

MIT Açık Ders Malzemeleri
<http://ocw.mit.edu>

5.62 Fizikokimya II
2008 Bahar

Bu materyallerden alıntı yapmak veya Kullanım Şartları hakkında bilgi almak için <http://ocw.mit.edu/terms> ve <http://tuba.acikders.org.tr> sitesini ziyaret ediniz.

5.62 Ders #13 Ek: **Nükleer Spin ve Simetri Sayısı**

$P_{12}\psi = \mp \psi$ tüm eşdeğer tanecik çiftleri için gereklidir. bozon için + , fermiyon için –
(Eşdeğer aynı çekirdek anlamındadır, aynı kimyasal çevre değil.)

$(P_{12})^2\psi = \psi$ her eşdeğer çekirdek gurubu için sadece iki simetri fonksiyonu sınıfı olduğu anlamındadır

örnek, benzen 6H $I_1 = 1/2$ $I = 3,1$ para: dejenerelik $7 + 3 = 10$
4, 2, 0 orto: dejenerasyon $9 + 5 + 1 = 15$
6C $I_1 = 0$ sadece $I_{top} = 0$

$\Psi_{dön}$ 'e göre izin verilen permutasyon simetrikli ψ 'yi kurmak için bağlı ağların örtüşmelerini düşünmemiz gerekir. Örneğin, C_2 simetri operasyonu C çiftleri ve H çiftlerini değiştirir. Ancak permutasyonun C'lere göre çift olması gerekir.

Kaç tane bağlı ağ vardır?

$$\frac{6! 6!}{2 \cdot 6}$$

12'ye bölüyoruz çünkü bu dönmesel olarak ilişkili eşdeğer yapılar nedeniyle fazladan saymadır. 12 simetri sayısıdır.

$q_{dön}$ 'ü, simetri sayısına bölüyoruz, zira bağlı özgün ağların sayısını düzeltiyoruz. Normal olarak bağlı ağların sayısını dahil etmiyoruz, zira bu sadece eşdeğer atomların toplam sayısının bir fonksiyonudur. Atomlar korunduğu sürece bu permutasyon dejenereliği korunur.

Ancak gerçekte benzenin her dönme-titreşim seviyesi $\frac{6! 6!}{12} = 43,200$ kat dejeneredir! Ama bu dejenerelik konusunda asla endişe etmiyoruz zira iç uyarmanın normal seviyeleri için bağlar korunur. Ancak, yüksek uyarımda bağ-kırılma izomerasyonu oluşur.

Bu, molekül için uygun simetri gurubunun “Moleküler Simetri Gurubu” olarak, alt gurubun “Tam Permütasyon İversiyon Gurubu” olarak adlandırıldığı anlamındadır. Alt grup tüm “olabilir” permütasyon ve permütasyon-inversiyonları içerir.