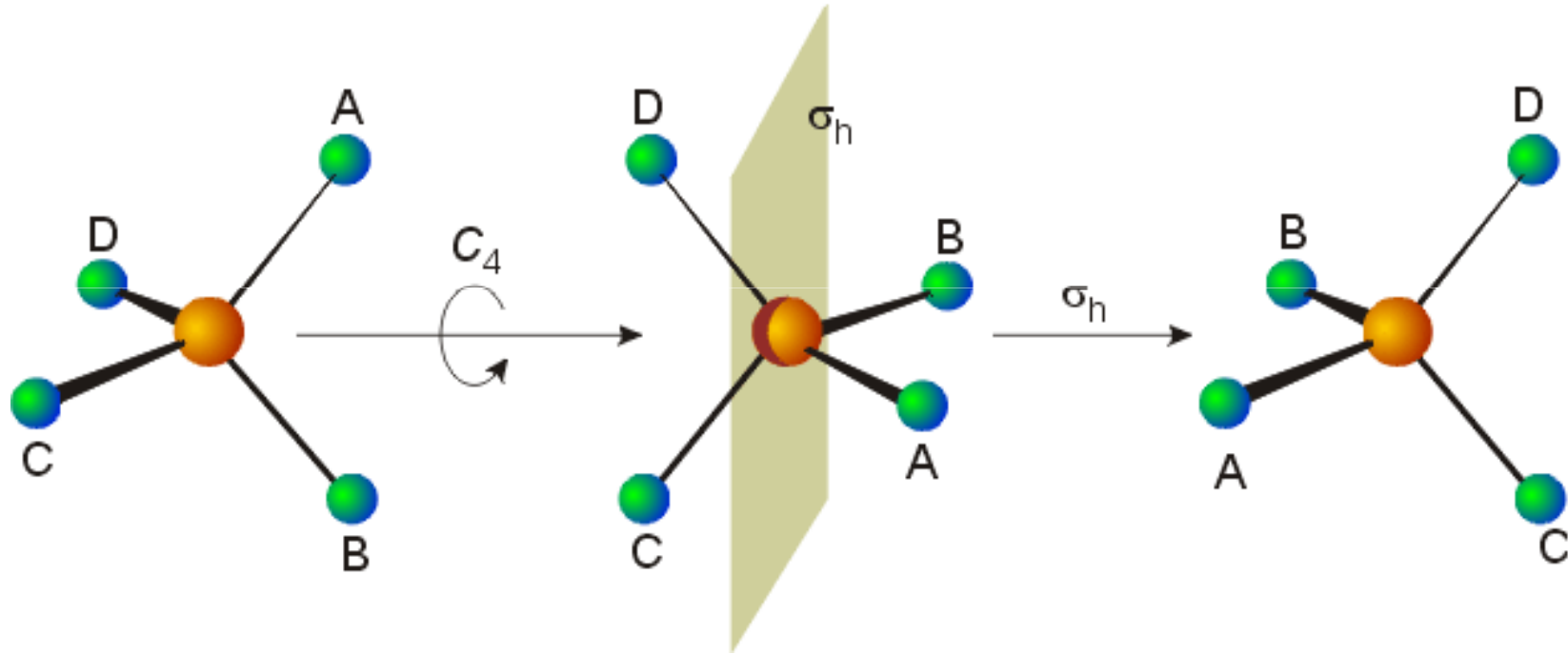


# MOLEKÜL YAPISI ve SİMETRİ



Yrd.Doç.Dr. İbrahim İsmet ÖZTÜRK

# **MOLEKÜL YAPISI**

**Lewis Nokta Yapısı ve Rezonans**

Nokta Yapısı ve Oktet Kuralı

Formal Yük

Rezonans

**VSEPR Kuramı**

İki Elektron Çifti

Üç Elektron Çifti

Dört Elektron Çifti

Beş Elektron Çifti

Altı Elektron Çifti

Yedi Elektron Çifti

Çoklu Bağ İçeren Yapılar

İzoelektronik Sistemler

**Bağ Enerjisi**

**Moleküllerde Simetri**

Simetri İşlemi ve Simetri Elemanı

Nokta Grupları

Nokta Gruplarının Sınıflandırılması

Nokta Grubu Tayini

İndirgenemeyen Gösterimler ve Karakter Çizelgeleri

**Simetri Uygulamaları**

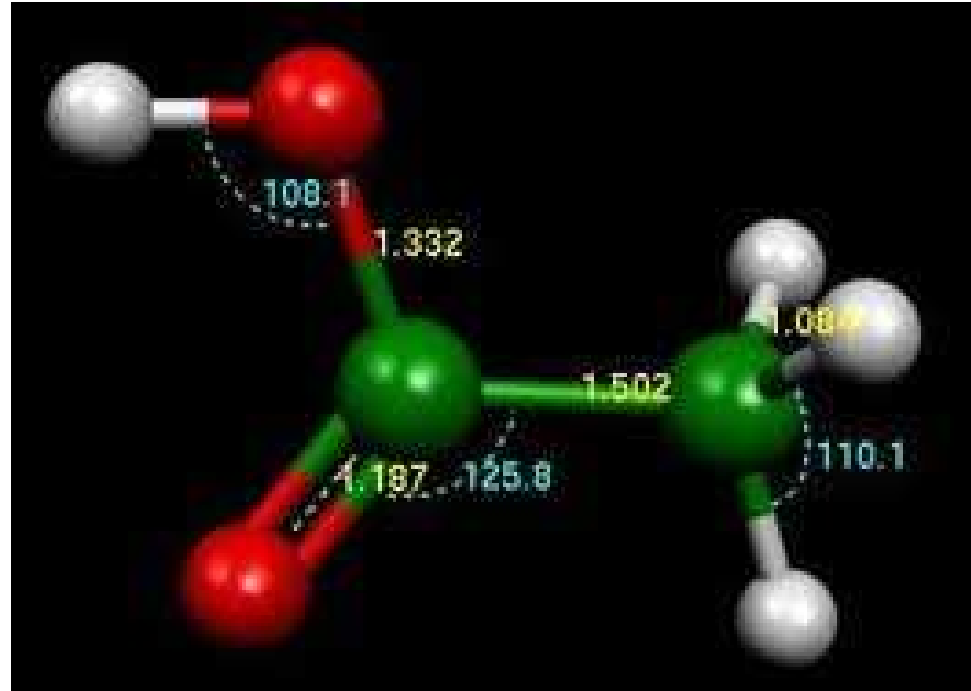
Polar Moleküller

Kiral Moleküller

Molekül Titreşimlerinin Simetrisi

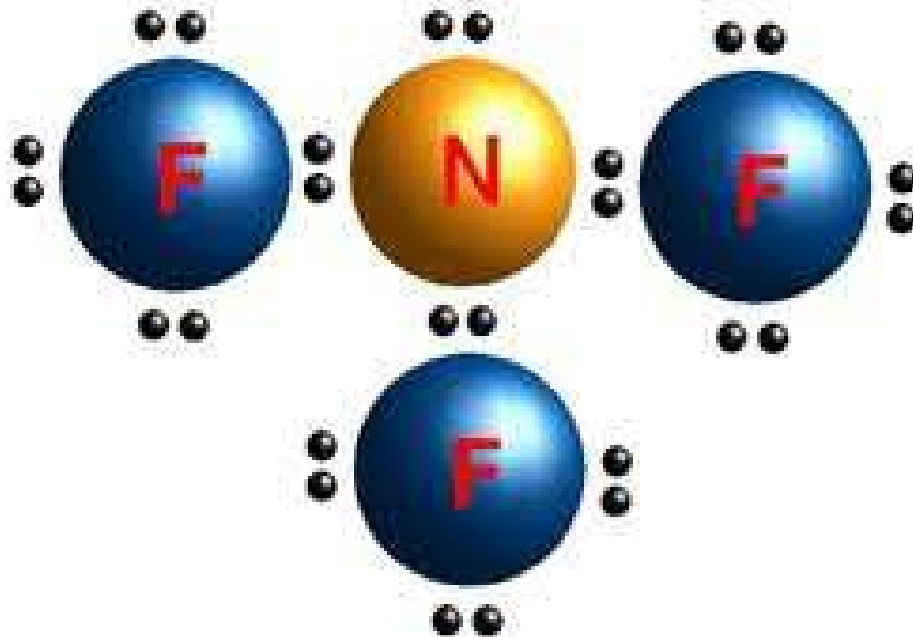
## MOLEKÜL YAPISI

Belirli sayıda atom, belirli geometrik düzende birleşerek molekülleri oluşturur. Atomların türü, sayısı ve düzenlenme şekli moleküllerin özelliğini belirler. Bileşiklerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenebilmesi için molekül yapısının bilinmesi gerekir.

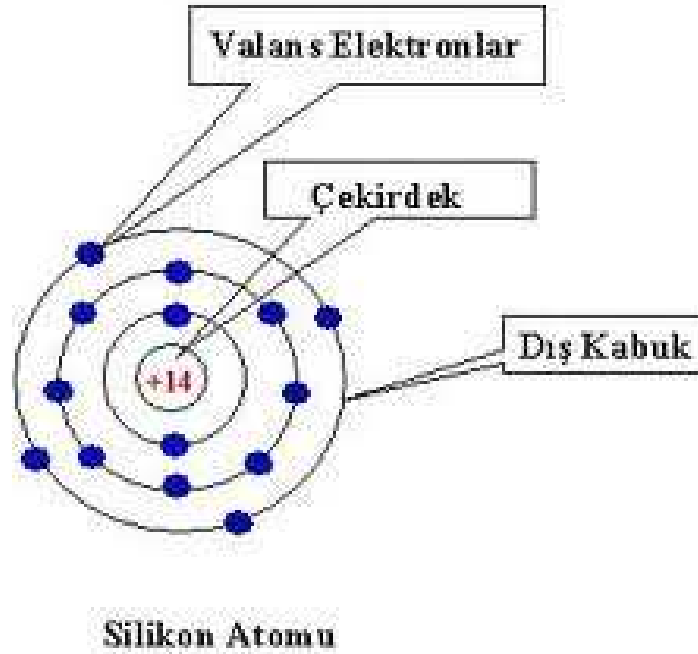


## ***Lewis Nokta Yapısı ve Rezonans***

Kimyasal olaylarda atomların çekirdeğe yakın elektronlarının etkilenmediğini düşünen Lewis 1916 yılında, atom ve moleküller için bir yapı şekli önermiştir. ***Lewis'in nokta yapısı*** olarak bilinen bu gösterim biçiminde ***atom çekirdeği ve iç elektronlar sembollerle, değerlik elektronları ise noktalarla*** gösterilmektedir.



**Değerlik Elektronları:** Lewis nokta yapılarının yazılabilmesi için değerlik elektronlarının sayısının belirlenmesi gerekir. Kimyasal tepkimelerde atomların değişikliğe uğrayan elektronlarına **değerlik elektronları** denir.

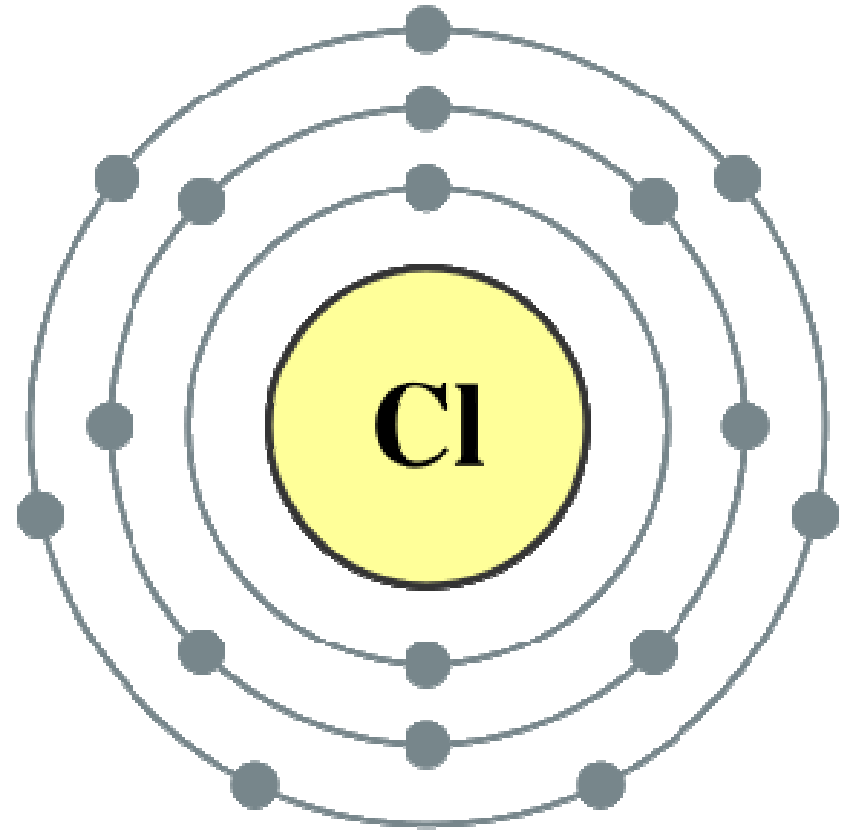
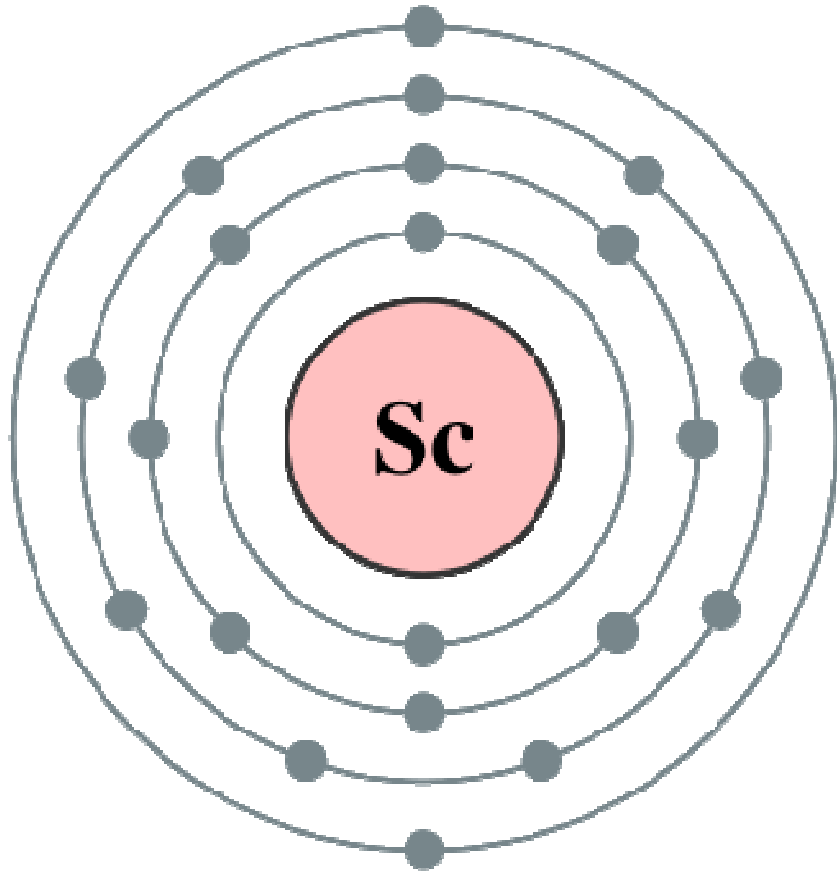


Değerlik elektronlarının sayısının belirlenmesinde kullanılan değişik ölçütlerden bazıları aşağıda açıklanmaktadır.

1- Birbirini izleyen iyonlaşma enerjileri giderek büyür. Bu artışlarda ani yükselme, iç kabuklardaki elektronlara geçişi gösterir. Bu nedenle ilk ani yükselmeden önceki iyonlaşma enerjilerine karşılık olan elektronlar değerlik elektronları olarak sayılır.

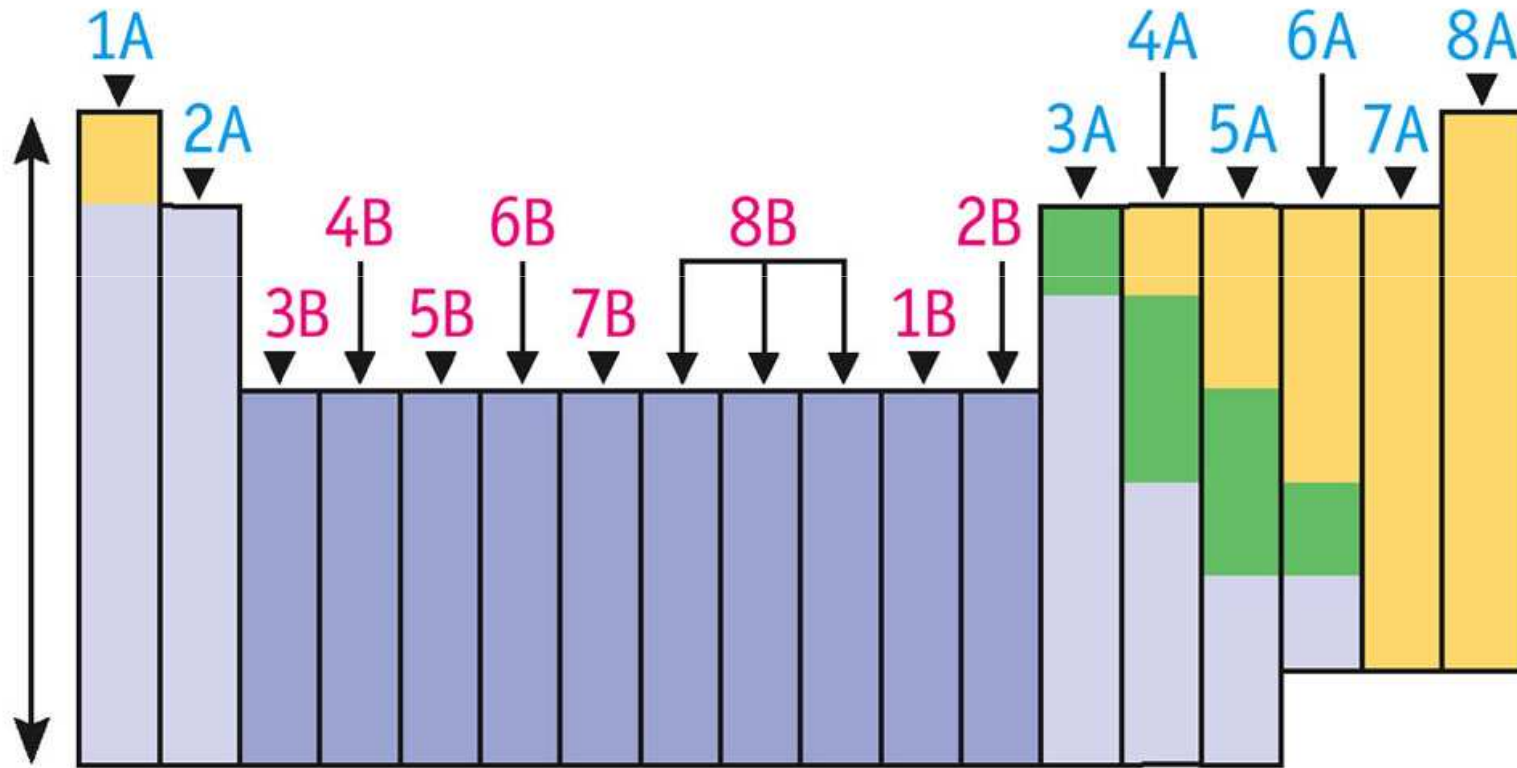
| Atom No | Element Sembolü | İYONLAŞMA ENERJİLERİ (kcal/mol) |      |      |      |      |       |       |       |       |
|---------|-----------------|---------------------------------|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|
|         |                 | 1.İE                            | 2.İE | 3.İE | 4.İE | 5.İE | 6.İE  | 7.İE  | 8.İE  | 9.İE  |
| 1       | H               | 313                             |      |      |      |      |       |       |       |       |
| 2       | He              | 567                             | 1254 |      |      |      |       |       |       |       |
| 3       | Li              | 124                             | 1744 | 2823 |      |      |       |       |       |       |
| 4       | Be              | 215                             | 420  | 3548 | 5019 |      |       |       |       |       |
| 5       | B               | 191                             | 580  | 875  | 5978 | 7839 |       |       |       |       |
| 6       | C               | 260                             | 562  | 1104 | 1486 | 9033 | 11290 |       |       |       |
| 7       | N               | 336                             | 683  | 1094 | 1784 | 2257 | 12721 | 15370 |       |       |
| 8       | O               | 314                             | 811  | 1271 | 1781 | 2625 | 3183  | 17036 | 20079 |       |
| 9       | F               | 402                             | 807  | 1445 | 2009 | 2632 | 3621  | 4267  | 21980 | 25355 |
| 10      | Ne              | 497                             | 947  | 1475 | 2238 | 2914 | 3640  | 4771  | 5486  | 27429 |
| 11      | Na              | 119                             | 1091 | 1650 | 2280 | 3195 | 3974  | 4804  | 6088  | 6913  |
| 12      | Mg              | 176                             | 348  | 1847 | 2519 | 3255 | 4303  | 5193  | 6131  | 7565  |
| 13      | Al              | 138                             | 434  | 657  | 2766 | 3545 | 4389  | 5576  | 6572  | 7643  |
| 14      | Si              | 188                             | 378  | 772  | 1040 | 3849 | 4728  | 5680  | 6989  | 8044  |
| 15      | P               | 254                             | 454  | 696  | 1186 | 1501 | 5089  | 6069  | 7127  | 8759  |
| 16      | S               | 239                             | 539  | 807  | 1092 | 1678 | 2033  | 6486  | 7579  | 8738  |
| 17      | Cl              | 300                             | 549  | 920  | 1255 | 1563 | 2229  | 2636  | 8028  | 9192  |
| 18      | Ar              | 363                             | 637  | 943  | 1380 | 1729 | 2104  | 2871  | 3308  | 10004 |
| 19      | K               | 100                             | 734  | 1100 | 1405 | 1913 | 2328  | 2766  | 3573  | 4057  |
| 20      | Ca              | 141                             | 274  | 1180 | 1550 | 1936 | 2559  | 2927  | 3481  | 4356  |

2- Bař kuantum sayısı en yksek olan orbitaldeki (ns, np) elektronlar deęerlik elektronlarıdır. Geiř elementlerinde bař kuantum sayısı bir eksik olan (n-1)d orbitallerindeki elektronlarda deęerlik elektronu sayılabilir.





3- Periyotlar çizelgesinde A grubu elementlerinin grup numaraları değerlik elektronlarının sayısına eşittir.



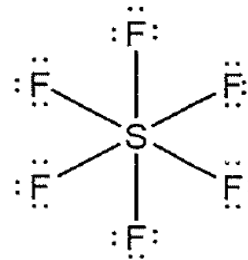
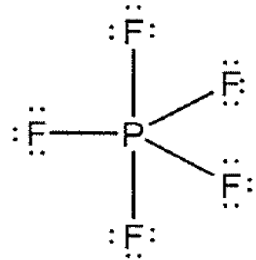
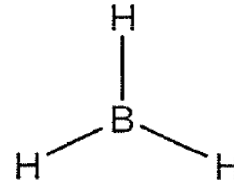
## ***Nokta Yapısı ve Oktet Kuralı***

Atomlar kimyasal tepkimelere girerken, elektron dizilişlerini kendilerinden sonra gelen soygazın kararlı yapısına benzetmeye çalışır. Bunun için değerlik elektronları sayısını soygazınkine çıkarırlar. Helyum  $1s^2$ , diğer soygazlar  $ns^2 np^6$  yapısında olduğuna göre, molekül oluşurken ***hidrojen değerlik elektronlarını ikiye, diğer atomlar sekize tamamlamalıdır.*** Moleküllerde atomlar bağ elektronlarını ortaklaşa kullanarak elektron eksikliklerini gidermeye çalışır.



## ***Bileşiklerin Nokta Yapısının Belirlenmesi***

Aykırı örneklerin bulunmasına karşın oktet kuralı birçok molekülün yapısının aydınlatılmasına katkıda bulunmaktadır. Bir molekülün nokta yapısının belirlenmesinde izlenecek yöntem  $\text{SO}_3$  molekülü örnek alınarak aşağıda açıklanmaktadır.



**1-** Atomların bağıl konumları bilinmelidir. Eğer deneysel olarak atomların konumları bilinmiyorsa, elektropozitifliği en yüksek olan atom merkeze konur.  $\text{SO}_3$ 'de kükürt merkez atomudur.

**2-** Moleküldeki değerlik elektronlarının toplam sayısı  $V$  hesaplanır.  $\text{SO}_3$ 'te toplam değerlik elektron sayısı  $V = (1 \times 6) + (3 \times 6) = 24$ 'tür.

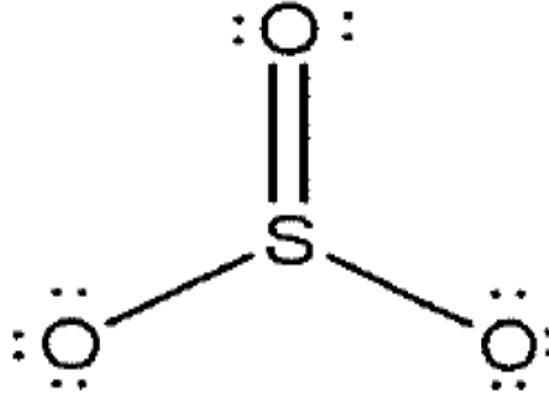
**3-** Moleküldeki bütün atomların oktet kuralına uymaları için gerekli değerlik elektronlarının sayısı hesaplanır. Molekülde  $h$  sayıda hidrojen atomu ve  $q$  sayıda hidrojenden başka atom varsa  $2h + 8q$  kadar değerlik elektronu gereklidir.  $\text{SO}_3$  molekülünde bütün atomların soygaz elektron dizilişine sahip olabilmeleri için  $(2 \times 0) + (4 \times 8) = 32$  değerlik elektronu gereklidir.

4- Molekölde  $(2h+8q)-V$  sayıda değerlik elektronu açığı vardır. Bu açık elektronların atomlar tarafından ortaklaşa kullanılması ile kapanır. Yani molekülde  $(2h+8q)-V = BE$  kadar bağ elektronu olmalıdır.

5- Moleküldeki bağ yapmayan yani ortaklanmamış elektronların sayısı OE, toplam değerlik elektronları sayısından bağ elektronları sayısı çıkarılarak hesaplanır ( $OE = V-BE$ ).  $SO_3$  molekülünde bağ yapmayan elektronların sayısı  $OE = 24-8 = 16$ 'dır.

6- Bağ elektronları önce atomlar arasında birer tek bağ olacak şekilde dağılır. Sonra artan bağ elektronları yine atomlar arasına birer çift bağ olacak şekilde yerleştirilir.

7- Bağ yapmayan elektronlar moleküldeki atomların çevresine her atomun oktetini sağlanacak şekilde konur.

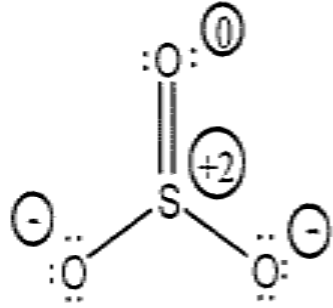


### ***Formal Yük:***

Ortak elektronların eşit olarak bölüşülmesi varsayımına dayanarak hesaplanan yüklere formal yük denir. Moleküldeki bir atomun formal yükünü hesaplanmasında

***Formal Yük = Grup numarası-Ortaklanmamış elektron sayısı-Bağ sayısı***

bağıntısı kullanılır. Buna göre SO<sub>3</sub> molekülünde S ve O atomlarının formal yükleri aşağıdaki gibi hesaplanır.



$$\text{S} : 6 - 0 - 4 = +2$$

$$\text{O (Tek bağılı)} : 6 - 6 - 1 = -1$$

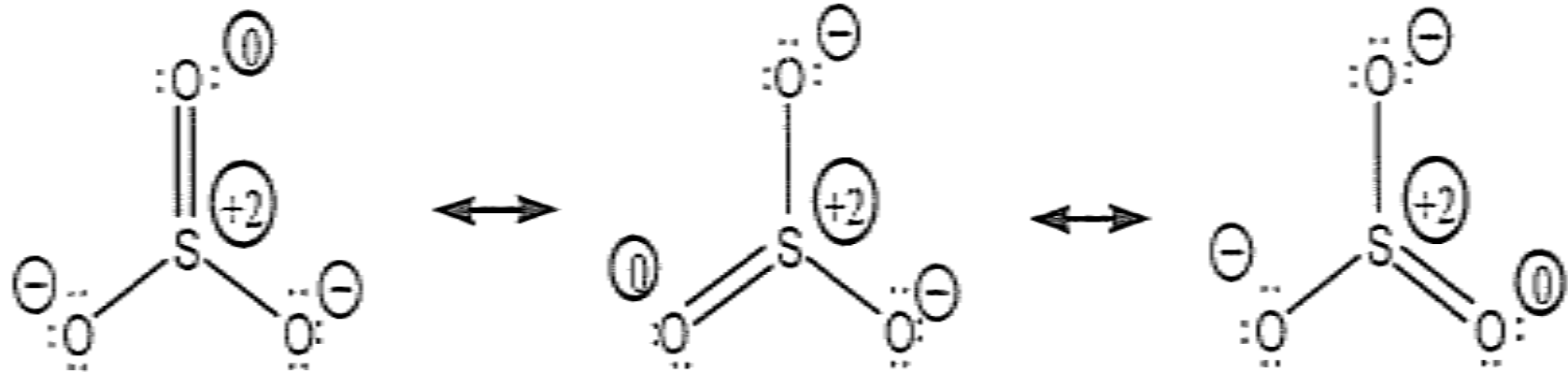
$$\text{O (Çift bağılı)} : 6 - 4 - 2 = 0$$

Nötr moleküllerde formal yüklerin toplamı sıfıra eşittir. İyonlarda toplam formal yük, iyon üzerindeki elektrik yüküne eşittir.

## Rezonans:

$\text{SO}_3$  molekülünün nokta yapısına göre S-O bağlarından biri çift bağıdır. Çift bağ tek bağdan kuvvetli olduğundan S-O bağlarından biri, diğer ikisinden kısa olmalıdır. Yapılan ölçümler  $\text{SO}_3$  molekülünde S-O bağlarının eşit uzunlukta olduğunu, bağ açılarının  $120^\circ$  olduğunu göstermektedir.

Deneyisel ölçümler doğru olduğuna göre, yukarıda verilen Lewis nokta yapısı  $\text{SO}_3$  molekülünün yapısını açıklamada yetersiz kalmaktadır. Kükürtün üç oksijen atomundan herhangi biri ile çift bağ yapabileceği düşünülebilir ve üç ayrı nokta yapısı çizilebilir. Molekülün gerçek yapısı, bu üçünün bir karışımıdır.



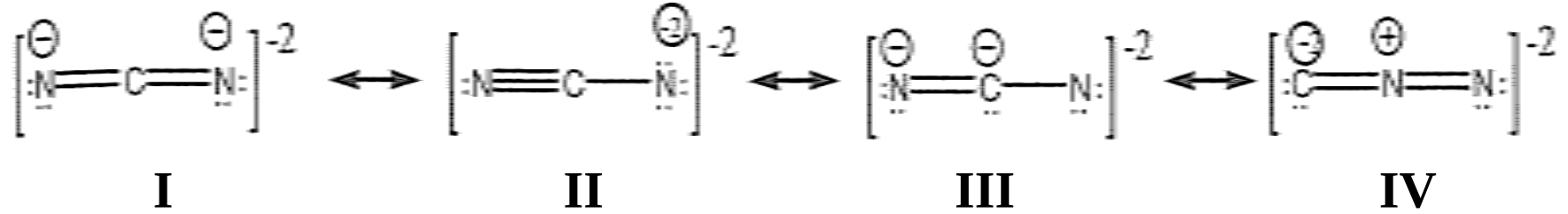
$\text{SO}_3$  de olduğu gibi bir molekülün iki veya daha çok sayıda nokta yapısının bir karışımı olarak gösterilmesine rezonans denir.



Rezonans şekillerinde bağ sayısı aynı fakat, bağ yapan veya ortaklanmamış elektronların yerleri farklıdır. Bazı moleküllerin gösteriminde nokta yapılarının rezonansa katkıları birbirinden farklı olabilir. Rezonans hallerinin önerilmesi ve katkılarının belirlenmesi yöntemini açıklamak üzere siyanamid iyonunu,  $\text{CN}_2^{2-}$ , örnek olarak alalım.

Rezonans hallerini belirleyebilmek için atomların bağıl konumları bilinmelidir. Siyanamid iyonunda karbon merkez atomudur ve azot atomları karbona bağlıdır. İkinci önemli nokta, değerlik elektronlarının sayısının bilinmesidir. Siyanamid iyonunda toplam 16 elektron vardır. Nokta yapılarının yazılmasında oktet kuralına uyulması zorunluluğu yoktur. Ancak, her rezonans halinin ağırlığını tartışırken oktet kuralından büyük ölçüde sapan yapıların katkılarının çok az olduğu görülecektir.

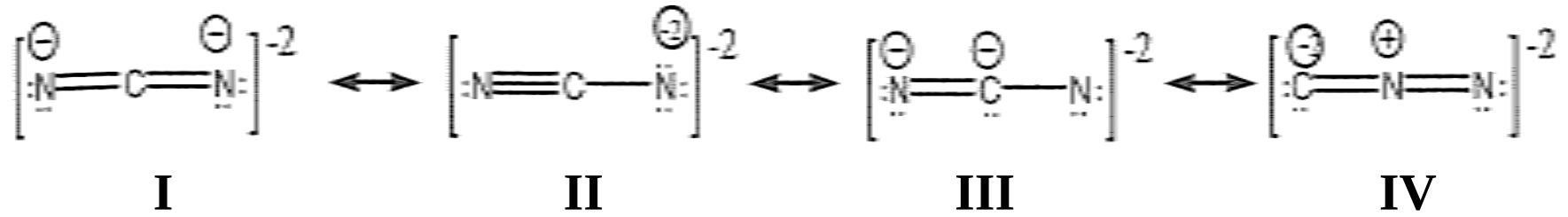
Bu bilgilere göre aşağıdaki rezonans halleri önerilir.



Rezonans hallerinin ağırlıklarının karşılaştırılmasında kullanılabilecek kurallar üç grupta toplanabilir.

**1. Atomların bağ konumları ve molekül geometrisini etkileyen yapılar:**

$\text{CN}_2^{2-}$  iyonunda karbonun merkez atomu olduğu belirtilmiştir. Bu bakımdan IV numaralı yapı rezonans hali değildir. Merkez atomu üzerinde yalnız elektronlar varsa, bu elektronlar bağ elektronlarını iterler ve yapının bükülmesine neden olurlar. Diğer rezonans halleri doğrusal olduğu halde III numaralı yapı açısaldır.



**2- Bağ sayıları:** Bağ sayısının çok olması, molekülün kararlılığını artırır. Diğer yapılarda dörder bağ olduğu halde III numaralı yapıda üç bağ vardır.

**3- Formal Yükler:** Aynı işaretli yükler birbirine komşu olmalı karşıt yükler birbirine yakın olmalıdır. Bir atom üzerindeki formal yük büyük olmamalıdır. Ayrıca eksi yük, elektronegatifliği yüksek olan atom üzerinde olmalıdır.

Bu koşullar dikkate alındığında molekül yapısına katkıda bulunabilecek yapıların I ve II olduğu görülmektedir. Formal yüklerin karşılaştırılmasında I yapısının katkısının II'den daha büyük olacağı sonucu çıkarılabilir.

## ***OKTET KURALINDAN SAPMALAR***

Oktet kuralı aslında ikinci grup elementleri için geçerlidir. Oktet kuralından sapmalar; eksik oktet, tek elektron sayısı ve merkez atom çevresinde sekiz değerlik elektronundan daha fazla elektron bulunması olmak üzere üç sınıfa ayrılır.

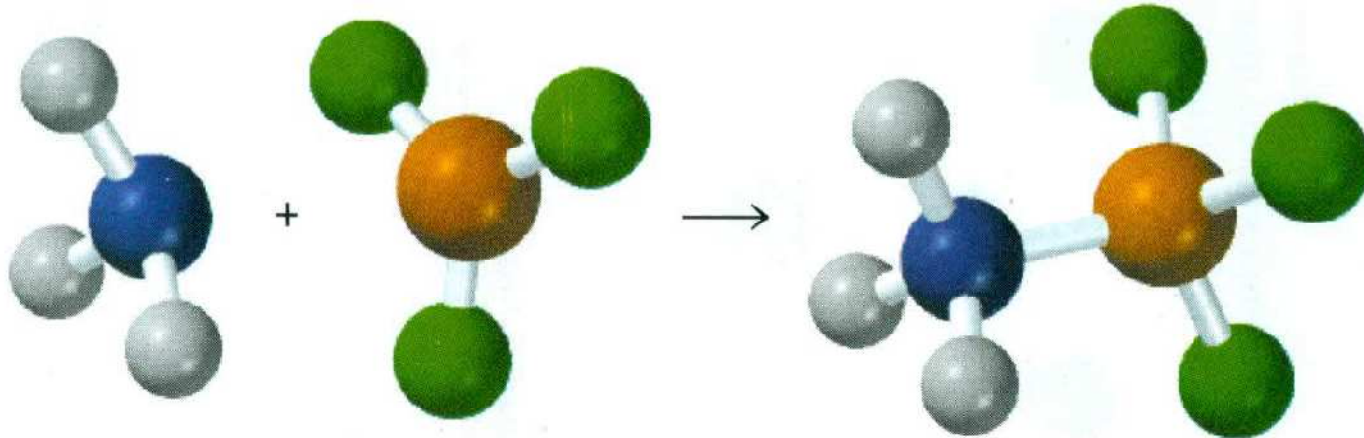
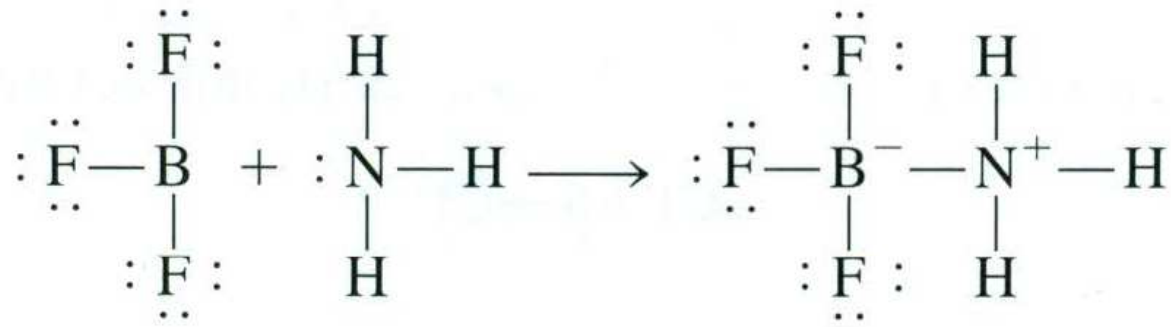
### ***Eksik Oktet***

Bazı durumlarda, kararlı bir molekülün merkez atomunu çevreleyen elektronların sayısı sekizden azdır. Örneğin berilyum'u (Be) ele alalım. Berilyum'un 2s orbitalinde iki değerlik elektronu vardır. Gaz fazında berilyum hidrür ( $\text{BeH}_2$ ) moleküler halde bulunur.  $\text{BeH}_2$ 'nin yapısı şu şekildedir.



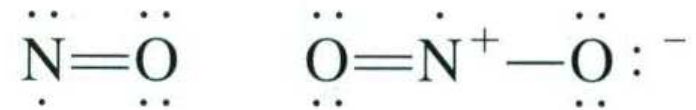
Berilyumun oktet kuralını sağlaması mümkün değildir.

Her iki elektronun da aynı atom tarafından sağlandığı kovalent bağa ***koordine kovalent bağ*** denir.



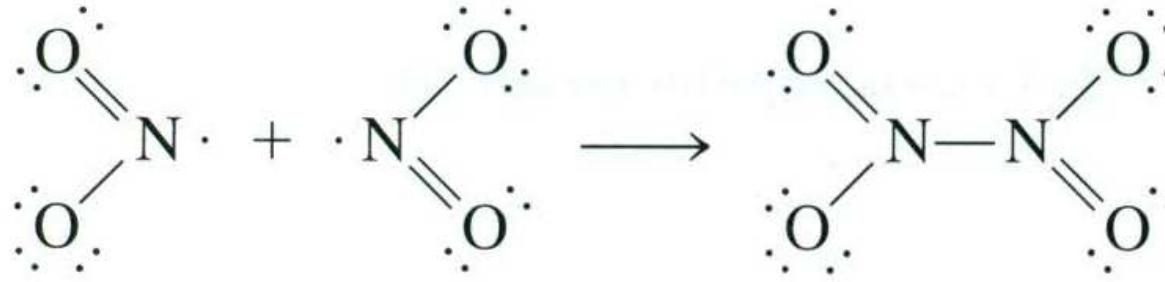
## ***Tek Elektronlu Moleküller***

Bazı moleküller tek sayıda elektron içerir. Azot monoksit ve azot dioksit bunlara örnek verilebilir.



Eşleşmeyi tamamlamak için çift sayıda elektrona ihtiyaç olduğundan bu moleküllerdeki atomlar oktet kuralını sağlamamaktadır.

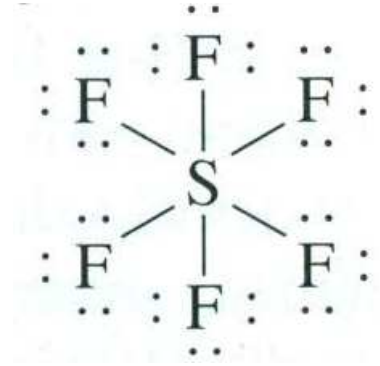
Tek elektronlu moleküller radikaller olarak da adlandırılır. Birçok radikal oldukça etkindir. Bunun nedeni eşleşmemiş elektronun diğer molekül üzerindeki eşleşmemiş bir elektronla kovalent bağ oluşturma eğilimidir. Örneğin iki azot dioksit molekülü birleştiğinde N ve O atomlarının her ikisinin de oktet kuralına uyduğu diazot tetraoksit oluşur.



### ***Genişlemiş Oktet***

İkinci periyot elementlerinin atomları, merkez atomu çevresinde sekizden fazla değerlik elektronu bulunduramazlar.

Üçüncü periyot elementleri 3s ve 3p orbitaline ek olarak, bağlanmada kullanabileceği 3d orbitallerine de sahiptirler. Bu orbitaller bir atomun genişlemiş oktet oluşturmaya neden olur. Kükürt heksaflorür genişlemiş oktet içeren bir bileşiktir ve çok karardır. Kükürdün elektron dağılımı  $[\text{Ne}]3s^23p^4$ dir.  $\text{SF}_6$  molekülünde, kükürdün 6 değerlik elektronunun her biri flor atomuyla kovalent bağ oluşturur. Dolayısıyla merkez kükürt atomu çevresinde 12 elektron vardır, yani okteti aşmıştır.



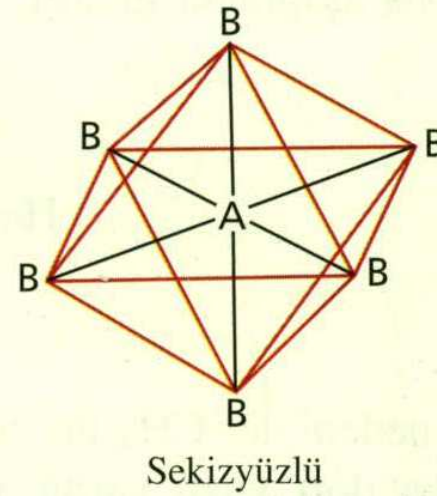
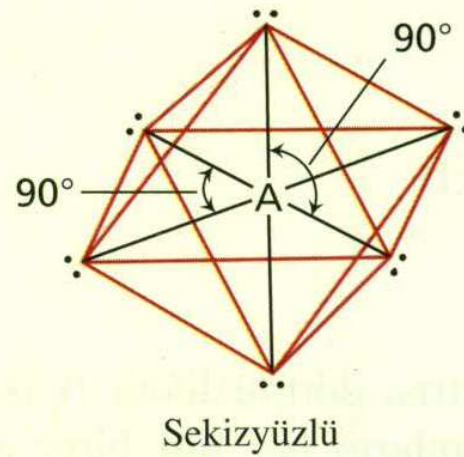
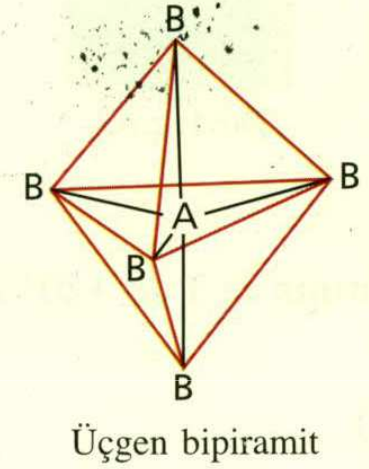
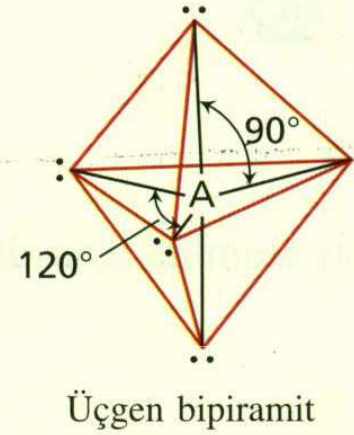
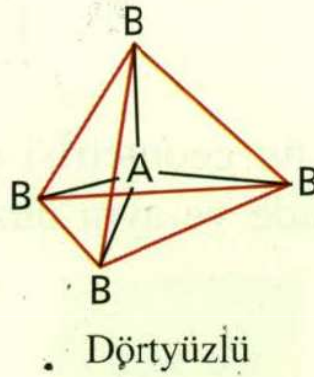
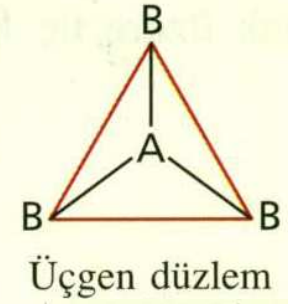
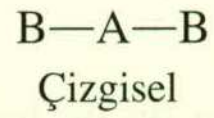
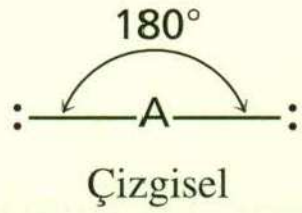
Kükürt atomu oktete uyan birçok bileşik de oluşturur. Örneğin kükürt diklorürde, S sekiz elektronla çevrilmiştir.

Bazen üçüncü periyot ve sonrasındaki elementlerin atomlarını merkez atomu olarak içeren bileşiklerin Lewis yapılarını çizerken; tüm atomların oktet kuralını sağladığını, ancak hala yerleştirilecek değerlik elektronları olduğunu görürüz. Bu gibi durumlarda, fazla elektronlar merkez atomu üzerine ortaklanmamış elektron çiftleri olarak yerleştirilmelidir.



## VSEPR Kuramı

VSEPR, değerlik kabuğu elektron çiftleri itmesi kelimelerinin İngilizce karşılıklarının baş harflerinden türetilmiştir (***Valence Shell Electron Pair Repulsion***). 1940 yılında, sadece tekli bağ içeren  $AB_n$  genel formülündeki bileşiklerin geometrisinin bağ elektronlarının birbirini en az itecek şekilde oluştuğu belirlenmiştir. Buna göre merkez atomunun çevresinde iki tane tek bağ olduğunda molekül ***doğrusal***, üç bağda ***düzlem üçgen***, dört bağda ***düzgün dörtyüzlü***, beş bağda ***üçgen çiftpiramit***, altı bağda ***düzgün sekizyüzlü***, yedi bağda ***beşgen çiftpiramit*** olmalıdır. Bu geometrilere ideal geometriler denir. Merkez atomunun çevresinde ortaklanmamış elektron çiftlerinin bulunması halinde ideal geometriden sapmalar olur.



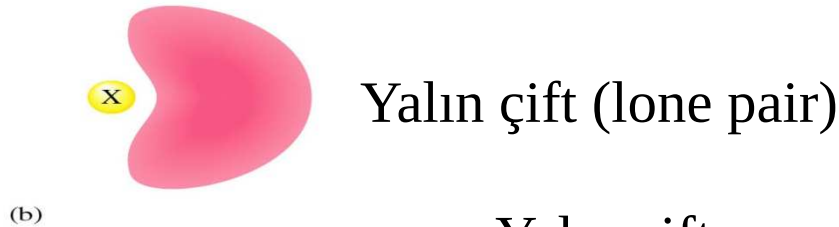
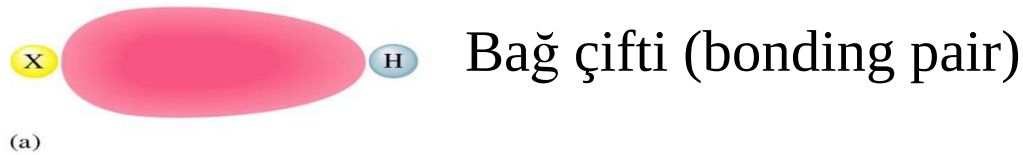
İdeal geometriden sapmaları inceleyen bilim adamları tarafından bazı kurallar önerilmiş ve bu kurallar geliştirilerek bugün VSEPR kuramı olarak bilinen aşağıdaki kurallar benimsenmiştir.

1- Molekülün şekli moleküldeki atomların bağl konumları ile verilir. Ancak molekülün şeklinin belirlenmesinde merkez atomu çevresindeki değerlik elektron çiftleri arasındaki itme dikkate alınır. Merkez atomu çevresinde ortaklanmamış (**OEÇ**) veya bağ yapan (**BEÇ**) tüm elektron çiftleri arasında en az itmenin olduğu en kararlı şekli alır.

2- Elektron çiftleri arasındaki itme kuvveti **OEÇ-OEÇ > OEÇ-BEÇ > BEÇ-BEÇ** sırasında azalır.

3- Ayrıca çift bağlar arasındaki itme tekli bağlar arasındakinden daha kuvvetlidir. Benzer şekilde üçlü bağlar arasındaki itme ikili bağlar arasındakinden daha kuvvetlidir.

4- Bir molekül veya iyonda bağ yapan elektron çiftleri arasındaki itme kuvveti merkez ve uç atomların ortak bağ elektronlarını çekmesindeki farka da bağlıdır. Uç atomlar bağ elektronlarını ne kadar kuvvetli çekerse, merkez atom çevresinde bulunan bağ elektron çiftleri arasındaki itme de o kadar azdır.



Yalın çift uzayda daha fazla yer kaplar.

VSEPR modelinin kullanımı iki genel kurala dayanır;

1- Sadece elektron çifti itmeleri göz önüne alındığında, ikili ve üçlü bağlar tek bağmış gibi düşünülebilir. Fakat iki atom arasındaki ikili yada üçlü bağ olduğunda elektron yoğunluğunun daha çok yer işgal ettiğini bilmeliyiz.

2- Eğer bir molekülün iki yada daha çok rezonans yapısı varsa VSEPR modelini bunlardan herhangi birine uygulayabiliriz.

Molekül modelleri, merkez atomlarının ortaklanmamış elektron çiftleri taşıyıp taşımadığına göre ikiye ayrılır.

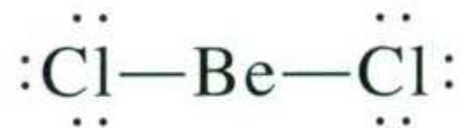
## Ortaklanmamış Elektron Çiftleri Bulunmayan Merkez Atomlu Moleküller

Merkez atomu A olan, A ve B gibi sadece iki elementten oluşan molekülleri göz önüne alırsak, bu moleküller  $AB_x$  genel formülüyle gösterilebilir. Burada x: 1,2,3,... gibi tam sayılardır. Eğer x:1 ise iki atomlu AB molekülü oluşur ve çizgisel bir geometridir.

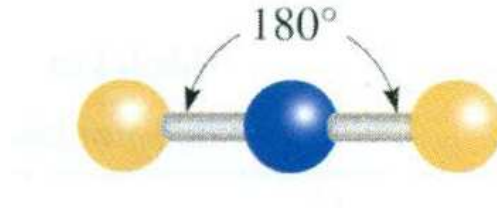
Karşılıklı itmenin bir sonucu olarak, elektron çiftleri, birbirinden olabildiğince uzak durur. Merkez atomunda ortaklanmamış elektron çifti olmayan moleküller, beş bağlayıcı çift düzeninden birine sahip olabilirler.

### ***AB<sub>2</sub>: Berilyum Klorür (BeCl<sub>2</sub>)***

Gaz fazında berilyum klorürün Lewis yapısı şöyledir:

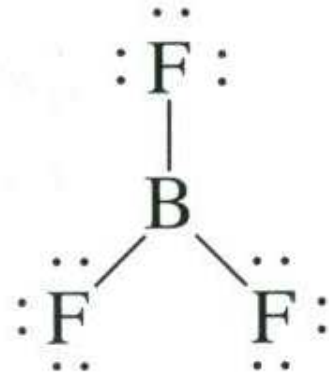


Bağlayıcı elektron çiftleri birbirini ittiğinden bu çiftler olabildiğince birbirinden uzak olmalıdır. Bu yüzden,  $\text{ClBeCl}$  açısı  **$180^\circ$**  dir ve molekül **çizgisel**dir.

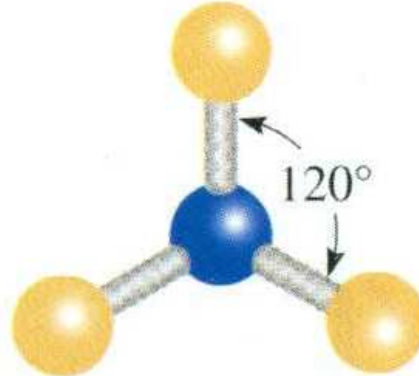
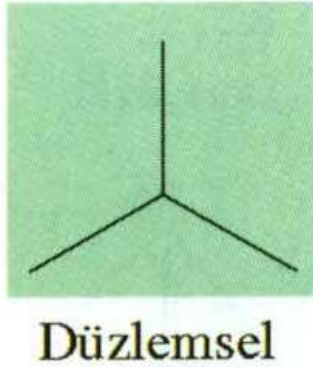


### **$\text{AB}_3$ : Bor Triflorür ( $\text{BF}_3$ )**

Bor triflorür üç kovalent bağ yada üç bağlayıcı çift içerir.  $\text{BF}_3$  ün geometrisi **üçgen düzlemdir**. Üç tane uç atom bir eşkenar üçgenin köşelerinde ve aynı düzlemedir.



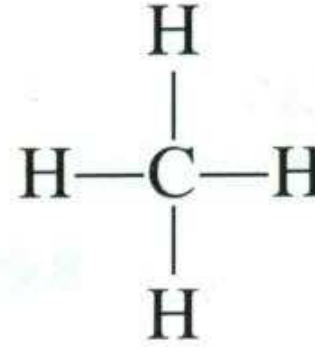
Bu yüzden, FBF açılarının üçüde **120°** dir ve **dört atomda aynı düzlemdedir.**



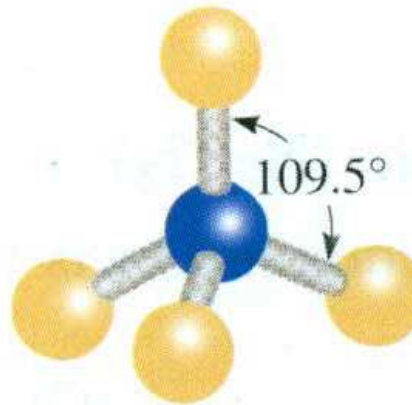
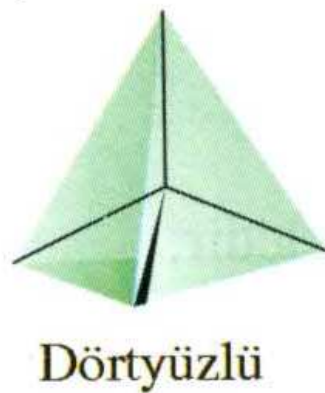


## AB<sub>4</sub>: Metan (CH<sub>4</sub>)

Metanın lewis yapısı yandaki gibidir.

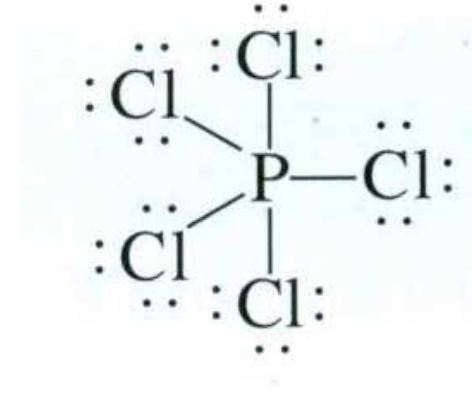


Dört elektron çifti nedeniyle, CH<sub>4</sub>'ün geometrisi **dörtüzlüdür**. Dörtüzlü bir molekülde, merkez atom dörtüzlünün merkezinde, diğer dört atom ise köşelerinde yer alır. Bağ açılarının hepsi **109.5°** dir.

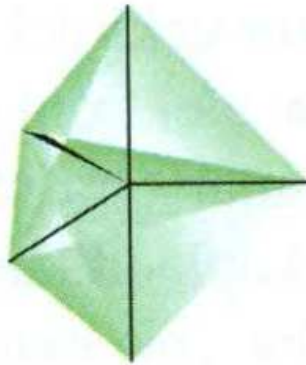


## AB<sub>5</sub>: Fosfor Pentaklorür (PCl<sub>5</sub>)

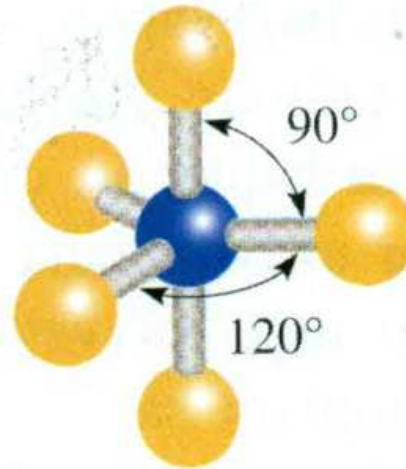
Fosfor penta klorürün lewis yapısı şöyledir;



Beş bağlayıcı çiftin itme kuvvetlerini en aza indirmenin tek yolu PCl bağlarının bir **üçgen bipiramit** şeklinde düzenlenmesidir.



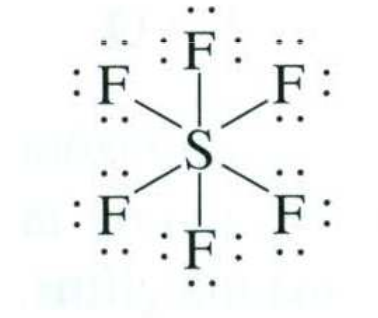
Üçgen  
bipiramit



Merkez atom ortak üçgenin merkezinde, çevreleyen atomlar ise üçgen bipramitin beş köşesinde yer alır. Üçgen düzleminin üzerinde ve altındaki atomlar aksiyel konumları, üçgen düzlemde yer alanlar ise ekvatoryal konumları işgal ederler. Ekvatoryal konumlar arasındaki her açı **120°** dir. Bir aksiyal ile bir ekvatoryal bağ arasındaki açı **90°**, iki aksiyal bağ arasındaki ise **180°** dir.

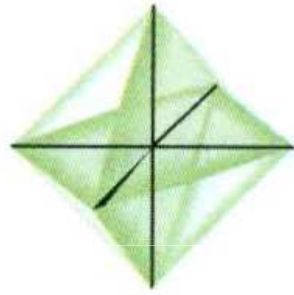
***AB<sub>6</sub>: Kükürt hegzaflorür (SF<sub>6</sub>)***

Kükürt hegzaflorürün yapısı şöyledir;

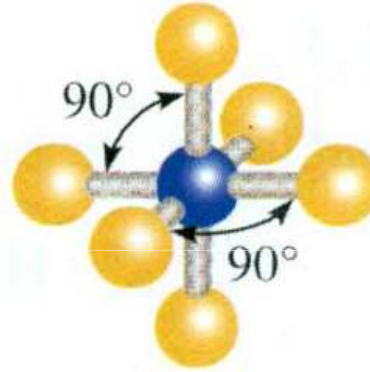


Yapıdaki SF bağlayıcı çiftin en kararlı konumlanması **sekizyüzlü** şeklindedir. Merkez atom ortak karenin merkezinde, köşelerde ise uç atomlar yer alır. Merkez atomla birbirine tamamen zıt uçta dik olan atom çiftleri arasındaki açı hariç, diğer tüm açılar **90°** dir.

Birbirine zıt dik uçlar arasındaki açı ise **180°** dir. Bir sekizyüzlü molekülde altı bağda eşdeğer olduğu için bu molekülde aksiyel ve ekvatoryal terimleri kullanılmaz.

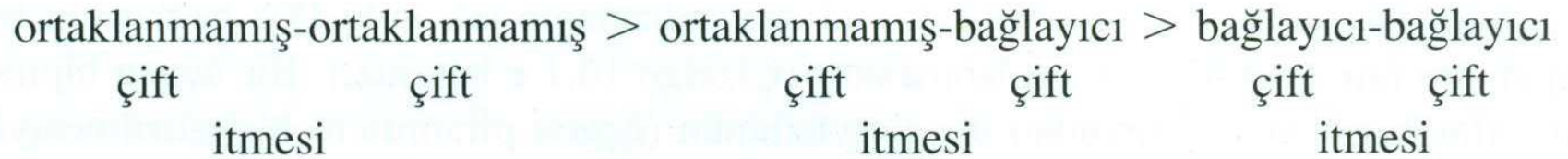


Sekizyüzlü



## Merkez Atomunda Bir yada Daha Çok Ortaklanmamış Elektron Çifti Olan Moleküller

Merkez atomunda hem ortaklanmamış, hem de bağlayıcı çiftleri olan bir molekülün geometrisinin belirlenmesi çok daha karmaşıktır. Böyle moleküllerde, bağlayıcı çiftler, ortaklanmamış çiftler ve bağlayıcı ile ortaklanmamış çiftler arasında olmak üzere üç itme kuvveti vardır.

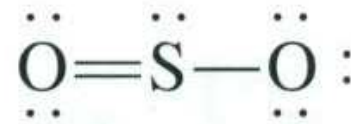


Bir bağda elektronlar, bağ yapmış iki atomun çekirdeğince uygulanan çekme kuvvetleriyle bir arada tutulurlar. Bu bağ yapan elektronlar uzayda ortaklanmamış elektronlardan daha az yer kaplarlar, çünkü atomlar tarafından çekilirler.

Moleküldeki ortaklanmamış elektronlar uzayda daha çok yer kapladıklarından komşu ortaklanmamış ve bağlayıcı çiftlerin itme kuvvetine daha çok maruz kalırlar. Bağlayıcı ve ortaklanmamış çiftlerin toplam sayısını belirtmek için ortaklanmamış çiftleri olan moleküller  $AB_xE_y$  şeklinde gösterilir. Burada A merkez atomu, B uç atomu, E ise A üzerindeki bir ortaklanmamış çifti gösterir.

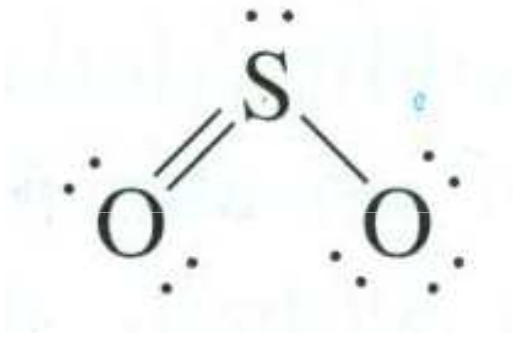
### **$AB_2E$ : Kükürt Dioksit ( $SO_2$ )**

Kükürt dioksitin Lewis yapısı şöyledir.

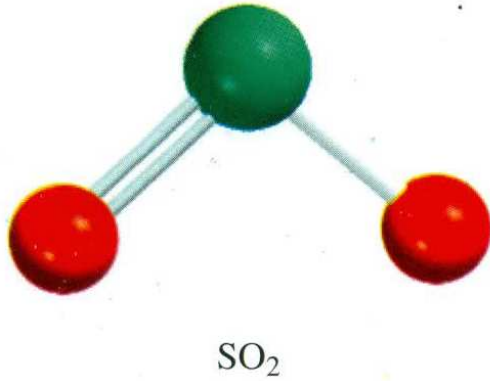


VSEPR modeline göre çift bağlar tek bağmış gibi göz önüne alındığından,  $SO_2$  molekülü merkez S atomu üzerinde üç elektron çifti içeren bir molekül olarak düşünülebilir. Bunlardan ikisi bağlayıcı, bir tanesi de ortaklanmamış çifttir.

Üç elektron çifti için toplam düzenlemenin üçgen düzlem olduğu görülmüştür. Ancak elektron çiftlerinden biri ortaklanmamış olduğu için SO<sub>2</sub> molekülü kırık çizgi şeklindedir.

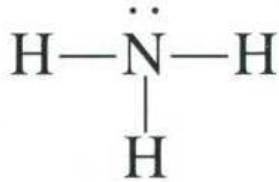


Ortaklanmamış çift ile bağlayıcı çift itmesi, bağlayıcı çiftler arasındaki itmeden daha fazla olduğu için, iki kükürt oksijen bağı ortaklanmamış çift tarafından azda olsa itilir ve OSO bağ açısı **120° den daha küçük** olur.



## **AB<sub>3</sub>E: Amonyak (NH<sub>3</sub>)**

Amonyak molekülü, üç bağlayıcı ve bir ortaklanmamış çift içerir.



NH<sub>3</sub> de elektron çiftlerinden biri ortaklanmamış çift olduğundan, NH<sub>3</sub> geometrisi üçgen pramittir. Ortaklanmamış çiftler, bağlayıcı çiftleri daha kuvvetle ittiklerinden üç NH bağlayıcı çiftleri itilerek birbirine yaklaşır.

Bu yüzden amonyaktaki HNH açısı, ideal dörtyüzlü açı **109.5° den daha küçüktür.**

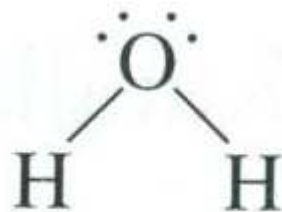


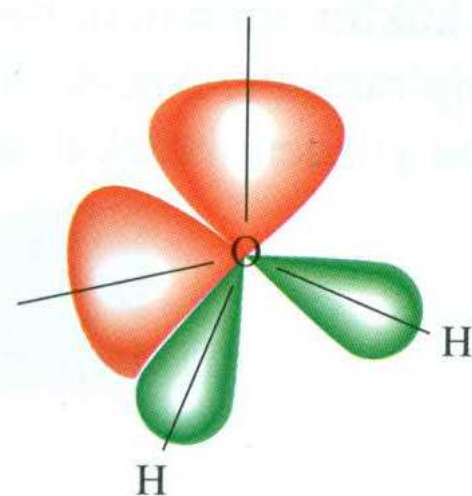
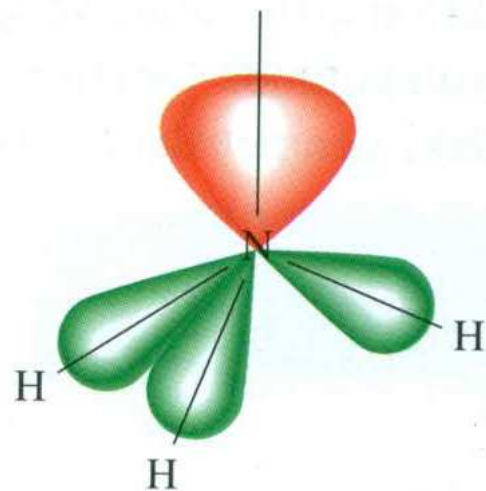
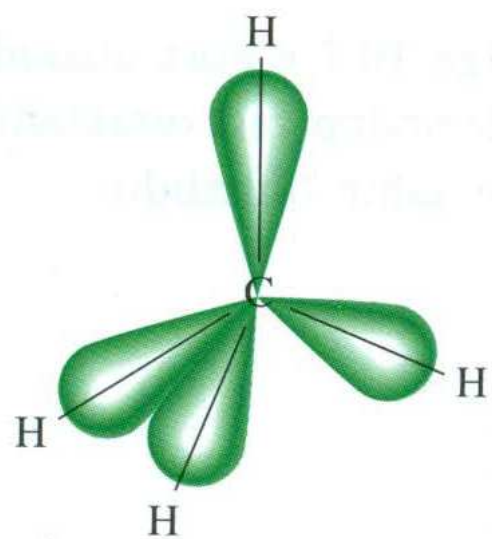
## **AB<sub>2</sub>E<sub>2</sub>: Su(H<sub>2</sub>O)**

Su molekülü iki bağlayıcı ve iki ortaklanmamış elektron çifti içerir.

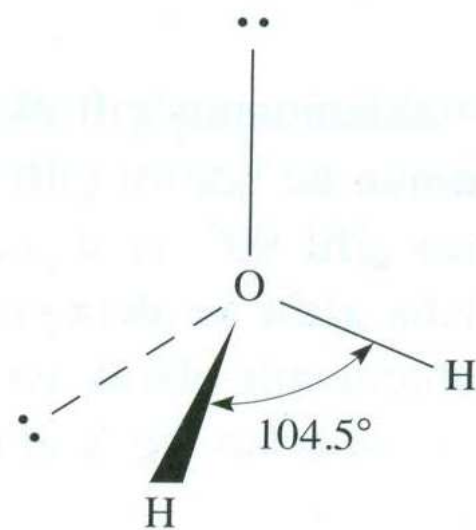
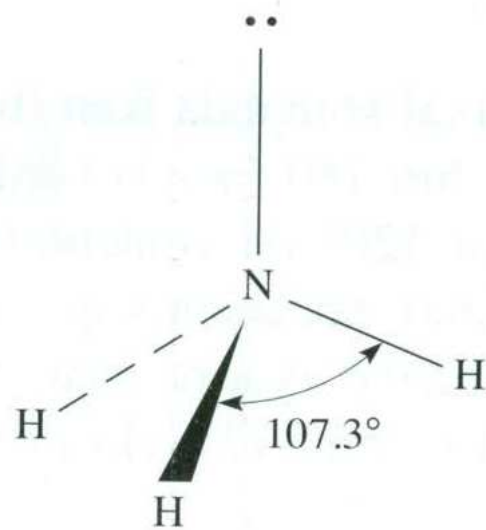
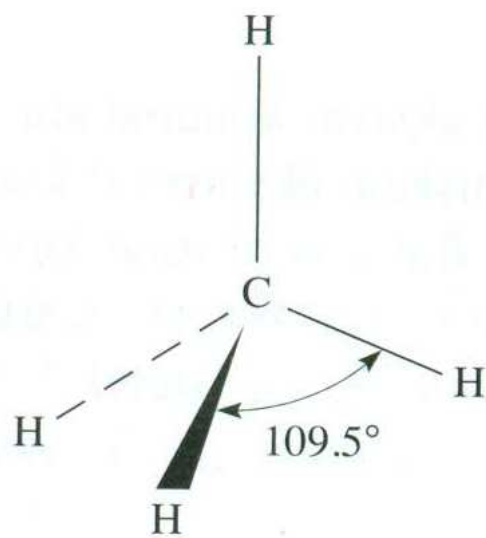


Suda dört elektron çiftinin toplam düzenlenişi amonyakta olduğu gibi dörtyüzlüdür. Ancak, amonyaktan farklı olarak suyun oksijen atomu üzerinde iki tane ortaklanmamış çift vardır. Bu ortaklanmamış çiftler itme kuvvetleri çok olduğu için birbirinden olabildiğince uzak durma eğilimindedirler. Sonuç olarak, iki OH bağlayıcı çifti birbirine doğru itilir ve dörtyüzlü açıdan sapma NH<sub>3</sub> dekinden daha büyüktür. HOH açısı **104.5°** dir.





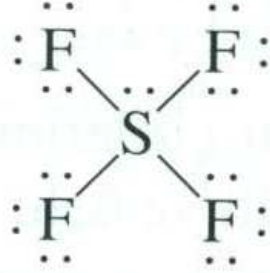
(a)



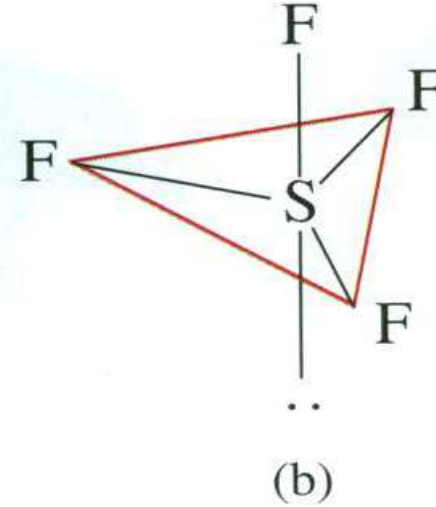
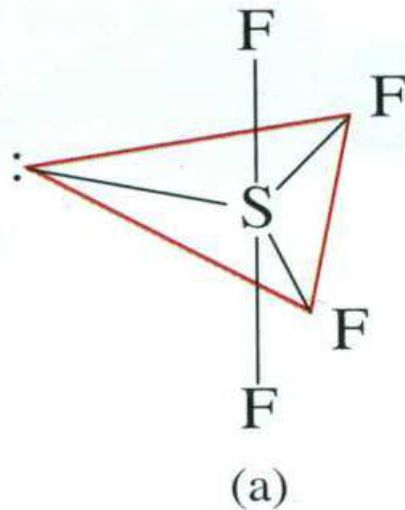
(b)

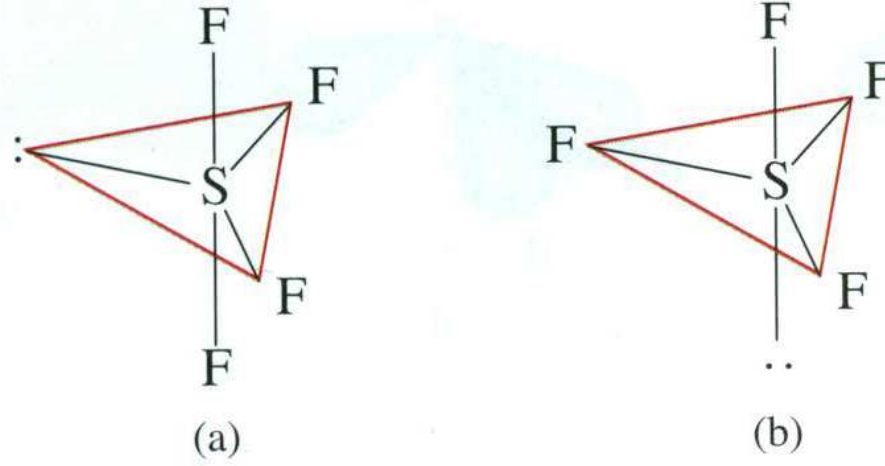
## **AB<sub>4</sub>E: Kükürt Tetraflorür (SF<sub>4</sub>)**

SF<sub>4</sub> ün Lewis yapısı şöyledir.



Merkez kükürt atomunun beş elektron çifti vardır. Düzenlenişi üçgen piramittir. Ancak, SF<sub>4</sub> molekülünde elektron çiftlerinden biri ortaklanmamış çifttir, bu yüzden molekül şu geometrilerden birine sahip olmalıdır.





(a) da ortaklanmamış çift ekvatoryal konumda iken (b) de aksiyal konumdadır. Aksiyal konumun üç komşu çifti  $90^\circ$  ve diğer ikisi  $120^\circ$  ile yönlenmiştir. Buna göre itme kuvvetleri (a) da daha azdır ve deneysel olarak gözlenen yapıda budur. Aksiyal F atomları ile S arasındaki açı  $173^\circ$ , ekvatoryal F atomları ile S arasındaki açı ise  $102^\circ$  dir.

# ***MOLEKÜLER SİMETRİ***

Kimyada simetri uygulamaları çoğunlukla moleküler simetri ile ilişkilidir. Moleküler simetri molekül geometrisine bağlıdır. Moleküler simetrinin kimyadaki uygulama alanları kısaca;

- 1- Kirallik ve optikçe aktifliğin belirlenmesi
- 2- Eşdeğer atomların belirlenmesi ve NMR spektrumlarının analizi
- 3- Infrared ve Raman spektrumların analizi
- 4- Moleküler orbitaller ve enerji diyagramlarının oluşturulması
- 5- Seçim kuralları ve elektronik absorpsiyon spektrumlarının analizi
- 6- Komplekslerde terim düzey diyagramlarının oluşturulması ve ligand alan geçişlerinin belirlenmesi

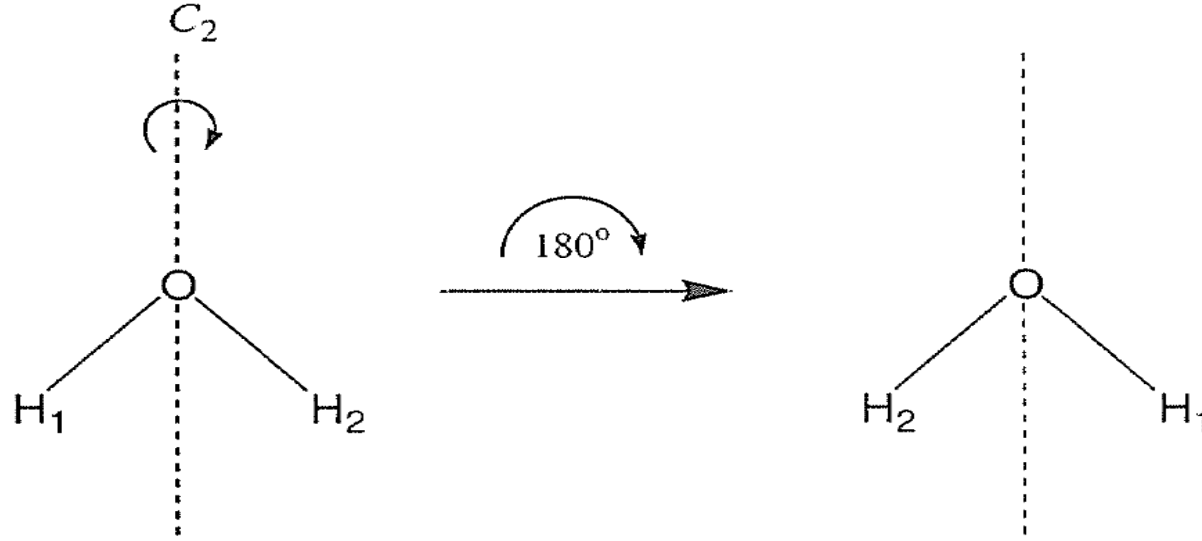
## Simetri Kavramı:

Doğanın temel olayları ve yasaları simetri ile ilişkilidir. Bu nedenle simetri bilimin temel kavramlarından biridir.

Simetri düzlemi yada ayna düzlemi ile tanımlanan iki taraflı simetri günlük yaşantımızda en sık karşılaştığımız simetri türüdür.

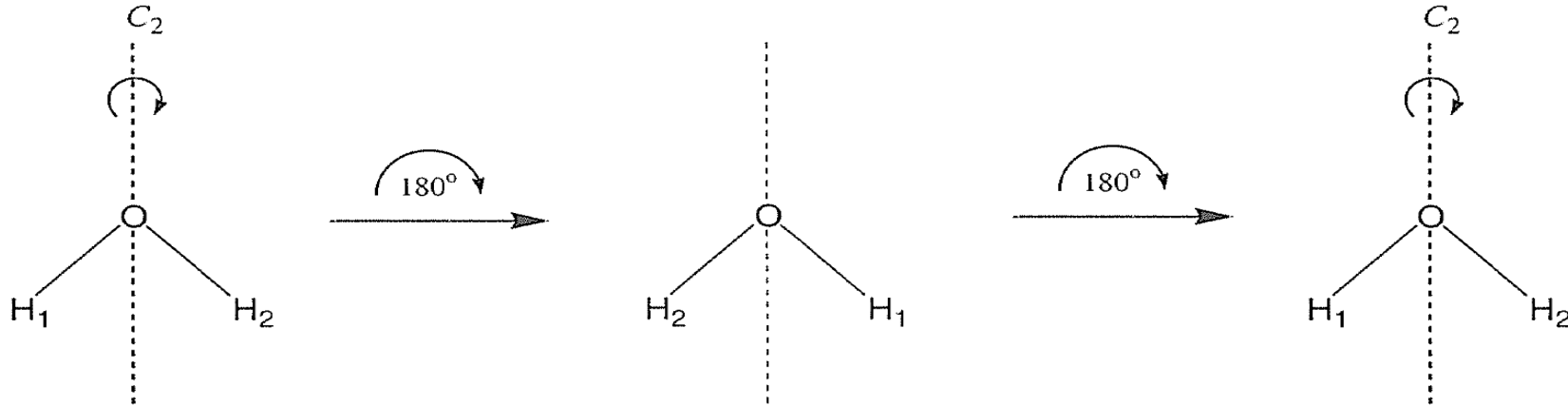


Simetri işlemi, moleküle uygulandığında moleküle eşdeğer bir yönelme ya da başlangıçtaki görünümü ile ayırt edilemeyen bir görünüm sağlayan işlemdir.



$\text{H}_2\text{O}$  molekülü z- eksenini etrafında  $180^\circ$  döndürüldüğünde hidrojenler birbirini yerine geçmektedir. Hidrojenler için kullanılan 1 ve 2 indisleri göz ardı edildiğinde, molekülün simetri işlemi uygulanmadan önceki görünümü ile işlemden sonraki görünümünün aynı olduğu görülür. O halde, uygulanan  $180^\circ$ 'lik dönme işlemi  $\text{H}_2\text{O}$  için bir **simetri işlemidir**. (II) yönelmesine **eşdeğer yönelme** denir.

Bu yönelme aynı eksen etrafında  $180^\circ$  döndürülürse, elde edilen (III) yönelmesi (I) ile tamamen aynı olur. Bu, molekülün orijinal konumunu koruduğunu gösterir. Bu nedenle (III) yönelmesi **özdeş yönelme** olarak adlandırılır. Bir molekülün orijinal konumunu koruması, simetride özdeşlik işlemi ile tanımlanır. **Özdeşlik işlemi**, her molekülün sahip olduğu bir simetri işlemidir.

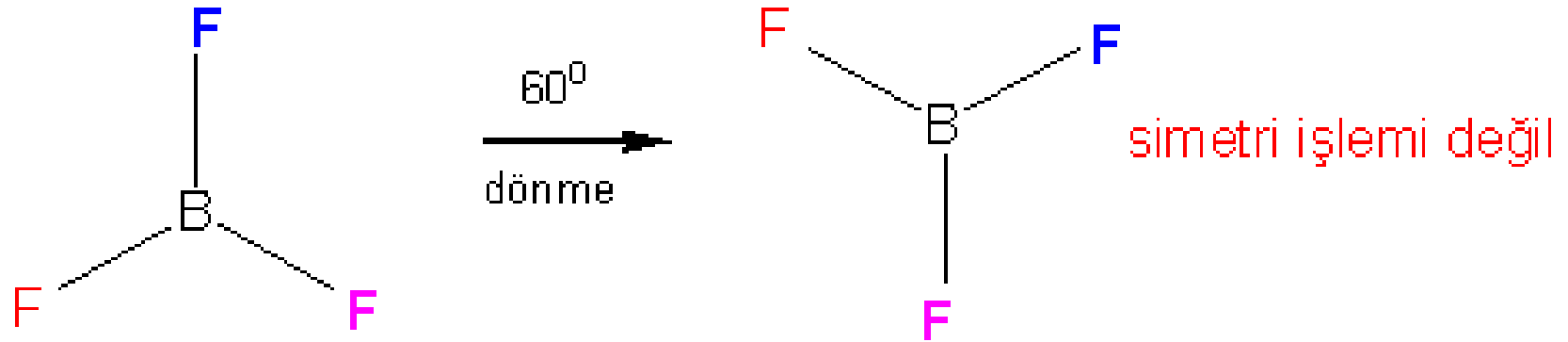




Simetri işleminin uygulandığı geometrik niceliğe ***simetri elemanı*** denir. H<sub>2</sub>O molekülü için z eksenine bir simetri elemanıdır. Moleküler simetride eksenin yanı sıra, nokta ve düzlem birer simetri elemanıdır. Bir simetri elemanına ardışık simetri işlemleri uygulanabilir.

| simetri elemanları         | simge    | simetri işlemleri                                                             |
|----------------------------|----------|-------------------------------------------------------------------------------|
| Özdeşlik                   | E veya I | değişim oluşturmaz                                                            |
| Simetri Eksenine           | C        | eksen etrafında <i>dönme</i>                                                  |
| Simetri Düzlemi            | $\sigma$ | düzlemden <i>yansıma</i>                                                      |
| Simetri Merkezi veya Nokta | <i>i</i> | <i>evirme</i> (inversiyon), terslenme ; (x, y, z) → (-x, -y, -z)              |
| Yansımalı dönme eksenine   | S        | <i>dönme</i> + <i>yansıma</i> (yansıma düzlemi, dönme eksenine dik olmalıdır) |

## Eşdeğer Olmayan Konum

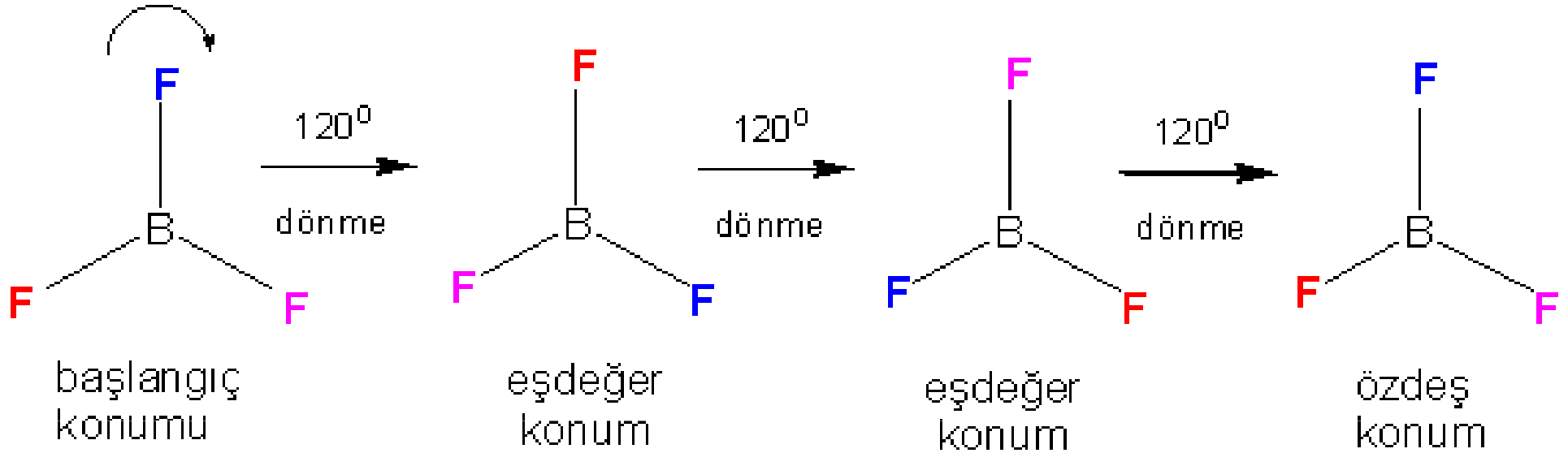


eşdeğer konum değil

$\text{BF}_3$  molekülünde  $60^\circ$  dönme eksenini yoktur.

*İşlem sonucunda molekülün görüntüsü değişmiştir.*

## Eşdeğer ve Özdeş Konumlar

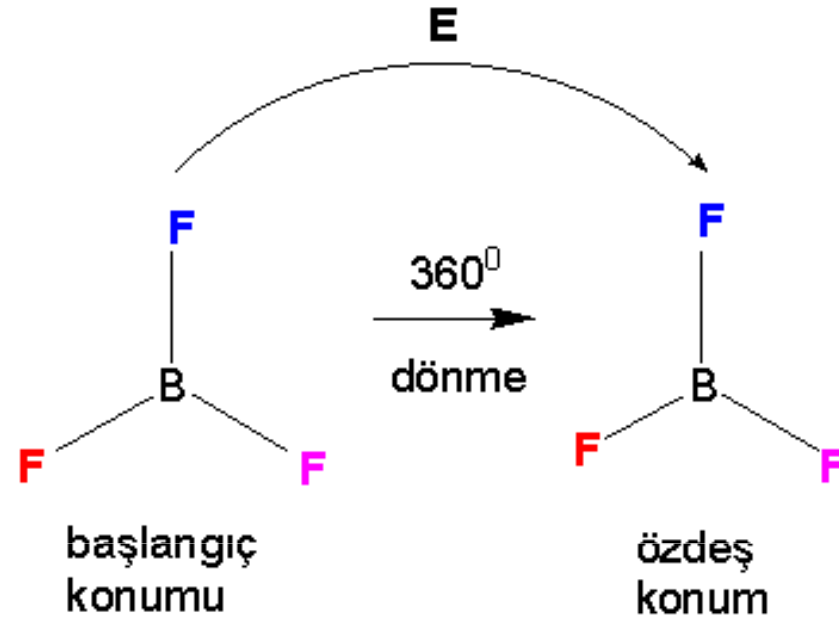


$\text{BF}_3$  molekülünde  $120^\circ$  dönme eksenini vardır.

*eşdeğer konum = başlangıç ile ayırt edilemeyen konum*

*özdeş konum = başlangıç ile aynı konum*

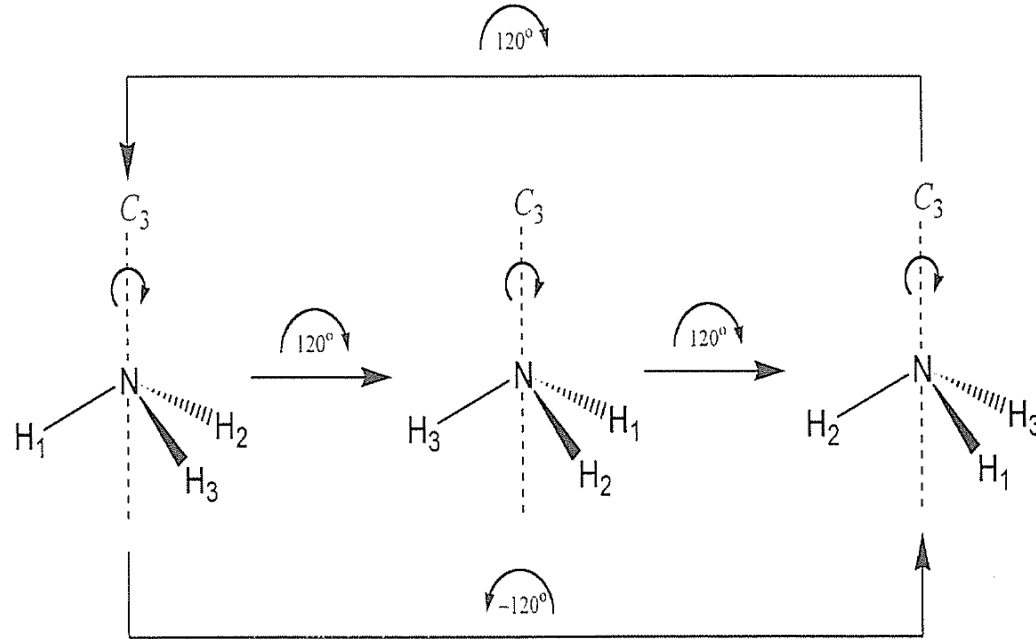
## Özdeşlik İşlemi:



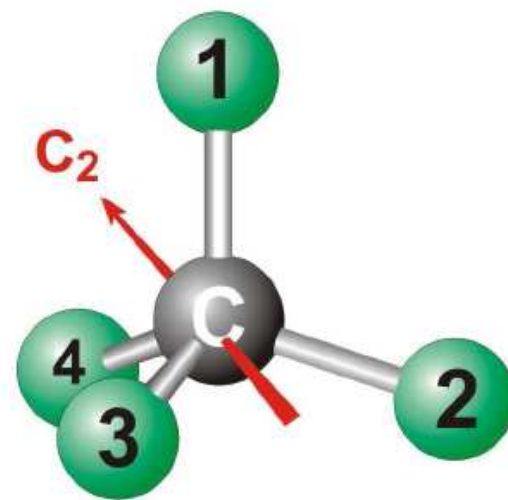
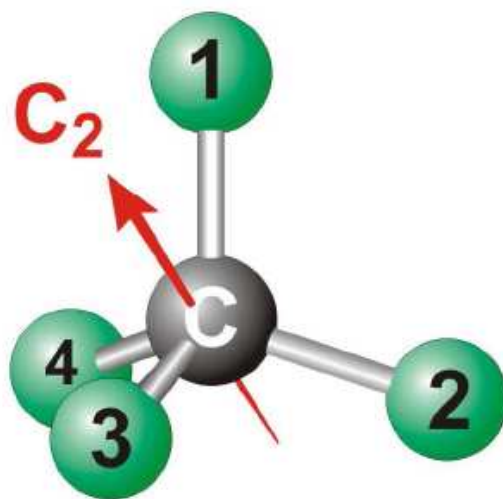
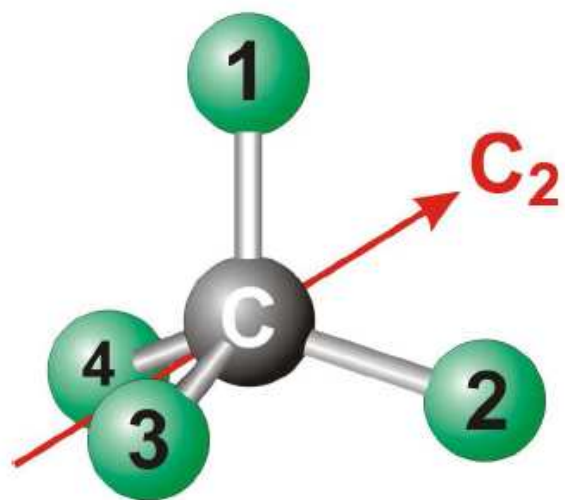
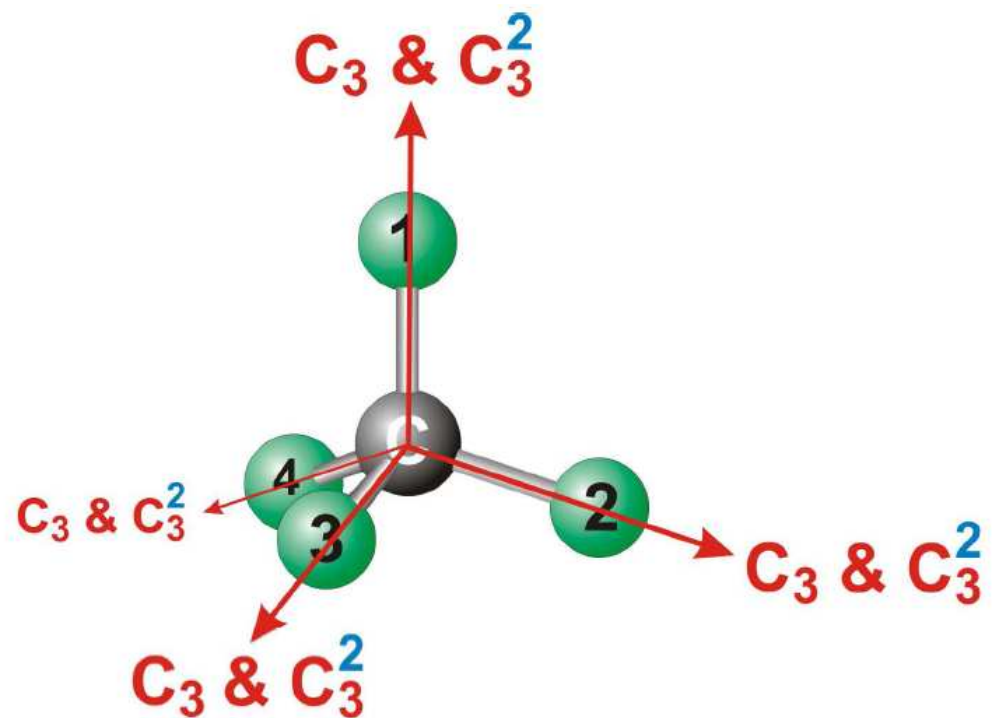
- *Simgesi E veya I dir.*
- *Molekülde hiç bir değişim yaratmaz, ya da  $360^\circ$  dönme hareketine karşılık gelir.*
- *Her molekülün özdeşlik işlemi vardır.*
- *Hiçbir simetri elemanı bulunmayan molekülün en azından bir özdeşlik işlemi vardır*

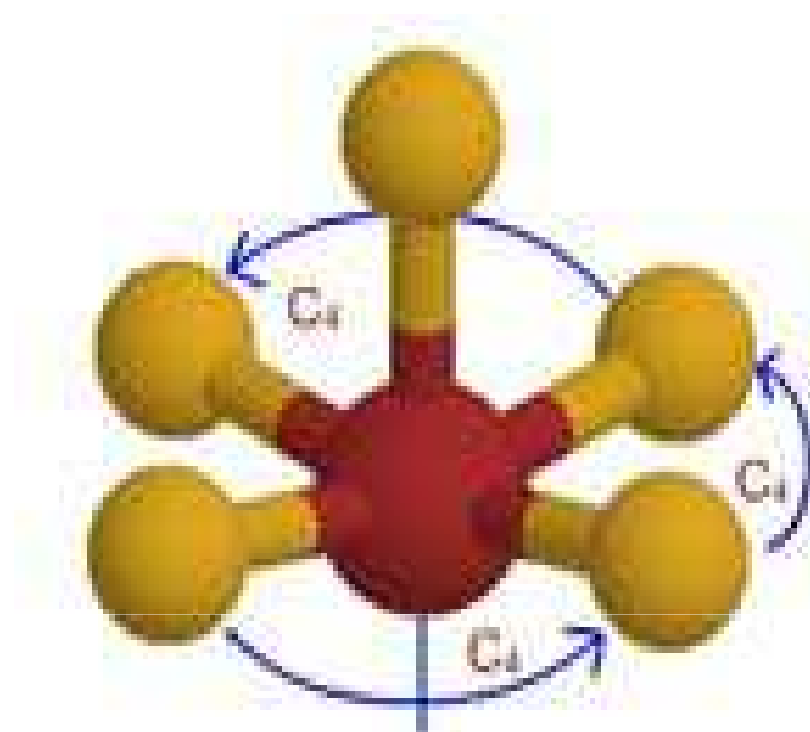
## Dönme işlemi ( $C_n$ ):

Molekül içinden geçen bir eksen etrafında, molekülün  $(360/n)^\circ$  lik açı ile döndürülmesi işlemidir. İşlemin uygulandığı eksen simetri eksenidir ve  $C_n$  ile gösterilir.  $n = 360/\theta$  dır ve  $n$  eksenin derecesidir.  $\theta$  döndürülme açısıdır. Örneğin, bir molekül, bir eksen etrafında  $120^\circ$  döndürülerek bir eşdeğer yönelme elde edilmiş ise, molekül  $C_3$  simetri eksenine sahiptir ve simetri işlemi bir  $C_3$  işlemidir.

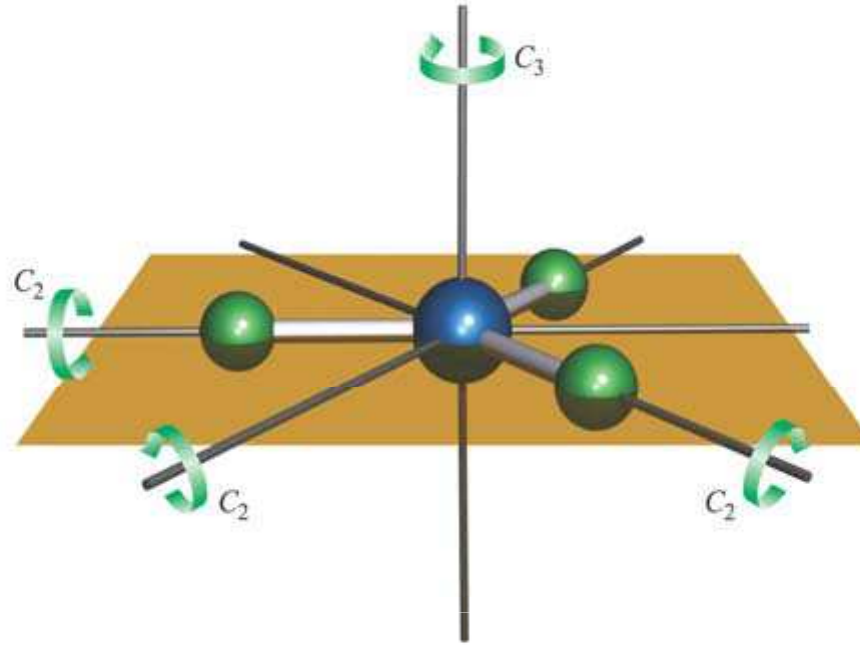


| $C_2$                   | $C_3$                       | $C_4$                       |
|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| $C_2^1 = 180^\circ$     | $C_3^1 = 120^\circ$         | $C_4^1 = 90^\circ$          |
| $C_2^2 = 360^\circ = E$ | $C_3^2 = 240^\circ$         | $C_4^2 = 180^\circ = C_2^1$ |
|                         | $C_3^3 = 360^\circ = E$     | $C_4^3 = 270^\circ$         |
|                         |                             | $C_4^4 = 360^\circ = E$     |
| $C_5$                   | $C_6$                       | $C_8$                       |
| $C_5^1 = 72^\circ$      | $C_6^1 = 60^\circ$          | $C_8^1 = 45^\circ$          |
| $C_5^2 = 144^\circ$     | $C_6^2 = 120^\circ = C_3^1$ | $C_8^2 = 90^\circ = C_4^1$  |
| $C_5^3 = 216^\circ$     | $C_6^3 = 180^\circ = C_2^1$ | $C_8^3 = 135^\circ$         |
| $C_5^4 = 288^\circ$     | $C_6^4 = 240^\circ = C_3^2$ | $C_8^4 = 180^\circ = C_2^1$ |
| $C_5^5 = 360^\circ = E$ | $C_6^5 = 320^\circ$         | $C_8^5 = 225^\circ$         |
|                         | $C_6^6 = 360^\circ = E$     | $C_8^6 = 270^\circ = C_4^3$ |
|                         |                             | $C_8^7 = 315^\circ$         |
|                         |                             | $C_8^8 = 360^\circ = E$     |



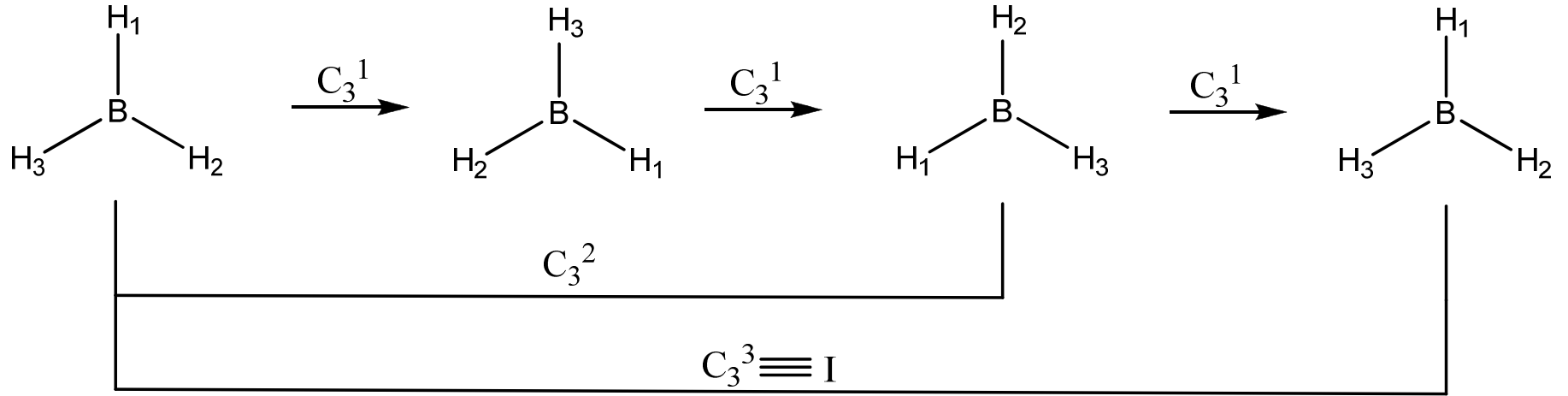




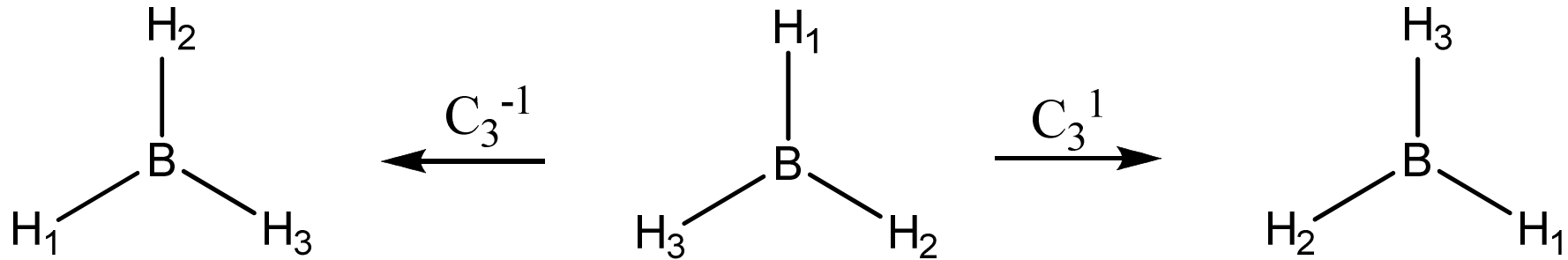


$\text{BH}_3$  molekülü bağ açıortaylarından geçen eksenler etrafında  $180^\circ$ , molekül düzlemine dik ve bor atomundan geçen eksen etrafında  $120^\circ$  döndürüldüğünde, eşdeğer yönelme elde edilmektedir. O halde  $\text{BH}_3$ , üç tane  $C_2$  ve bir tane  $C_3$  eksenine sahiptir.

Uygulanan işlemler  $C_2$  ve  $C_3$  işlemleridir. Bir molekülün derecesi en yüksek olan eksenine ana simetri eksenidir.  $C_3$   $BH_3$  molekülünün ana simetri eksenidir.



$n \geq 3$  olmak üzere,  $C_n$  işleminin saat yönünde ve tersi yönde uygulanması farklı yönelmelere götürür. Saatin dönme yönündeki işlem  $C_n$ , tersi yöndeki işlem ise  $C_n^{-1}$  ile gösterilir. Buna ters işlem denir.  $BH_3$  molekülüne  $C_3$  ve  $C_3^{-1}$  işlemlerinin uygulanmasıyla elde edilen yönelmeler şu şekildedir.



Bir moleküle  $C_n$  ve  $C_n^{-1}$  işlemlerinin ard arda uygulanması özdeş yönelmeye götürür. Bu nedenle  $C_n \cdot C_n^{-1} = I$  dır.  $C_n \cdot C_n^{-1}$ , iki işlemin ard arda uygulandığını gösterir.

Doğrusal moleküllerde, molekül, bağlardan geçen eksen etrafında sonsuz küçüklükte açı ile döndürüldüğünde başlangıç görünümü ile ayırt edilmeyen bir görünüme sahip olur.  $N = 360/\theta$  bağıntısından  $\theta \rightarrow 0$  iken  $\theta \rightarrow \infty$  olur. Bu nedenle doğrusal moleküllerin ana simetri eksenini  $C_\infty$  dur.

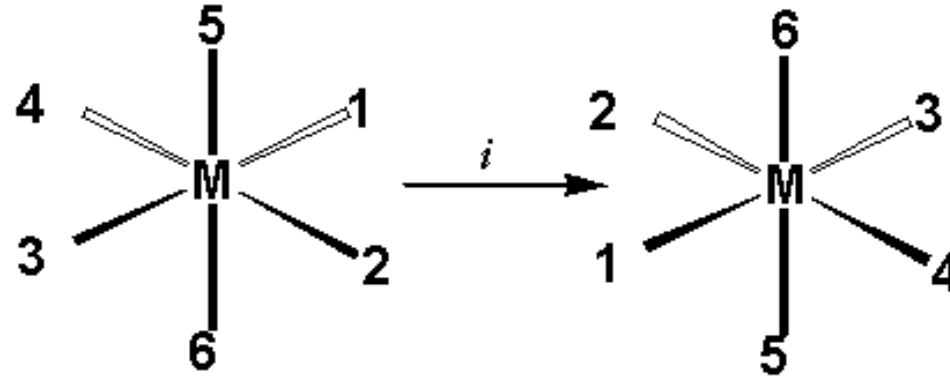
Her molekül  $C_1$  eksenine sahiptir. Ancak  $C_1=I$  olduğundan  $C_1$  simetri eksenini olarak göz önüne alınmaz. Bir molekülde en yüksek dereceye sahip birden fazla simetri eksenini varsa, daha çok atomdan geçen eksen ana simetri eksenini olarak alınır.

## **Terslenme İşlemi (i):**

Eğer molekülün herhangi bir noktasından başlayıp merkezden geçen bir doğru üzerinde, bu merkezi geçtikten sonra eşit uzaklıkta ilerlediğinde ilki ile ayırt edilemeyen bir noktaya geliniyorsa, molekülün bir ***terslenme merkezi*** olduğu söylenir. Uygulanan işlemede terslenme denir. Terslenme merkezi ve terslenme işlemi ***i*** sembolü ile gösterilir.

Başka bir ifadeyle ***terslenme işlemi***; moleküldeki her atomun, atom ve molekül merkezinden geçen doğru boyunca merkezin diğer tarafına ilk konumuna eşit uzaklıkta taşınması işlemidir. Bu işlem ile benzer atomlar birbiri yerine geçmektedir. Terslenme işlemi ile koordinatları  $x$ ,  $y$  ve  $z$  olan bir nokta, koordinatları  $-x$ ,  $-y$  ve  $-z$  olan bir konuma taşınır.

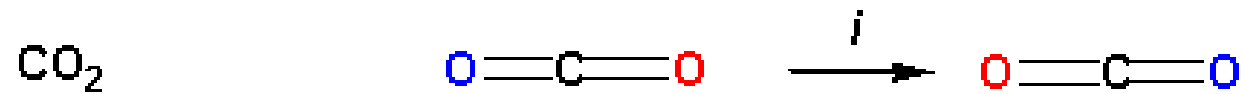
$$(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$$



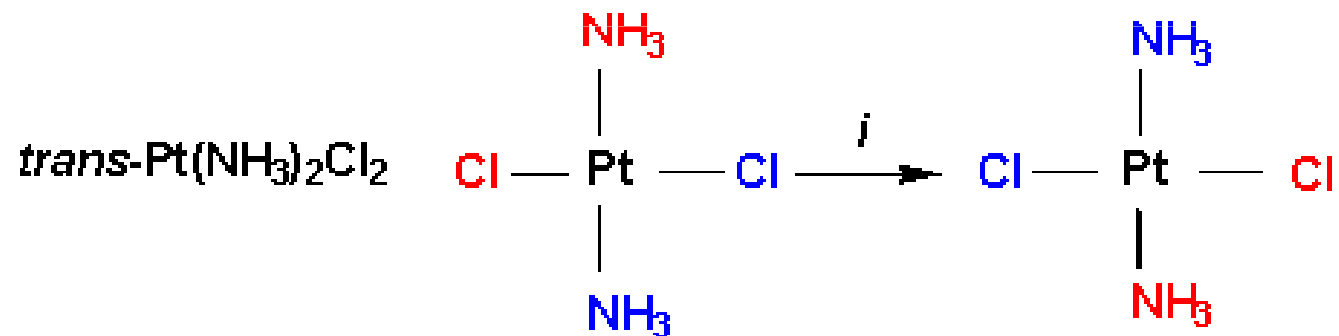
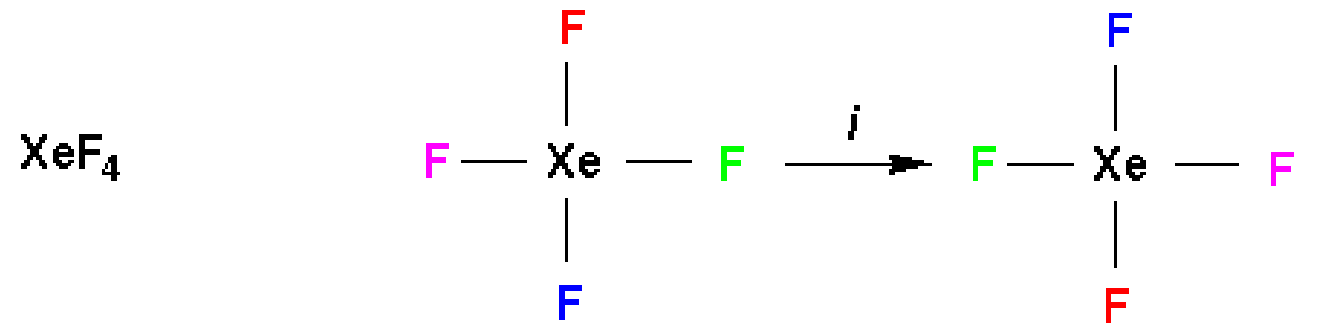
**Terslenme işlemi (inversiyon) bir nokta temel alınarak yapılır.**

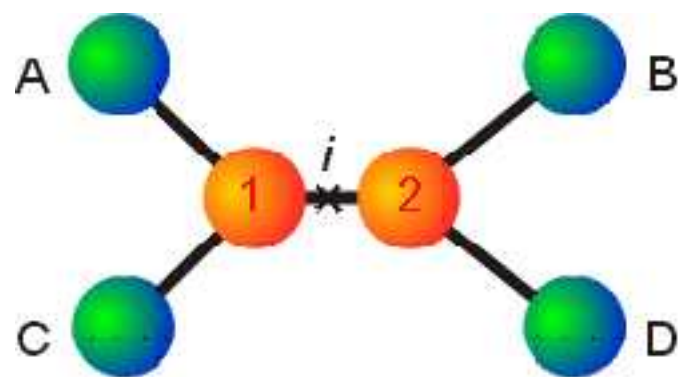
**Bu noktaya simetri merkezi adı verilir.**

Doğrusal moleküllerde  $i : (z) \rightarrow (-z)$  dir.

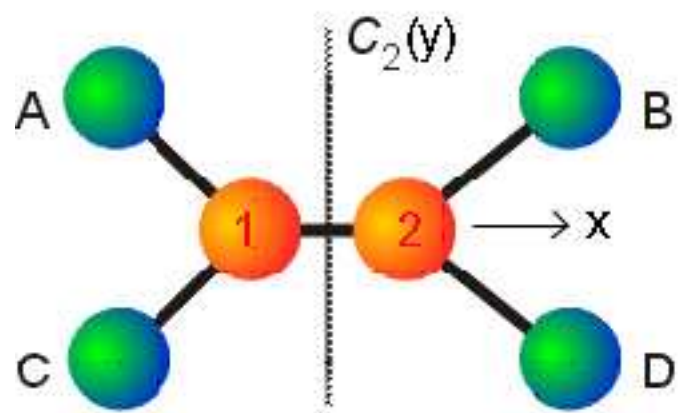
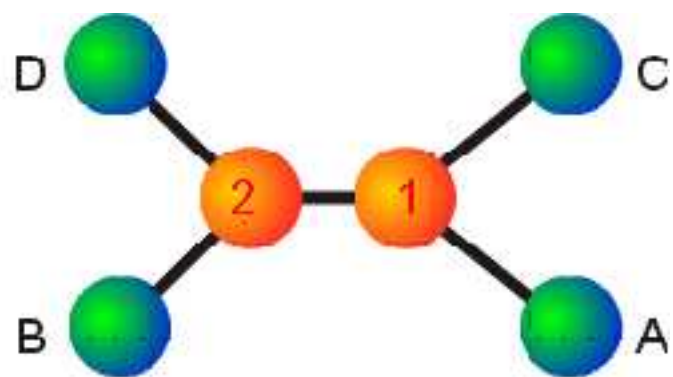


Düzlemsel moleküllerde  $i : (x, y) \rightarrow (-x, -y)$  dir.

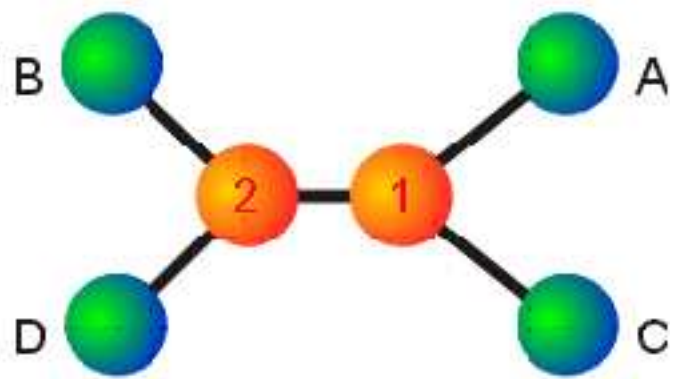




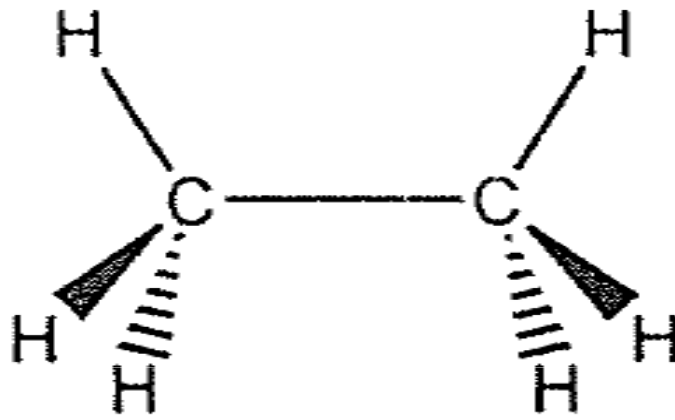
(a)



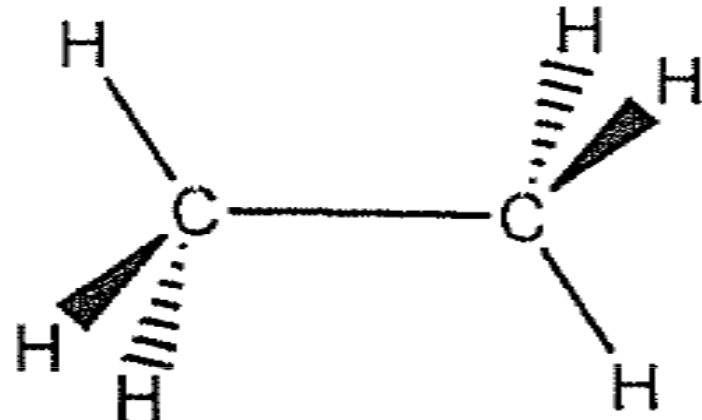
(b)







hizalı

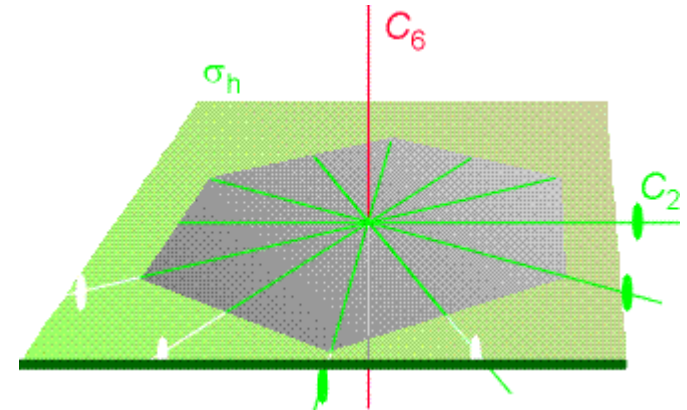
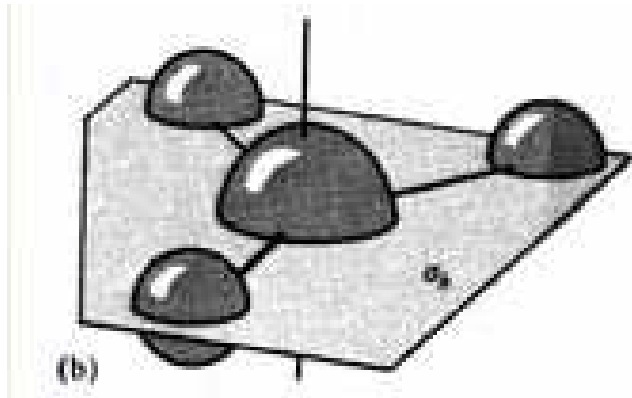


çapraz

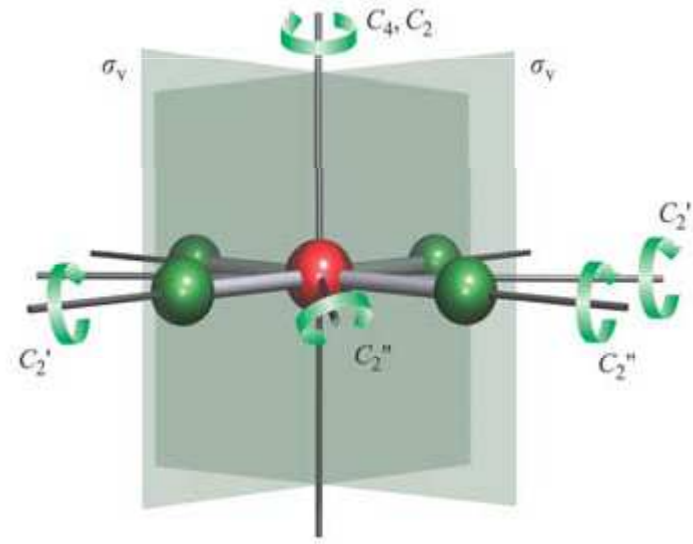
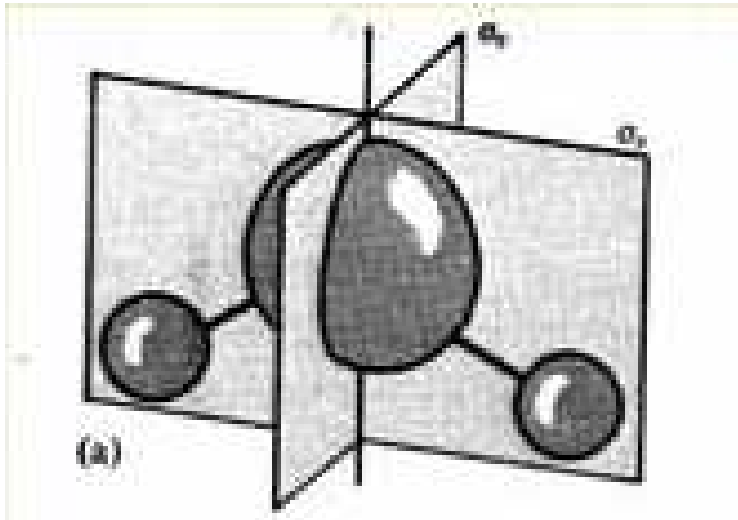
## Yansıma İşlemi ( $\sigma$ ):

Moleküldeki tüm atomların, molekül içinden geçen bir düzlem aynadan yansıtılması işlemidir. Bu işlemle, düzlemin solunda yer alan atomlar sağa, sağında yer alanlar ise sola taşınır ve benzer atomlar birbirine yerine geçer. Burada ele alınan düzlem simetri düzlemidir ve  $\sigma$  ile gösterilir. Simetri düzlemi, molekülü birbirinin ayna görüntüsü olan iki parçaya ayırır. Moleküllerde üç çeşit simetri düzlemi tanımlanır;

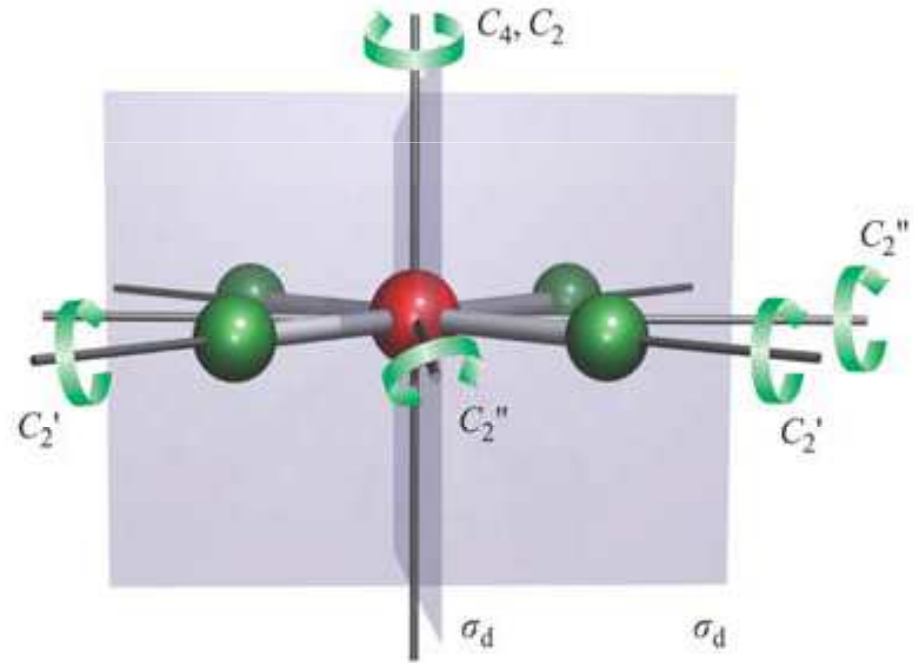
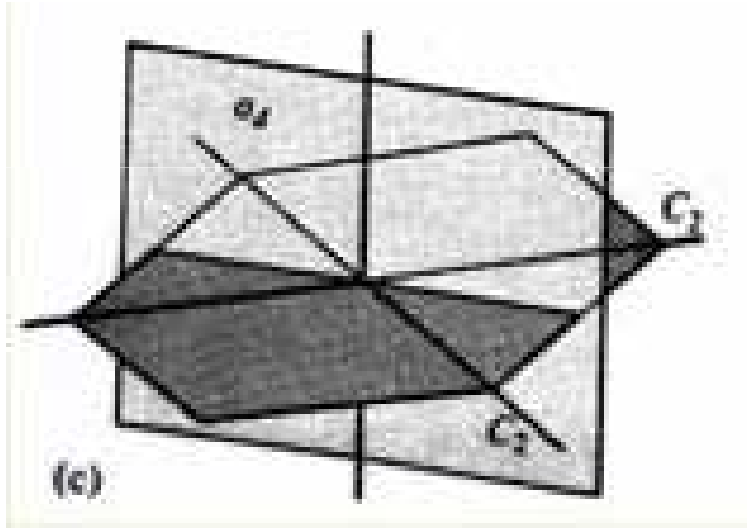
**a) Yatay Simetri Düzlemi:** Molekülün ana simetri eksenine dik olan düzlemdir ve  $\sigma_h$  ile gösterilir.

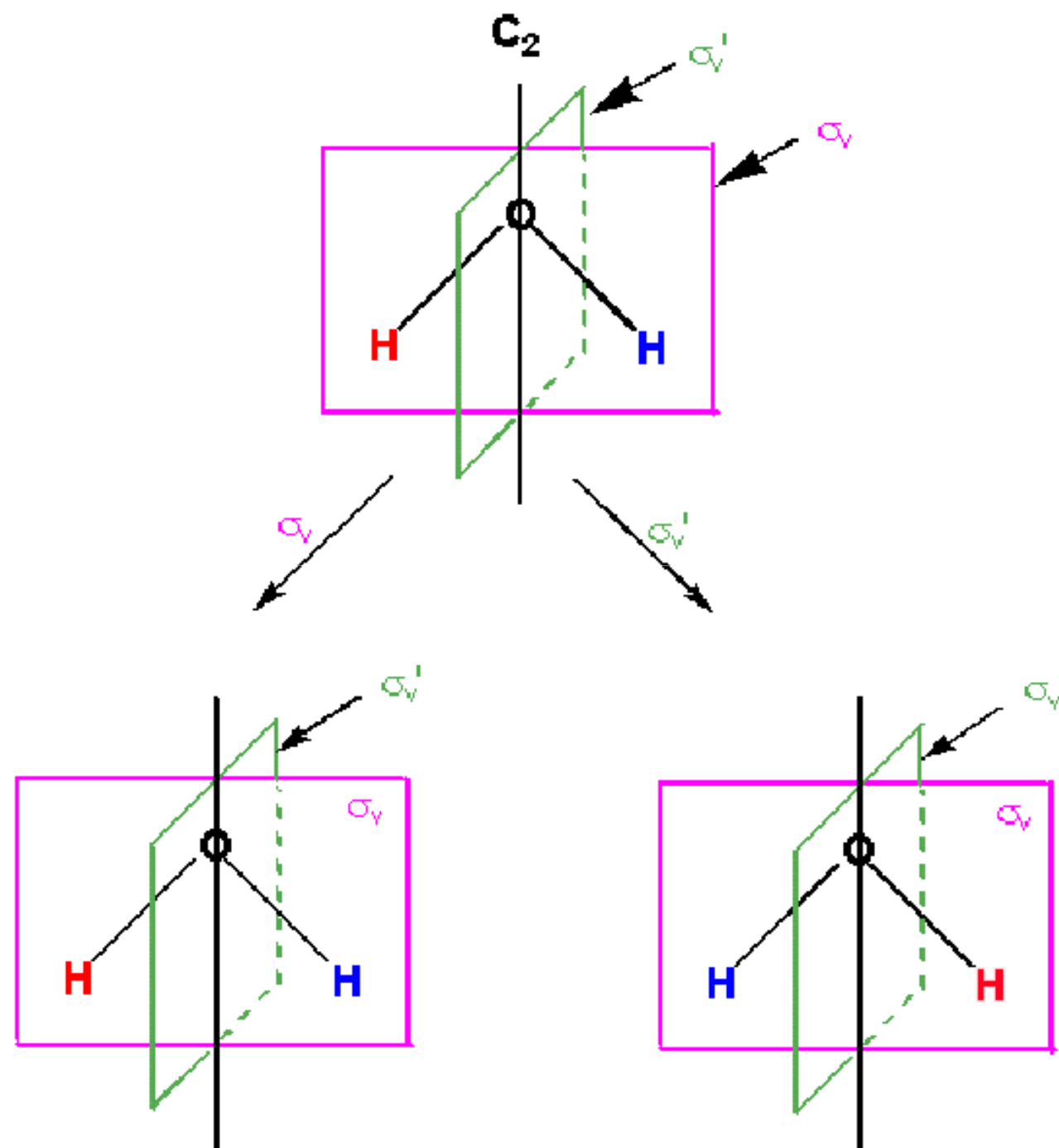


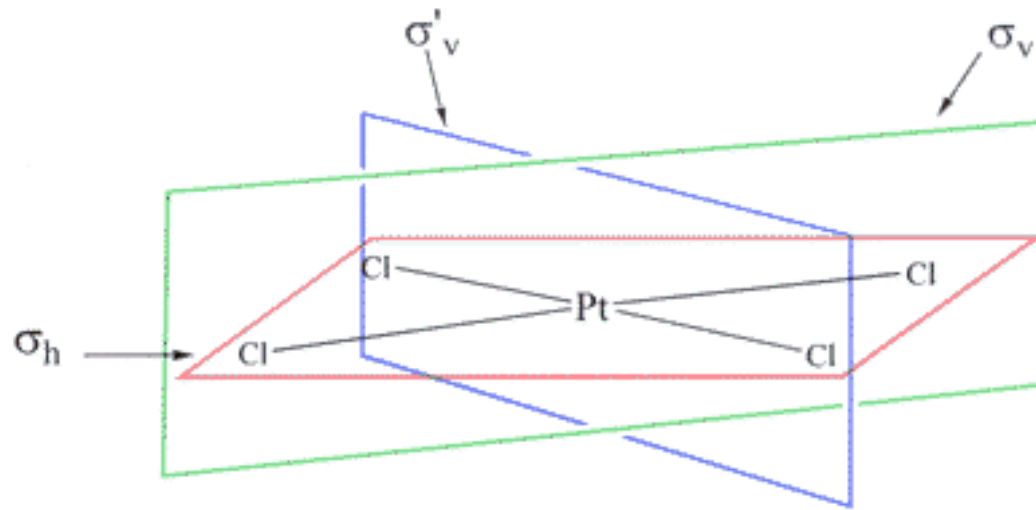
**b) Dikey Simetri Düzlemi:**  $C_n$  ana simetri eksenine dik  $n$  tane  $C_2$  içermeyen moleküllerde, ana simetri eksenini içeren düzlem yada düzlemler ile  $C_n$  ana simetri eksenine dik  $n$  tane  $C_2$  içeren moleküllerde, molekülün  $\sigma_h$  düzleminde yer alan bağlardan ya da atomlardan geçen düzlem yada düzlemler, dikey simetri düzlemdir ve  $\sigma_v$  ile gösterilir.



**c) Diagonal Simetri Düzlemi:**  $C_n$  ana simetri eksenine dik  $n$  tane  $C_2$  içeren moleküllerde, molekülün  $\sigma_h$  düzleminde yer alan bağlardan geçmeye yada bağları ikiye bölen düzlemdir ve  $\sigma_d$  ile gösterilir. ya da atomlardan geçen düzlem yada düzlemler, dikey simetri düzlemidir

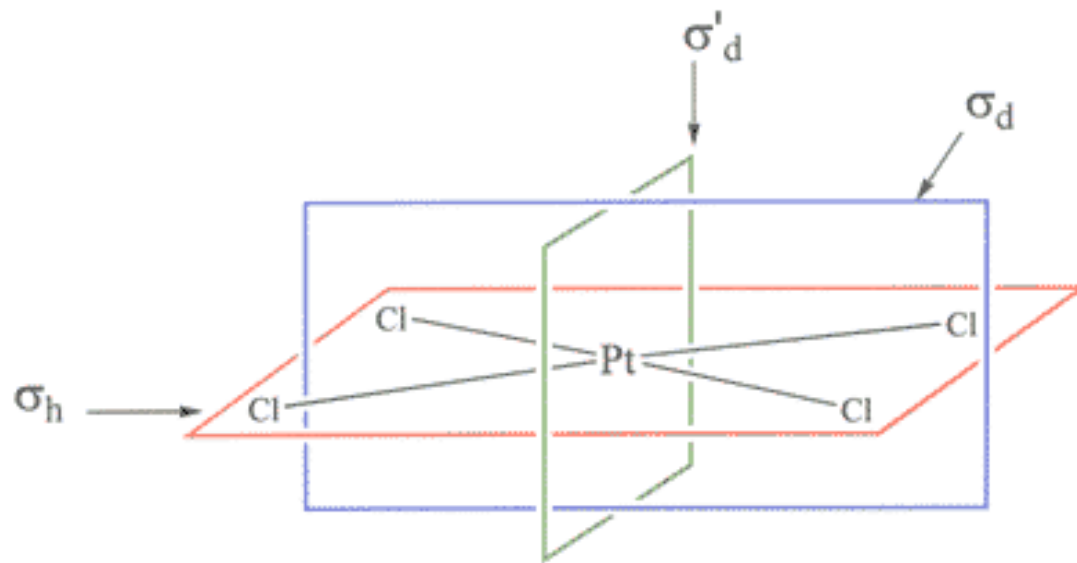






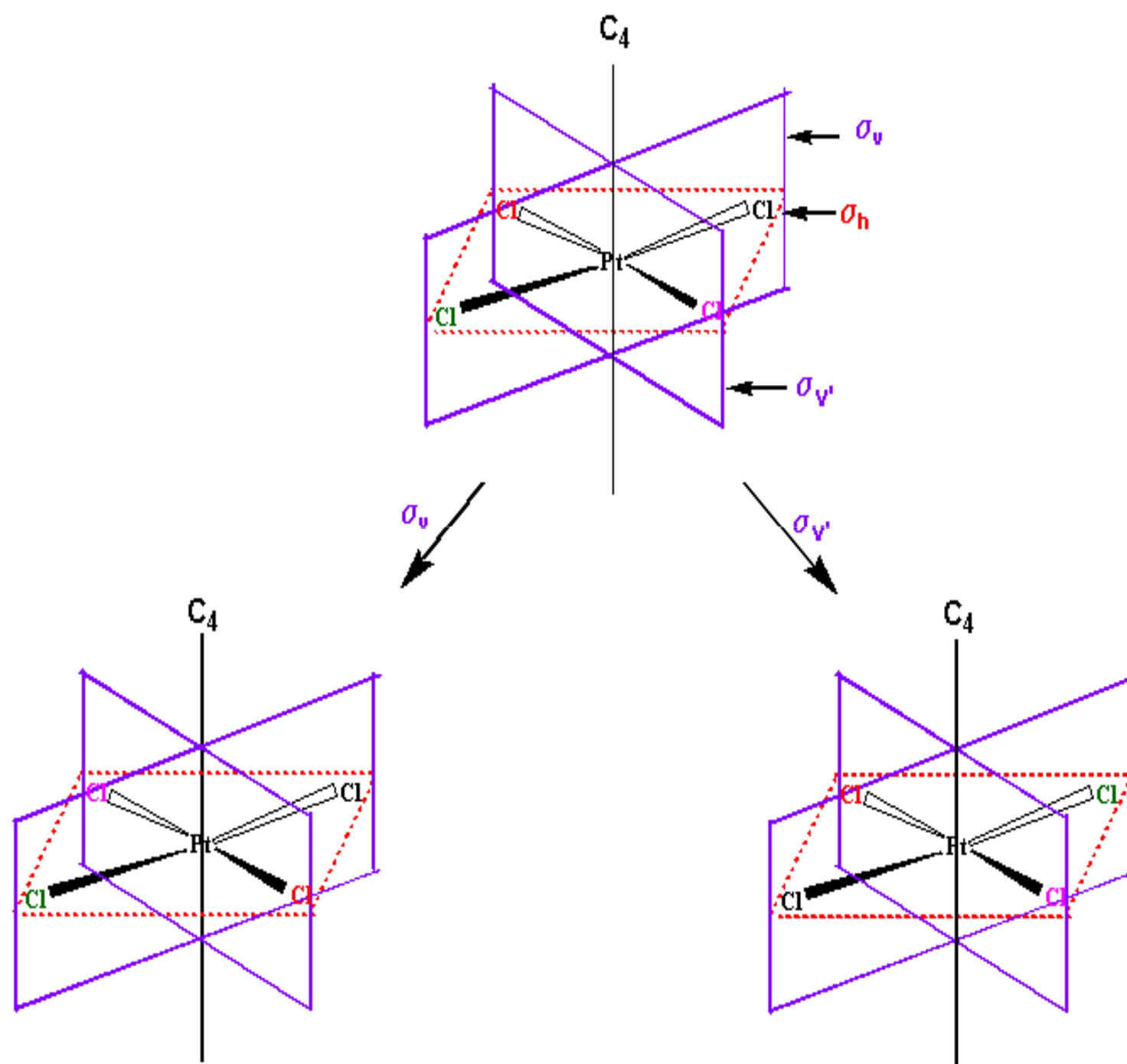
$\sigma_v$  yansıma düzlemleri

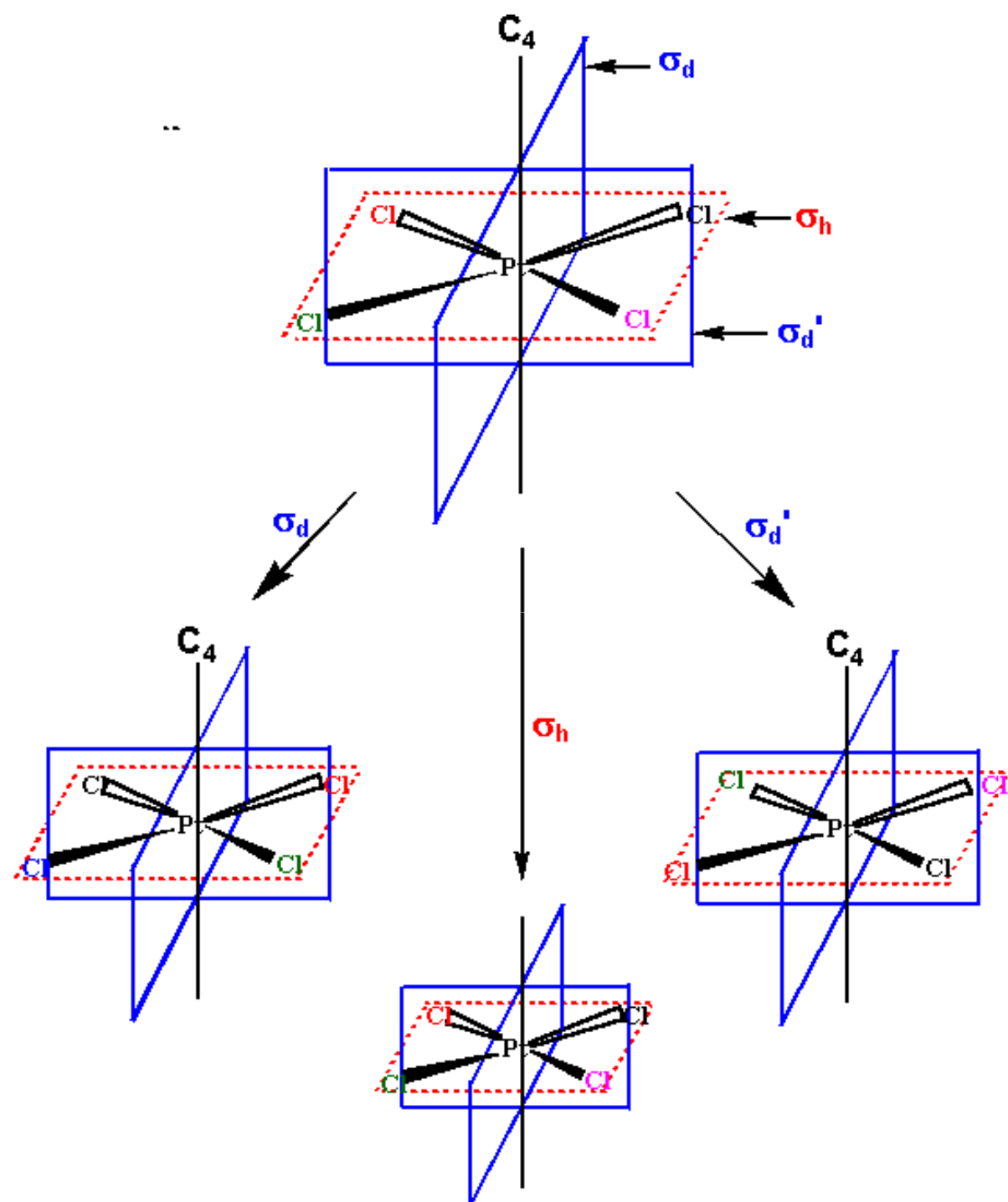
$C_2'$  eksenlerinden geçer.



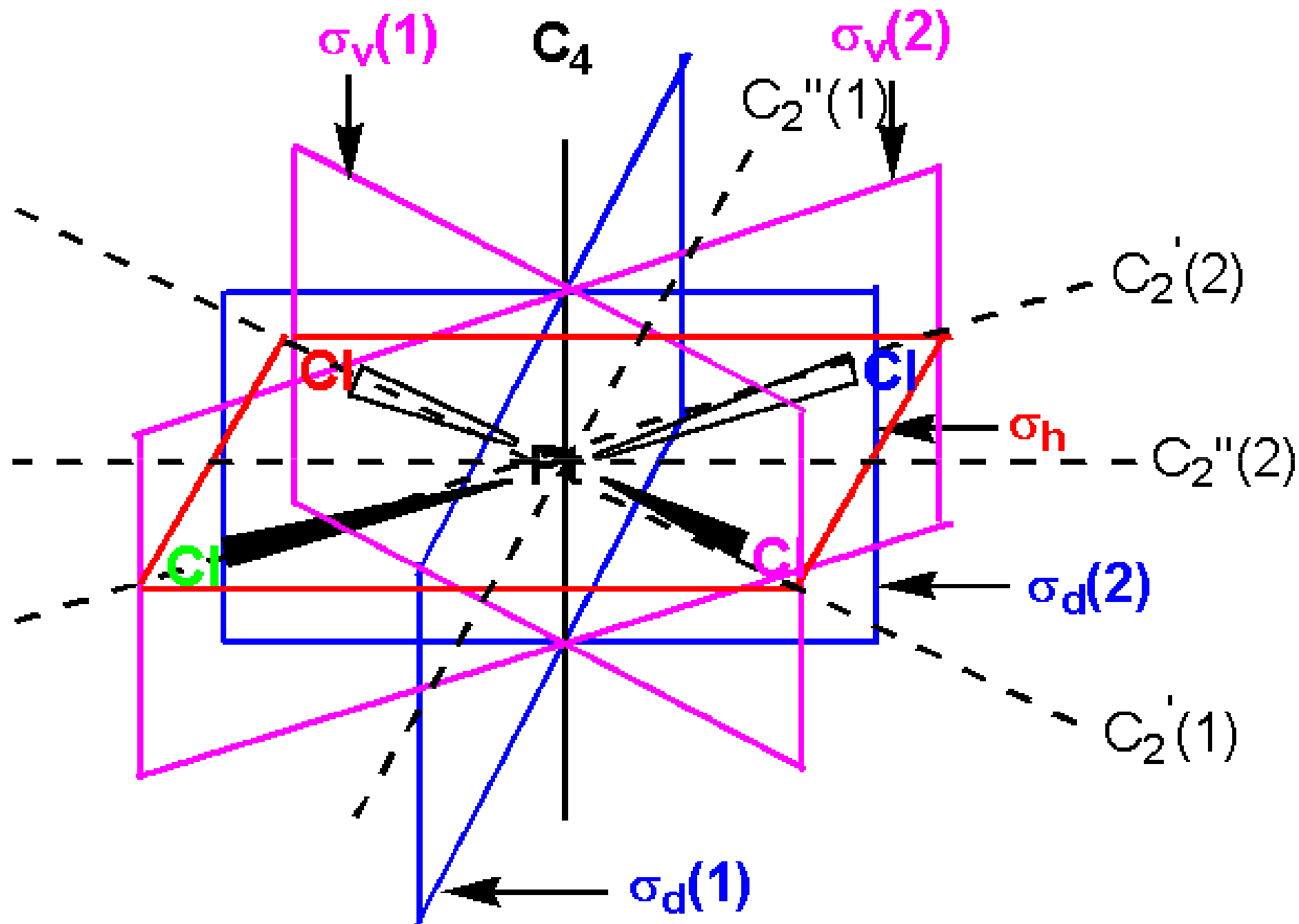
$\sigma_d$  yansıma düzlemleri

$C_2''$  eksenlerinden geçer.



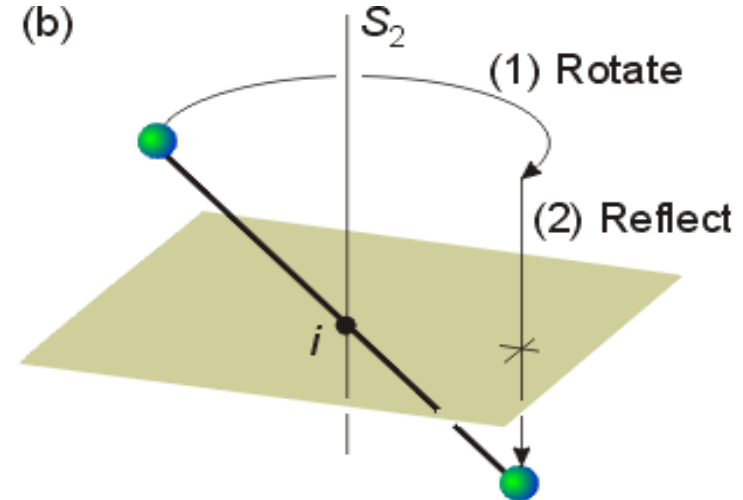
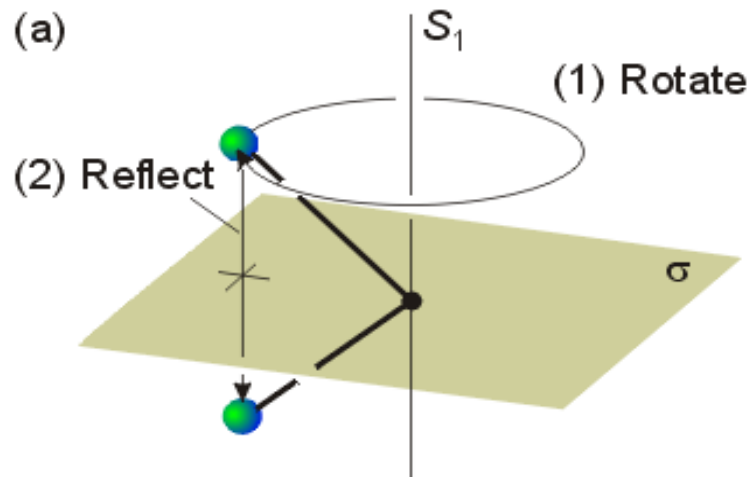




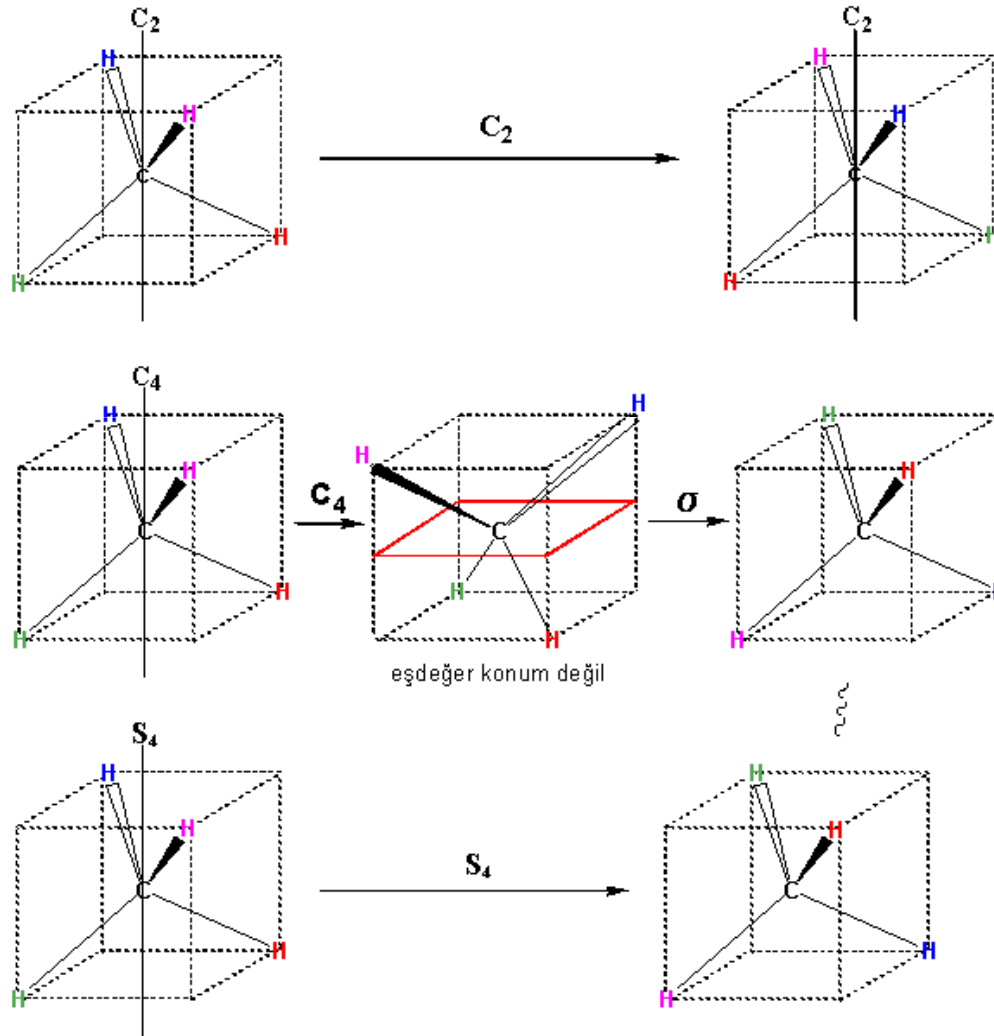


## ***Dönme-Yansıma İşlemi ( $S_n$ ):***

Dönme-yansıma işlemi, ard arda uygulanan iki işlem içerir. Molekül bir eksen etrafında  $(360/n)^\circ$  lık açı ile döndürülür ve daha sonra alınan eksene dik düzlemden yansıtılır. Kullanılan eksen ve düzlem molekülün simetri elemanı olmayabilir. Bu işlemler sonucu eşdeğer yönelme elde edilir. Burada kullanılan simetri elemanına dönme-yansıma elemanı denir ve  $S_n$  ile gösterilir.  $S_n$  işlemi ard arda uygulanan iki işlem içerdiğinden  $S_n = C_n \cdot \sigma$  bağıntısı ile verilir.



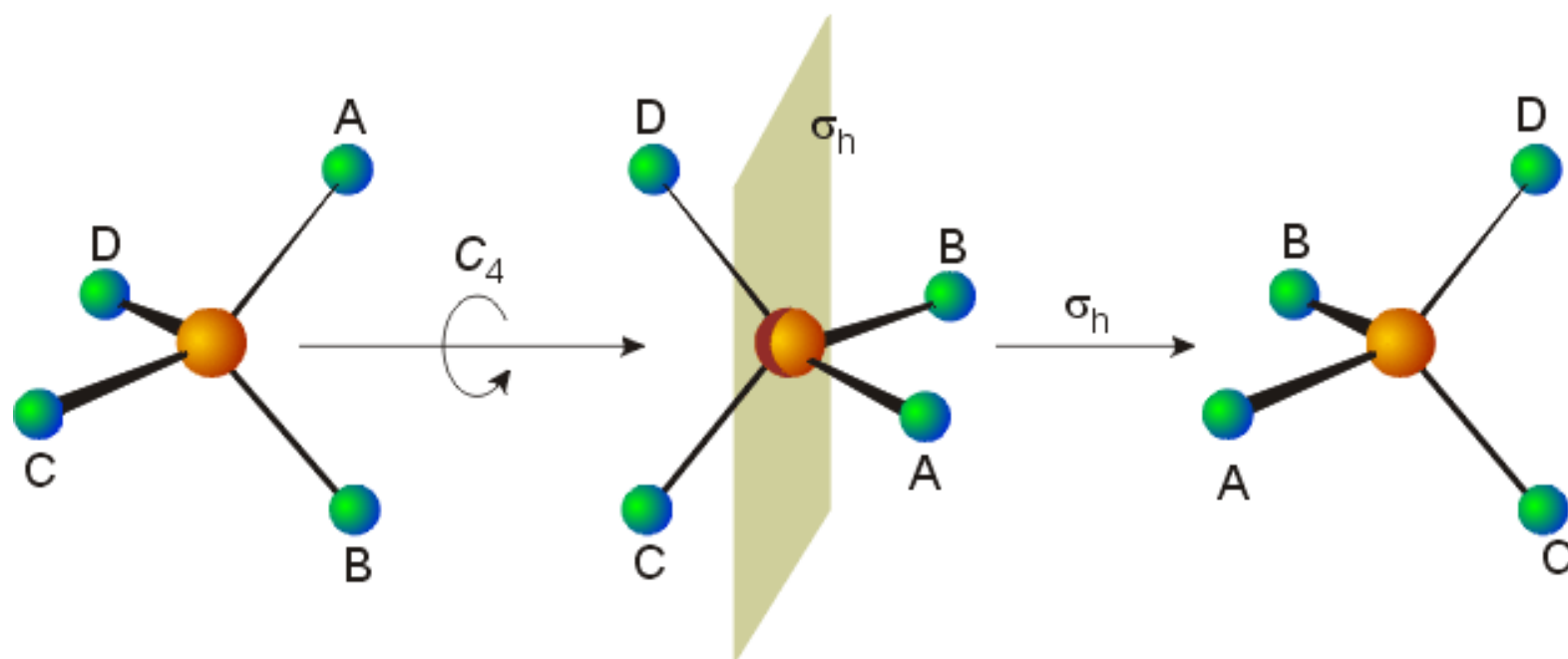
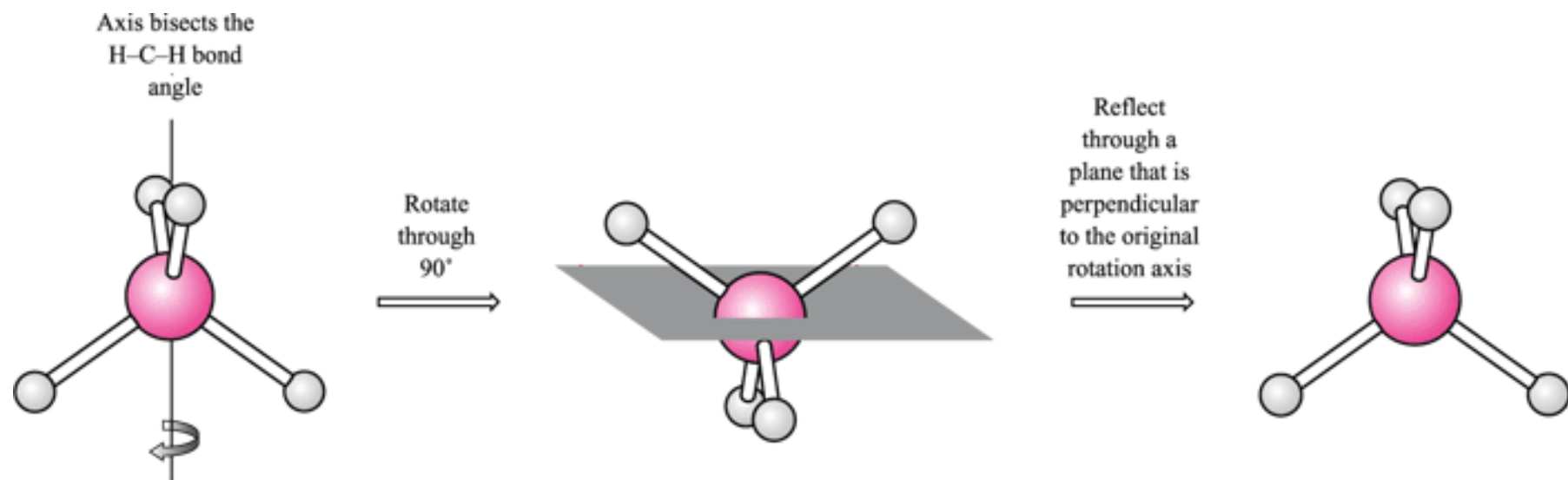
$n > 2$  olmak üzere ana simetri eksenine dik  $n$  tane  $C_2$  içeren moleküller  $S_n$  elemanına sahiptir.



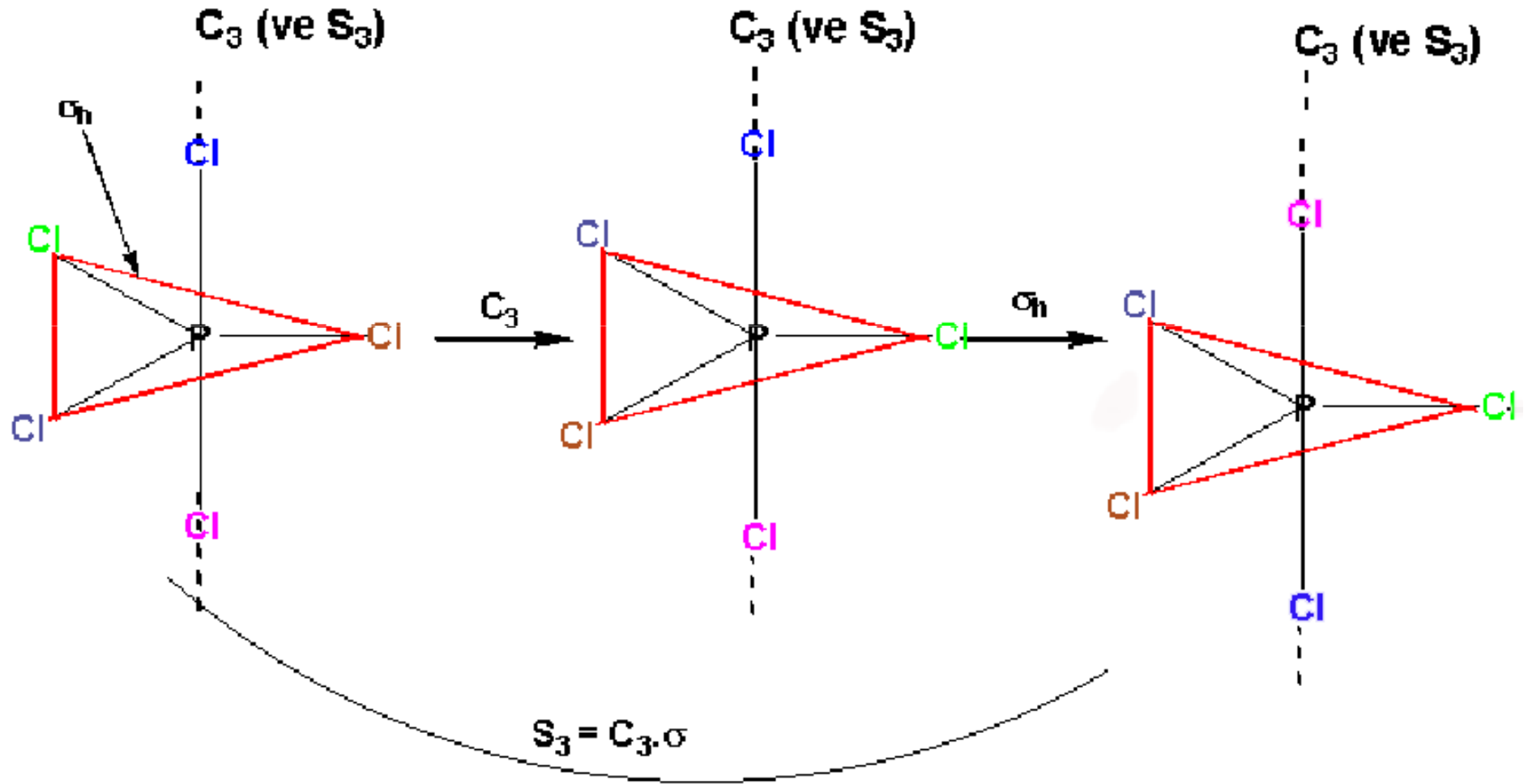
$CH_4$  molekülünde,

◆  $C_2$  eksenini aynı zamanda  $S_4$  eksenidir.

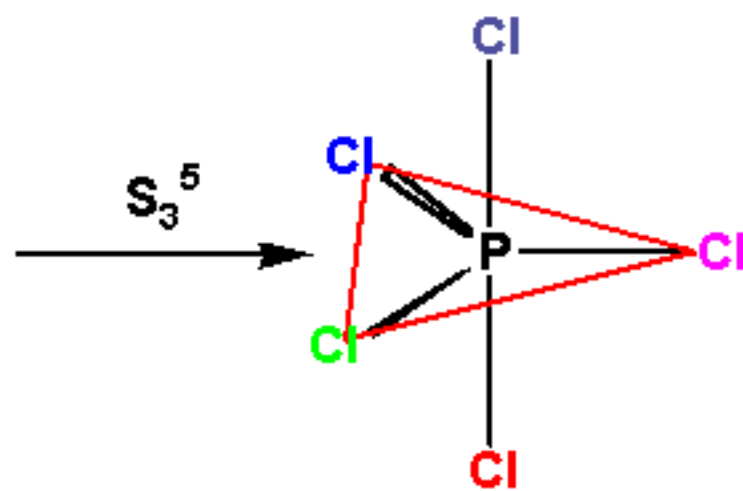
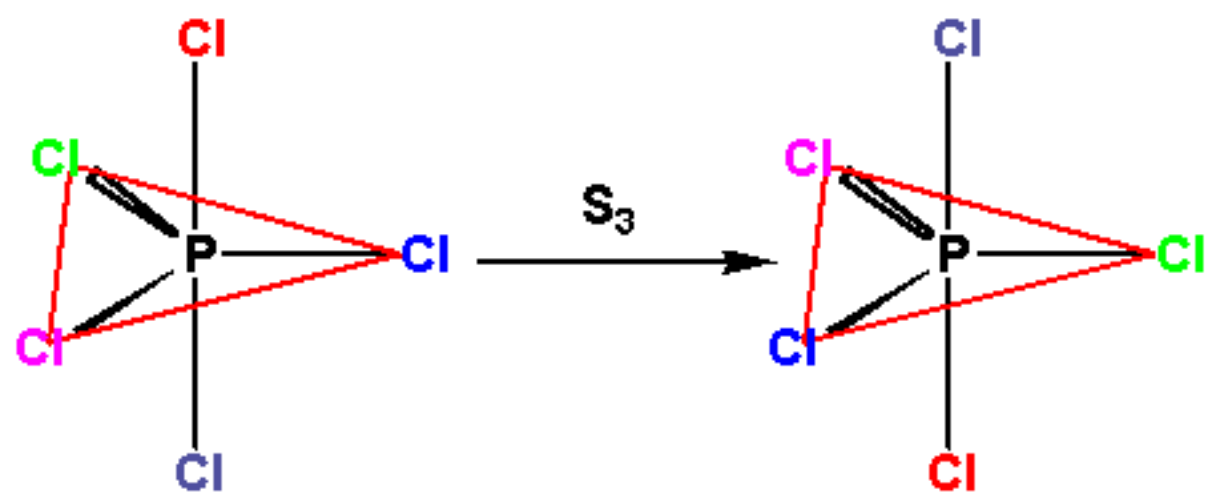
◆ molekülde  $C_4$  eksenini yoktur.

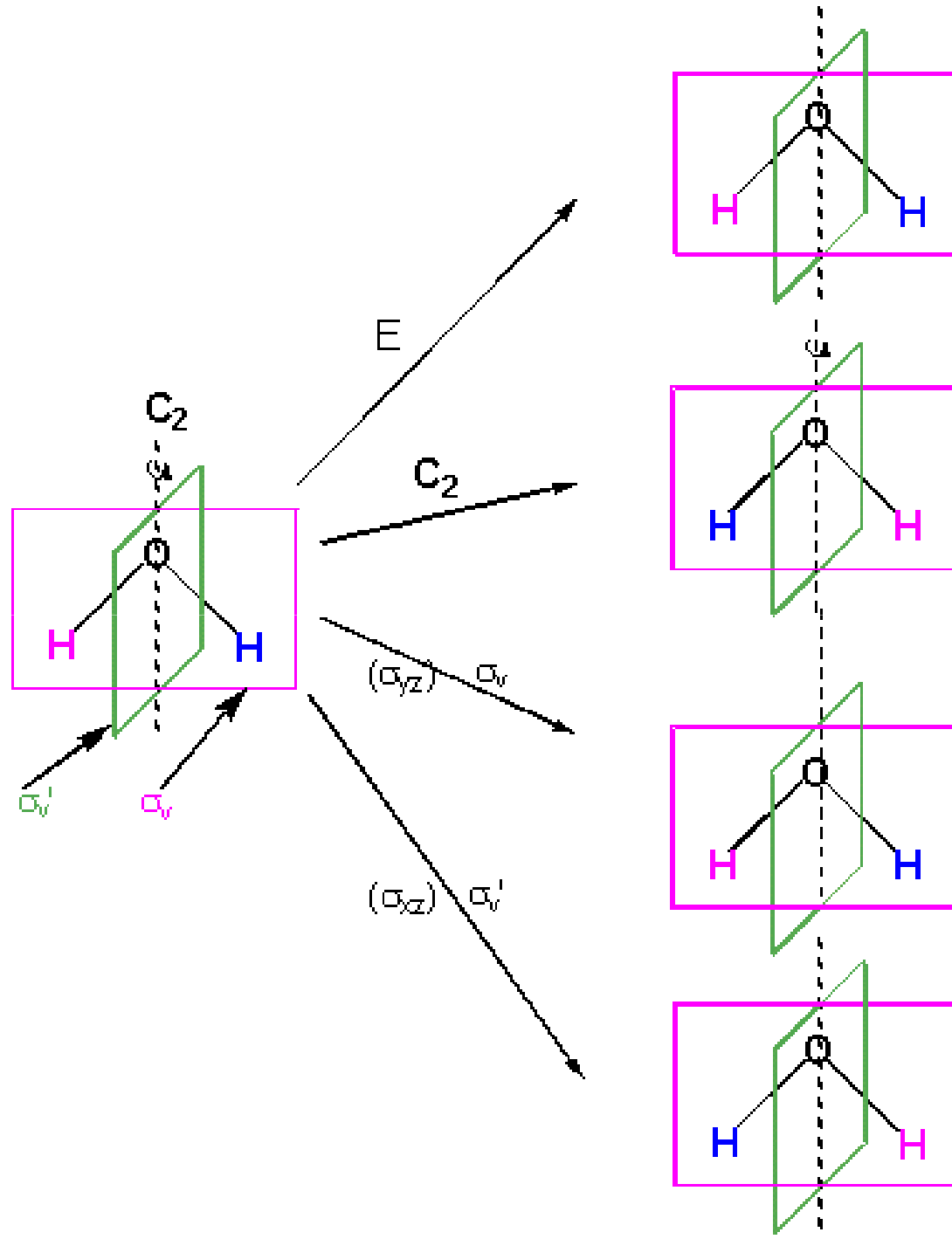


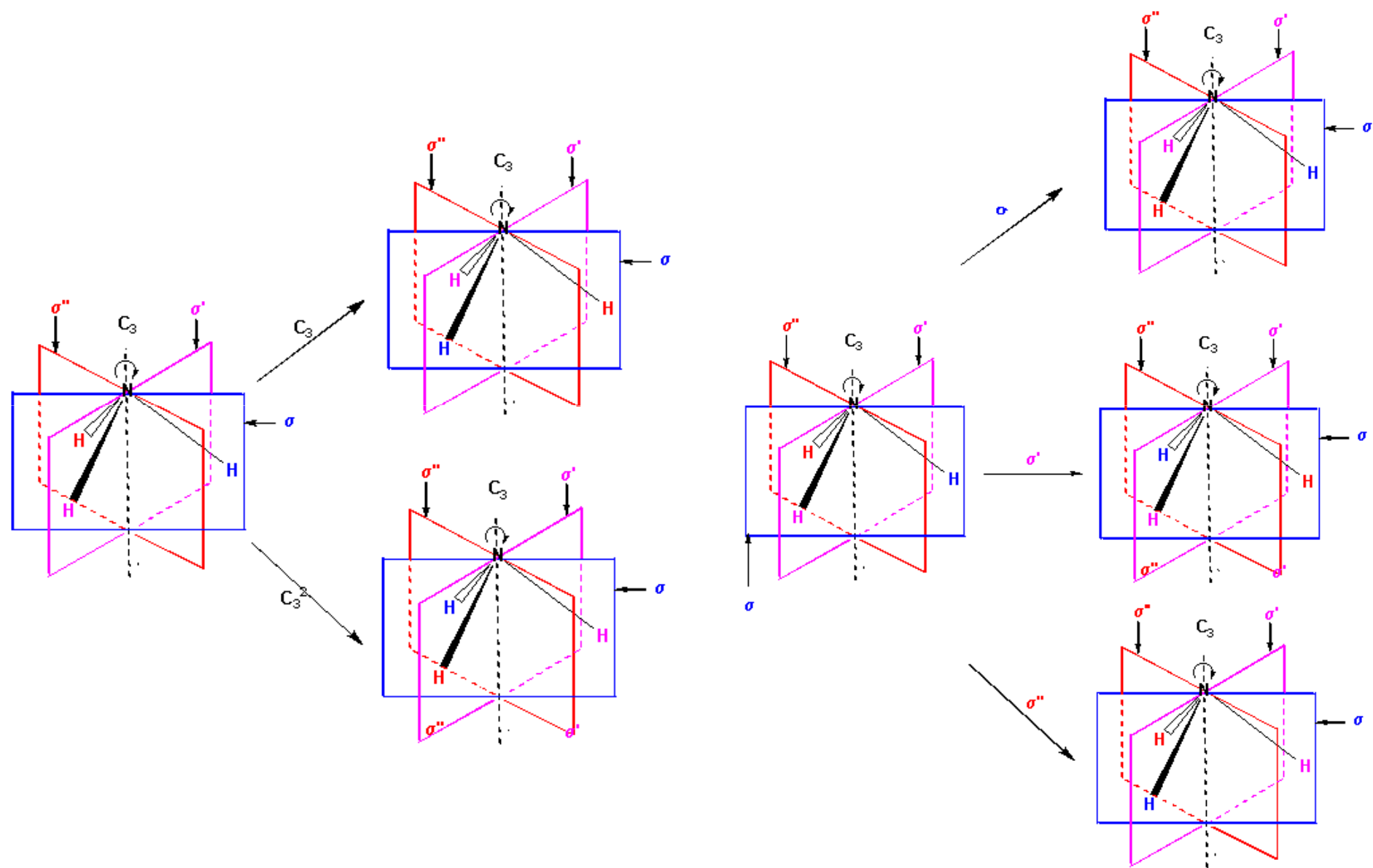
$$S_3 = C_3 \cdot \sigma_h$$



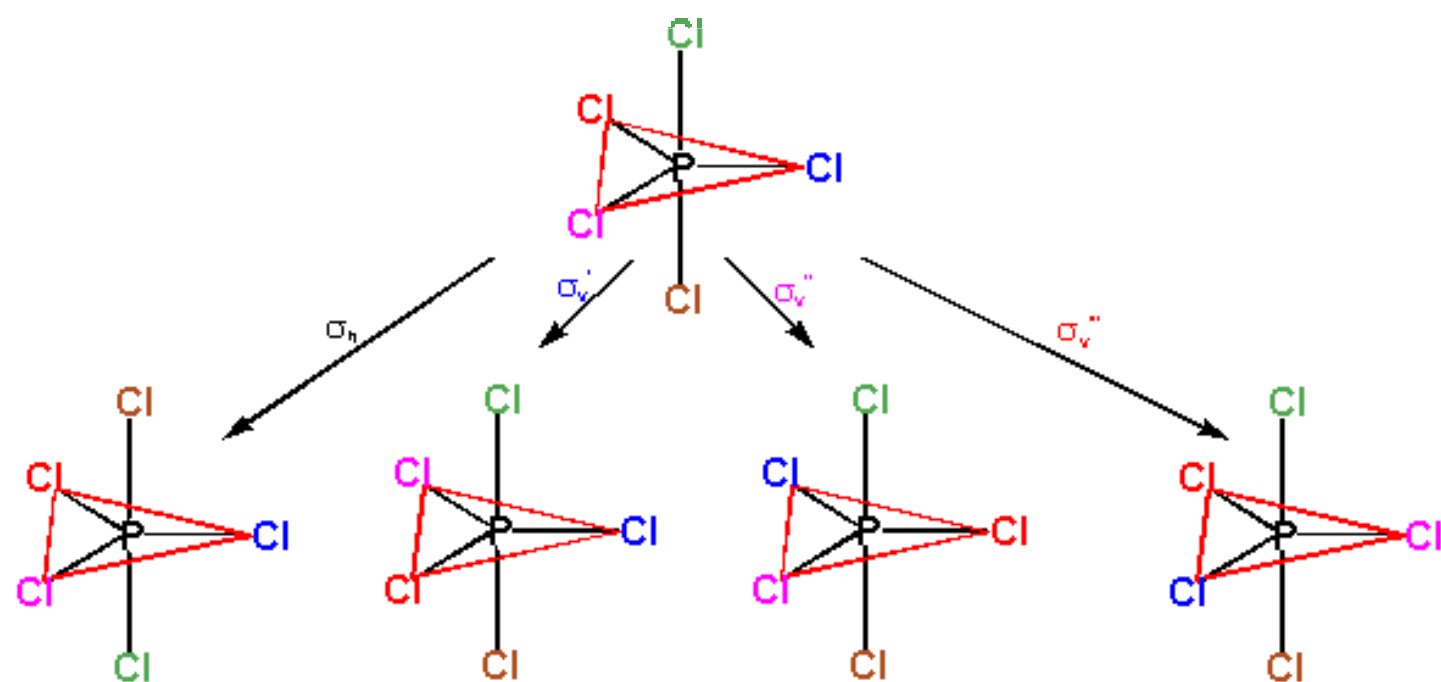
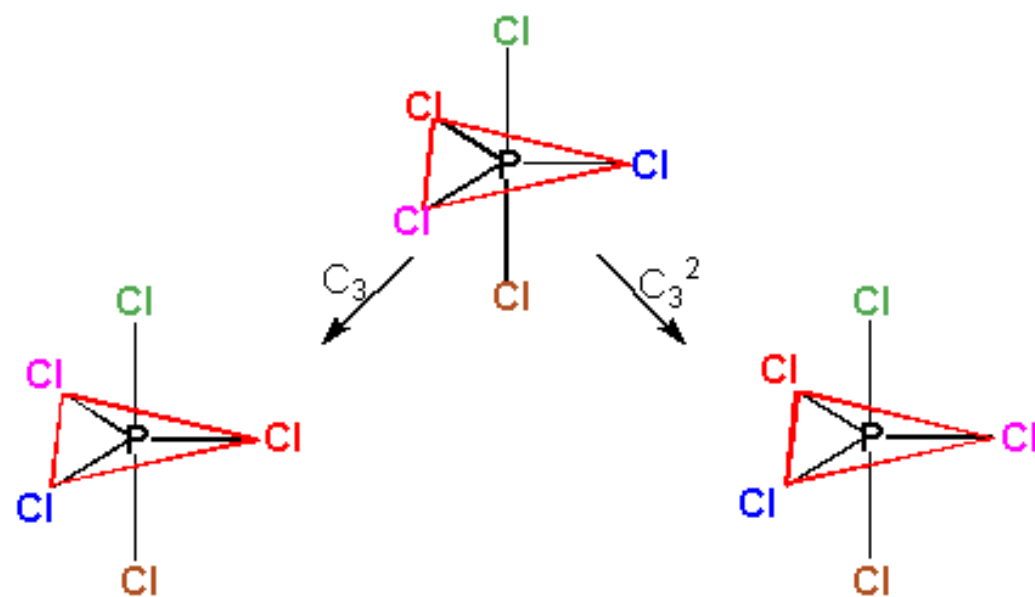
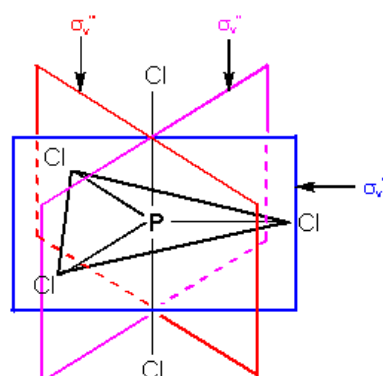
$PCl_5$  molekülünde  $C_3$  eksenini aynı zamanda  $S_3$  eksenidir.







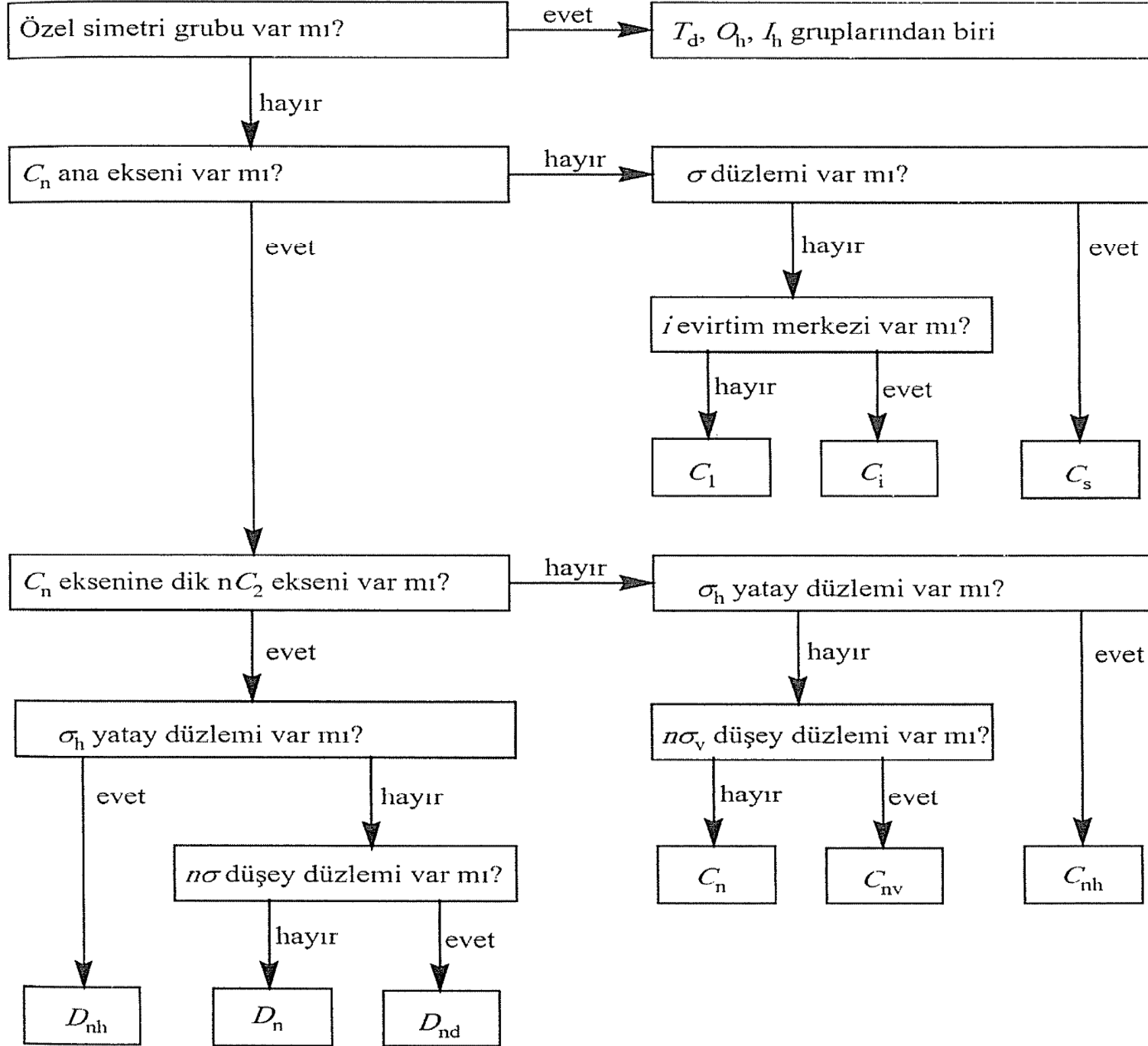




## ***Nokta Grupları:***

Bir molekülün simetri işlemlerinin oluşturduğu kümeye ***simetri grubu*** yada ***nokta grubu*** denir. Örneğin H<sub>2</sub>O molekülünün nokta grubu, E, C<sub>2</sub>,  $\sigma_v$ ,  $\sigma_v^I$  işlemlerinden oluşan bir kümedir. Her nokta grubu için bir simge kullanılır. H<sub>2</sub>O nun nokta grubu C<sub>2v</sub>'dir. Çoğu molekülün nokta grubu verilen şema ile belirlenebilir.

Şemada ilk olarak, molekülün özel bir nokta grubunda olup olmadığı sorulur. Özel nokta grubuna giren moleküller şu şekilde açıklanmaktadır.

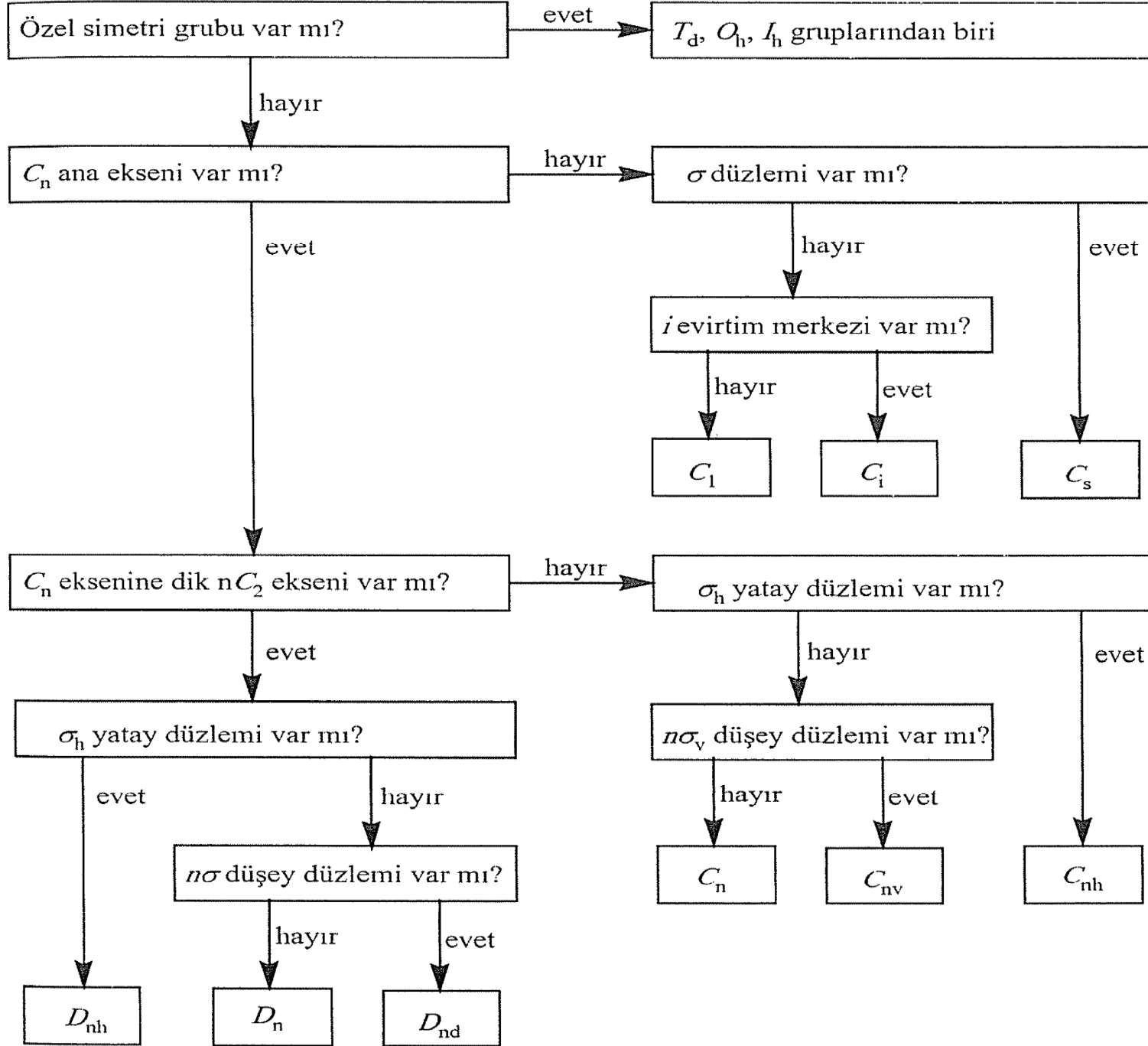


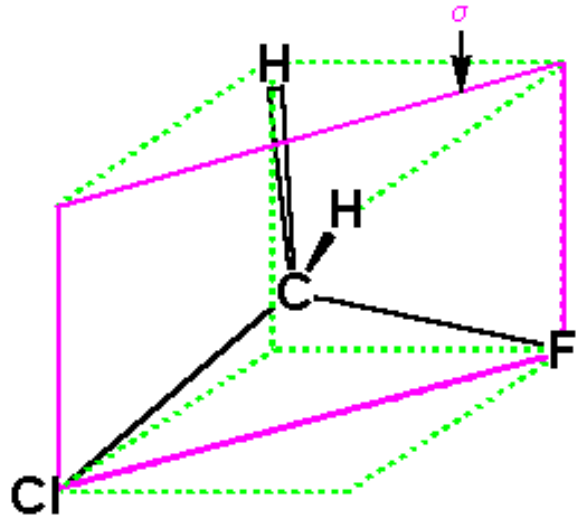
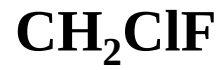
- a) İki atomlu moleküller ve doğrusal moleküller:  $A_2$  ve  $AX_2$  tipi moleküllerin nokta grubu  $D_{\infty h}$ 'dir.  $AX$  ve  $AXY$  tipi moleküllerin nokta grubu  $C_{\infty v}$ 'dir.  $D_{\infty h}$  nokta grubundaki moleküller hem  $\sigma_h$  hem de  $\sigma_v$  içerirken  $C_{\infty v}$  nokta grubundakiler sadece  $\sigma_v$  içermektedir.
- b)  $AX_4$  tipi tetrahedral moleküllerin nokta grubu  $T_d$  dir.
- c)  $AX_6$  tipi oktahedral moleküllerin nokta grubu  $O_h$ 'dir.

Özdeşlik elemanı dışında hiçbir simetri elemanı içermeyen moleküllerin nokta grubu  $C_1$ 'dir. Yani asimetric moleküller  $C_1$  nokta grubundadır. Az sayıda simetri elemanı içeren (düşük simetrik) moleküllerin nokta grupları  $C_i$ ,  $C_s$  ve  $C_n$  dir.

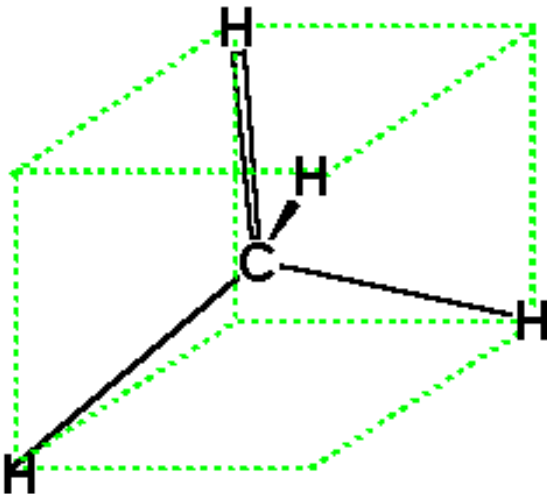
- 1. Düşük simetrlili gruplar
  - sadece E var :  $C_1$
  - simetri düzlemi var:  $C_s$
  - Simetri merkezi var:  $C_i$
- 2. Sadece bir tane simetri eksenine sahip ( $C_n$ )
  - Başka elemanı yok:  $C_n$
  - Artı düşey simetri düzlemleri var:  $C_{nv}$
  - Artı yatay simetri düzlemi var:  $C_{nh}$
  - $C_n$  ile çakışan  $S_{2n}$  eksenini var :  $S_{2n}$
- 3. Bir tane  $C_n$  baş dönme eksenini ve buna dik  $n$   $C_2$  eksenine sahip ( $D_n$ )
  - Başka elemanı yok:  $D_n$
  - Artı  $C_n$  ile çakışan  $S_{2n}$  eksenini var :  $D_{nd}$
  - Artı yatay simetri düzlemi var :  $D_{nh}$
- 4. Yüksek simetrlili gruplar
  - Dört yüz lü (tetrahedral):  $T_d$
  - Sekiz yüz lü (oktahedral):  $O_h$
  - Yirmiyüz lü (ikosahedral):  $I_h$
  - Doğrusal, simetri merkezi yok:  $C_{\infty v}$
  - Doğrusal, simetri merkezi var :  $D_{\infty h}$

- Molekül düşük veya yüksek simetrlili nokta gruplarından mı?
- Molekülün  $C_n$  eksenini var mı?
- Molekül  $C_2 \perp C_n$  sahip mi?
  - EVET ise , molekül  $D$  grubundadır.
  - HAYIR ise, molekül  $C$  veya  $S$  grubundadır.
- Molekül simetri düzlemine ( $\sigma_h$ ) sahip mi?
  - EVET ise, molekül  $C_{nh}$  veya  $D_{nh}$  grubundadır.
  - HAYIR ise, diğer simetri düzlemlerine bakınız.
- Molekül  $C_n$  eksenini içeren simetri düzlemlerine ( $\sigma_v$ ) sahip mi?
  - EVET ise, molekül  $C_{nv}$  veya  $D_{nd}$  grubundadır.
  - HAYIR ve  $D$  grubunda ise, molekül  $D_n$  grubundadır.
  - HAYIR ve  $C$  grubunda ise devam ediniz.
- Molekülde  $C_n$  eksenini ile aynı  $S_{2n}$  eksenini bulunur mu ?
  - EVET ise, molekül  $S_{2n}$  nokta grubundadır.
  - HAYIR ise, molekül  $C_n$ .



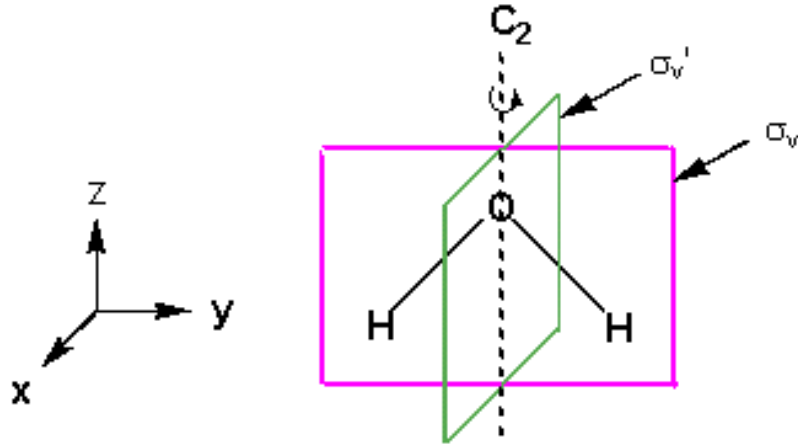


*Bir tane simetri düzlemi bulunur, O halde nokta grubu  $C_s$  dir.*



*Dörtüzlü yapı, nokta grubu  $T_d$  dir.*





1. Bir tane C<sub>2</sub> eksenini vardır (aynı zamanda *baş dönme eksenini*)
2. Baş dönme eksenine dik C<sub>2</sub> dönme eksenleri yoktur.

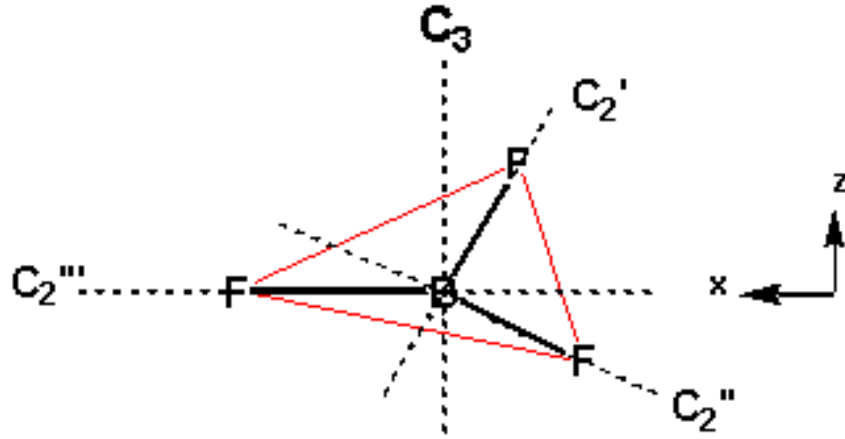
O halde C<sub>2</sub> kümesindedir.

3. Baş dönme eksenine dik σ<sub>h</sub> düzlemi yoktur.

O halde C<sub>2h</sub> grubunda değildir.

4. Baş dönme eksenini içeren 2 tane σ<sub>v</sub> düzlemi vardır.

O halde nokta grubu C<sub>2v</sub> dir.



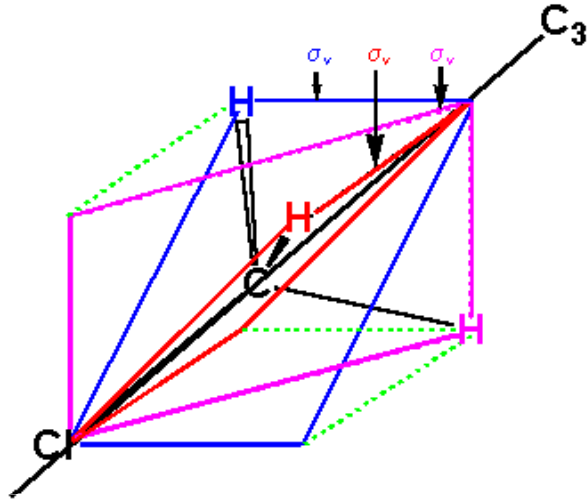
1. C<sub>3</sub> eksenini vardır, baş dönme eksenidir, 3 F atomunu birbirine taşır.

2. Baş dönme eksenine dik 3 tane C<sub>2</sub> dönme eksenini vardır.

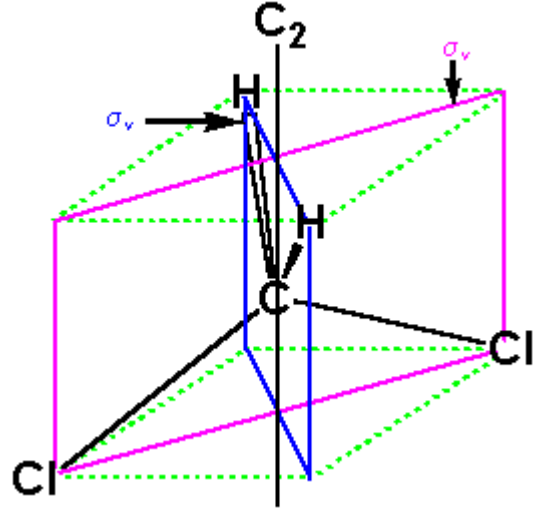
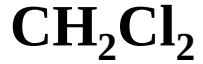
O halde D<sub>3</sub> kümesindedir.

3. Baş dönme eksenine dik  $\sigma_h$  düzlemi vardır.

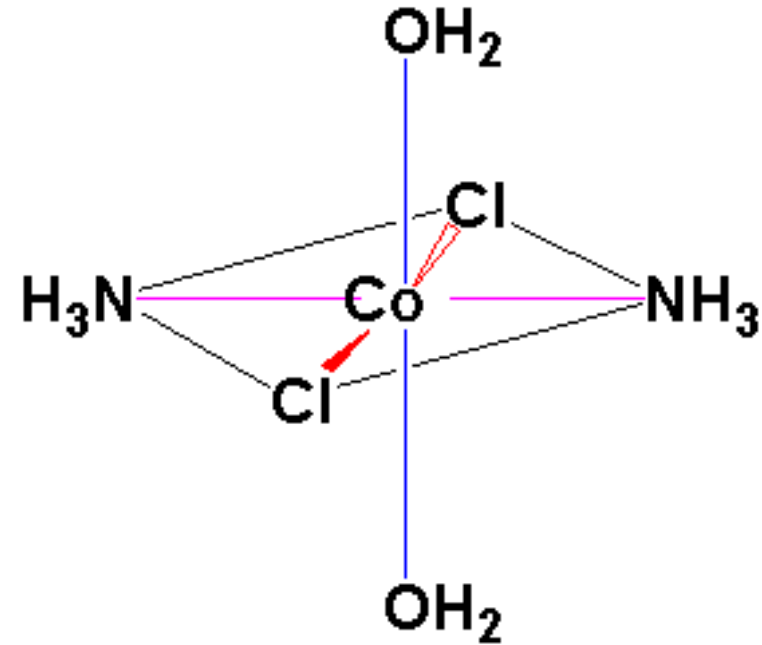
O halde nokta grubu D<sub>3h</sub> dır.



1. Bir tane  $C_3$  eksenini vardır, üç tane H atomunu birbirine taşır, *baş dönme eksenidir*.
2. Baş dönme eksenine dik  $C_2$  dönme eksenleri yoktur.  
O halde  $C_3$  kümesindedir.
3. Baş dönme eksenine dik  $\sigma_h$  düzlemi yoktur.  
O halde nokta grubu  $C_{3h}$  değildir.
4. Baş dönme eksenini içeren 3 tane  $\sigma_v$  düzlemi vardır.  
O halde nokta grubu  $C_{3v}$  dir.



1. İki H atomu ile iki Cl atomunu birbirine taşıyan bir tane  $C_2$  eksenini vardır.
2. Baş dönme eksenine dik  $C_2$  dönme eksenleri yoktur.  
O halde  $C_2$  kümesindedir.
3. Baş dönme eksenine dik  $\sigma_h$  düzlemi yoktur.  
O halde nokta grubu  $C_{2h}$  değildir.
4. Baş dönme eksenini içine alan 2 tane  $\sigma_v$  düzlemi vardır.  
O halde nokta grubu  $C_{2v}$  dir.



1. Üç tane C<sub>2</sub> eksenini vardır, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O ve Cl atomlarını birbirine taşır, (bunlardan biri baş dönme eksenini olarak kabul edilir.)

2. Baş dönme eksenine dik 2 tane C<sub>2</sub> eksenini bulunur.

O halde D<sub>2</sub> kümesindedir.

3. Baş dönme eksenine dik  $\sigma_h$  düzlemi vardır.

O halde nokta grubu D<sub>2h</sub> dır.

*Aşağıdaki bileşiklerin nokta gruplarını belirleyiniz.*

