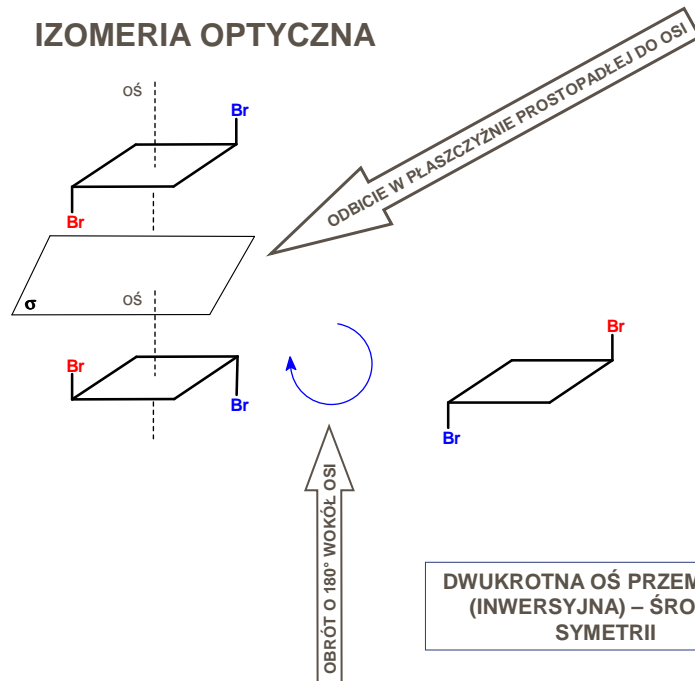
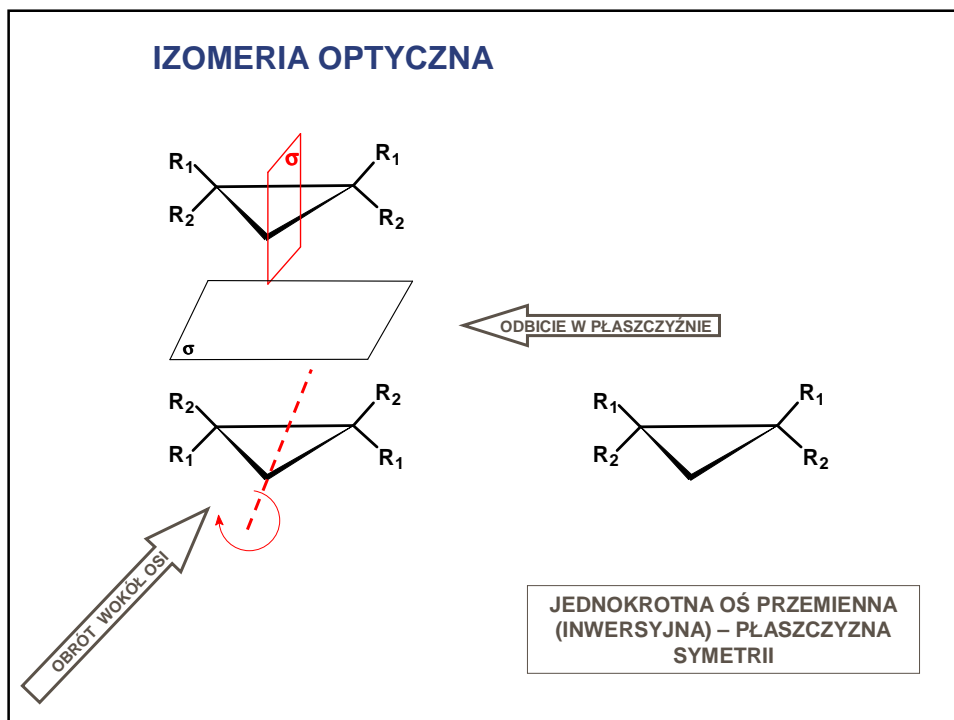


## IZOMERIA OPTYCZNA



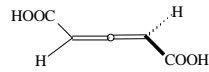
## IZOMERIA OPTYCZNA



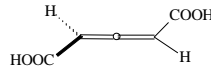
## IZOMERIA OPTYCZNA

### Cząsteczki chiralne

posiadające  $n$ -krotną oś symetrii, np. dwukrotną



(S)-1



(R)-1

allen

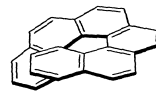


(R)-2



(S)-2

(E)-cyklookten

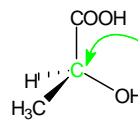
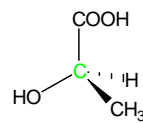


heksalenen

## IZOMERIA OPTYCZNA

### Cząsteczki asymetryczne

pozbawione wszelkich elementów symetrii

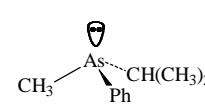
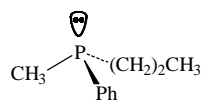
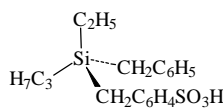
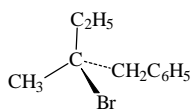


plaszczyna odbicia

atom asymetryczny

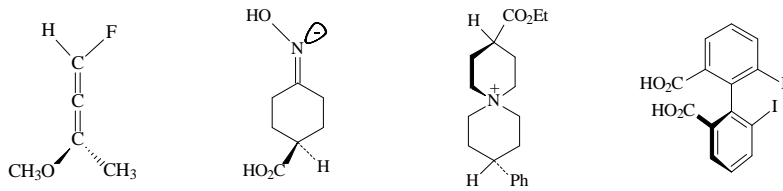
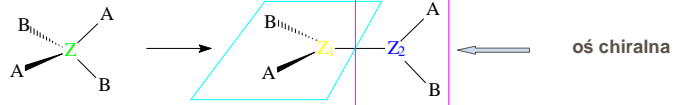
•atomy IV grupy układu okresowego takie jak: krzem czy german, powiązane z różnymi podstawnikami

•atomy siarki (sulfotlenki, sole sulfoniowe, estry kw. sulfinowych), azotu (sole ammoniowe,  $N$ -tlenki amin), fosforu (fosfina, tlenek fosfiny, estry kw. fosfinowych), arsenu (arsyna)



## IZOMERIA OPTYCZNA

### Chiralność osiowa (aksjalna)

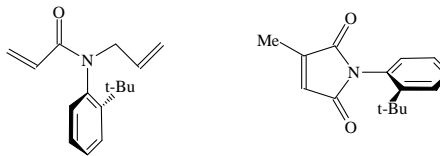


## IZOMERIA OPTYCZNA

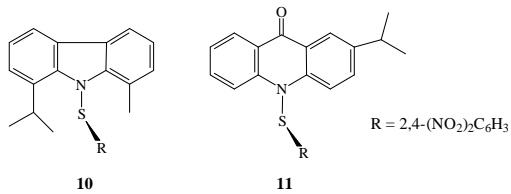
### Chiralność osiowa (aksjalna)

DWA ATOMY O HYBRYDYZACJI  $sp^2$   
POŁĄCZONE WIĄZANIEM POJEDYNCZYM O  
WYSOKIEJ BARIERZE ROTACJI, NP. BIFENYLE

zahamowana rotacja wokół wiązania pojedynczego C-N

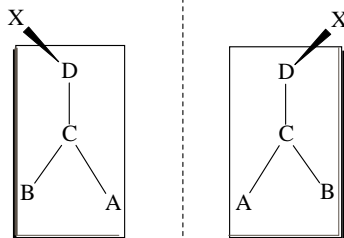


sulfenamidy z osią chiralną biegnącą wzdłuż wiązania S-N



## IZOMERIA OPTYCZNA

### Chiralność planarna

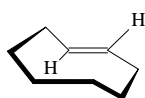


### PŁASZCZYZNA CHIRALNA

- ❖ wiązanie podwójne
- ❖ płaski pierścień, np. benzenowy

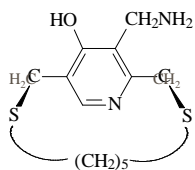
## IZOMERIA OPTYCZNA

### Chiralność planarna



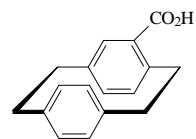
*S*

(*E*)-cyklookten



*S*

cyklofan



*R*

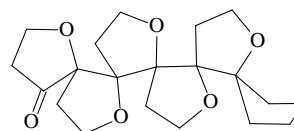
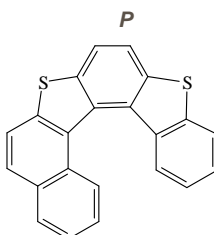
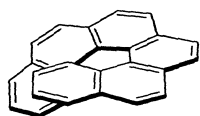
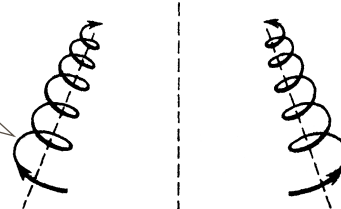
paracyklofan

## IZOMERIA OPTYCZNA

Cząsteczki wewnętrznie dyssymetryczne

Konfiguracja cząsteczki nie zależy od konstytucji

Helikalne struktury makromolekuł naturalnych:  
– podwójna helisa kwasów nukleinowych  
– helisa polipeptydów



1. duża skręcalność właściwa rzędu kilku tysięcy stopni
2. wysoka stabilność układu; bariera inwersji rzędu 150–180 kJ/mol

1960r. Cahn, Ingold i Prelog

uniwersalna reguła przypisywania konfiguracji *R/S* każdemu związkowi organicznemu

Vladimir Prelog (ur. 23.07.1906 Sarajewo, zm. 7.01.1998 Zurich) - chemik, laureat nagrody Nobla w 1975 za prace nad stereochemią reakcji katalizowanych przez enzymy

Sir Christopher Kelk Ingold (28.10.1893 Londyn, zm. 8.12.1970 Edware) – chemik angielski, pracował w Leeds i Londynie



REGUŁY CIP

1960r. Cahn, Ingold i Prelog

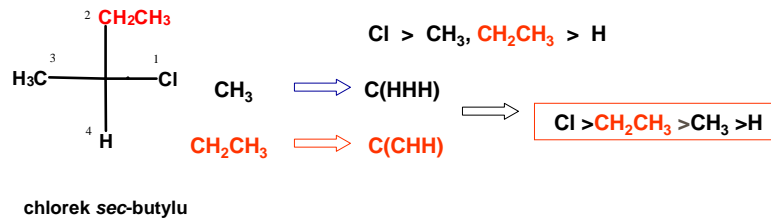
uniwersalna metoda przypisywania konfiguracji R/S  
każdemu związkowi organicznemu

Reguły pierwszeństwa podstawników:

- Jeżeli cztery atomy połączone z centrum stereogennym są różne, to pierwszeństwo zależy od liczby atomowej atomu połączonego z centrum stereogennym; im większa liczba atomowa, tym starszy podstawnik; dla izotopów – im cięższy tym starszy, np.:

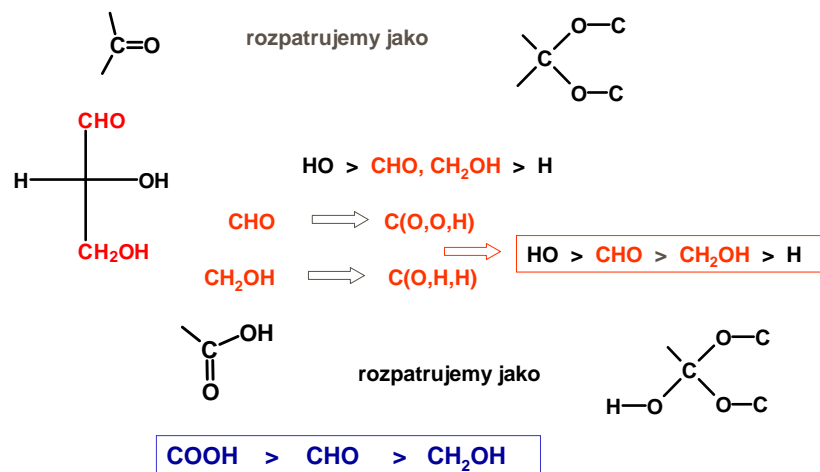


- Jeżeli nie można ustalić pierwszeństwa podstawników w oparciu o regułę 1, to należy w analogiczny sposób rozpatrywać następane atomy, np. chlorek sec-butyłu



Reguły pierwszeństwa podstawników:

- W przypadku podstawników z wiązaniami wielokrotnymi, atomy połączone takim wiązaniem rozpatruje się jako podwójne lub potrójne



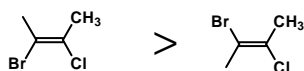
Reguły pierwszeństwa podstawników:

4. W przypadku, gdy asymetria cząsteczki zależy tylko od różnic stereochemicznych między podstawnikami, przyjmuje się :

dla izomerów geometrycznych

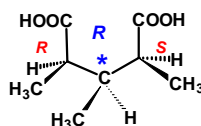
*cis* > *trans*

*Z* > *E*



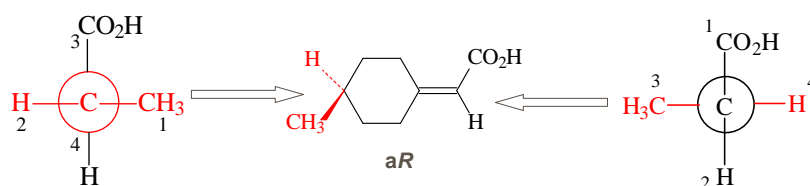
dla podstawników enancjomerycznych

*R* > *S*



1960r. Cahn, Ingold i Prelog

uniwersalna metoda przypisywania konfiguracji *R/S* każdemu związkowi organicznemu

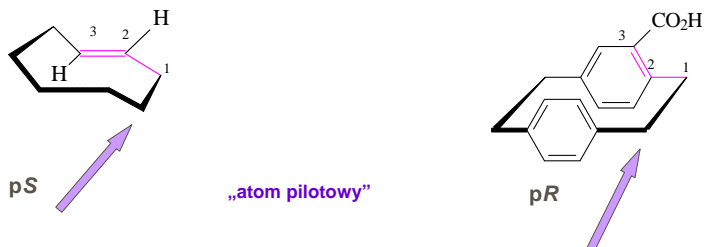


1. rozpatrywaną cząsteczkę należy zorientować dowolnym końcem osi chiralnej w stronę obserwatora
2. określa się szereg ważności podstawników (1–4) **w parach** zgodnie z obowiązującymi w nomenklaturze chemicznej zasadami starszeństwa
3. przyznawanie pierwszeństwa ligandom położonym bliżej obserwatora (przypisuje się im numery 1 i 2).
4. Konfigurację cząsteczki *aR* lub *aS* wskazuje kierunek krzywej łączącej ligandy preferowane w pierwszej, drugiej i trzeciej kolejności; przedrostek *a* oznacza, że związek posiada chiralność osiową – jego obecność nie jest wymagana



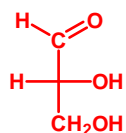
1960r. Cahn, Ingold i Prelog

uniwersalna metoda przypisywania konfiguracji *R/S* każdemu związkowi organicznemu

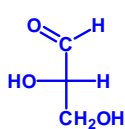


1. cząsteczkę orientuje się w ten sposób, aby patrzeć na nią od strony najbliższego atomu wystającego poza płaszczyznę chiralną – zwany „atomem pilotowym”
2. gdy kilka atomów może spełniać rolę „atomu pilotowego” jego wybór określają obowiązujące w chemii reguły starszeństwa; mogą występować dwa równoważne „atomy pilotowe”.
3. zgodnie z obowiązującymi regułami starszeństwa CIP należy ustalić kolejność trzech sąsiednich atomów (1, 2 i 3) leżących w płaszczyźnie chiralnej
4. jeżeli poruszając się od atomu (1) połączonego z „atomem pilotowym” w stronę kolejnych (2 i 3) poruszamy się zgodnie z ruchem wskazówek zegara, to konfiguracja oznaczana jest symbolem *pR*, jeśli przeciwnie *pS*; przedrostek *p* służy do zaznaczenia chiralności planarnej – jego obecność nie jest obowiązkowa

### KONWENCJA FISCHERA – szeregi *L* i *D*

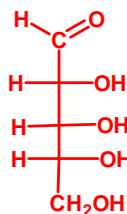


ALDEHYD *D*-(+)- GLICERYNOWY

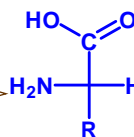


ALDEHYD *L*-(−)- GLICERYNOWY

ATOM WĘGLA NA NAJWYŻSZYM STOPNIU UTLENIEŃIA



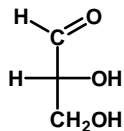
SZEREG *D*-WĘGLOWODANÓW



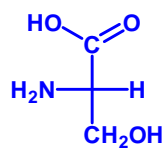
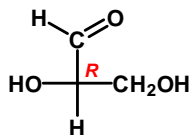
SZEREG *L*- $\alpha$ -AMINOKWASÓW

KONFIGURACJA NA JEDNYM ATOMIE WĘGLA

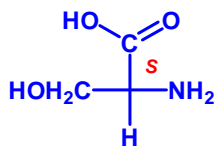
KONWENCJA FISCHERA – szeregi L i D



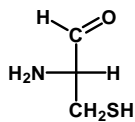
ALDEHYD D-(+)- GLICERYNOWY



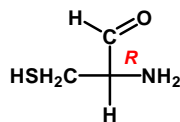
L(-)-Ser



S-Ser

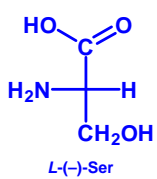


L-Cys

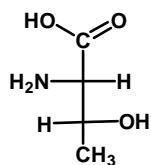
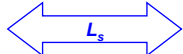


R-Cys

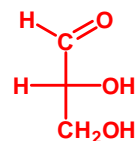
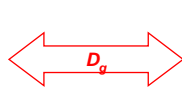
KONWENCJA FISCHERA – szeregi L i D



L(-)-Ser



L(-)-Treonina



ALDEHYD D-(+)- GLICERYNOWY

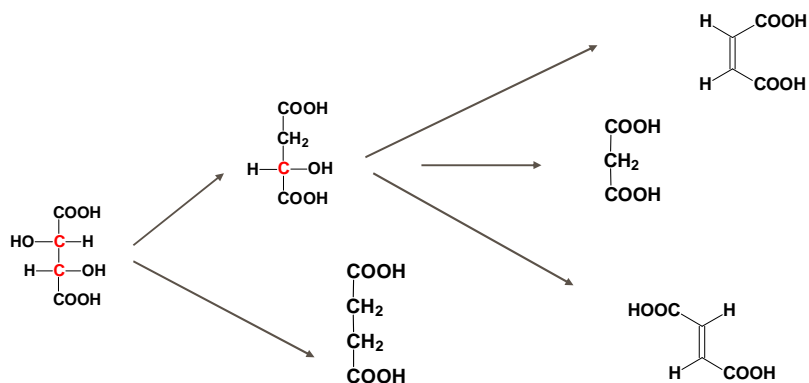
Wady konwencji Fischera:

- ❖ korelowanie konfiguracji jest realizowane tylko na jednym, określonym centrum stereogennym
- ❖ niejednoznaczność w przypisywaniu konfiguracji, gdy w cząsteczce występuje więcej niż jedno centrum stereogenne – stosowanie dodatkowych wskaźników literowych; w niektórych przypadkach nawet takie postępowanie zawodzi, np. optycznie czynny kwas winowy

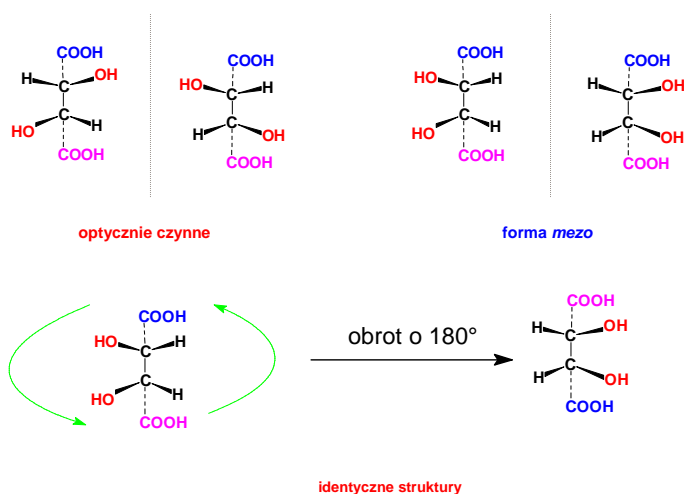
Jakub van't Hoff postulował:

1. Związki węgla, posiadające asymetryczny atom węgla są chiralne

2. Pochodne chiralnych związków węgla tracą zdolność skręcania płaszczyzny światła spolaryzowanego wtedy, gdy zanika asymetria wszystkich atomów węgla

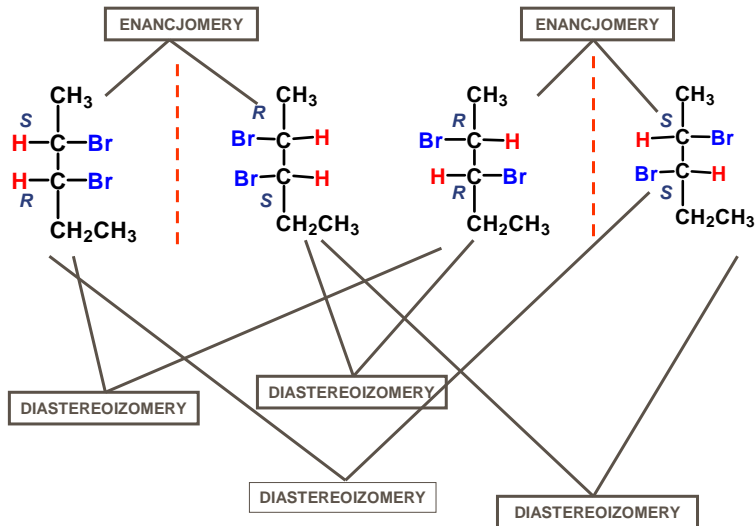


3. Związki posiadające asymetryczne atomy węgla nie muszą być chiralne



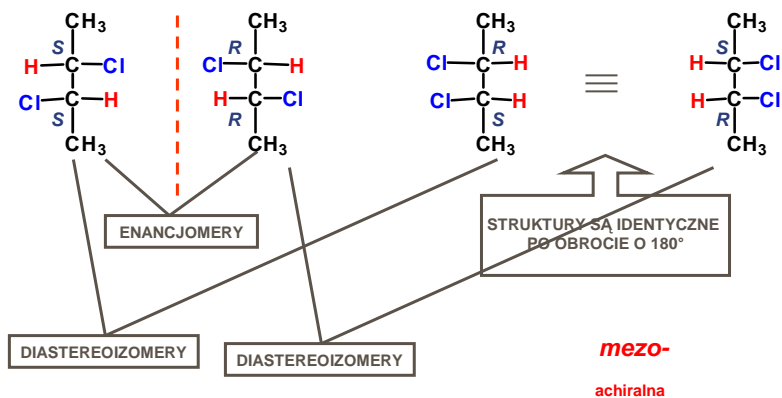
## IZOMERIA OPTYCZNA

$n$  – liczba centrów stereogennych  $\implies$   $2^n$  – maksymalna liczba stereoisomerów



## IZOMERIA OPTYCZNA

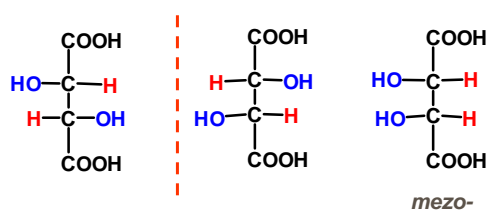
$n$  – liczba centrów stereogennych  $\implies$   $2^n$  – maksymalna liczba stereoisomerów



## IZOMERIA OPTYCZNA

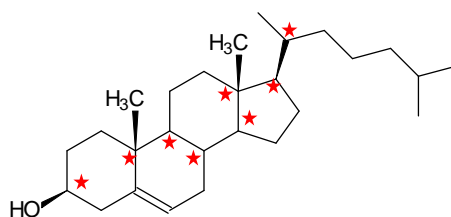
### WŁAŚCIWOŚCI FIZYCZNE KWASÓW WINOWYCH

KWAS WINOWY	$[\alpha]_D^{20}$	temp. top. [°C]	CIĘŻAR WŁ.	ROZPUSSZCZALNOŚĆ w H <sub>2</sub> O [g/100ml]
mezo-	-	140	1 666	120
(-)	- 11.98	170	1 760	147
(+)	+11.98	170	1 760	147
(±)	-	205	1 687	25



## IZOMERIA OPTYCZNA

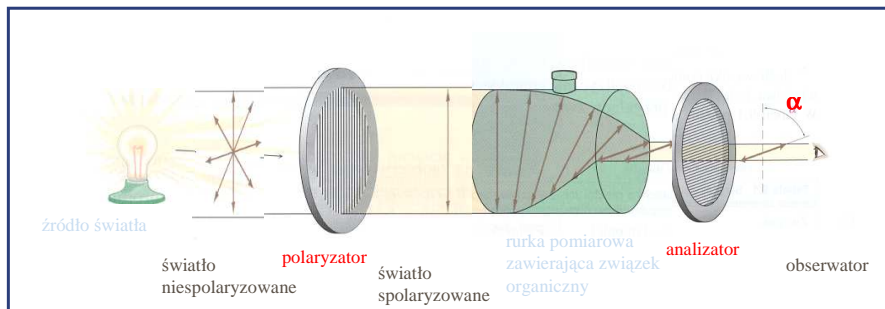
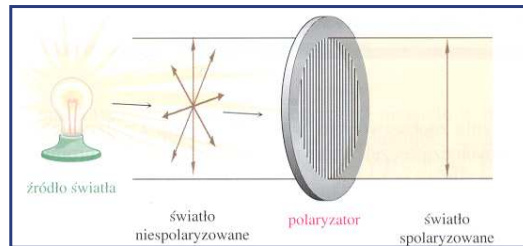
$n$  centrów stereogenicznych  $2^n$  stereoizomerów



cholesterol  
 $2^8 = 256$  stereoizomerów

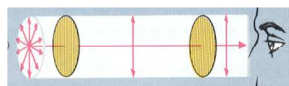
## Czynność optyczna

Fizyk francuski Jean-Baptiste Biot – 1815r.



## Czynność optyczna

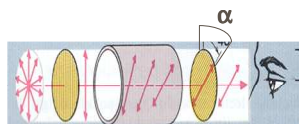
### Skręcalność właściwa niektórych związków



- polaryzator i analizator ustawione równolegle
- brak optycznie czynnej substancji
- światło spolaryzowane przechodzi przez analizator



- polaryzator i analizator ustawione prostopadle
- brak optycznie czynnej substancji
- światło spolaryzowane nie przechodzi przez analizator



- optycznie czynna substancja znajduje się pomiędzy polaryzatorem i analizatorem
- światło spolaryzowane przechodzi przez analizator, gdy przekręci się go w lewo (względem obserwatora) o kąt  $\alpha$

## Czynność optyczna

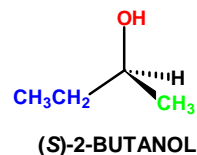
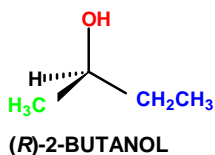
### Skręcalność właściwa niektórych związków

ZWIĄZEK	$[\alpha]_D$
Kamfora	+44.26
Morfina	-132.0
Sacharoza	+66.47
Cholesterol	-31.5
Penicylina V	+233.0
Glutaminian sodowy	+25.5
Benzen	0

$$[\alpha]_D = \frac{[\alpha]}{l \times c} = \frac{\text{obserwowana skręcalność}}{\text{długość drogi optycznej [dm]} \times \text{stężenie [g/100ml]}}$$

Skręcalnością właściwą  $[\alpha]$  związku nazywa się skręcalność zaobserwowaną, gdy światło o długości fali 589 nm pokonuje drogę długości 1dm przez roztwór związku o stężeniu 1g/100cm<sup>3</sup>

## Czynność optyczna



TEMP. WRZENIA	99.5°C	99.5°C
GĘSTOŚĆ [g/ml]	0.808	0.808
WSPÓŁ. ZAŁ.	1.397	1.397
<b>SKRĘCALNOŚĆ WŁ.</b>	<b>- 13.52</b>	<b>+ 13.52</b>

$$[\alpha]_D^{20^\circ\text{C}} = \frac{\alpha}{c \times l}$$

Gdzie:  $\alpha$  – skręcalność obserwowana  
 $c$  – stężenie roztworu badanego [g/100ml]  
 $l$  – długość drogi światła [dm]

ENANCJOMERY



IDENTYCZNE  
WŁAŚCIWOŚCI FIZYCZNE I  
CHEMICZNE

ALE

RÓŻNE KIERUNKI SKRĘCANIA  
PŁASZCZYNY ŚWIATŁA  
SPOLARYZOWANEGO

## ELEMENTY SYMETRII

### Element symetrii

obiekt geometryczny taki jak linia, płaszczyzna lub punkt, względem którego dokonuje się operacji symetrii.

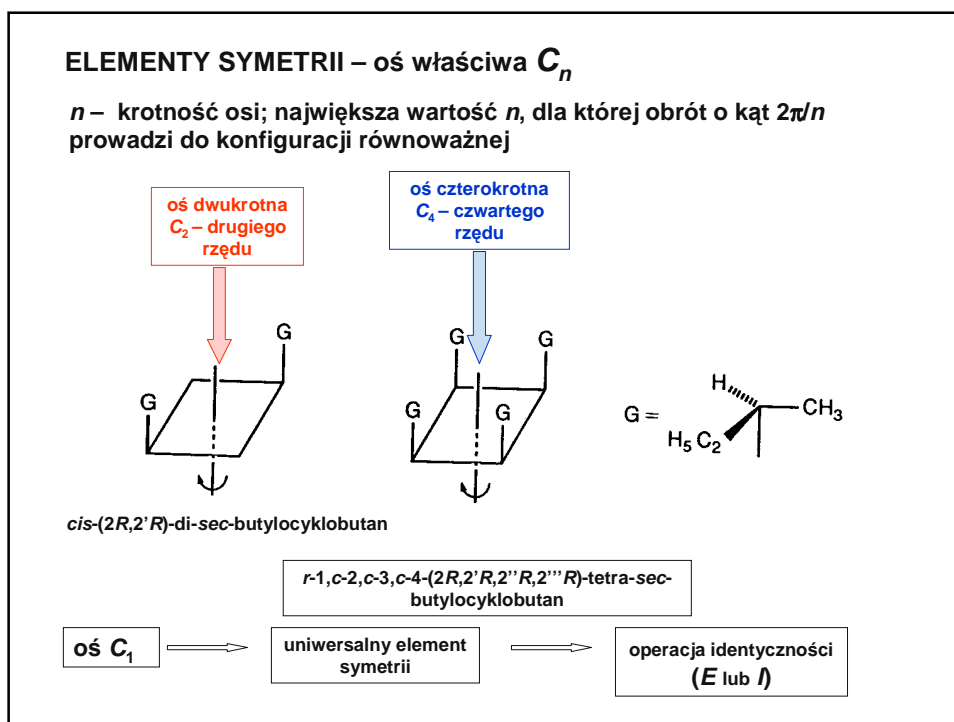
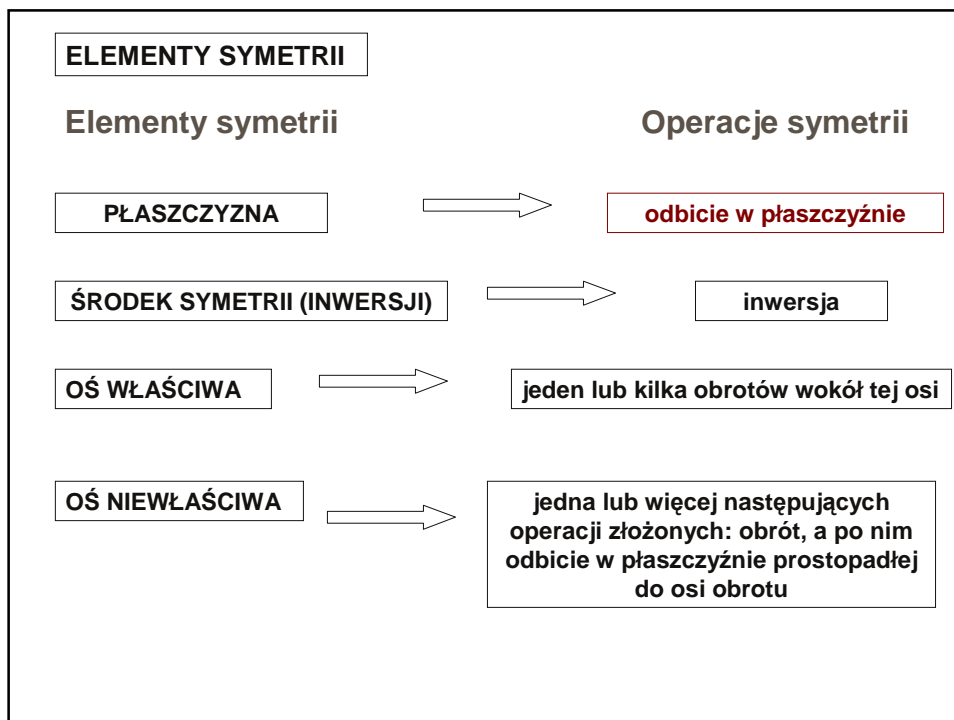
### Operacja symetrii

przekształcenie ciała, po dokonaniu którego każdy punkt ciała pokrywa się z równoważnym punktem (w szczególności z samym sobą) przed wykonaniem transformacji.

## ELEMENTY SYMETRII

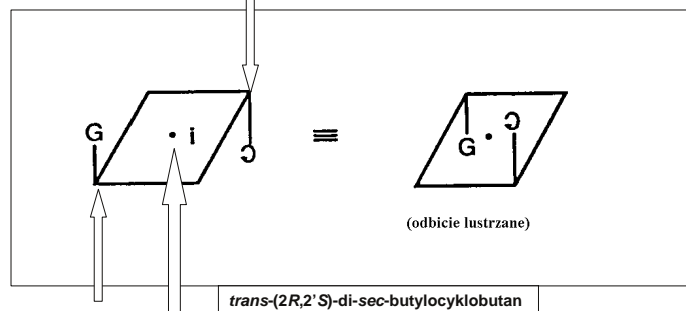
- oś symetrii  $C_n$
- płaszczyzna symetrii  $\sigma$
- środek symetrii  $i$
- oś niewłaściwa (inwersyjna)  $S_n$





## ELEMENTY SYMETRII – środek symetrii $i$

punkt, w którym znajduje się początek układu kartezjańskiego;  
zamiana współrzędnych  $(x,y,z)$  każdego atomu na współrzędne  $(-x,-y,-z)$  prowadzi do konfiguracji równoważnej atomów cząsteczki



jedyny atom cząsteczki, który nie zmieniłby swojego położenia w wyniku operacji symetrii tzn. inwersji

Inne atomy muszą występować w cząsteczce parami; każdy z nich musi mieć swój odpowiednik, z którym zamienia się miejscem podczas inwersji

## ELEMENTY SYMETRII – środek symetrii $i$

$n$ -krotne wykonywanie operacji inwersji  $i^n$

$n$  parzyste

$$i^n = E$$

$n$  nieparzyste

$$i^n = i$$

cząsteczki mające środek symetrii:

- ✓ cząsteczki typu  $AB_6$  o strukturze ośmiościanu,
- ✓ płaskie cząsteczki  $AB_4$ ,
- ✓ płaskie cząsteczki  $AB_2C_2$  typu *trans*,
- ✓ cząsteczki liniowe typu  $ABA$ ,
- ✓ eten, benzen

środek symetrii nie występuje w cząsteczkach, w których występuje więcej niż jeden rodzaj nieparzystych atomów

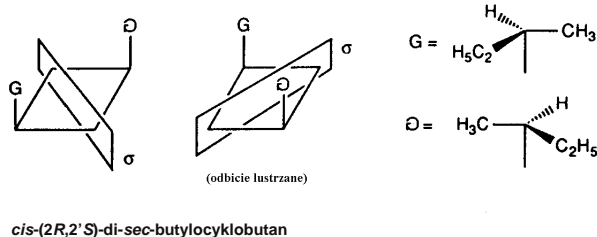
cząsteczki o wysokiej symetrii nie mające środka symetrii:

$C_5H_5^-$  (płaski pięciobok)

cząsteczki typu  $AB_4$  o strukturze czworościanu

## ELEMENTY SYMETRII – płaszczyzna symetrii $\sigma$

- przechodzi przez ciało,
- atomy leżące na płaszczyźnie zajmują szczególne położenie – operacja odbicia względem płaszczyzny nie zmienia ich położenia,
- każda cząsteczka płaska musi mieć jedną płaszczyznę wyznaczoną przez atomy tworzące cząsteczkę,
- liczba atomów danego rodzaju nie leżących na płaszczyźnie symetrii musi być parzysta,
- jeżeli w cząsteczce mającej płaszczyznę symetrii jest tylko jeden atom danego rodzaju, to musi on znajdować się na każdej płaszczyźnie symetrii cząsteczki



## ELEMENTY SYMETRII – płaszczyzna symetrii $\sigma$

$n$ -krotne wykonywanie operacji inwersji  $\sigma^n$

$n$  parzyste

$$\sigma^n = E$$

$n$  nieparzyste

$$\sigma^n = \sigma$$

cząsteczki mające płaszczyzny symetrii:

- ✓ cząsteczki liniowe o nieskończonej liczbie płaszczyzn symetrii
- ✓ cząsteczki typu  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CHCl}_3$  o trzech płaszczyznach symetrii
- ✓ kompleksy o strukturze płaskiej, np.  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$  o pięciu płaszczyznach symetrii
- ✓ cząsteczki o strukturze czworościanu foremnego mają sześć płaszczyzn symetrii
- ✓ cząsteczki o strukturze ośmiościanu foremnego mają dziewięć płaszczyzn symetrii

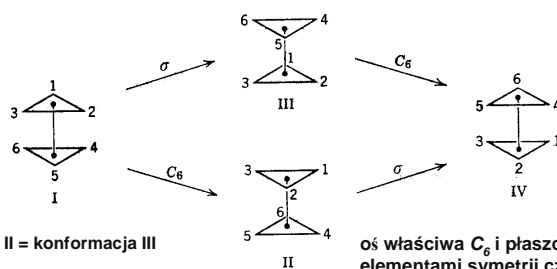
## ELEMENTY SYMETRII – oś niewłaściwa (inwersyjna) $S_n$

• złożenie dwóch operacji symetrii: obrotu właściwego oraz następującego po nim odbicia w płaszczyźnie prostopadłej do osi obrotu; obrót niewłaściwy o kąt  $2\pi/n$  oznacza się symbolem  $S_n$

• jeżeli cząsteczka ma oś  $C_n$  i prostopadłą do niej płaszczyznę symetrii, to ma także i oś inwersji  $S_n$

• cząsteczka może mieć oś  $S_n$  wtedy, gdy nie ma, ani osi  $C_n$ , ani prostopadłej do niej płaszczyzny symetrii  $\sigma$

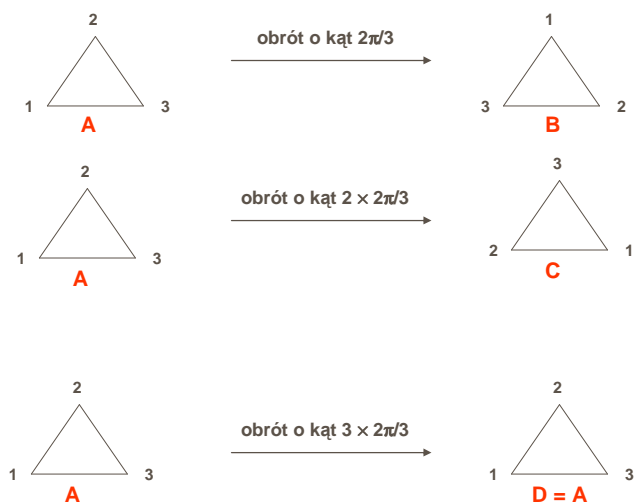
prosta C-C jest osią trzeciego rzędu  $C_3$  cząsteczki etanu



konformacja II = konformacja III  
oraz  
konformacja I = konformacja IV  
ALE  
konformacja II  $\neq$  konformacja I

oś właściwa  $C_6$  i płaszczyzna symetrii  $\sigma$  nie są elementami symetrii cząsteczki etanu  
ALE

złożenie tych dwóch elementów symetrii jest elementem symetrii cząsteczki – osią niewłaściwą  $S_6$



## ELEMENTY SYMETRII – oś niewłaściwa (inwersyjna) $S_n$

element symetrii oś inwersyjna  $S_n$   $\implies$  operacje  $S_n, S_n^2, S_n^3, \dots$

dla  $n$  – parzystego

operacje  $S_n, S_n^2, S_n^3, \dots, S_n^n$

$S_n^n$  wykonywane są operacje  $C_n, \sigma, C_n, \sigma, \dots, n$  – razy

$n$  – parzyste, to wykonanie  $n$  razy odbicia daje jedność

czyli

$$S_n^n = C_n^n$$

$$C_n^n = E$$

tym samym

$$S_n^n = E$$

## ELEMENTY SYMETRII – oś niewłaściwa (inwersyjna) $S_n$

Zbiór operacji  $S_6, S_6^2, S_6^3, S_6^4, S_6^5, S_6^6$  można, np. zapisać

$$S_6,$$

$$S_6^2 = C_6^2 = C_3,$$

$$S_6^3 = S_2 = i,$$

$$S_6^4 = C_3^2,$$

$$S_6^5,$$

$$S_6^6 = E$$

czyli  $S_6, C_3, i, C_3^2, S_6^5, E$

Operacje  $C_3, C_3^2, E$  są generowane przez oś  $C_3$

Z istnienia osi  $S_6$  wynika istnienie osi  $C_3$



z istnienia osi  $S_n$  parzystego rzędu wynika istnienie osi  $C_{n/2}$

## ELEMENTY SYMETRII – oś niewłaściwa (inwersyjna) $S_n$

Zbiór operacji  $S_5, S_5^2, S_5^3, S_5^4, \dots$  można, np. zapisać

$$S_5 = C_5, \text{ a następnie } \sigma,$$

$$S_5^2 = C_5^2,$$

$$S_5^3 = C_5^3, \text{ a następnie } \sigma,$$

$$S_5^4 = C_5^4,$$

$$S_5^5 = \sigma$$

$$S_5^6 = C_5,$$

$$S_5^7 = C_5^2, \text{ a następnie } \sigma,$$

$$S_5^8 = C_5^3,$$

$$S_5^9 = C_5^4, \text{ a następnie } \sigma,$$

$$S_5^{10} = E$$

$$S_5^{11} = C_5, \text{ a następnie } \sigma,$$

od operacji  $S_5^{2n+1}$  ciąg operacji zaczyna powtarzać się



element  $S_n$  dla  $n$  nieparzystego generuje  $2n$  operacji

## Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne

Zbiór niepowtarzających się operacji symetrii danej cząsteczki tworzy grupę; różne grupy odpowiadają różnym rzeczywistym cząsteczkom

### Grupa punktowa $C_1$

✓ charakteryzują się najniższym stopniem symetrii;

✓ **jedyny element symetrii – identyczność równoważna z osią symetrii  $C_1$ .**

cząsteczki typu Cabcd, np. CHFCIBr

### Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne

Grupy punktowe  $C_n$       jeden element symetrii – oś właściwa  $C_n$

grupa punktowa  $C_2$

np.

(-)- i (+)-kwas winowy,  
chiralne bifenyle,  
1,3-dipodstawione alleny

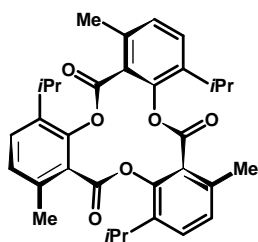


1,3-dichloroallen

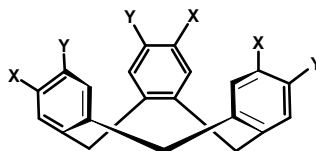
### Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne

Grupy punktowe  $C_n$       jeden element symetrii – oś właściwa  $C_n$

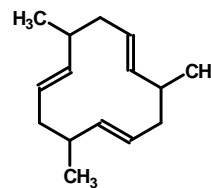
grupa punktowa  $C_3$



tri-o-tymotydy cztery konformacje,  
z których dwie mają symetrię  $C_3$  a  
dwie  $C_1$ ; energia racemizacji ok.  
22 kcal/mol



X = OCH<sub>3</sub>  
Y = OH, OCH<sub>3</sub>



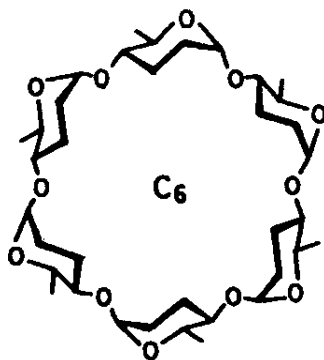
*trans,trans,trans*-3,7,11-trimetylo-  
1,5,9-dodekatrien C otrzymano  
poprzez trimeryzację (typu  
głowa-do-głowy) 1,3-pentadienu.

Pochodne cyklotriweratrylenu są stosunkowo optycznie  
trwałe (energia aktywacji dla racemizacji wynosi ok. 26.5  
kcal/mol)

Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne

Grupy punktowe  $C_n$       jeden element symetrii – oś właściwa  $C_n$

grupa  $C_6$



cykloheksaamyloza, tzw.  $\alpha$ -cyklodekstryna

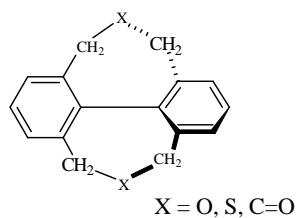
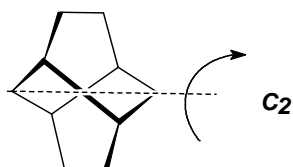
Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne

Grupy punktowe  $D_n$        $n$  osi symetrii  $C_2 \perp$  głównej osi właściwej  $C_n$

grupa punktowa  $D_2$

np.

twistan, zmostkowane bifenyle,



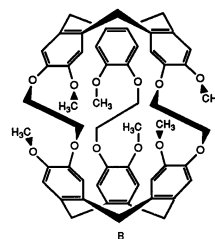
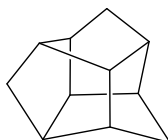
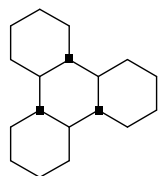


**Grupy punktowe zawierające cząsteczki chiralne**

Grupy punktowe  $D_n$   $n$  osi symetrii  $C_2 \perp$  głównej osi właściwej  $C_n$

grupa punktowa  $D_3$

trishomokuban



*trans-transoid-trans-transoid-trans*-perhydrotriphenylen – pierwszy związek z grupy  $D_3$  otrzymany w optycznie czynnej formie

dimer cyklotriweratrylenu

**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

Grupy punktowe inne niż  $C_n$  i  $D_n$  posiadają płaszczyzny, środki symetrii czy osie.



cząsteczki należące do nich są achiralne

## Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

### Grupa punktowa $C_s$ (lub $C_{1h}$ )

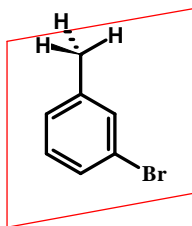
elementy symetrii – płaszczyzna symetrii  $\sigma$

operacje symetrii dla cząsteczek należących do tej grupy:

$E$  i  $\sigma$

przykłady cząsteczek należących do tej grupy:

- cząsteczki typu  $CH_2XY$  i  $CR_2XY$ ,
- aldehydy ( $RHC=O$ )
- chloroeten  $CH_2=CHCl$
- *m*-bromochlorobenzen



## Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

### Grupy punktowe $S_n$

elementy symetrii –  $n$ -krotna inwersyjna oś symetrii  $S_n$

$n$  – parzyste

brak płaszczyzn symetrii  
niezbędna oś symetrii  $C_{n/2}$  towarzysząca osi  $S_n$

$$n = 4m+2$$

gdzie  $m = 0, 1, 2, \dots$   
występuje także środek inwersji

$$n = 4m$$

gdzie  $m = 0, 1, 2, \dots$   
brak środka inwersji

$n$  – nieparzyste

$S_n$  towarzyszy zawsze oś  $C_n$   
pozioma płaszczyzna  $\sigma_h$   
(grupy nazywają się  $C_{nh}$ )

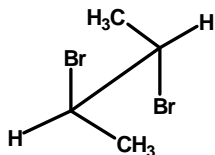
**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

Grupy punktowe  $S_n$  elementy symetrii –  $n$ -krotna inwersyjna oś symetrii  $S_n$

**Grupa punktowa  $S_2$  (lub  $C_i$ )**

elementy symetrii – oś inwersyjna  $S_2 (i)$

operacje symetrii dla cząsteczek należących do tej grupy:  
 $E$  i  $i$

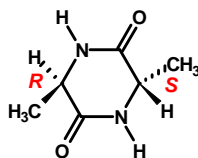
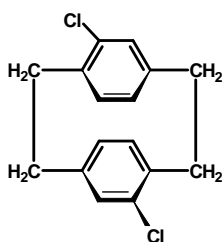


przykłady cząsteczek należących do tej grupy:

➤ mezo-2,3-dibromobutan w konformacji antiperiplanarnej

➤ dichloro[2.2]paracyklofan

➤ trans-diketopiperazyna (powstała z *L*- oraz *D*-Ala)



**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

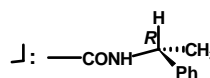
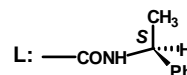
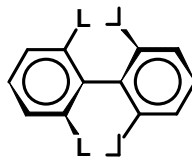
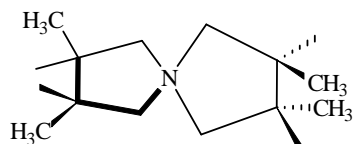
Grupy punktowe  $S_n$  elementy symetrii –  $n$ -krotna inwersyjna oś symetrii  $S_n$

**Grupa  $S_4$**

operacje symetrii dla cząsteczek należących do tej grupy:

$E$ ,  $S_4^1$ ,  $C_2$  i  $S_4^3$

przykładem cząsteczki należącej do tej grupy jest np. związek typu spiro czy pochodna bifenylu



**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

płaszczyzny symetrii – wertykalna  $\sigma_v$  zawiera główną oś symetrii  
 diagonalna  $\sigma_d$  zawiera główną oś symetrii  
 horyzontalna  $\sigma_h$  prostopadła do głównej osi symetrii

Kombinacje tych płaszczyzn z osiami symetrii generują  
 większość grup punktowych symetrii  $C_n$  lub  $D_n$

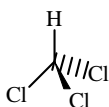
**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

grupy punktowe  $C_{nv}$

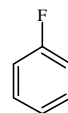
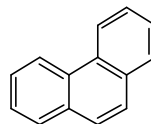
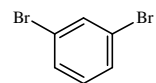
jedna oś symetrii  $C_n$

$n$  wertykalnych (pionowych) płaszczyzn symetrii  $\sigma_v$ ,  
 które zawierają oś symetrii  $C_n$  oraz przecinają się  
 na niej

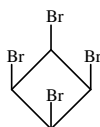
**$C_{3v}$**



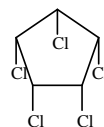
**$C_{2v}$**



**$C_{4v}$**



**$C_{5v}$**



dla planarnych pierścieni

## Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

### grupa punktowa $C_{\infty v}$

oś symetrii  $C_{\infty}$ , w której przecinają się płaszczyzny symetrii, ale brak innych elementów symetrii

przykłady cząsteczek należących do tej grupy (tzw. symetria stożkowa):

- chlorowodór
- tlenek węgla
- chloroetyln

oś symetrii  $C_{\infty}$  – obrót o nieskończenie mały kąt

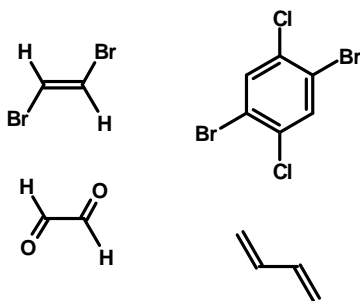
## Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

grupy punktowe  $C_{nh}$  oś symetrii  $C_n$

płaszczyzna symetrii  $\sigma_h$ , która jest prostopadła do osi symetrii  $C_n$

grupy punktowe  $C_{2h}$

operacje symetrii  $E, C_2, i, \sigma$



przykłady cząsteczek należących do tej grupy:

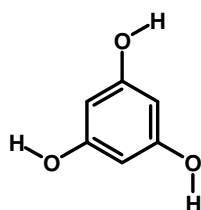
- *trans*-dibromoeten
- *s-trans*-1,3-butadien
- 1,4-dibromo-2,5-dichlorobenzen

**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

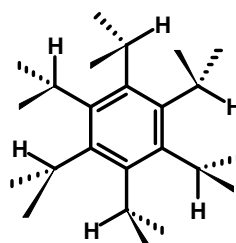
**grupy punktowe  $C_{nh}$**

wyższe grupy punktowe  $C_{nh}$  – należą do nich cząsteczki występujące w określonych konformacjach

**grupa punktowe  $C_{3h}$**



**grupa punktowe  $C_{6h}$**



**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

**grupy punktowe  $D_{nd}$**

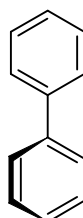
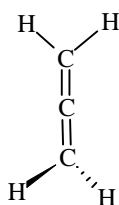
jedna oś symetrii  $C_n$   
 $n$  prostopadłych do niej osi symetrii  $C_2$   
 $n$  płaszczyzn symetrii  $\sigma_d$  (diagonalne, przekątne)  
 które przecinają się na osi głównej symetrii  $C_n$

**grupy punktowe  $D_{2d}$**

operacje symetrii  $E, C_2, 2C'_2, 2\sigma_d, S^1_4, S^3_4$

**$D_{2d}$**

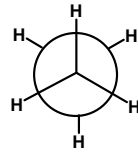
przykłady cząsteczek należących do tej grupy:



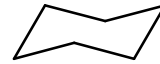
- alleny
- spirany
- bifenyle

**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

grupy punktowe  $D_{nd}$

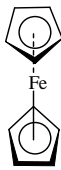


grupa punktowa  $D_{3d}$

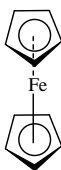


wyższe grupy punktowe  $D_{nd}$  – cząsteczki występują w takich grupach raczej rzadko

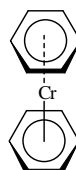
$D_{5d}$



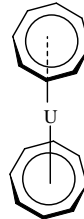
$D_{5h}$



$D_{6h}$



$D_{8h}$



**Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne**

grupy punktowe  $D_{nh}$

jedna oś symetrii  $C_n$

$n$  prostopadłych do niej osi symetrii  $C_2$

płaszczyznę symetrii  $\sigma_h$

grupa punktowa  $D_{2h}$

operacje symetrii  $E, C_2, 2C'_2, 2\sigma_v, \sigma_h, i$

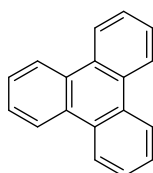
przykłady cząsteczek należących do tej grupy:

- eten
- 1,4-dichlorobenzen
- naftalen, antracen

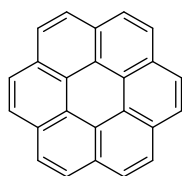
### Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

grupy punktowe  $D_{nh}$       jedna oś symetrii  $C_n$   
    $n$  prostopadłych do niej osi symetrii  $C_2$   
   płaszczyznę symetrii  $\sigma_h$

$D_{3h}$

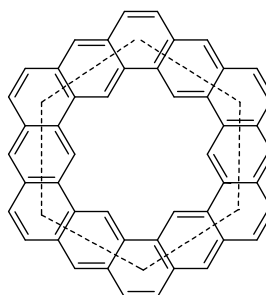


trifenylen



koronen

$D_{6h}$



kekulen

### Grupy punktowe zawierające tylko cząsteczki achiralne

grupa punktowa  $D_{\infty h}$

oś symetrii  $C_{\infty}$ , w której przecinają się płaszczyzny symetrii  
 $\infty$  osi symetrii  $C_2$  prostopadłych do osi głównej symetrii  $C_{\infty}$   
płaszczyzna symetrii prostopadła do osi głównej symetrii  $C_{\infty}$

przykłady cząsteczek należących do tej grupy  
(tzw. symetria cylindryczna):

- wodór cząsteczkowy
- ditlenek węgla
- etyn



### Grupy punktowe odpowiadające bryłom platońskim

Aby zbudować wielościan foremny należy w jednym punkcie połączyć co najmniej trzy ściany.

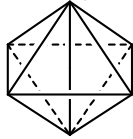
Dla trójkątów równobocznych:

- trzy trójkąty o wspólnym wierzchołku (czworościan)



ściany: 4 trójkąty równoboczne  
wierzchołki: 4 krawędzie: 6

- cztery trójkąty o wspólnym wierzchołku (ośmiościan)



ściany: 8 trójkątów równobocznych  
wierzchołki: 6 krawędzie: 12

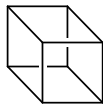
- pięć trójkątów o wspólnym wierzchołku (dwudziestościan)



### Grupy punktowe odpowiadające bryłom platońskim

Dla kwadratów:

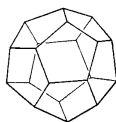
trzy kwadraty o wspólnym wierzchołku – sześćcian



ściany: 3 kwadraty wierzchołki: 8  
krawędzie: 12

Dla pięciokątów foremnych:

trzy pięciokąty o wspólnym wierzchołku – dwunastościan ( $3 \times 108^\circ = 324^\circ < 360^\circ$ )



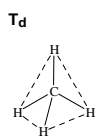
dwunastościan  
ściany: 12 pięciokątów foremnych  
wierzchołki: 20  
krawędzie: 30

## Grupy punktowe odpowiadające bryłom platońskim

**Tetraedr (czworościan) ma następujące elementy i operacje symetrii:**

- trzy osie  $S_4$ , które pokrywają się z osiami  $x, y, z$  (generowane operacje  $S_4, S_4^2=C_2, S_4^3$ )
- trzy osie  $C_2$ , które pokrywają się z osiami  $x, y, z$  (każda generuje operację  $C_2$ )
- cztery osie  $C_3$ , z których każda przechodzi przez jeden wierzchołek i środek czworościanu (każda generuje operację  $C_3$  i  $C_3^2$  razem osiem)
- sześć płaszczyzn symetrii

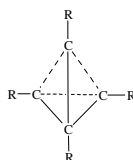
grupa punktowa  $T_d$



A



B



C, R = H

Przykłady cząsteczek:

metan  
adamantan  
cząsteczka hipotetyczna

## Grupy punktowe odpowiadające bryłom platońskim

grupa punktowa  $O_h$

Oktaedr (ośmiościan) ma następujące elementy i operacje symetrii:

- trzy osie  $S_4$ , które przechodzą przez przeciwległe wierzchołki (każda generuje operacje  $S_4, S_4^2=C_2, S_4^3$ )
- trzy osie  $C_2$ , które pokrywają się z osiami  $S_4$  (każda generuje operację  $C_2$ )
- trzy osie  $C_4$ , które pokrywają się z osiami  $S_4$  i  $C_2$  (każda generuje operacje  $C_4, C_4^3$  i  $C_2$ , ale tylko  $C_4, C_4^3$  nie zostały jeszcze wymienione)
- sześć osi  $C_2'$ , które przechodzą przez środki przeciwległych krawędzi (każda generuje operację  $C_2'$ )
- cztery osie  $S_6$ , które przechodzą przez środki przeciwległych ścian trójkątnych (każda generuje operacje  $S_6, S_6^3=C_2, S_6^5, S_6^5$ )
- cztery osie  $C_3$ , które pokrywają się z osiami  $S_6$  (każda generuje operacje  $C_3, C_3^2$ , generowane również przez  $S_6$ )
- środek inwersji (wymieniony w pkt 5)
- trzy płaszczyzny symetrii, które przechodzą przez cztery spośród sześciu wierzchołków ośmiościanu (operacje  $\sigma_h$ )
- sześć płaszczyzn symetrii, które przechodzą przez dwa wierzchołki i dzielą na połowy przeciwległe krawędzie nie zawierające tych wierzchołków (operacje  $\sigma_d$ )

## Grupy punktowe odpowiadające bryłom platońskim

grupa punktowa  $I_h$

Dodekaedr (dwunastościan) oraz zikosaedr (dwudziestościan) mają taką samą symetrię; Należą do grupy punktowej  $I_h$ , która charakteryzuje się 120 operacjami ( $E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2, i, 12S_{10}, 12S_{10}^3, 20S_6, 15\sigma$ )

## OKREŚLANIE SYMETRII CZĄSTECZEK

