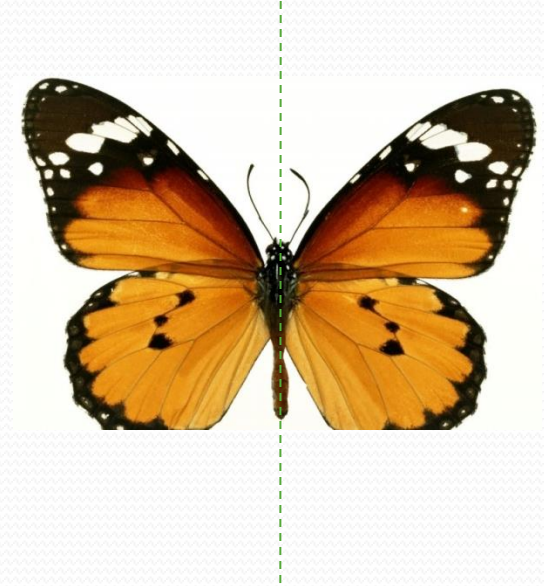
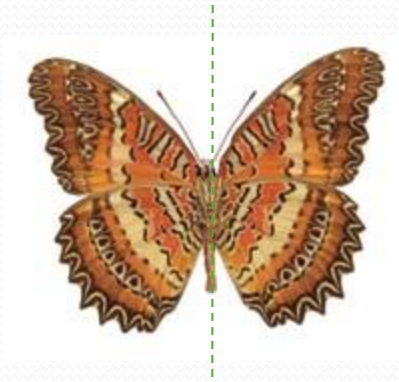


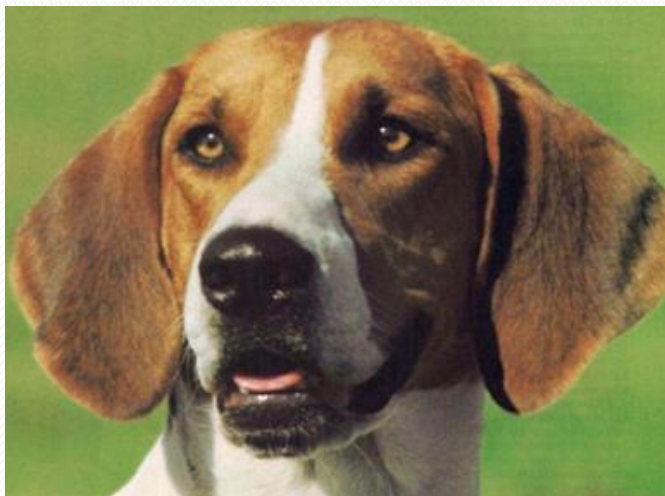
# MOLEKÜLER SİMETRİ VE GRUP TEORİ



- Çoğumuz simetri kavramının ne olduğunu en azından nitel olarak biliriz.
- Simetri doğada ve insan yapımı birçok eserde de sıkça rastlanan bir özelliktir.
- Doğada bulunan pek çok çiçek, bitki, böcek ve hayvan kendilerine özgü simetriye sahiptir.



Nevruz çiçeği





➤ *Camiler, kiliseler ve Mısır Piramitleri gibi birçok mühendislik eseri estetik bakımından simetri gösterirler.*

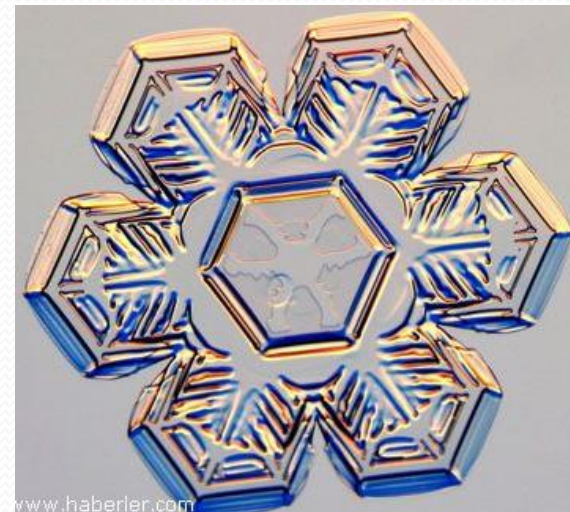
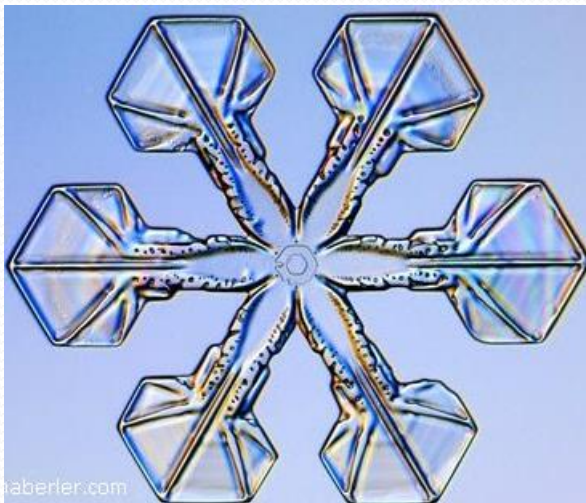
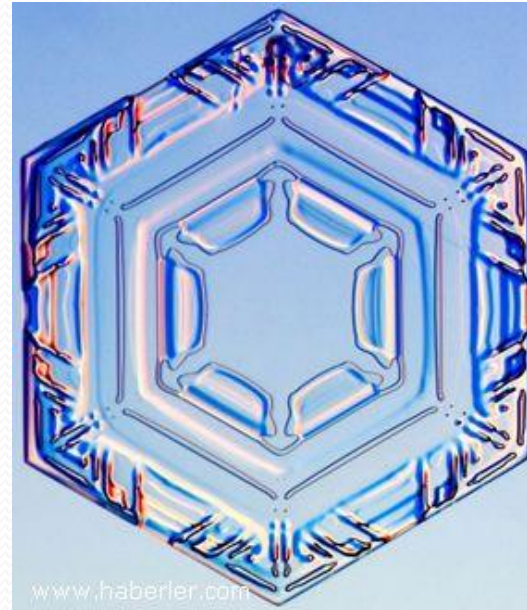


Taç Mahal, Babür İmparatorluğunun 5. hükümdarı Şah Cihan Şah-ı Cihan (Dünyanın şahı)-(1593-1666) tarafından, o zamanki imparatorluğun başkenti olan Hindistan'ın Agra şehrinde, Jumna (Yamuna) Nehri'nin kıyısında yaptırılmıştır. (Babür Şah'ın kurduğu Hint-Türk İmparatorluğu, Hindistan'da 332 yıl (1526-1858) egemen olmuştur.) Bu türbe, Şah Cihan'ın eşi Arcümend Banu'nun, (Mümtaz Banu Begüm) doğum sırasında ölümü üzerine, onun hatırasına yaptırılmıştır.

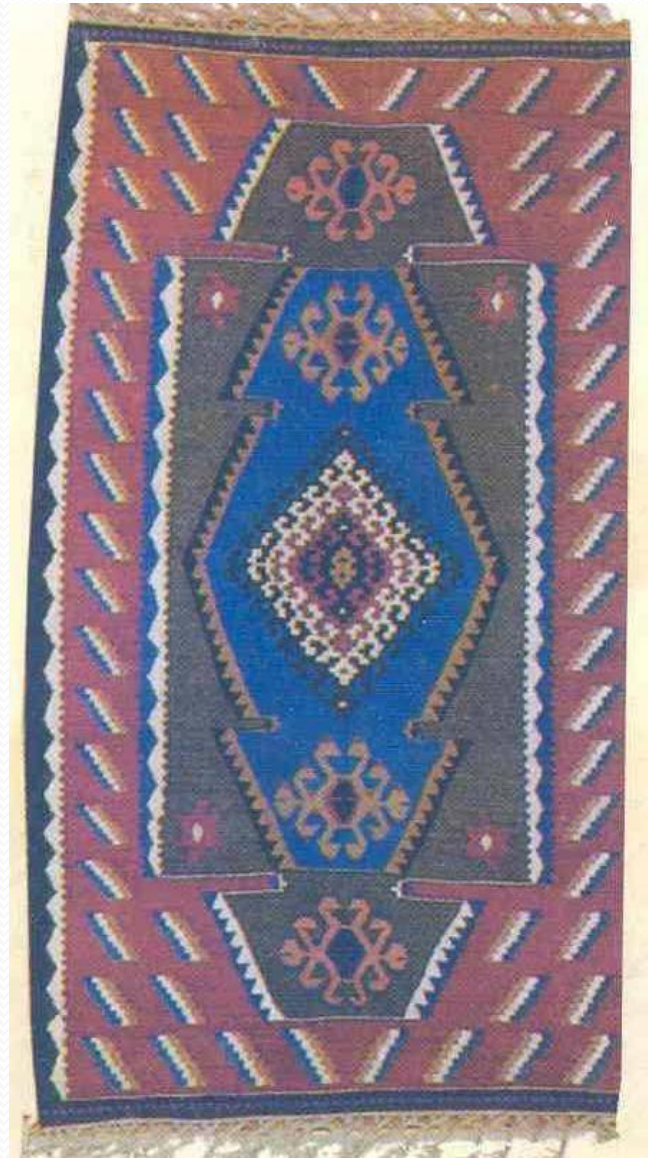
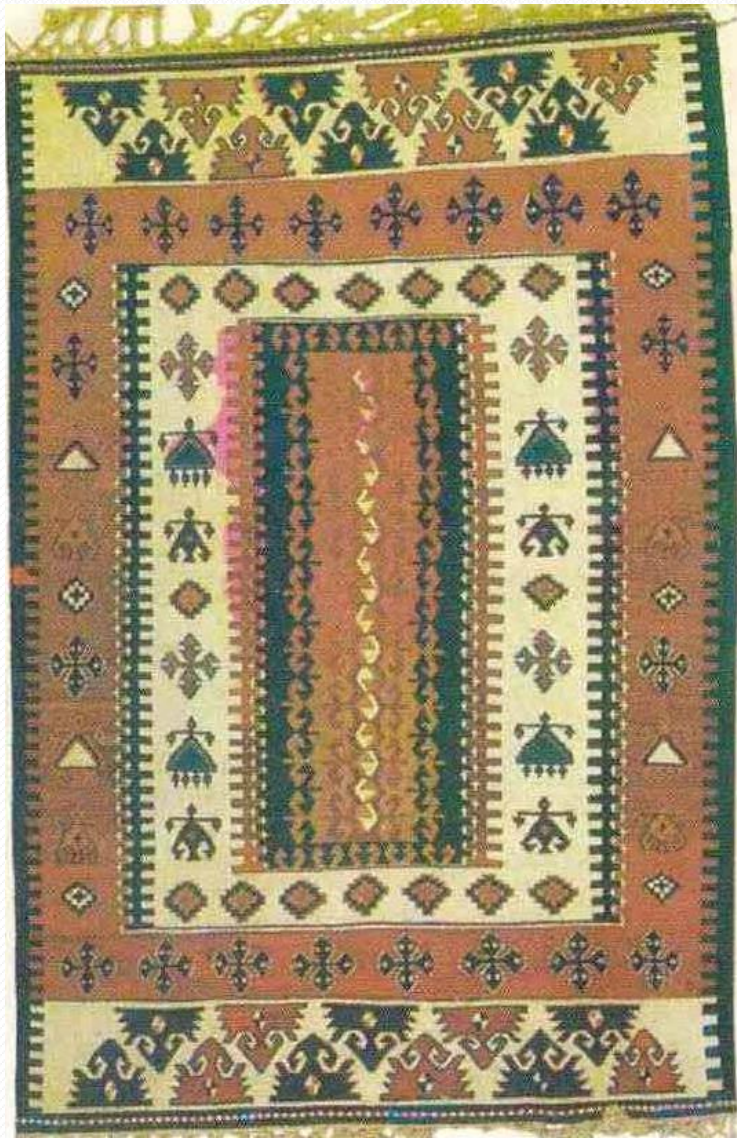
Yapının mimarları; **Mimar Sinan'ın talebelerinden Mehmet İsa Efendi ve Mehmet İsmail Efendi** ile yapıdaki yazıları yazan Hattat Serdar Efendi, eserin yapımı için Şah Cihan tarafından İstanbul 'dan davet edilmişlerdi. 1630'da inşasına başlanan eser, 22 yıl sonra 1652'de tamamlanmıştır.

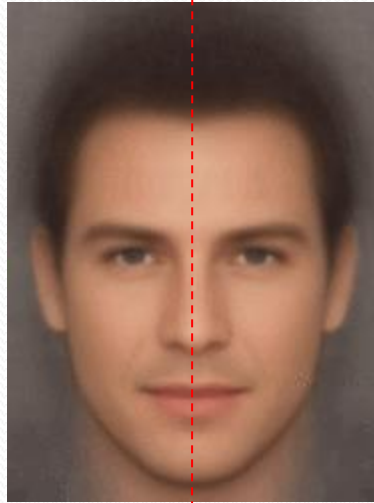












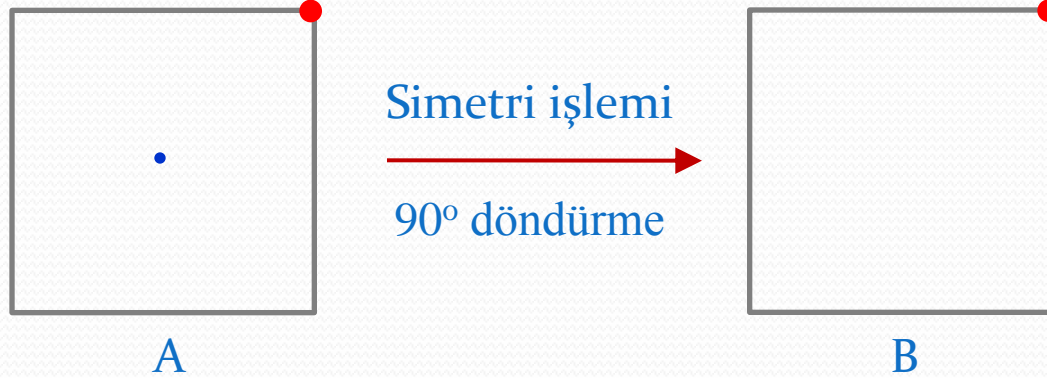


- Kimyada simetri kavramı oldukça kullanışlıdır.
- *Simetri ve grup teori yöntemiyle;*
  - ✓ *Molekül ve iyonlar simetri özelliklerine göre sınıflandırılabilir.*
  - ✓ *Hatta simetrik olmayanlar da sınıflandırılabilir.*
  - ✓ *Bağ oluşumuna katılan atomik orbitalleri ile oluşan molekül orbitalleri ve melez orbitalleri belirlenebilir.*
  - ✓ *Moleküllerin infrared ve raman titreşimleri belirlenebilir ve spektrumlar değerlendirilebilir.*
  - ✓ *Moleküllerin elektronik spektrumları yorumlanabilir.*
  - ✓ *Simetri özelliklerinden optikçe aktif olup olmadıkları belirlenebilir.*
  - ✓ *Simetri özelliklerinden polar olup olmadıkları tayin edilebilir.*
- Bu bölümde;
  - ✓ *Simetri elemanları ve simetri işlemleri tanımlanacak,*
  - ✓ *Moleküller simetri özelliklerine göre sınıflandırılacak ve nokta grupları belirlenecek.*

# Simetri elemanları ve işlemleri

- *Bir cismin orijinal halinden ayırt edilemeyen bir duruma getirilmesi işlemine simetri işlemi denir.*
- *Simetri işlemi belli bir simetri elemanı kullanılarak gerçekleştirilen işlem sonucu, molekülü başlangıç haliyle ayırt edilemeyecek yeni bir duruma getirme işlemidir.*
- *Molekül simetri işlemi uygulanmadan önce ve sonra aynı görünüme sahip olmalıdır.*
- *Eğer uygulanan bir işlem molekülü orijinalinden farklı bir duruma getiriyorsa bu işlem molekülün simetri işlemi değildir.*
- *Simetri işlemleri ve işlemlerin gerçekleştirildiği simetri elemanları aynı sembollerle gösterilirler.*





- A pozisyonu, B pozisyonundan ayırt edilemez, yani iki hal EŞDEĞERDİR.
- Bu iki halin ÖZDEŞ olması gerekli değildir.
- Sadece başlangıç halinden ayırt edilemez bir duruma gelmesi gerekir.
- Bu iki düzenlenme (A ve B) eşdeğerdir.
- Bu cisim için 90° döndürme işlemi bir simetri işlemidir.

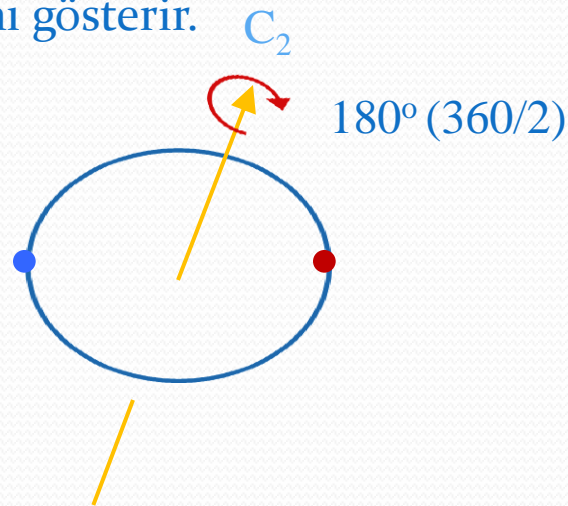
# Simetri Elemanları

- *Simetri işleminin gerçekleştirildiği nokta, eksen veya düzleme simetri elemanı denir.*
- Dört çeşit simetri elemanı vardır.
  - ✓ *Nokta: simetri merkezi*
  - ✓ *Eksen: dönme eksen*
  - ✓ *Eksen: dönme-yansıma eksen*
  - ✓ *Düzlem: yansıma (ayna) düzlemi*

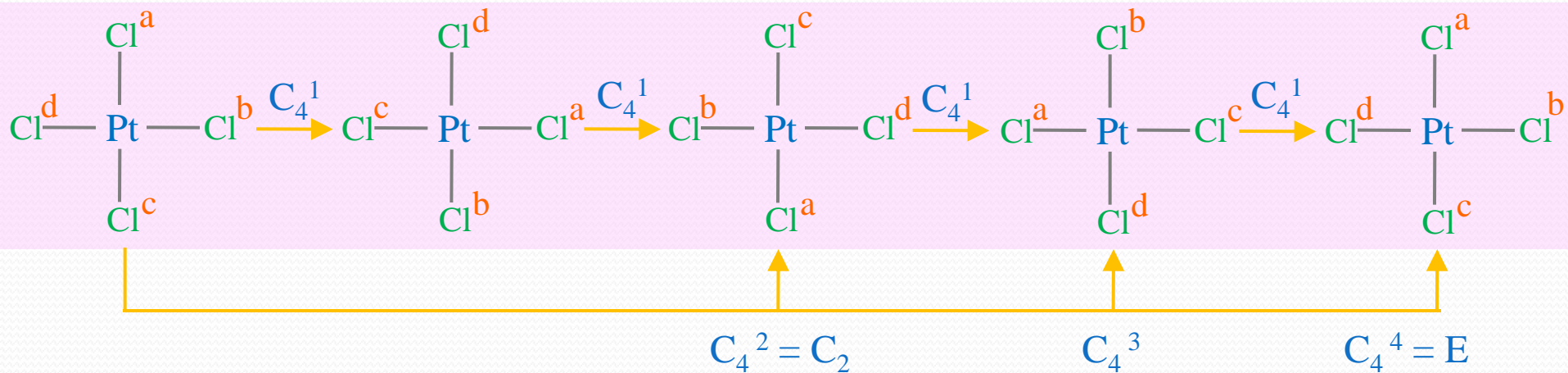


# Dönme işlemi ve Simetri Eksenleri ( $C_n$ )

- Bir molekül veya cisim, merkezden geçen bir eksen etrafında saat yelkovanı yönünde  $2\pi/n$  ( $360^\circ/n$ ) 'lık bir açı ile döndürüldüğünde, başlangıç halinden ayırt edilemeyen bir duruma geliyorsa, molekülün dönme işlemi ve simetri eksenleri (dönme eksenleri) vardır.
- Dönme işlemi ve dönme eksenleri  $C_n$  ile gösterilir.
- Dönme açısı ( $\theta$ )  $360^\circ$  nin tam sayılı askatlarıdır.
- $n$  sayısı,  $360^\circ$  lik dönmeyi (bir tam tur) gerçekleştirmek üzere, dönme işleminin kaç kez uygulandığını gösterir.



- Örneğin  $\text{PtCl}_4^-$  iyonu  $C_4$  'e yani 4 katlı dönme eksenine sahiptir.



- $C_4^1 \rightarrow$  dönme işleminin  $(360^\circ/4)$  bir kez yapıldığını gösterir.

- $C_4^2 \rightarrow$  dönme işleminin iki kez yapıldığını gösterir.

$$C_4^1 \times C_4^1 = C_4^2$$

- E: özdeşlik (kimlik) işlemi hiçbir değişiklik (etki) yapmayan simetri işlemidir.

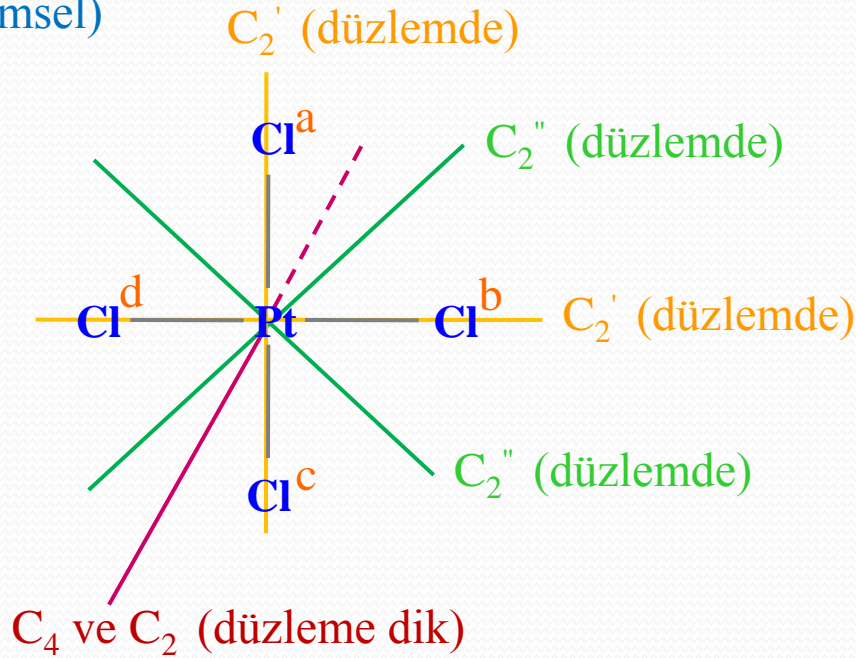
- *Tüm cisimler kimlik işlemine sahiptir.*

- Burada uygulanan dört simetri işlemi,  $C_4^1$ ,  $C_2$ ,  $C_4^3$  ve E dir.



- $[\text{PtCl}_4]^{2-}$  molekül iyonu birden fazla dönme eksenine sahiptir.

$[\text{PtCl}_4]^{2-}$  (düzlemsel)



- Şekilden de görüldüğü gibi, 4 tane düzlemde, bir tane düzleme dik ve bir tanede  $C_4$  eksenine paralel olmak üzere beş tane  $C_2$  eksenidir.