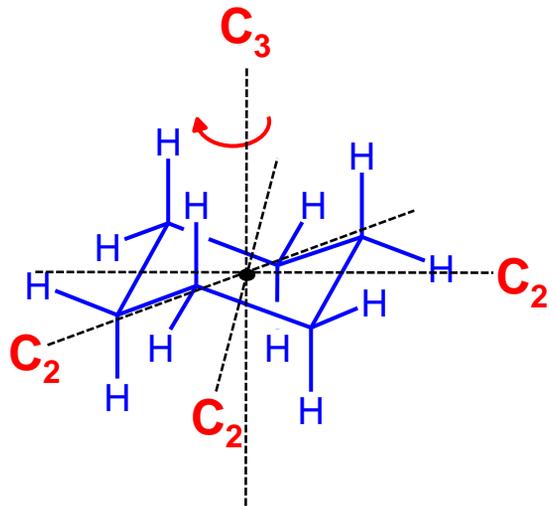
Ordine del gruppo: $2n$

8. Gruppo puntuale D_{nd}

E' presente 1 asse proprio C_n , n assi C_2 ortogonali all'asse principale, n piani verticali σ_d che si intersecano in corrispondenza di C_n ma che non contengono gli assi C_2 .



3 assi C_2 e 2 piani passanti rispettivamente per gli atomi 1-2-3 e 4-5-6



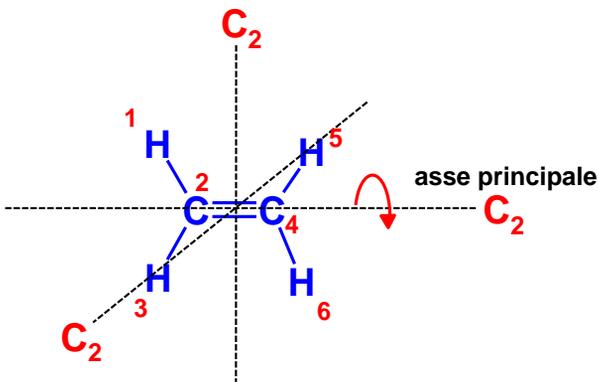
Momento di dipolo = 0

1 asse C_3 , 3 assi C_2 e 3 piani diagonali passanti rispettivamente per ogni coppia di atomi di carbonio affacciati del ciclo e intersecantesi in corrispondenza di C_3

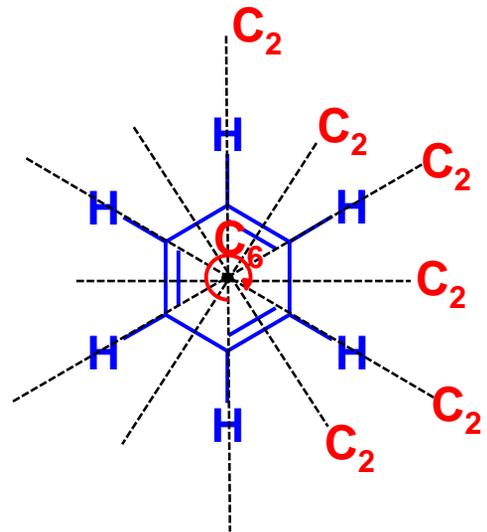
Ordine del gruppo: $4n$

9. Gruppo puntuale D_{nh}

E' presente 1 asse proprio C_n , n assi C_2 ortogonali all'asse principale, n piani verticali σ_v che si intersecano in corrispondenza di C_n e contengono gli assi C_2 , 1 piano orizzontale σ_h . Fanno parte di questo gruppo puntuale anche molecole lineari con estremità simmetriche



3 assi C_2 ortogonali tra loro, 2 piani verticali σ_v ortogonali tra loro e intersecantesi in corrispondenza dell'asse principale, 1 piano orizzontale ortogonale all'asse principale



1 asse C_6 , 6 assi C_2 ad esso ortogonali, 6 piani verticali intersecantesi in C_6 e passanti rispettivamente per ogni coppia di atomi di carbonio e legami affacciati del ciclo, 1 piano orizzontale, cioè ortogonale a C_6

Momento di dipolo = 0

**Ordine del gruppo:
4n (∞ per le lineari)**

