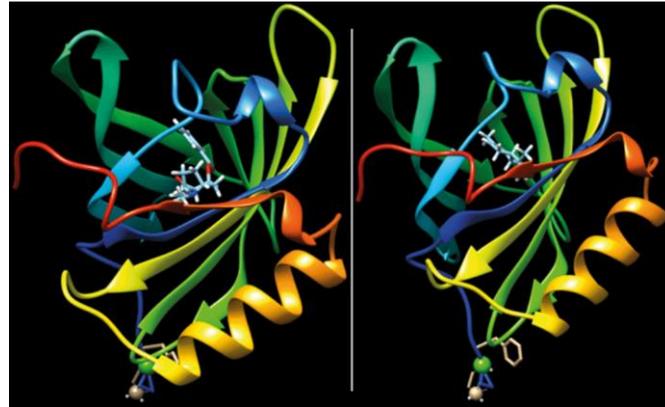
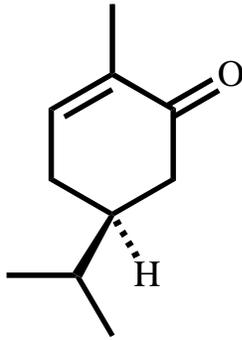


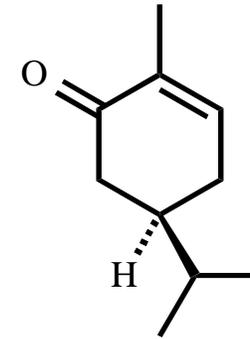
STEREOCHIMICA

il ramo della chimica che riguarda la disposizione tridimensionale delle molecole e l'effetto che questo ha sulla reattività chimica

S-carvone



R-carvone



How the chiral molecule carvone (right: S-(+)-carvone, left: R-(-)-carvone) interacts with the binding pocket of an artificial protein derived from a porcine odorant binding protein.

Simmetria di una molecola

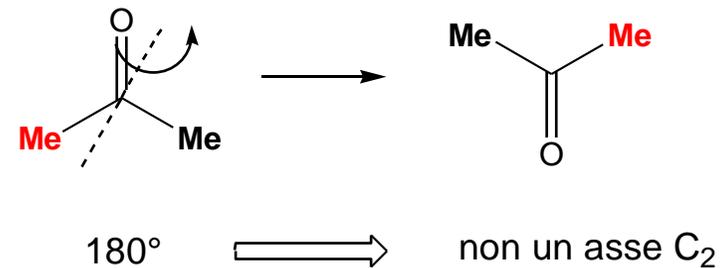
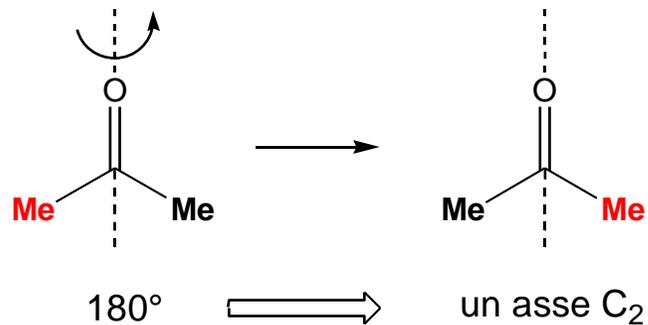
Gli elementi di simmetria sono entità geometriche definite da rette, piani, punti

| 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 |

<https://symotter.org/tutorial/intro>

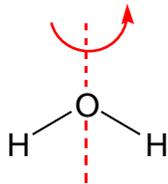
Valutazione della simmetria di un composto

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

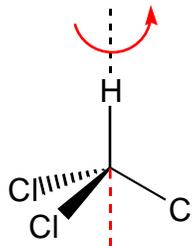


Asse di Rotazione Semplice o Asse Proprio C_n $1 < n < \infty$

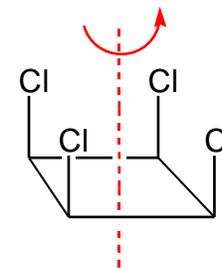
Un **asse di rotazione proprio** (C_n) è un asse che passa per l'oggetto in esame tale per cui una rotazione di $360^\circ/n$ intorno a quell'asse fornisce un modello dell'oggetto indistinguibile dall'originale



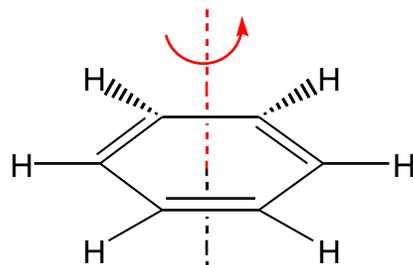
C_2



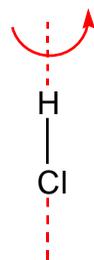
C_3



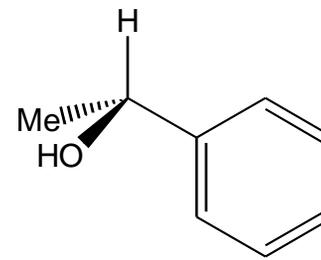
C_4



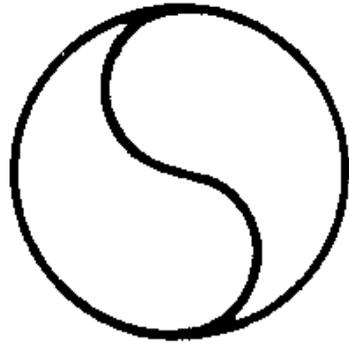
C_6



C_∞

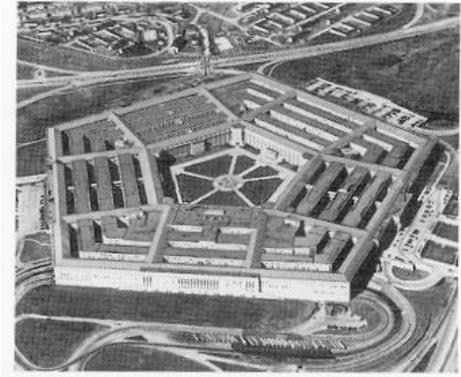


C_1



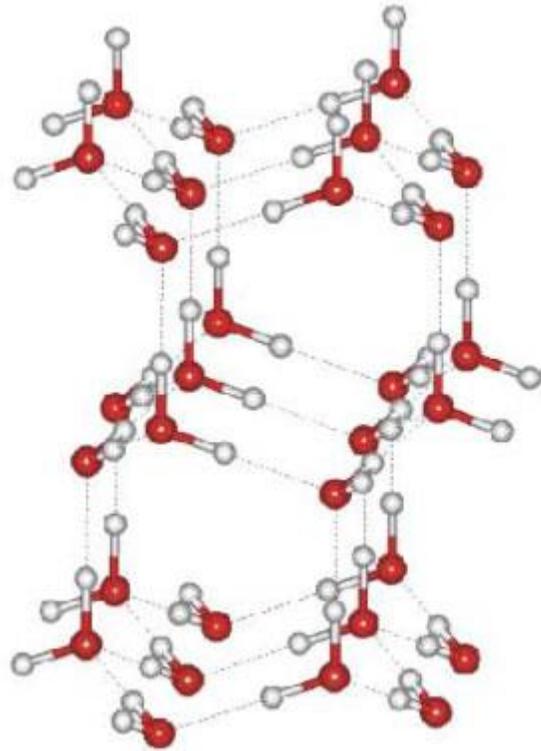
C₂

C₅



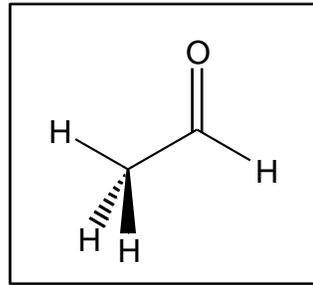
C₃

Cristalli di neve - C_6

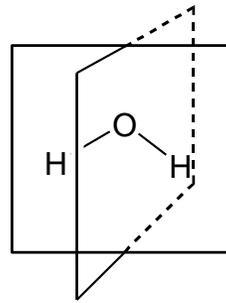


Piano di Riflessione σ

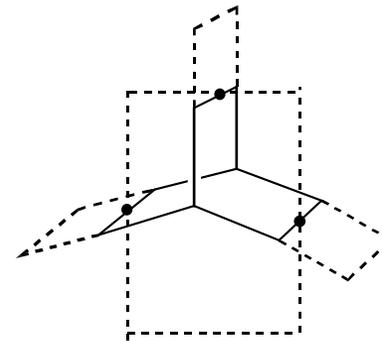
Un **piano di riflessione (σ)** è un piano che divide l'oggetto in modo che la metà del modello da una parte del piano si riflette esattamente nell'altra metà dall'altra parte del piano



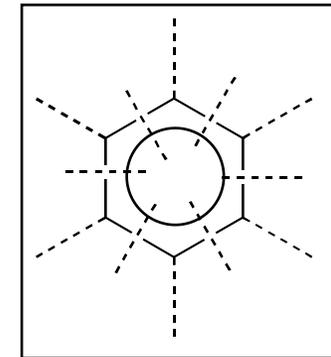
1σ



2σ



4σ



7σ

Simmetria Bilaterale



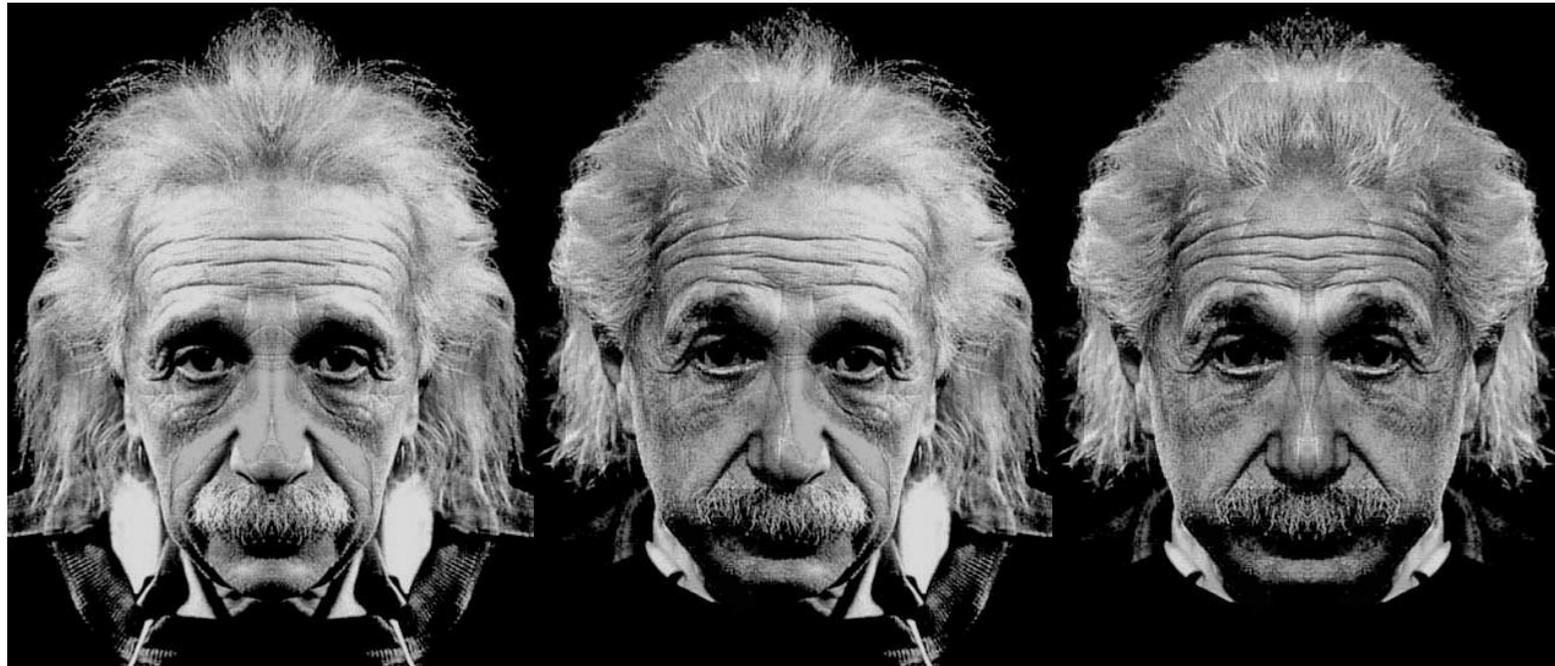
**Il viso umano ha una simmetria bilaterale?
Cioè ha un piano di riflessione?**



**Confronta i due lati del viso stando di fronte a uno specchio
Sono uguali?**

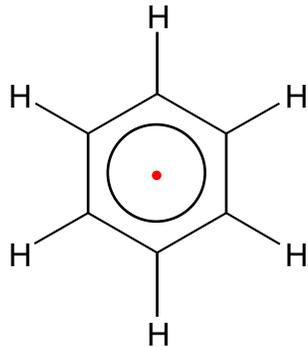


**Confronta i due lati del viso stando di fronte a uno specchio
Sono uguali?**

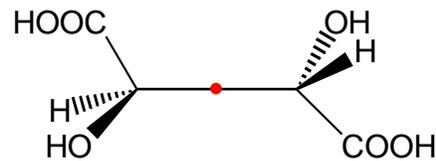


Centro di Inversione i

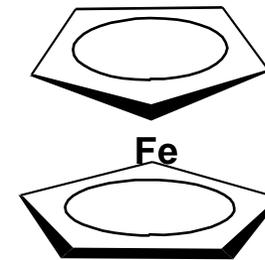
Un **centro di inversione (i)** è un punto di una molecola tale per cui muovendosi su una retta in direzioni opposte partendo da quel punto si incontrano gli stessi atomi ad uguali distanze



i nel vuoto

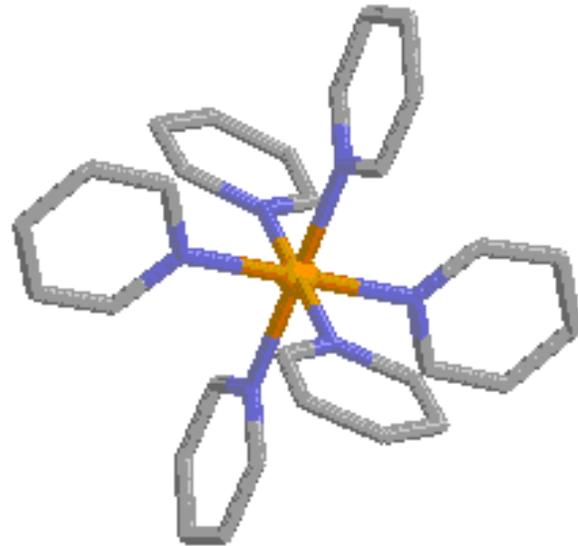


i su un legame



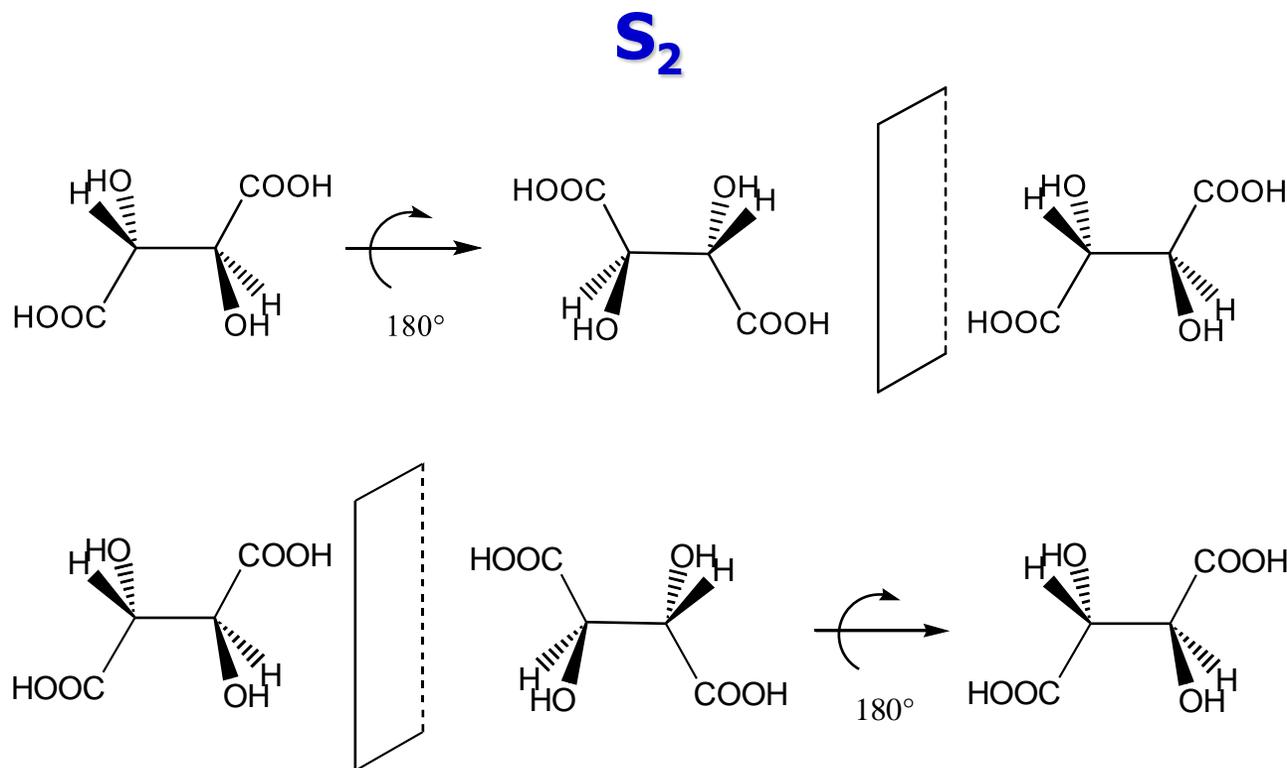
i su un atomo

Centro di Inversione i



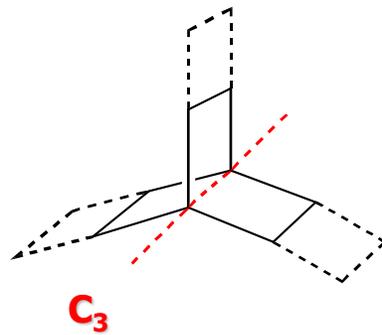
Asse di Roto-Riflessione S_n

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 S_h rispetto all'asse stesso.

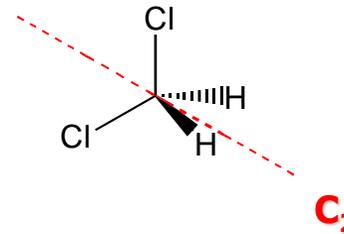


Relazione tra gli elementi di simmetria

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

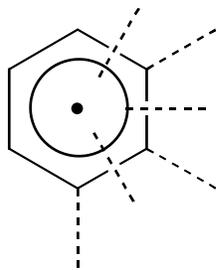


3 piani s
1 asse C_3

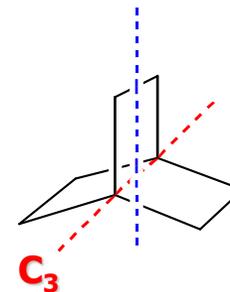


2 piani s
1 asse C_2

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

Simmetria di una molecola

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 |

<https://symotter.org/tutorial/intro>

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)

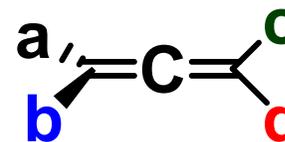
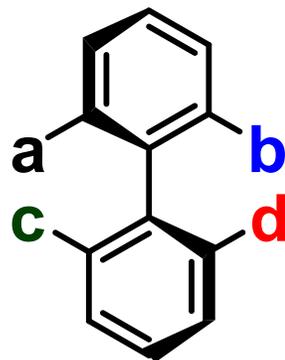
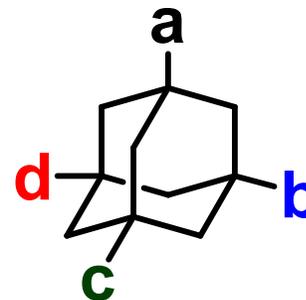
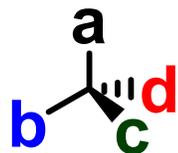
Elementi di simmetria del secondo ordine (σ , S_n , i)

symmetry@otterbein

<https://symotter.org/tutorial/intro>

Molecole asimmetriche (solo assi C_1)

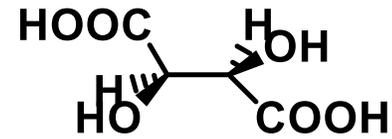
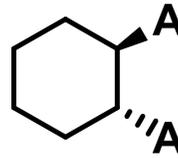
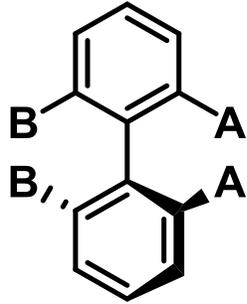
Molecole Chirali



Molecole dissimmetriche (solo assi C_n)

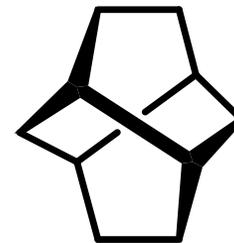
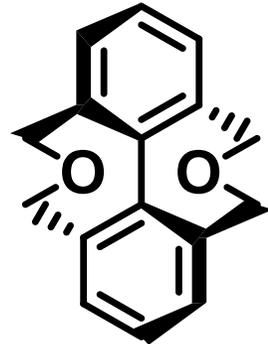
Molecole Chirali

C_2



$C_n (n > 1)$

D_2

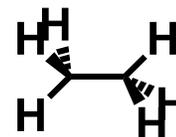
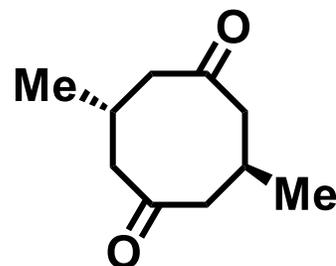
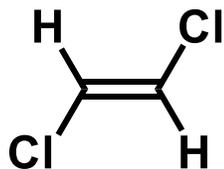
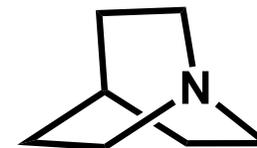
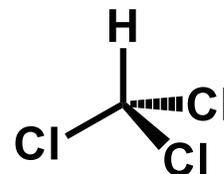
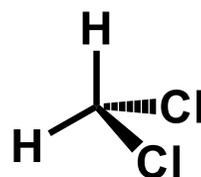
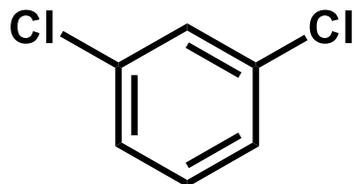
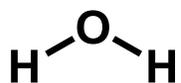
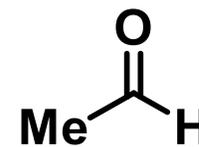
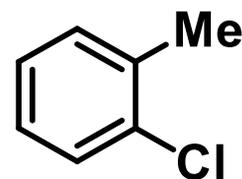
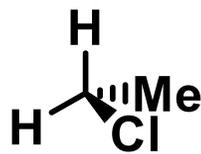
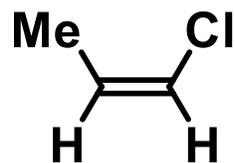


$1 C_n + n C_2 (n > 1)$

Molecole con elementi di simmetria del secondo ordine

Molecole Achirali

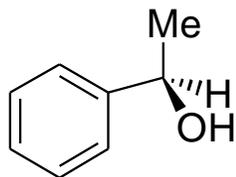
Piani di riflessione (σ)



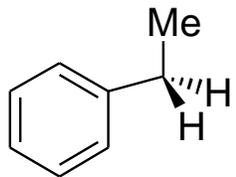


Una definizione più pratica di chiralità a livello molecolare

Una molecola è chirale se non possiede nessun elemento di simmetria 'riflessiva'
(elemento di simmetria del secondo ordine)



Nessuna simmetria riflessiva → chirale



Un piano di simmetria → achirale

La Chiralità è profondamente legata alla simmetria

La valutazione della simmetria di una molecola consente di determinare un modo non ambiguo e immediato la chiralità in una molecola

CHIRALITA'

Una molecola è **chirale** quando non è sovrapponibile alla sua immagine speculare

Immagine speculare = entità distinta

Forme Enantiomorfe:

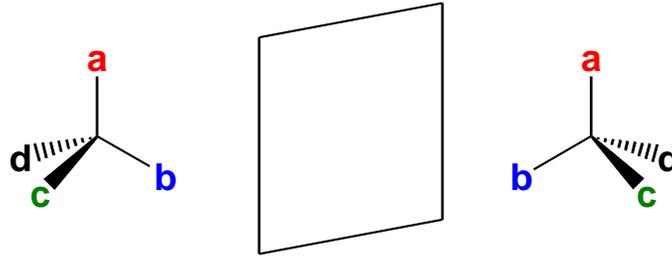
due forme non sovrapponibili di una struttura chirale

STRUTTURA ACHIRALE

Strutture sovrapponibile alla sua immagine speculare

Nella struttura deve comparire almeno un elemento di simmetria del II ordine

Consideriamo due modelli enantiomorfi:

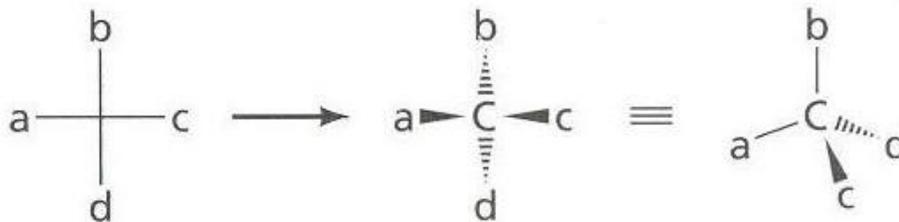


- Stessa composizione chimica
- Stessa connettività
- Le strutture possono essere scambiate con riflessione
- Sono **isometriche** (identiche per forma e dimensione)
- Possono anche essere definite **isomere** (fatte delle stesse parti)

Due isomeri enantiomorfi sono detti enantiomeri

Proiezioni di Fisher

Le **PROIEZIONI DI FISHER** sono un altro modo di rappresentare le molecole

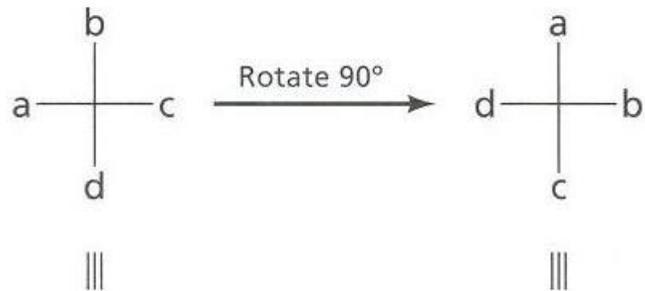


La proiezione di Fischer rappresenta le molecole nel piano con gli atomi di carbonio all'intersezione di rette perpendicolari ai cui estremi vengono posti i sostituenti. Per convenzione i sostituenti orizzontali escono dal piano mentre quelli verticali sono all'interno del piano

A causa di questa convenzione non tutte le trasformazioni o manipolazioni di queste strutture sono concesse

Proiezioni di Fisher

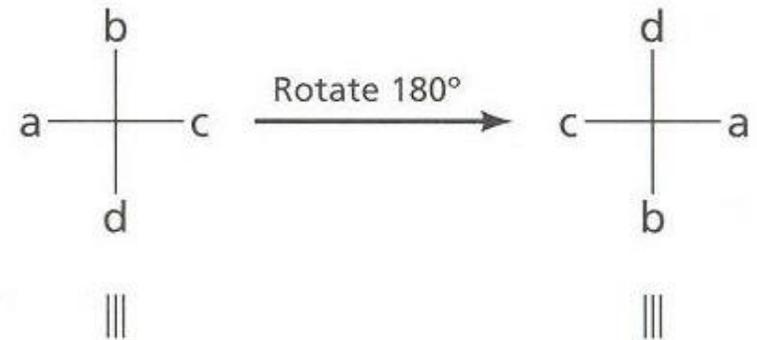
a.



You cannot rotate the figure by 90° in the plane of the paper because this changes the configuration.

Le strutture possono essere ruotate di 180°

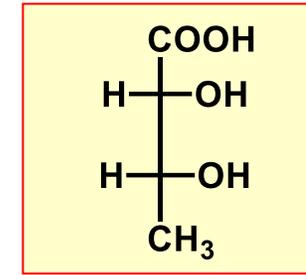
b.



Le strutture non possono essere ruotate di 90° e neanche rovesciate

Relazioni di Isomeria

Due strutture isomere
sono isometriche?



SI

NO

Sono correlate da un'isometria del
primo ordine?

Hanno la stessa
costituzione?

SI

NO

SI

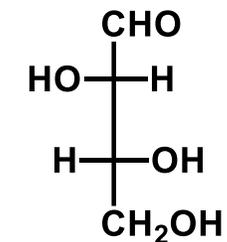
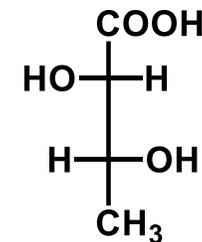
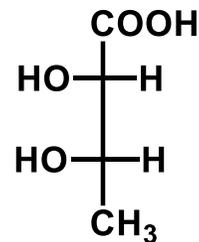
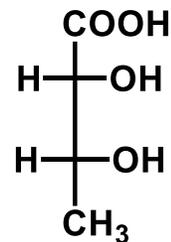
NO

omomeri

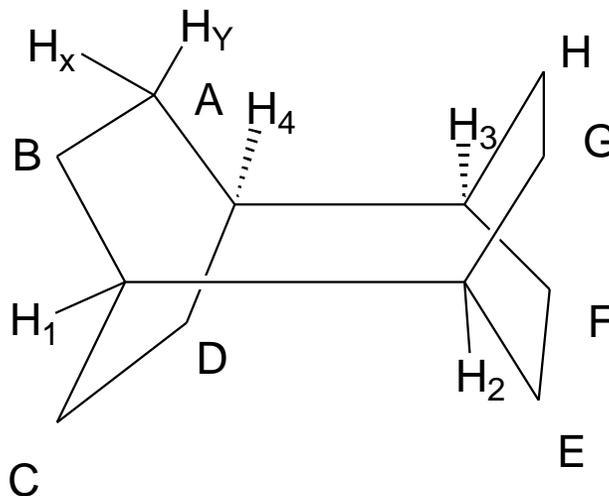
enantiomeri

diastereoisomeri

isomeri
costituzionali



Relazioni di Topicità



Elementi di simmetria

$3C_2, \sigma_h, 2\sigma, i$

Differenti Protoni

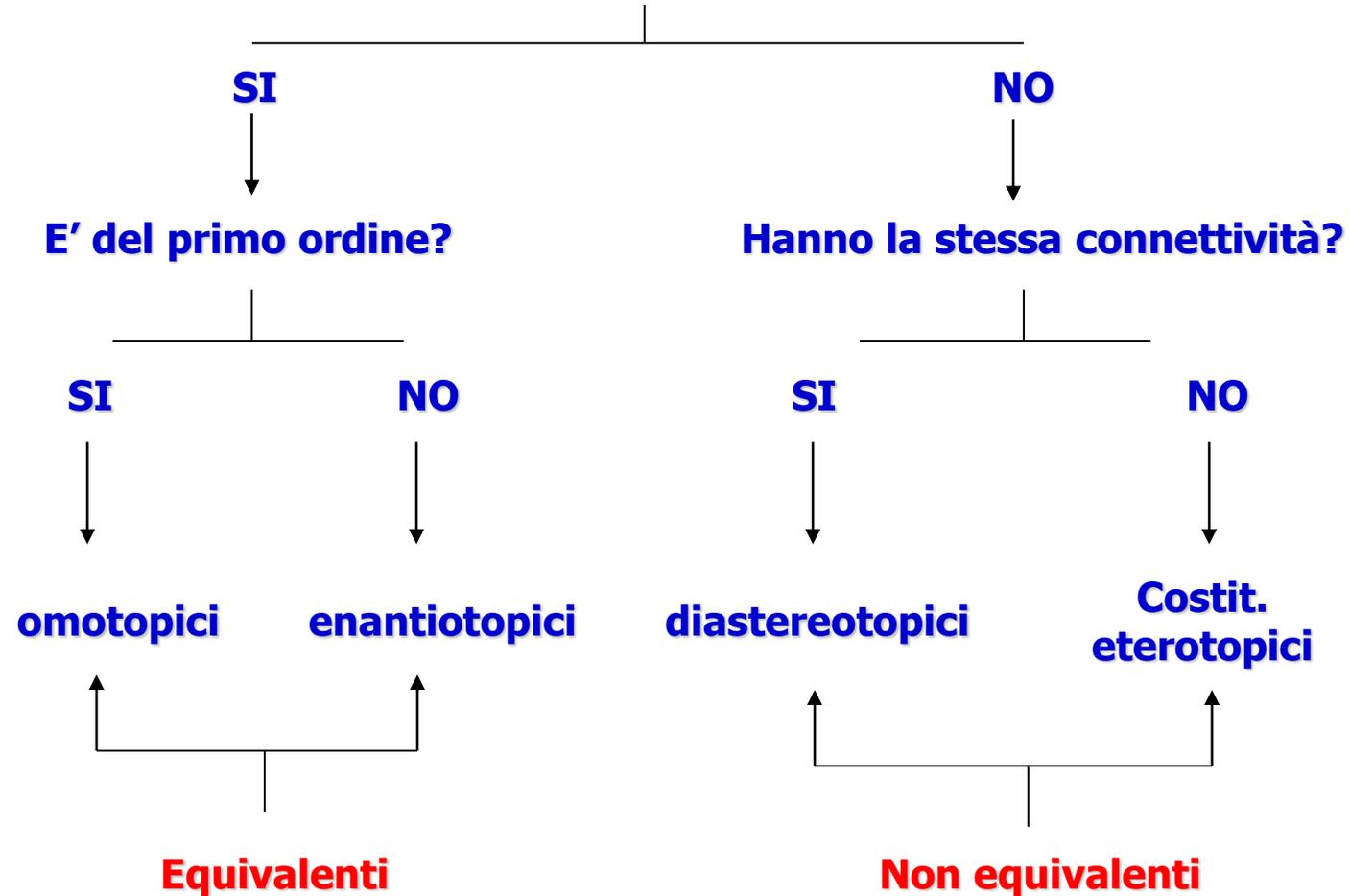
1 segnale per CH (4)
1 segnale per CH_x (8)
1 segnale per CH_y (8)

Differenti Carboni

1 segnale per CH (4)
1 segnale per CH₂ (8)

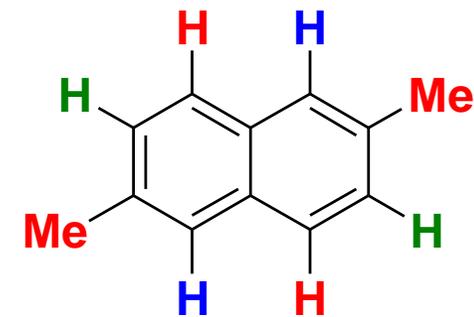
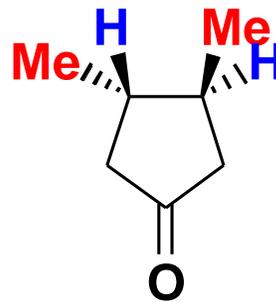
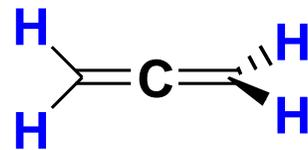
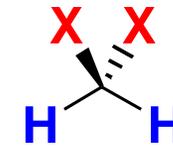
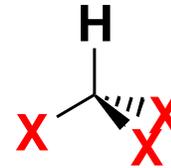
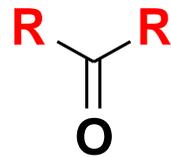
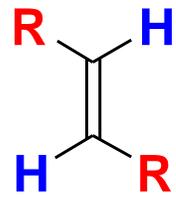
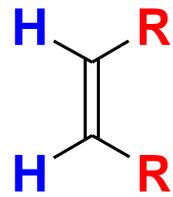
Relazioni di Topicità

Due atomi o gruppi di atomi in una molecola sono correlati da un'operazione di simmetria?



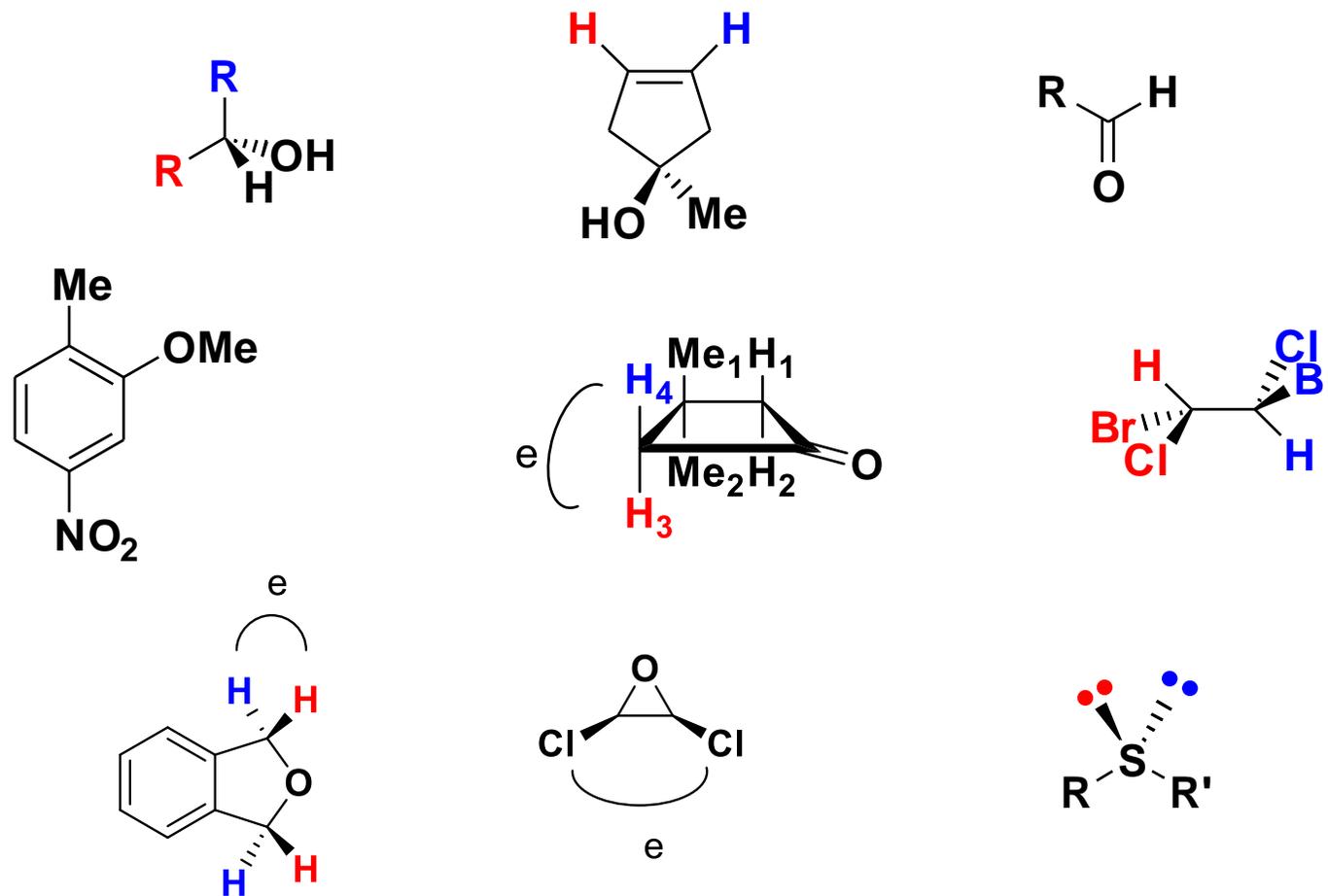
Gruppi Omotopici

Devono essere presenti assi C_n ($n > 1$)



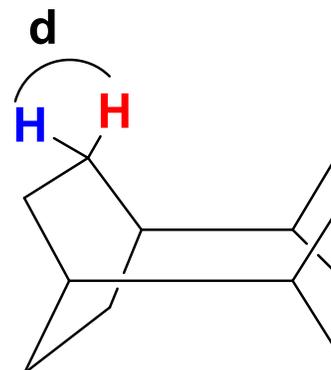
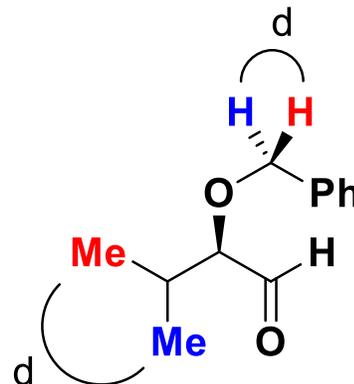
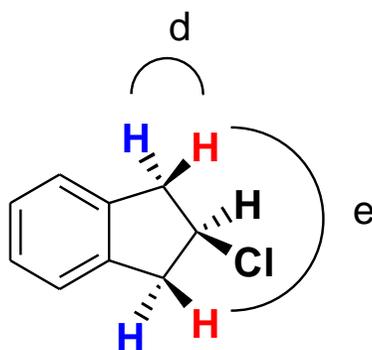
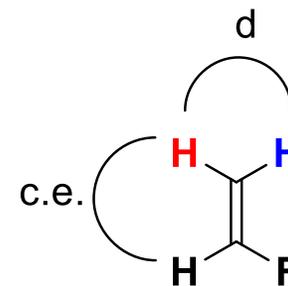
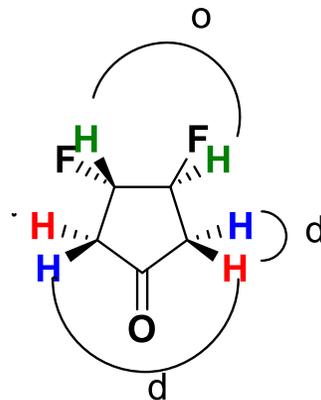
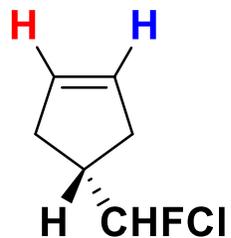
Gruppi Enantiotopici

Devono essere presenti elementi di simmetria del II ordine

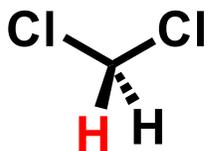
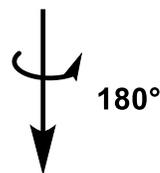
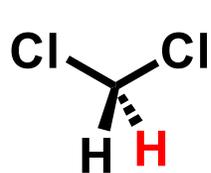


Gruppi Diastereotopici

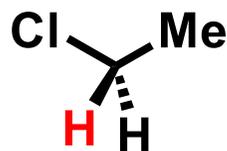
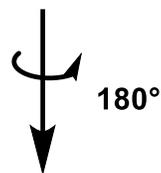
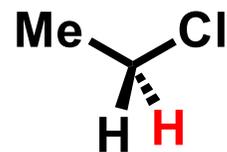
Stessa connettività ma non scambiabili con operazioni di simmetria



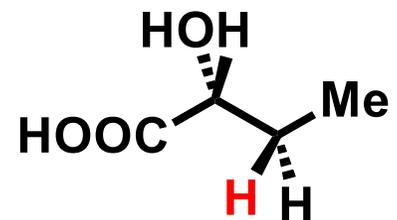
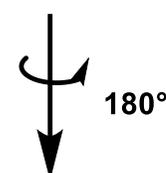
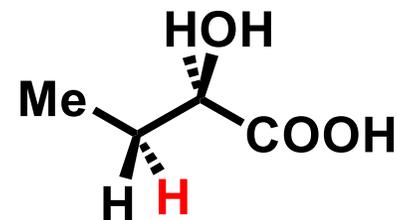
Intorno di Molecole – gruppo CH₂



omotopici



enantiotopici



diastereotopici

| Topicità relativa | Criterio di simmetria | Gruppi puntuali non compatibili |
|--------------------------|--------------------------------------|---|
| Omotopicità | $C_n (1 < n < \infty)$ | $C_{\infty v}, C_{1v}, C_{sv}, C_i$ |
| Enantiotopicità | S_n | $C_{\infty v}, D_{\infty h}$ e gruppi chirali |
| Diastereotopicità | Non sono scambiati da alcun elemento | $C_{\infty v}, D_{\infty h}$ |