



Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας

Ενότητα # (4): Συμμετρία, Πολικότητα και Οπτική Ενεργότητα των
μορίων

Σιγάλας Μιχάλης
Τμήμα Χημείας



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.





ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

ΑΝΟΙΚΤΑ
ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΑ
ΜΑΘΗΜΑΤΑ



Συμμετρία, Πολικότητα και Οπτική Ενεργότητα των μορίων



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Σκοποί ενότητας

Μετά την ολοκλήρωση της μελέτης του κεφαλαίου αυτού θα μπορείτε να ...

- προβλέπετε με βάση τη συμμετρία αν ένα μόριο έχει μόνιμη ηλεκτρική διπολική ροπή
- προβλέπετε με βάση τη συμμετρία του αν ένα μόριο είναι οπτικά ενεργό.

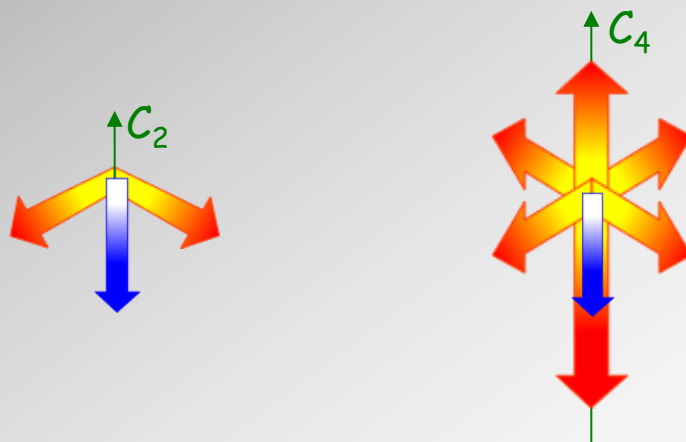


Πολικότητα των μορίων και συμμετρία

Ένα **πολικό** μόριο έχει μια **μόνιμη διπολική ροπή** που είναι η συνισταμένη των στοιχειωδών ροπών που αναπτύσσονται λόγω της ύπαρξης μερικών φορτίων στα άτομά του.

Η ύπαρξη ή μη διπολικής ροπής και η διεύθυνσή της εξαρτάται από τη συμμετρία του μορίου.

1. Αν το μόριο έχει έναν άξονα C_n δε μπορεί να έχει διπολική ροπή με διεύθυνση άλλη από αυτήν του άξονα.

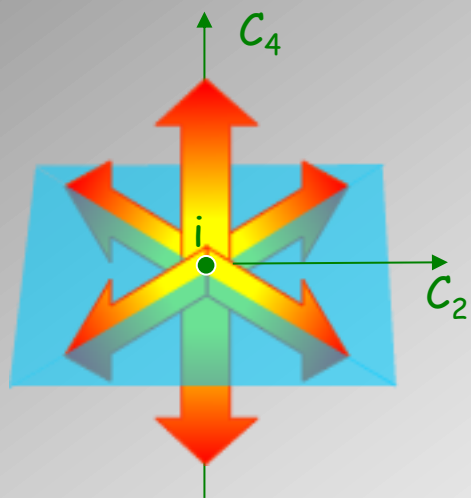


Πολικότητα των μορίων και συμμετρία

Ένα **πολικό** μόριο έχει μια **μόνιμη διπολική ροπή** που είναι η συνισταμένη των στοιχειωδών ροπών που αναπτύσσονται λόγω της ύπαρξης μερικών φορτίων στα άτομά του.

Η ύπαρξη ή μη διπολικής ροπής και η διεύθυνσή της εξαρτάται από τη συμμετρία του μορίου.

2. Αν το μόριο έχει ένα στοιχείο συμμετρίας που ανταλλάσει δύο ίσα μέρη του δεν έχει διπολική ροπή.



Τέτοια στοιχεία συμμετρίας είναι:

α. Κέντρο συμμετρίας i .

β. Άξονας C_2 κάθετος στον κύριο άξονα.

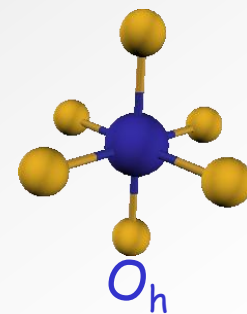
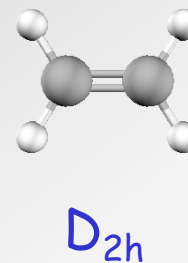
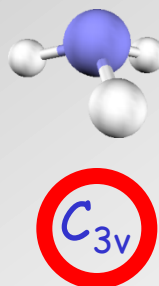
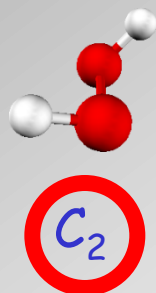
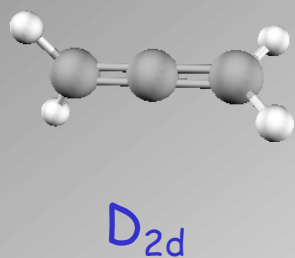
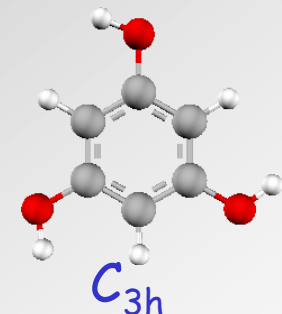
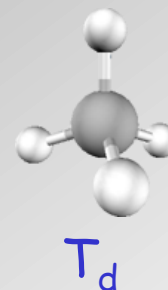
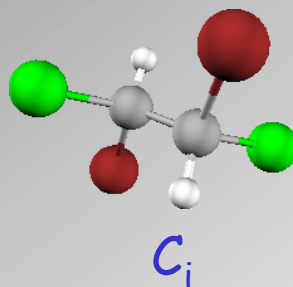
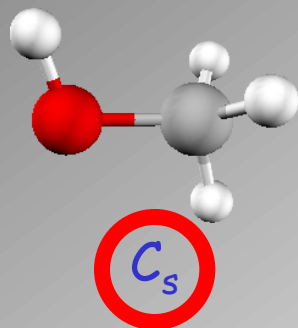
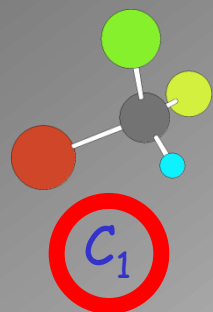
γ. Επίπεδο σ_h (κάθετο στον κύριο άξονα).

Πολικότητα των μορίων και συμμετρία

Ένα μόριο που έχει μια **μόνιμη διπολική ροπή** (πολικό μόριο) πρέπει να ανήκει σε μια από τις ομάδες σημείου:

$$C_1, C_s, C_n, C_{nv}$$

Παραδείγματα



Οπτική ενεργότητα των μορίων και συμμετρία

Χειρομορφία - Εναντιομέρεια

Η ύπαρξη σε ένα μόριο άξονα στροφοκατοπτρισμού, S_n , αποκλείει την ύπαρξη του υπό μορφή οπτικών αντιπόδων, δηλαδή την οπτική του ενεργότητα.

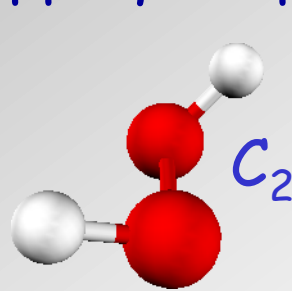
Αλλά: $S_1 = \sigma$ και $S_2 = i$. Συνεπώς ...

Η ύπαρξη σε ένα μόριο άξονα στροφοκατοπτρισμού, S_n , επιπέδου συμμετρίας, σ , ή κέντρου συμμετρίας, i , αποκλείει την οπτική του ενεργότητα.

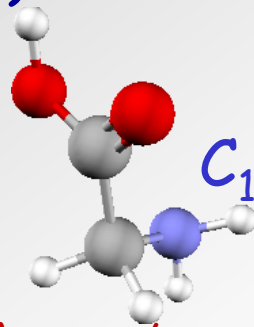
Για να είναι ένα μόριο οπτικά ενεργό είναι να έχει μόνο τα στοιχεία συμμετρίας E και C_n .

Οι χειρόμορφες ομάδες σημείου είναι η C_1 (ασύμμετρα μόρια) και οι C_n και D_n (δυσυμμετρικά μόρια).

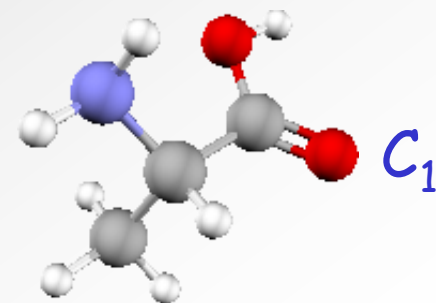
Προσοχή στην ελεύθερη περιστροφή!!!



Μη χειρόμορφο



Μη χειρόμορφο



Χειρόμορφο

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (1/3)

Βιβλία

- Bishop, D., *Group Theory and Chemistry*, Clarendon Press, Oxford, 1973.
- Carter, R. L., *Molecular Symmetry and Group Theory*, Wiley, New York, 1998.
- Cotton, F., *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd Ed., Wiley, New York, 1989.
- Dmitriev, I. S., *Symmetry in the World of Molecules*, Mir Publishers, Moscow, 1979.
- Dorain, P., *Symmetry in Inorganic Chemistry*, Addison-Wesley, New York, 1965.
- Ferraro, J. R. & Ziomek J. S., *Introductory Group Theory*, Plenum Press, New York, 1969.
- Hollas, J., *Symmetry in Molecules*, Chapman and Hall, 1972.
- Jaffé, H. H. & Orchin M., *Symmetry in Chemistry*, Wiley, New York, 1965.
- Kettle, S. F. K., *Symmetry and Structure*, 2nd Ed., Wiley, New York, 1995.
- Lesk, A.M., *Introduction to Symmetry and Group Theory for Chemists*, Kluwer, New York, 2004.
- Odgen, J. S., *Introduction to Molecular Symmetry*, Oxford University Press, Oxford, 2001.
- Rotman, J. J., *An Introduction to the Theory of Groups*, 4th Ed., Springer-Verlag, New York, 1999.



Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (2/3)

Βιβλία

- Vincent, A., *Molecular Symmetry and Group Theory*, Wiley, New York, 1977.
- Weyl, H., *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, 1931, English transl., Dover Publications, 1931.
- Worrall, I. J., *Molecular Symmetry*, Royal Institute of Chemistry Lecture Series, no. 2, 1967.
- Τσίπης, Κ. Α., *Εισαγωγή στην Κβαντική Χημείας, Τόμος II: Μοριακή Δομή*, Γ. Δεδούσης, Θεσσαλονίκη, 1993.



Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (3/3)

Διευθύνσεις στο Διαδύκτιο

- *Chilarity*: <http://csi.chemie.tu-darmstadt.de/ak/immel/tutorials/chirality/index.html>

Εκπαιδευτικό Λογισμικό

- *3DMolSym*: <http://www.molwave.com/software/3dmolsym/3dmolsym.htm>
- *Symmetry Resources at Otterbein College*: <http://symmetry.otterbein.edu/index.html>



Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Σιγάλας Μιχάλης.
«Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας. Συμμετρία, Πολικότητα και
Οπτική Ενεργότητα των μορίων». Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2015. Διαθέσιμο
από τη δικτυακή διεύθυνση: <http://eclass.auth.gr/courses/OCRS424/>



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Μη Εμπορική Χρήση - Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>





Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Ιππολύτη Γκουντενούδη - Εσκιτζή
Θεσσαλονίκη, Ιούλιος 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ