

C_{60} ve SİMETRİSİ

Selâmi PALAZ

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ADANA
KASIM 1996**

Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğüne,

Bu Çalışma Jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

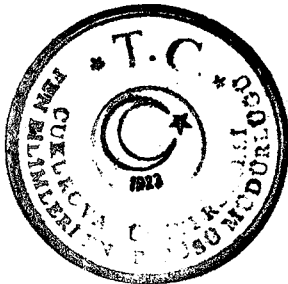
Başkan : Doç Dr. Nazife KOCA

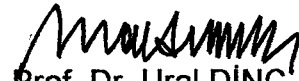
Üye : Doç. Dr. Eda EŞKUT

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ramazan KOÇ

Kod No 1213

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.




Prof. Dr. Ural DİNÇ
Enstitü Müdürü

İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER	i
TABLULARIN LİSTESİ	iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	v
ABSTRACT	vi
ÖZ	vii

BÖLÜM 1

1.1. Giriş.....	1
1.2. Önceki Çalışmalar.....	2

BÖLÜM 2

SONLU GRUPLAR

2.1. Giriş.....	9
2.2. Grup Postulatları	9
2.3. Alt Gruplar	11
2.3.1. Temel Teoremler.....	11
2.3.2. Maximal Alt Grupların Özellikleri	12
2.3.3. Kosetler ve Normal Alt Grupların Özellikleri	13
2.4. Homomorphı Kavramı.....	13
2.4.1. Isomorf Kavramı.....	14
2.4.2. Bir Grubun Otomorfizmi	14
2.4.3. Grup Genişlemesi	14
2.4.3.1. Direkt Çarpım	14
2.4.3.2. Yarı-Dolaysız Çarpım	15

2.5. Grupların Matris Temsilleri	16
2.5.1. İndirgenebilir ve İndirgenemez Temsiller	20
2.5.2. İndirgenemez Temsillerin Özellikleri	21
2.5.3. İndirgenebilir ve İndirgenemez Temsiller Arasındaki İlişki	22
2.6. Eşlenik Sınıflar ve Karakter Tablolarının Oluşturulması	23
2.6.1. Bir Grubun Eşlenik Sınıfları	24
2.6.2. İndirgenebilir Karakterler Üzerinde Bağlıntılar	26
2.6.3. Karakter Tablolarının Oluşturulması	28
2.6.4. Karakter Tablosundan Normal Alt Grubunun Bulunması	31
2.7. Jeneratörler ve Jeneratör İlişkileri	31

BÖLÜM 3

ICOSAHEDRAL SİMETRİ

3.1. Giriş	32
3.2. İcosahedron'un Simetri Grubu	33
3.2.1. Simetri Öğeleri ve Simetri İşlemleri	33
3.2.2. İcosahedron'un Simetri Grupları: Y ve Y_h	35
3.2.2.1. Y Grubu	35
3.2.2.2. Y_h Grubu	36
3.3. C_{60} Molekülünün Geometrik Yapısı	40
3.4. Y 'nin İndirgenemez Matris Temsilleri	41
3.5. Y_h 'ın İndirgenemez Matris Temsilleri	43

BÖLÜM 4

C_{60} MOLEKÜLÜNÜN NORMAL TİTREŞİM FREKANSLARI

4.1. Giriş	44
4.2. Moleküllerin Titreşim Frekansları	44
4.3. Titreşim Frekanslarının Sınıflandırılması	49

4.4. Titreşim Frekanslarının Bulunması.....	52
4.5. Raman Spektra.....	58
4.6. Infrared Spektra.....	60

BÖLÜM 5

SONUÇLAR	64
SUMMARY	65
ÖZET	66
KAYNAKLAR	67
TEŞEKKÜR	71
ÖZGEÇMİŞ	72



TABLolarIN LİSTESİ

2.1 Verilen Bir Grubun Eşlenik Sınıfları	25
2.2 S_3 Grubunun Conjugacy Sınıfları	25
2.3 Bir G Grubunun Karakter Tablosu	26
2.4 Simetrik S_3 Grubunun Karakter Tablosu	29
3.1 Simetri Öğeleri ve Simetri İşlemleri	34
3.2 Y'nin Karakter Tablosu	41
3.3 Y_h 'ın Karakter Tablosu	43
4.1 X Operasyonu Neticesinde Atomların Yer Değiştirmeleri	50
4.2 Y Operasyonu Neticesinde Atomların Yer Değiştirmeleri	50
4.3 İnversiyon İşlemi Neticesinde Atomların Yer Değiştirmeleri	51
4.4 C_{60} Molekülünün Merkezinden Diğer Atomlara Olan Vektörel Uzaklığı	54
4.5 Bir Numaralı Atomun Diğer Atomlara Olan Uzaklığı	55
4.6 Simetri Operasyonu Neticesinde Elde Edilen Baz Vektörleri	57
4.7 C_{60} 'ın Titreşim Modları İçin Hesapladığımız Değerler	58

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

1.1.a C_{60} Molekülü "Footballene"	3
1.1.b İcosahedron	3
2.1 Eşkenar Üçgenin Simetrileri	19
3.1 Y Grubunun Simetri Öğeleri	35
3.2 Y_h Grubunun Simetri Öğeleri	38
4.1 Ozon Molekülünün Normal Modları	48
4.2 CO_2 İçin Titreşme-Soğurma Bandları	63
4.3 H_2O İçin Kırmızı Ötesi Bandlar	63



ABSTRACT

The symmetry structure of C_{60} , the relation between group theory and vibrational frequencies are studied by many physicists.

A force constant model for the vibrational modes in C_{60} is presented. The harmonic potential is adopted for calculating the dynamical matrix. Using symmetries of the molecule, the dynamical matrix which yields the vibrational modes is block-diagonalized. We summarize the role of group theory in specifying the vibrational modes. The results are in excellent agreement with experiments. The 3 dimensional matrix representation of Icosahedral group is constructed.



ÖZ

C_{60} 'ın simetri yapısı, grup teorisi ile olan ilişkisi, elektronik yapısı, titreşim frekansları birçok fizikçi tarafından çalışıldı.

C_{60} 'daki titreşim modları için bir kuvvet sabit modeli sunduk. Hesaplanan dinamiksel matris için harmonik potansiyeli benimsedik. Molekölün simetrisini kullanarak titreşim modları veren dinamiksel matris köşegen hale getirildi. Kesinlik belirten titreşim modlarındaki grup teorisinin rolünü özetledik. Sonuçların, deneysel ve bazı teoriksel sonuçlarla mükemmel bir şekilde uyduğu gördük. İcosahedral grubun 3 boyutlu matris temsillerini kurduk.



BÖLÜM 1

1.1. GİRİŞ

Kristal ve molekül gruplarının, $SO(3)$ ün sürekli grubunun sonlu alt grupları olduğu bilinmektedir. Bunlar "Cyclic" gruplar C_n , "Dihedral" gruplar D_n , "Tetrahedral" grup T , "Oktahedral" grup O ve "Icosahedral" grup Y olarak sınıflandırılmışlardır. Bu gruplar aynı zamanda nokta gruplar olarak bilinmektedir. Adı geçen grupların simetri özelliklerini içeren pek çok molekül ve kristal mevcuttur. Yalnız bunlardan "Icosahedral" simetriye sahip molekül ilk defa 1985 yılında gözlenmiştir [10]. Bu molekül, son yıllarda, üzerinde çok çalışmalar yapılmış olan C_{60} molekülüdür.

C_{60} molekülü ilk defa 1991 yılında katı olarak elde edilmiştir. Bu molekül içine herhangi bir katkı yapıldığı zaman yalıtkan, alkali metallerle birleştiği zaman birleşme oranına bağlı olarak iletken veya yarı iletken olmaktadır. Yine Alkali metallerle birleştiği zaman düşük sıcaklıklarda (30 °K) süper iletken olmaktadır bu elektronik yapı bir çok bakımdan ilgi çekicidir. Özellikle iletken formu yarı iletkenler üzerine kolayca ince silim yapıldığından ve yarı iletkenin yüzey yarı iletkenin yüzey yapısını çok fazla etkilemediğinden, mikro elektronik endüstrisinde aranan bir malzemedir.

Öte yandan Icosahedral simetriye sahip ilk molekül olması sebebiyle fizikçilerin ilgisini çekmektedir. Bilinen molekülde içinde en fazla simetriye sahip olanıdır. Fiziksel gözlenebilirlerin hesap edilmesinde, fiziksel sistemin bir simetriye sahip olması problemi çok basit bir hale getirmektedir. Bu nedenle, özellikle bir fiziksel sistemin simetrisi doğru olarak tespit edilmelidir.

Bu çalışmada temel olarak iki konu ele alınmıştır. Bunlardan birisi C_{60} molekülünün simetrisi, diğeri ise bu simetri kullanılarak bazı fiziksel gözlenebilirlerin hesap edilmesidir.

Çalışmamız şu şekilde organize edilmiştir. Birinci bölümde, özellikle C_{60} ile ilgili önceki çalışmalar kısa değerlendirmelerle ele alındı. İkinci bölüm ikide grup

postulatları ve sonlu grupların teorik kavramlarını içermektedir. Bu bölümü grup teorik bir sözlük olarak nitelendirebiliriz.

Üçüncü bölümde $SO(3)$ grubunun sonlu alt grubu olan Icosahedral grubunun matris temsilleri elde edildi. Ayrıca Icosahedral grubun duali olan dodecahedron grup, bunların simetri grupları, simetri öğeleri ve simetri işlevleri incelendi.

Dördüncü bölümde matris temsillerinden yararlanılarak C_{60} molekülünün titreşim enerji seviyeleri ile kuvvet sabitlerinin sınıflandırılması ele alındı.

Beşinci bölümde sonuçlar verilmekte ve ilerki çalışmalar için öngörüler verilmektedir.

1.2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR:

C_{60} molekülü ilk defa 1985 yılında gözlenmiştir Icosahedral simetriye sahip tek molekül olması sebebi ile üzerinde yoğun çalışmalar yapılmıştır. 1985 yılında gözlenen C_{60} molekülü 1991 yılında elde edilmiştir. Bu nedenle 1991 yılına kadar pek çok teorik çalışma yapılmıştır. 1991 yılından sonra deneysel çalışmalar yoğunluk kazanmıştır.

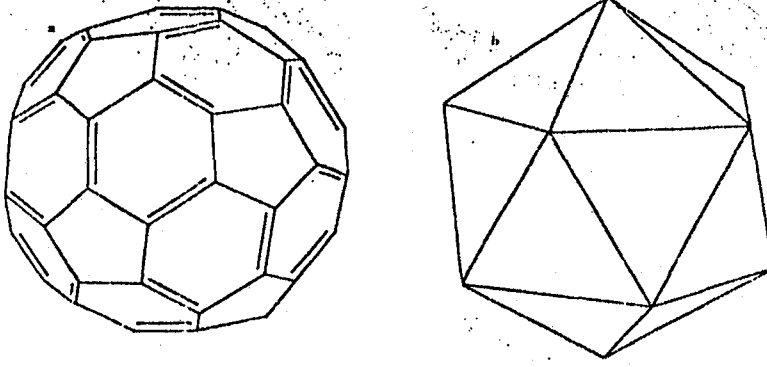
Bu bölümde, çalışmamızda faydalandığımız ve daha sonraki çalışmalara ışık tutacak makalelerden bahsedeceğiz.

Çalışmamızın temelini oluşturan ve C_{60} 'ın süper iletkenlik özelliklerinin belirlenmesinde önemli rol oynayan ,titreşim enerji seviyeleri bulunması ile ilgili çok sayıda yayın vardır. Bu yayınlar aşağıdaki şekilde ele alınmıştır.

1985 yılında A.D.J. Haymet C_{60} molekülü için ilk teorik düşüncayı sunmuştur [10]. Buna göre oluşturulan molekülde her bir C atomu sp^2 hibritleşmesi yapar ve diğer üç C atomu ile bağlıdır. Bundan dolayı C_{60} hidrojen içermeyen bir alken gibi olup grafitin küresel kabuğuna yaklaşıp.

12 pentagonal 20 hexagonal halkalı her yapı gerekli kimyasal bağlanma ile meydana gelir ve şekilde görüldüğü gibi, aşağı-yukarı bir küresel molekül teşkil eder.

Pentagonal halkalar hexagonal halkalar cinsinden olmayan noksan benzetmeler gibi görülebilir. (C_{60} molekülünün hexagonal halkaya benzemediğine dair görüşler olabileceğini ifade ediyor.) En fazla olabilir simetrik yapısı yassı (tepesi kesik) Icosahedron'dur (Şekil 1.b). Kolaylık için bu molekül "footballane" olarak adlandırılır (Şekil-1.a). Her bir C atomu bütün diğer C atomlarına eşittir.



Şekil (1.a): C_{60} molekül "Footballene"

(1.b): Icosahedron

Smalley ve çalışma grubunun yaptığı hesaplamalardan sonra kütle spektrumundaki büyük tepe veren deney sonuçları ile uyumlu C-baloncuklarının bulunduğunu gözlediler. C bileşiğinin bu yapısı grafitte göre kapalı olan aşağıdaki yapı gibi düşünülebilir. Bu yapı pentagonal halka çiftlerine bağlı 6 tane C atom çifti ile birleştirilmiş olup bir tanesi etrafında 6 tanesi simetrik olarak dizilmiş 7 tane hexagonal halkanın iki tabakasından oluşmuştur. Yapılan çalışmalar böyle bir yapının kararlı olabileceğini göstermiştir.

Küresel görünüşlü ve kafes yapılı olan C_{60} molekülü deneysel yöntemle ilk kez 1985 yılında lazer pulsu ile buharlaştırılan grafit içindeki C demetleri incelenirken gözlemlendi. Moleküle ad olarak verilen " C_{60} Buckminster fullerance" başlığı ile yayımlandı [20]. Bu ad, kubbe şeklindeki mimarî yapıların profil demirleri kullanılarak çatılmasını sistematik bir şekilde incelemiş; mimarlık ve mühendislik hesaplarını yapmış olan Amerikalı mimar Buckminster Fuller'in anısına verilmişti. Sonradan "Buckball C_{60} " şeklinde kısaltıldı ve bu isim altında yaygınlaştı.

Kimyasal açıdan bakıldığında bu molekül, C'nun bilinen grafit ve elmas yapısının dışında üçüncü bir allotropunu oluşturuyor ve yepyeni bir inceleme ve araştırma sahasının kapılarını açıyordu.

Sonradan yürütülen çalışmalarda benzer yapıda çok sayıda başka molekülün var olduğu anlaşıldı. Bu sebeple sadece C atomlarından kurulu, kafes yapılı, kapalı, üç boyutlu moleküllerin kümesine fulleren ailesi ismi verildi.

1975-1978 yılları arasında yapılan radyoastronomik çalışmalarda kızıl C yıldızları oluşabileceği düşünüldü. Öne sürülen bu iddianın ispatlanabilmesi için bu yıldızların yeryüzünde taklit edilmesi, yani C_{60} molekülünün oluşması sırasında C atomlarının içinde bulunmaları öngörülen ortamın benzerinin laboratuvar şartlarında sağlanması gerekiyordu [19].

Yıldızlar arası uzayda ve yıldızların çevresindeki halkalarda gözlenmiş olan karbonlu, zincir yapılı, uzun moleküllerin oluşum mekanizmalarını almaya yönelik deneyler, Nd-YAĞ lazerinden ikinci harmonik üretme tekniği ile elde edilmiş olan, 532 nm dalga boylu yaklaşık 30 mJ enerjili, çok kısa süreli ışık pulslarının saf grafit üzerine odaklanması ile yapılmıştır ve bunlar uçuş süresine ayarlı bir kütle spektrometresi yardımıyla incelenmiştir.

Buharlaşıma sırasında meydana gelen demetlerin kütle spektrumları incelendiğinde 720 atomik kütle birimi kütleyle sahip, 60 adet C atomundan oluşması gereken, oldukça kararlı bir yapı ile karşılaşıldı. Araştırma ekibi demetleşme şartlarını kontrol etmek suretiyle 720 atomik kütle birimine karşılık gelen sinyali komşu sinyallerin 40 katına kadar çıkarabilmişti. 60 tane C atomunun hangi dizilişte kararlı bir yapı oluşturabileceğini araştıran ekip, 12'si düzgün eşken, 20'si düzgün altıgen olmak üzere düzgün beşgen ve altıgenlerden kurulu, 60 köşeli 90 ayrıtlı ve bir 32 yüzlünün kapattığı molekül modelini tez olarak ortaya attı.

Bu yapı, dikiş yerlerinden düzgünce kesilmek suretiyle küre kabuklarından arındırılmış ve ayrıntılarının kesim noktaları olan köşelerine birer C atomu yerleştirilmiş bir futbol topuna çok benziyordu. Molekülü meydana getiren bu

şekildeki C atomlarının her biri, grafit yapısında olduğu gibi komşu atomlarla birisi çift, ikisi tek olmak valans bağlarla bağlanarak aromatik yapıyı sağlıyordu.

Amerika'nın Arizona Üniversitesi Fizik Bölümü ' ile ortaklaşa çalışan Almanya'nın Max-Planck Çekirdek Fiziği Enstitüsünde bir ekip ise şunları gözledi. 100 torr asal gaz basıncı altında elektrikle ısıtılan saf grafit çubuklarının fotospektrometrede incelemeye yetecek miktarda bu molekülden meydana geliyordu [18].

R.A. Jishi ve çalışma arkadaşları C_{60} 'ın titreşim frekanslarını elde etmek için yedi kuvvet sabiti içeren bir model üzerinde çalıştılar. Bu sabitleri deneysel sonuçlardan yararlanarak tespit ettiler. C_{60} 'daki titreşim modları için bir kuvvet sabit modeli bağ genişlemesine ve açılı eğme etkileşimlerine dayandığını gösterdiler. Bu modelin sonuçlarını nötronun elastik olmayan saçılma ölçümleriyle yüksek çözünürlü elektron-enerji kaybı spektroskopileriyle ve İnfrared, Raman'dan elde edilen mevcut veriler ile karşılaştırdılar. Deney ve hesaplama arasında mükemmel bir sonuç buldular [15].

Benzeri bir çalışma J.L. Feldman ve çalışma arkadaşları tarafından yapılmıştır. Bunlar C_{60} 'ın titreşim frekanslarını elde etmek için altı kuvvet sabiti içeren bir model üzerinde durdular [7].

A.A. Quong ve çalışma grubu Fullerene Molekülü'nün atomlar arası kuvvet sabit tensörünün ilk prensiplerinin bulunması ile ilgili bir çalışma yapmışlardır. İlk prensiplerden C_{60} , Fullerene molekülünün Hession kuvvet sabit tensörünü hesapladılar. Bütün elektron yoğunluk fonksiyonel kodlarından bütün atomlar üzerindeki kuvvetleri tek bir atomun çeşitli yer değiştirmeleri için hesapladılar. Kullanılan sonlu farklar ve molekülün simetri işlemleri, tam matrisi (full matris) belirledi. Dinamiksel matrisin diagonalizasyonu deney ile tartışmadaki titreşim modlarını verir. Kuvvet sabit tensörünün cinsi ve sırası gösterilmiş olmalıdır. Herhangi kuvvet-sabit modeli, atomların kabukları altı ve yedi kuvvet içermeli [25].

G.B. Adams ve çalışma arkadaşları reel uzay kuantum moleküler dinamiğinin birinci prensibinin kullanılması ile Icosahedral C_{60} 'ın normal modlarını ve yapısını hesapladılar. Temel haldeki birçok elektronun enerjisi ve atomik kuvvetler her bir atomik durum için hesaplandı ve bu sonuçları, modların moleküler dinamik hesaplamalarında kullanıldı. Birinci derece raman aktif ve infrared aktiften birinin 14 modu üzerinde çalıştılar. Deneysel sonuçlarla hesapladıkları frekans modunu karşılaştırdılar. Serbest parametre kullanmadan modlara bağlı ölçülen değerlerin %4 ile %16 arasındaki frekasları hesapladılar [1].

Alkali metallerle dop edilen C_{60} ve C_{60} 'daki örgü modlarının simetrisi üzerinde G.Dresselhaus ve ekibi çalışmıştır. Alkali metal ile dop edilen C_{60} ve C_{60} 'daki raman saçılma spektroskopisinin yeni yapılan deneysel gözlemlerinin açıklanması ile ilgili grup teoriksel analizi gösterdiler. Grup teoriksel analizini, kübik grup T_h ile izole edilmiş C_{60} molekülünün Icosahedral nokta grup simetrisi indirgenerek iki uzay grubunun kullanılmasını yaptırdılar. Fullerenin fcc(yüzey merkezli kübik) durum için uzay grubu T_h^6 dir ve C_{60} 'ın düşük sıcaklık katı fazına karşılık gelir Katı M_6C_{60} için bcc durum T_h^5 uzay grubu ile tutarlıdır. Burada M alkali metaldir. Simetri, dop edilmiş alkali metal metaryali için düşünüldü. Deneysel raman spektrumu, fullerene molekülü için T_h simetrisine bir simetri kırılması ile tutarlı çizgi saçılmalarını gösterdi. Bununla birlikte deneysel olarak gözlenmiş polarizasyon seçim kuralları, kübik simetri dışında, bir simetri kırılmasını gösterdi [5].

Y.O. Nakamura ve çalışma arkadaşları alkali metallerle dop edilmiş fullerenlerdeki süper iletkenliğindeki atomlar arası titreşim modlarının rolleri üzerinde çalıştılar. Alkali metallerle dop edilen fullerenlerdeki süper iletkenlik çeşitli deneyleri bir görüş olarak destekler. Basit Eliashberg analizinden atomlar arası modlar ile elektronların güçlü bağlanmalarını aynı zamanlı tünel açma deneylerindeki ölçülen aralık ve süper iletkenlik geçiş sıcaklığının her ikisinin açıklanmasının gerekli olduğunu gösterdiler. $\Delta(\omega, T)$ aralık fonksiyonundan hesaplanan NMR (Nükleer manyetik rezonans) oranı bu modellerele çözüldü. Bu metaryaldeki uygun olmayan fitler gözlemlendiğinden dolayı NMR sonuçları daha iyi açıklar [22].

W. Krätschmer kapalı kafes yapıları karbon moleküllerini Fullerenes olarak adlandırdı. Bunlardan futbol topu şeklindeki C_{60} Buckminsterfullerene çok simetriktir. Fullerenes ve fullerites tanımlandı ve bunların özelliklerini gösterdi [17].

A. Graja ve R. Swietlik bazı C_{60} bileşiklerinin IR spektrumunun sıcaklıkla ilişkisi üzerinde çalıştılar. C_{60} FTIR spektrumu sıcaklığa bağlı ve çeşitli kompleksler, spesifik olarak seçilmiş bileşikler 80-340 K sıcaklığında ölçtüler. Integral şiddeti ve dört çok şiddetli C_{60} bandlarının zayıf dalga sayısı, sıcaklık bölgesinde faz geçişindeki değişimleri buldular. IR parametrelerinin gözlenen özellikleri dönme titreşim ilişkisini verdi. Sonuç olarak dop edilmemiş C_{60} 'ın IR aktif bandlarının dolu kümesinin ve dört bileşenin sıcaklığa bağlılığını gösterdi [8].

M. R. Pederson ve A. A. Quong izole edilmiş fullerene moleküllerinin titreşim modları ve yük durumları, polarizasyonları hakkında bir çalışma yaptılar. Çalışmalarında izole edilmiş C_{60} molekülleri üzerinde yoğunluk fonksiyon temelini hesaplamak için lokal orbital baloncuk kodlarını kullandılar. Spin polarizasyonu ve yük indüklenmesinin geometriksel ilgisinden dolayı bütün etkileri içeren birinci ve ikinci elektron ilgilerini gösterdiler. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımından dolayı etkiler anlatıldı. İki A ve tek A titreşim modlarını gösterdiler ve yüklenmeden dolayı frekans değişimlerini tahmin ettiler. Değişen kuvvetin statik elektrik alanındaki fullerene moleküllerine yerleştirilmesi ile moleküler statik polarizasyonları elde ettiler. İzole edilmiş karbon atomlarının karşılaştırılmasında, Fermi seviyesindeki dekolize olmuş elektronlar nedeni ile lineer polarizasyonlardaki artmaları buldular. Fulleren polarizasyonundan ve yük transferinden dolayı etkilerle uzun menzil etkileşimleri için sebebini belirten bir basit potansiyelle karşılaştılar ve alkali-dopant konsantrasyonunu bir fonksiyon gibi Hubbard parametrelerini tahmin ettiler [24].

Susumu Saito ve Atsushi Oshiyama fcc C_{60} kristali katı karbonun yeni bir şeklinin elektronik yapıları ve bir mekanizma özelliği, mikroskopik toplam enerji hesaplamalarını sağladığını gösterdiler. C_{60} baloncuklarını buldular ve fcc C_{60} 'ın neticesi Brillion-zone sınırındaki 1,5eV'un direk enerji aralığı ile yeni bir yarı iletken. Ayrıca kirliliği bulurlar [26].

R. A. Jishi ve M. S. Dresselhaus yapmış oldukları çalışmalarda alkali metaller ile dop edilen C_{60} kristalindeki raman aktif modlarındaki yük transferinin etkisi tartılar. Özellikle, C_{60} molekülündeki alkali metal atomlarından yük transferi teğetsel titreşim modlarının mod yumuşamalarını gösterirken deneylerdeki tartışmalarda A_g modu pekiştiğini gösterdiler [14].



BÖLÜM 2

SONLU GRUPLAR

2.1. Giriş

Bu bölümde daha sonraki uygulamalarımızda gerek olabilecek bazı ilgili sistemlerin ve sonlu grupların temel özellikleri ile başlayacağız. Sonlu matris grupları ve onların uygulamaları bu çalışmanın temelini kapsar.

2.2. Grup Postulatları

Bir fiziksel sistemdeki simetri dönüşümleri bir set oluşturur. Matematiksel bir yapıya sahip olan bu set grup özellikleri taşır. Zaman ve uzaydaki ötelemeler, dönmeler ve fiziksel sistemlerdeki bir çok simetri dönüşümleri grup özelliklerine sahiptir. Simetriler matematiğin bir kolu olarak grup teori kullanılarak tanımlanır. Genel olarak bütün gruplar aşağıda verilen dört özelliğe sahiptir.

i) Kapalılık Özelliği :

Grubun herhangi iki elemanın artarda etkisi grubun içinde her hangi bir elemanın etkisine eşittir. Grup, çarpma altında kapalıdır.

$$(g_1 \in G, g_2 \in G) \Rightarrow g_1 \cdot g_2 \in G \quad (2.1)$$

ii) Birleşme Özelliği:

G grubunun elemanları çarpma altında birlikte birleştirilir. Grubun elemanları birleşme özelliğine sahiptir. Örneğin üç elemanın artarda etkisinin sonucu ilk ikisinin etkisinin bileşik değerinin alınmasıyla değişmez. Yani ,

$$g_1(g_2g_3)=(g_1g_2)g_3, \quad g_i \in G \quad i=1,2,3 \quad (2.2)$$

iii) Birim Eleman

Grubun elemanları içerisinde sadece ve sadece aşağıdaki özelliği sağlayan g_0 gibi bir birim eleman vardır. Birim eleman grubun etkisiz elemanıdır. Grubun diğer elemanlarına etkideğinde yine elemanın kendisini verir.

$$g_0 g_i = g_i g_0 = g_i, \quad g_0, g_i \in G \quad (2.3)$$

iv) Ters Eleman:

G Grubun her g_i elemanı için bir g_i^{-1} ters elemanı vardır. Gruptaki her ters eleman tersi ile çarpıldığında birim elemanı verir, yani,

$$g_i g_i^{-1} = g_i^{-1} g_i = 1 \quad (2.4)$$

Eğer grup, sonlu sayıda elemanlara sahip ise **sonlu grup** olarak adlandırılır. Bir sonlu grubun elemanlarının sayısı grubun **mertebesi** (order) olarak adlandırılır ve $|G|$ ile gösterilir. Grubun elemanları sonsuz sayılabilirse, grup, **sonsuz kesikli** grup olarak adlandırılır. Grubun elemanları sürekli formda ise grup, **sürekli** bir grup olarak adlandırılır. Her sonlu grup, $n \times n$ singular olmayan matrislerle temsil edilebilir.

Çeşitli özel gruplar vardır. İlerde kullanılabileceklerin bir kaçından bahsedelim. Eğer grubun bütün elemanları birbirleri ile çarpım esnasında yer değiştirebiliyorsa $(g_i g_j = g_j g_i)$, bu gruba **Abelian** grup denir. Eğer bir grup, bir elemanın tekrarlanan uygulamalarından türetilebiliyorsa bu gruba **cyclic** (devirli) grup denir. Her bir eleman kendini komit ediyorsa bütün cyclic gruplar Abelian dır.

Verilen bir grubun yapısını anlamamanın ve grubu oluşturmaının çeşitli yolları vardır. Alt gruplar, grubun yapısını anlamada önemli rol oynar. Bir gruptaki bir alt grup, onun karakter tablosu ve grubu oluşturmada faydalıdır. İlk olarak alt grupları ve onların grup içerisindeki rollerini tartışacağız.

2.3. Alt Gruplar

Eğer H 'nin elemanları grup postulatları altında grup formunda ise verilen bir G grubunun alt kümesi olan H , alt grup olarak adlandırılır. Her grup en azından iki **trivial** (aşıkâr) alt gruba sahiptir. Bunlar grubun kendisi ve birim elemanıdır. G 'den ve birim elemandan farklı bir alt grup **proper** alt grup olarak adlandırılır. G , H 'yi kapsamıyor ve H , G 'den farklı ise bir proper alt grup olan H **Maximal** alt grup olarak adlandırılır. G 'nin alt grubu olan H ;

$$g_i H g_i^{-1} \in H \text{ bütün } g_i \in G \quad (2.5)$$

sağlıyorsa **Normal** alt grup olarak adlandırılır.

Bir grup proper normal alt gruba sahip değil ise **Basit** grup olarak adlandırılır. Aksi takdirde **composite (karma)** grup denir. Eğer bir grup birim elemandan başka invariant (değişmez) Abelian alt grup içermiyorsa, bu grup **semisimple (yarı basit)** grup olarak adlandırılır.

2.3.1. Temel Teoremler

Sonlu bir grup olan G ile G 'nin bir alt grubu olan H 'yi düşünelim. Bu noktadaki temel soru G ve H 'nin mertebeleri hakkında olacaktır. Lagrange teoremi bu sorulara kısmen cevap verir. Lagrange teoremi bir sonlu grubun bir alt grubunun mertebesi, ana grubun mertebesinin her zaman bir böleni olduğunu ifade eder. Grubun mertebesi, kendi alt grubunun mertebesine bölümü $|G|/|H|$ her zaman bir tamsayı verir..Bu tamsayı H alt grubunun **index'i** olarak adlandırılır. Bu teoreme rağmen G 'nin grubun mertebesine bölen n . mertebeden bir alt grup içereceğine garanti yoktur. Fakat n , G 'nin ana böleni ise, G , n . mertebeden bir alt grup içerir. Bir elemanın mertebesi bu eleman tarafından türetilen alt grubunun mertebesine eşit olduğundan dolayı G 'nin her elemanının mertebesi G 'nin mertebesinin bir bölenidir.

Sylow'un üç mükemmel teoremi, sonlu bir grupta bilinen alt grupların varlığına ve grupla ilişkili olan özelliklerine değinir.

Sylow'un Birinci Teoremi : p^n G grubunun mertebesini bölen, p asal sayısının en yüksek derecesi olsun. G, p^n mertebesinin en azından bir Sylow p alt grubunu kapsar.

Sylow'un ikinci Teoremi : Sonlu bir gruptaki Sylow p alt grupları (sabit asal p için) diğerlerine izomorftur.

Sylow' un Üçüncü Teoremi: Sonlu bir G grubunun Sylow p alt gruplarının sayısı $1+kp$ formunda ve G' nin mertebesinin bir bölenidir.

2.3.2. Maximal Alt Grupların Özellikleri

Sonlu grupları düşünelim, bundan dolayı maximal alt gruplar her zaman mevcuttur. Bir grubun bütün maximal alt gruplarının hesaplaması zordur. Özellikle sıfır güçlü (nilpotent) ve supersolvable gruplar maximal alt grupların özellikleriyle tanımlanabilir.

G grubunun elemanları $g_1^{-1}g_2^{-1}g_1g_2$ g_1 ve g_2 'nin **komütatörü** olarak adlandırılır ve (g_1, g_2) ile gösterilir. $g_1g_2 = g_2g_1$ ise tanımdan $(g_1, g_2)=1$ 'dir. Bütün (g_i, g_j) komutatör tarafından meydana getirilen G'nin H alt grubu **derived (türetilmiş)** grup olarak adlandırılır. H G'nin bir invariant alt grubudur. Eğer seri $G \subseteq H^1 \subseteq H^2 \subseteq \dots \subseteq H^{(i)} = 1$ ise G grubu **çözünür (solvable)** denir. Her $H^{(i)}$ grubu önceki grubun türetilmiş şeklidir. Basamakların sonlu sayıdaki özellikleri son bulur. Bir çözünür grubun her faktör grubu $H^{(i-1)} / H^{(i)}$ devirli ise grup, supersolvable olarak bilinir. Eğer $H^{(i-1)} / H^{(i)}$ faktör grubu $G / H^{(i)}$ 'nin merkezinde ise grup **nilpotent (sıfır güçlü)** grup olarak bilinir.

Huppert Teoremi : Eğer sonlu bir grup olan G'nin her maximal alt grubunun indeksi asal sayı ise G **supersolvable**'dir. Diğer teorem nilpotent grup hakkındadır. Bir grubun maximal alt grubu normal ise, grup **nilpotent** olarak adlandırılır.

G grubunun kesişen bütün maximal alt grupları **Frattini** alt grup olarak adlandırılır. Bir G grubunun **karakteristik** alt grubu olarak da adlandırılır. H G

grubunun bir proper alt grubu ise karakteristik alt grup bellidir (G 'de maximal değildir). Bundan dolayı H 'yi içeren G 'nin bir maximal alt grubu vardır. Bir grubun maximal alt grupları grup genişlemesinde grubun alt gruplarıyla birlikte önemli rol oynar.

2.3.3. Kosetler ve Normal Alt Grupların Özellikleri

Bir G grubunu ve bir H alt grubunu ele alalım. ' $g \in G$ ' olmak üzere gH elemanlarının kümesi H 'nin **soldan koseti** olarak adlandırılır. Aynı şekilde Hg elemanlarının kümesi de H 'nin **sağdan koseti** olarak adlandırılır. G sonlu ise, G 'yi kosetler cinsinden (soldan kosetler) parçalara ayırabiliriz.

$$G = H + g_1H + g_2H + \dots + g_nH \quad (2.6)$$

Aşağıdaki formda bu ilişkiyi ifade ederiz.

$$H\text{'nin Kosetleri} = \frac{G \text{ grubunun elemanları}}{H \text{ alt grubunun elemanları}} \quad (2.7)$$

G grubu içinde H alt grubunun sağdan veya soldan kosetleri sadece ve sadece bir grup formunda ise H normal alt gruptur. Burada faktör grubunu tanımlamak yerinde olacaktır. Bir grubun **faktör** grubu, H normal alt grubunun kosetleri tarafından türetilen (biçimlendirilen) gruptur. Normal alt grubun jeneratörlerin kümesi G 'nin elemanlarının bütün konjüge sınıflarının birleşmesinden dolayı, G grubunun normal alt gruplarının belirlenmesi oldukça kolaydır. G 'nin alt grubunu N ile göstereceğiz.

2.4. Homomorphy Kavramı

Bir S kümesinin bir T kümesine mapping'i modern matematiğin en temel kavramıdır. Eğer iki elemanın çarpımı hayali elemanlar üzerine map edilebiliyorsa S elemanlarının T alt kümesi üzerine tek değerli mappingleri **homomorphy** olarak adlandırılır. T 'nin bir elemanı s 'nin bir elemanının görüntü elemanı ise homomorphy **homomorfizma** olarak adlandırılır. T kümesi s kümesine **homomorftur** denir. İki

grubun elemanları arasında bire-bir değilse iki grup homomorf olarak adlandırılır. $H \approx G/N$ ise bu ifade verilen bir G grubunun H faktör grubuna homomorftur. N 'nin bu şekildeki homomorfizmasına **kernel homomorfizma** denir.

2.4.1. Isomorf Kavramı

Bir G grubu G' grubuna homomorf ediliyorsa o zaman G' 'deki çarpımlar G 'ye paraleldir. G ve G' grubunun elemanlarının bire-bir eşleşmesinde $G \Leftrightarrow G'$, $g_1 \Leftrightarrow g'_1, g_2 \Leftrightarrow g'_2$ o zaman $g_1 g_2 \Leftrightarrow g'_1 g'_2$ ise buna **izomorfizma** denir. Bundan dolayı iki grubun mertebeleri aynı olmalıdır. Grup teorik noktadan dolayı iki grup aynı olmasına rağmen grubun elemanları farklı olabilir.

2.4.2. Bir Grubun Otomorfizmi

Bir grubun kendi üstüne izomorf gönderimi (isomorphic mapping) **otomorfizm** olarak adlandırılır. Sadece ve sadece $g_i g_j = g_k$ ise α bir otomorfizm olmalıdır. Bu da $g_i^\alpha g_j^\alpha = g_k^\alpha$ olduğunu belirtir. Sabit bir r elemanı ile G grubunun elemanlarının dönüşümü otomorfizm'dir. Formal şekilde

$$\alpha: r g_i r^{-1} = g'_i \text{ ve } r g_j r^{-1} = g'_j \Rightarrow r g_i g_j r^{-1} = g'_i g'_j \quad (2.8)$$

yazılabilir. Burada $g_i, g_j \in G$ ve $g'_i, g'_j \in G$ ve r , G 'nin sabit elemanıdır. Bu **iç (inner) otomorfizm** olarak adlandırılır. İç otomorfizmadan farklı G grubunun otomorfizmasının hepsi **dış (outer) otomorfizm** olarak adlandırılır.

2.4.3. Grup Genişlemesi

Kendi yapılarımızdaki N normal alt gruplarından grup açılımlarını çoğunlukla düşünmekle beraber ilk olarak kısaca mümkün grup açılımlarını tartışalım

2.4.3.1. Direkt Çarpım

Gruplar aşağıdaki şekilde iki grubun direkt çarpımı ile yapılır h_i, h_j, H ve h'_i, h'_j, H' ile H ve H' iki grup olsun. Çarpma;

$$(h_i, h_j)(h'_i, h'_j) = (h_i h_j, h'_i h'_j) \quad (2.9)$$

ile tanımlanır. h_i, h_j H 'nin elemanı olmak üzere ve h'_i, h'_j de H' 'nin elemanı olmak üzere $h_i h_j, h'_i h'_j$ de $H \times H'$ 'nin bir elemanıdır. $H \times H'$ 'nin $H' \times H$ izomorftur. $H \times H'$ 'nin mertebesi H ve H' 'nin mertebelerinin çarpımıdır. H ve H' $H \times H'$ 'nin alt grupları olsun;

$$G = H_1 \times H_2 \times \dots \times H_m \quad (2.10)$$

bir grup (2.10)'daki yolla kendi alt gruplarından genişletilir. Her alt grubun bütün elemanları, diğer alt grupların her elemanı ile yer değiştirebiliyorsa ve G 'nin her g_i elemanı $g_i = h_1 h_2 \dots h_m$ şeklindeki formla açıklanmış olabilir. Burada $h_i \in H_i$ 'dir.

Grupların direkt çarpımında bulunan denklem (2.9) grupların matris temsilleri için uygundur. H $n \times n$ matrislerinin bir grubu ve H' $m \times m$ matrislerinin bir grubu ise o zaman $H \times H'$ 'nin temsili aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$(h, h') = h \oplus h' = \begin{bmatrix} h & 0 \\ 0 & h' \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Matris çarpımı $H \times H'$ 'nde yukarda tanımlanan operasyonu verir.

$$(h_i, h_j)(h'_i, h'_j) = \begin{bmatrix} h_i h_j & 0 \\ 0 & h'_i h'_j \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

2.4.3.2. Yarı-Dolaysız Çarpım (Boyuna Genleşme)

$k \in N$ 'nin bir otomorfizmi ve her eleman $h \in H$ için H ve N gruplarını düşünelim. O zaman çarpma kuralı altında $[h, k]$ sembolü bir grup formudur.

$$[h_1, k_1] \cdot [h_2, k_2] = [h_1 h_2, k_1^{h_2} k_2]; \quad k_i^{h_j} = h_j k_i h_j^{-1} \quad (2.13)$$

Bu H ile N 'nin **normal çarpımı** veya **yarı dolaysız** (semi-direkt) olarak adlandırılır.

Sırasıyla $k \in \mathbb{N}$ ve $h \in \mathbb{N}$ ile N ve H grupları verilsin. Eğer G N ve H 'in yarı dolaysız çarpımı ise sembolik olarak, $N:H$ ile gösterilir.

O zaman $[k,1]$ elemanları N 'e izomorf olan bir normal alt grup formundadır ve G 'nin $[1,h]$ 'in elemanları H 'a izomorf olan bir alt grup formundadır. Sadece ve sadece N G 'nin normal bir alt grubu ise H H 'in kesişimi ile bir faktör grup ise ve N sadece birim eleman ise genelde G , H ile N 'nin yarı-dolaysız çarpımıdır. Bu boyuna genişlemeye bir örnektir. H bir faktör grubu olup, bir alt grubu değil ise o zaman G/H ile N 'nin boyuna olmayan genişlemesidir.

2.5. Grupların Matris Temsilleri

Grupların matris temsilleri görünüşün bir noktasından dolayı önemlidir. Birçok grupların kendi doğal temsilleri matrisler cinsinden vardır. Eğer grupların elemanları ile kare matrisler kümesi arasından herhangi bir ilişki varsa, grubun $n \times n$ singular olmayan matris formları, matris çarpımı altında temsiller kümesidir. g_1 ve g_2 grubun elemanları olsun. Aşağıdaki özellikler $m \times m$ singular olmayan matrisler birleştirebilir.

$$\begin{aligned} A(g_1) &= a_{ij}(g_1), \quad (i, j = 1, 2, \dots, m) \\ A(g_2) &= a_{ij}(g_2), \quad (i, j = 1, 2, \dots, m) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Burada a_{ij} reel veya kompleks sayılardır. Eğer aşağıdaki bağıntıyı sağlıyorsa

$$A(g_1)A(g_2) = A(g_1g_2), \quad (g_1, g_2, g_1g_2 \in G) \quad (2.15)$$

$A(1) = I_m$ olduğuna dikkat edilmelidir. Burada I_m $m \times m$ birim matris olup $A(x^{-1}) = [A(x)]^{-1}$ de matris tersidir. Bir grubun matris temsillerinin oluşturulmasının birçok yolları vardır. Genellikle gruplar simetri işlemleri ile forma sokulur. Grubun matris temsillerini oluşturmak için bir vektör uzayı (taşıyıcı uzay) seçer ve daha sonra bu uzayda G işlemlerini tanımlarız.

Tarihi olarak Grup Teori sonlu permütasyon gruplarıyla başlamıştır. Eğer n tane objemiz varsa simetrik grup olarak adlandırılan S_n grubunun $n!$ durumu vardır.

Bu noktada n tane objenin permütasyon ve değişkenleri $x_1, x_2, \dots, x_n$ olan sonlu sayılar kümesi düşünelim. Her değişkeni $x_1, x_2, \dots, x_n$ olan n değişkenli genel lineer dönüşüm aşağıdaki lineer kombinasyon formu ile verilir.

$$A: x_i \rightarrow x'_i = a_{1i}x_1 + a_{2i}x_2 + \dots + a_{ni}x_n \quad (2.16)$$

a_{ij} katsayıları genelde reel veya kompleksdir. Son denklemi aşağıdaki formda yazmak mümkündür.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \dots \\ x'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$

a) Bütün sonlu gruplar permütasyon grubunun alt grubudur ve permütasyon gruplarının matris temsillerini, lineer $x_i \rightarrow x_j$ yer değiştirmesini kullanarak yazmak mümkündür.

b) Herhangi bir sonlu grup için sonsuz tane matris temsilleri vardır. Bunun ispatı kolaydır. Herhangi bir singular olmayan T matrisi ve G grubunun $A(g)$ matris temsillerini düşünelim. $B(g) = TA(g)T^{-1}$ ile bulunabilir. Buradan;

$$\begin{aligned} B(g_1g_2) &= TA(g_1g_2)T^{-1} = TA(g_1)A(g_2)T^{-1} \\ &= TA(g_1)T^{-1}TA(g_2)T^{-1} = B(g_1)B(g_2) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Burada B yine G 'nin bir matris temsilidir. Bu dönüşüm **benzerlik** dönüşümü olarak bilinir ve benzerlik dönüşümü ile belirlenen temsiller **denk (eşit)** temsil olarak adlandırılır.

c) $A(g)$ ve $B(g)$ G grubunun n ve m boyutlarda matris temsilleri olsun. Buradan

$$C(g) = \begin{bmatrix} A(g) & 0 \\ 0 & B(g) \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

matrisi derecesi $n \times m$ olan yine G grubunun matris temsillerinin bir formudur. $C(g)$, $A(g)$ ve $B(g)$ 'nin direkt toplamıyla bulunur. $C(g) = A(g) \oplus B(g)$. $C(g)$ temsili birleştirilemez, $A(g)$ ve $B(g)$ onun bileşenleridir. Örnek olarak S_3 grubunu alalım. S_3 simetrik grubunun bileşenleri (x_1, x_2, x_3) olan x vektörü gibi üç objenin permüt edilmesiyle bulunur. Üç boyutlu Euclidean uzayı bu temsil için taşıyıcı uzaydır. Aşağıda permütasyonun elemanları verilmiştir.

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}; P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}; P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}; P_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}; P_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}; P_5 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix};$$

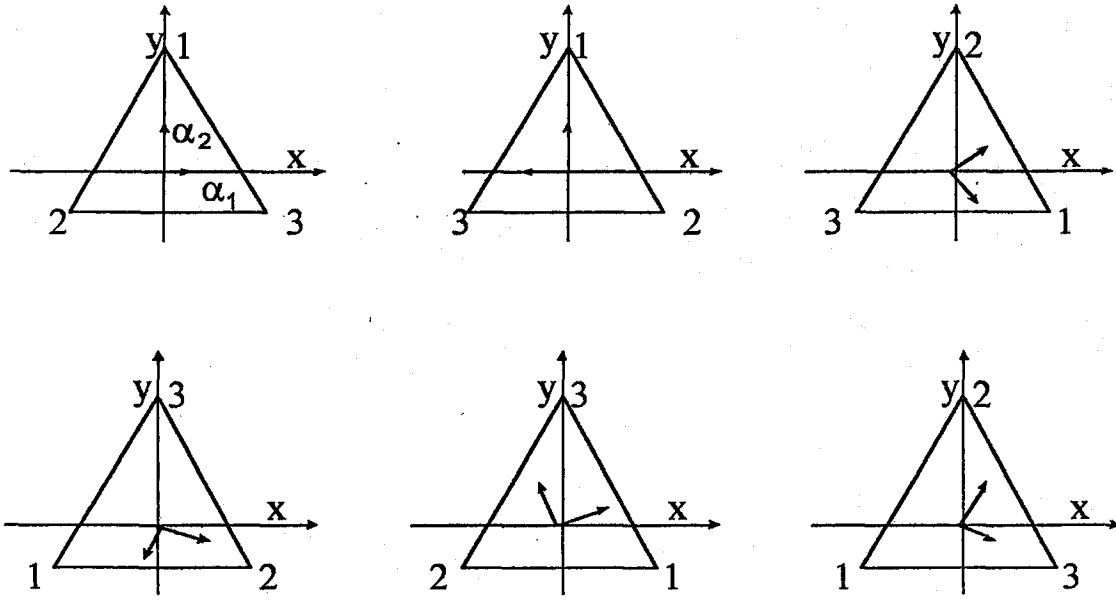
$$\begin{array}{cccccc} x'_1 \rightarrow x_1 & x'_1 \rightarrow x_3 & x'_1 \rightarrow x_2 & x'_1 \rightarrow x_3 & x'_1 \rightarrow x_3 & x'_1 \rightarrow x_2 \\ x'_2 \rightarrow x_2 & x'_1 \rightarrow x_1 & x'_1 \rightarrow x_3 & x'_1 \rightarrow x_1 & x'_1 \rightarrow x_2 & x'_1 \rightarrow x_1 \\ x'_3 \rightarrow x_3 & x'_1 \rightarrow x_2 & x'_1 \rightarrow x_1 & x'_1 \rightarrow x_2 & x'_1 \rightarrow x_1 & x'_1 \rightarrow x_3 \end{array} \quad (2.20)$$

Denklem (2.17)'yi kullanarak matris dönüşümlerini yazabiliriz ve aşağıdaki şekilde olur.

$$\begin{array}{l} A(p_0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; A(p_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; A(p_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ A(p_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; A(p_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; A(p_5) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \quad (2.21)$$

Her matris elemanı x_i koordinatını x'_i 'ne dönüştürür ve grup postulatları altında grup şeklini alır.

Düzlemde bir eşkenar üçgenin simetri gruplarını düşünerek S_3 'ün diğer temsillerini bulabiliriz. x -ekseni boyunca α_1 birim vektörünü ve y -ekseni boyunca α_2 vektörünü seçeriz. Şekil (2.1)'deki gibi simetri işlemlerini yaparak matrisleri buluruz. Böylece simetrik S_3 grubunu buluruz. $A(g_i)$ matrisleri simetri işlemleri yapılarak bulunur.



Şekil 2.1 Eşkenar Üçgenin simetrileri.

$$A(g_0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; A(g_5) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}; A(g_2) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}; \quad (2.22)$$

$$A(g_1) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; A(g_3) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}; A(g_4) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix};$$

$A(g_i)$ matrisleri yine S_3 'ün bir matris temsilinden şekillendirilir. Singular olmayan T matrisi varsa G grubunun $A(g)$ matris temsili verilen bir alan üzerinden indirgenebilir, yani;

$$C(g) = T^{-1}A(g)T = \begin{bmatrix} B(g) & 0 \\ E(g) & D(g) \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

Singular olmayan bir T matrisi varsa verilen bir alan üzerinden G grubunun $A(g)$ temsili indirgenir. Burada $B(g)$ ve $D(g)$ G 'nin temsilleridir. $E(g)$ sıfır matris ise, $A(g)$ tamamen indirgenir.

2.5.1. İndirgenebilir ve İndirgenemez Temsiller:

Herhangibir simetri operasyonunun matris temsillerinin kümesi bir temsilin nokta grup formlarındandır. C_{2h} nokta grubunu örnek olarak düşünelim. E , $C_{1/2}$, σ_{xy} ve i bu grubun içinde bulunan dört simetri işlemcisidir. Bu nokta grupları matris temsilleri aşağıda verilmiştir.

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_{1/2} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Temsiller indirgenebilir ve indirgenemez temsiller olarak ikiye ayrılır.

A , B , C , bir grubu oluşturan matrisler olsun. Bu matrislerin indirgenebilir veya indirgenemez temsiller olup olmadığını anlamak için iki yol vardır. Birincisi matrislerin oluşturduğu grubun eşlenik sınıflarına bakılır, eğer bu karakter tablosundaki indirgenemez temsillerin herhangi birisinin karakteri ile aynı ise, bu temsil indirgenemez. İkinci yol ise benzerlik dönüşümü ile bunu anlayabiliriz.

A , B , C , D ve P bir grubun Γ temsiliinin matrisleri P ise bu grupta benzerlik dönüşüm matrisi olsun. Aşağıdaki gibi benzerlik dönüşümü ile A , B , C , D ve P matrisleri A' , B' , C' , D' ve P' matrislerine dönüşür.

$$\begin{aligned} P^{-1}AP &= A' & P^{-1}DP &= D' \\ P^{-1}BP &= B' & P^{-1}PP &= P' = P \\ P^{-1}CP &= C' \end{aligned} \quad (2.24)$$

Eğer sonuç matris A' matrisine blok edilebiliyorsa, Γ temsili indirgenebilir temsil olarak adlandırılır.

$$A' = \begin{pmatrix} a'_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a'_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a'_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a'_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a'_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_6 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Eğer Γ temsilinin matrislerini indirgeyebilecek bir benzerlik dönüşüm matrisi bulunamıyorsa temsil indirgenemezdir denir. Bütün bir boyutlu temsiller her zaman indirgenemez.

İndirgenebilir ve indirgenemez temsiller fizikte grup teorisinin uygulamaları problemlerin çözümünde önemli bir rol oynar. İlk basamak olarak grup teorisindeki uygulaması indirgenebilir temsillerin formasyonunu (oluşumunu) içerir. Buradan bu temsil tetkik edilmekte olan nokta grupların değişik indirgenemez temsillerine ayrışır.

2.5.2. İndirgenemez Temsillerin özellikleri:

Bir nokta grubun karakter tablosunu oluşturmak için indirgenemez temsillerin özelliklerinin bilinmesi önemlidir. İndirgenemez temsillerin özellikleri diklik koşulunun yardımı ile bulunabilir.

h simetri işlemlerini içeren bir nokta grubu ele alalım. Bu işlemle k sınıflara bölünmüştür. İndirgenemez temsiller $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_k$ olarak yazılır. $I_1, I_2, \dots, I_k$ 'da bu temsillerin boyutlarıdır. Diklik teoremi indirgenemez temsiller için aşağıdaki kuralları bulmada kullanılır.

1. Bir grupta indirgenemez temsiller için aşağıdaki sınıfların sayısına eşittir.

2. Bir grupta indirgenemez temsillerin boyutlarının kareleri toplamı grubun

mertebeğine eşittir.
$$\sum_{i=1}^k I_i^2 = h \quad (2.26)$$

3. İndirgenemez temsillerdeki özdeş işlemlerin kareleri toplamı grubun mertebesine eşittir.

$$\sum_{l=1}^k (x_l(E))^2 = h \quad (2.27)$$

4. İki farklı indirgenemez temsildeki simetri işlemcilerinin karakterleri aşağıdaki bağıntıyı sağlar.

$$\sum g_p x_i(R_p) x_j(R_p) = h \delta_{ij} \quad (2.28)$$

$i \neq j$ durumunda (2.28) eşitliği,

$$\sum_{p=1}^k g_p x_i(R_p) x_j(R_p) = 0 \quad (2.29)$$

formuna gelir. $i = j$ durumunda (2.28) eşitliği, $\sum_{p=1}^k g_p (x_i(R_p))^2 = h$ (2.30)

formuna gelir. Bu denklemlerde g_p p.inci sınıftaki simetri işlemcilerinin sayısına karşılık gelir. R_p , p.inci sınıfın simetri işlemcisidir. $x_i(R_p)$ ve $x_j(R_p)$ i ve j temsillerindeki R_p işlemcisinin matrisinin karakterine karşılık gelir.

5. Aynı sınıftaki işlemcilere ait bütün matrislerin karakterleri aynıdır.

2.5.3. İndirgenebilir ve İndirgenemez Temsiller Arasındaki İlişki

İndirgenebilir temsiller benzerlik dönüşüm metoduyla indirgenemez temsillere ayrılabilir. Herhangi bir benzerlik dönüşümü ile bir matrisin karakterlerinin değişmez olduğu kuralı kullanılarak

$$x(R) = \sum_j n_j x_j(R) \quad (2.31)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada $x(R)$ indirgenebilir temsiller R operasyonuna (işlemcisine) göre karakterlerini $x_j(R)$ j'inci indirgenemez temsilde R işlemcisi için matrisin karakterini temsil eder. $x(R)$ ve $x_j(R)$ arasındaki ilişki aşağıdaki şekilde bulunabilir.

Yukarıdaki denklemin her iki tarafı i .inci indirgenemez temsildeki operasyonun karakteri $\chi_i(R)$ ile çarpılsın. Gruptaki bütün operasyonlar altında tüm toplamlar yapılsın. Toplam

$$\sum_R \chi(R) \chi_i(R) = \sum_R \sum_j n_j \chi_j(R) \chi_i(R) = \sum_j n_j \sum_R \chi_j(R) \chi_i(R) \quad (2.32)$$

ile verilen indirgenemez temsillerin kuralını kullanarak.

$$\sum_R \chi_j(R) \chi_i(R) = h \delta_{ij} \quad (2.33)$$

$$\sum_R \chi(R) \chi_i(R) = \sum_j n_j h \delta_j$$

denklemini elde ederiz. $i=j$ olduğu temsiller için son denklem

$$\sum_R \chi(R) \chi_i(R) = n_i h \text{ 'e indirger. Buradan}$$

$$n_i = \left(\frac{1}{h} \right) \sum_R \chi(R) \chi_i(R) \quad (2.34)$$

Eğer g_p grubun p .inci sınıfındaki operasyonların sayısını temsil ediyorsa yukarıdaki son yazdığımız denklem;

$$n_i = \left(\frac{1}{h} \right) \sum_R g_p \chi(R_p) \chi_i(R_p) \quad (2.35)$$

halini alır. Bu denklemdeki R_p p .inci klasdaki simetri işlemleri olarak bilinir.

2.6. Konjuge (Eşlenik) Sınıflar ve Karakter Tablolarının oluşturulması

Konjüge sınıflar ve karakter tabloları, verilen temsillerin karakterleri olarak bilinen sayıları içerir. Bir $A(g)$ matris temsilinin χ karakteri

$$\chi(g) = \text{Tr}[A(g)] = \sum_{i=1}^n a_{ii}(g) \quad (2.36)$$

ile tanımlıdır. Böylece karakterler, verilen bir alanın elemanlarıdır. Bütün eşdeğer temsiller tanımlı matris temsilleri üzerinde aynı karaktere sahiptir. Temsil boyutu 1 ise $X=A$ olduğunu görmek çok kolaydır.

2.6.1 Bir Grubun Eşlenik (Konjuge) Sınıfları

$s \in S$ ve $g \in G$ elemanları ile G grubunun bir S kümesini göz önüne alalım. $g_1^{-1}Sg_1 = S$ ise $S = g_1Sg_1^{-1}$ olur. Yine, $g_2^{-1}Sg_2 = S$ ise $S = (g_1g_2)^{-1}S(g_1g_2)$ olur. Böylece $S = g_iSg_i^{-1}$ olacak şekilde $g_i \in G$ 'nin kümesi G 'nin bir alt grubudur ki bu gruba G 'deki S 'nin **normalizeri** denir ve bu $N_G(S)$ ile gösterilir. Yine, $s \in S$ için $s = g_i^{-1}sg_i$, olacak şekilde $g_i \in G$ 'nin kümesi benzer olarak G 'nin bir alt grubu olabilir ki bu gruba G 'deki S 'nin **centralizeri** denir. $C_G(S)$ ile gösterilir. S tek bir elemandan ibaretse centralizer ve normalizerin özdeş olduğu açıktır. Üstelik daima $C_G(S) \subseteq N_G(S)$ 'dir G 'deki G 'nin centralizerine G 'nin **merkezi** denir. Matematiksel ifade ile $C_G(S)$ ve $N_G(S)$ kümeleri

$$C_G(S) = \{g \in G \mid gS = Sg\}$$

$$N_G(S) = \{g \in G \mid gs = sg \text{ bütün } s \in S\} \quad (2.37)$$

olacak şekilde S 'nin dönüşen elemanları ile elde edilir. Açık olarak merkez, G 'deki elemanların bütün normalizerlerinin ara kesitidir. Tanımdan dolayı merkez, bir Abelian normal alt gruptur.

Bir S kümesinin aşağıdaki gibi elde edildiğini düşünelim. G bir grup ve S , $g_r^{-1}g_i g_r$ formunun elemanlarının kümesi olsun. Hem g_i hem de g_r G 'nin elemanları ve g_r sabit bir elemandır. Bu durumda, S kümesine G grubunun **eşlenik sınıfı** denir. G grubu ayrık kümeler içinde parçalara ayrılmış ise buna elemanların eşlenik sınıfları veya G grubunun **conjugacy sınıflar** denir. Formal olarak

$$C_i(p_i) = \{g \in G \mid h_i = g_r^{-1}g_i g_r\} \quad (2.38)$$

Daha sonraki uygulamalarımızda bir grubun eşlenik sınıfları, karakter tabloları dizayn edilen notasyonlarının bir sayısı, genelde (2.1) tablosunda verilen formda anlatılacaktır. Tablonun ilk satırı sınıfın ismine eşlenir ki bu $C_1(p_1)$ ile gösterilir ve p_i ise her elemanın sırasını gösterir. İkinci ve üçüncü satırları sırasıyla bir sınıftaki elemanların sayılarına ve her elemanın karakterine eşlenir.

Sınıf	$C_1(1)$	$C_2(p_2)$	$\dots$	$C_1(p_n)$
Elemanlar	h_1	h_2	$\dots$	h_n
Karakterler	χ_n	χ_n	$\dots$	χ_n

Tablo 2.1 Verilen bir grubun eşlenik sınıfları.

Bu kısa tanımdan (2.21) ve (2.22) denklemleri verilen matris temsillerinin kullanılmasıyla S_3 grubunun eşlenik sınıflarını elde ederiz. İlk sınıf 3×3 matrislerinin sadece birim elemanlarını içerir ki bu bellidir. $A(p_1)$ 'i sabit bir eleman olarak seçersek, matrislerin kümesinden (2.38) denklemi kullanılarak izi (trace) 1 ve mertebesi 2 olan $A(p_3), A(p_4)$ ve $A(p_5)$ elde edilir. Diğer sınıf üyeleri sabit bir eleman olarak $A(p_4)$ seçilmesiyle izi 0 ve mertebesi 3 olan $A(p_1)$ ve $A(p_2)$ elde edilir. Bunlar Tablo (2.2)'de gösterilmişlerdir. Benzer olarak S_3 'ün eşlenik sınıfları 2×2 matris temsilleri için elde edilir. Karakter değerleri Tablo (2.2)'nin dördüncü sırasında gösterilmiştir. Her iki gösterimin birim elemanı $C_1(1)$ sınıfının üyesidir.

Sınıf	$C_1(1)$	$C_2(2)$	$C_3(3)$
Elemanlar	1	3	2
(3x3) Karakterler	3	1	0
(2x2) Karakterler	2	0	-1

Tablo 2.2. S_3 Grubunun Conjugacy Sınıfları

Her sınıf benzer dönüşüm ile elde edilmiş olduğundan bir sınıftaki her elemanın iz ve mertebesi, her biri diğerine eşittir. Bir sınıftaki elemanların sayısına, bu sayılar G grubunun mertebesine bölüyorsa buna bir sınıfın **indeksi** denir. C_1, G

grubunun eşlenik elemanlarının bir sınıfı ise C_i^{-1} eşlenik elemanların bir sınıfı şeklinde olduğunu söyleyebiliriz.

2.6.2. İndirgenebilir Karakterler Üzerinde Bağıntılar

G grubunun denk olmayan indirgenemez temsillerinin sayısı G grubunun sınıflarının sayısına eşittir. Bir grubun $|G|$ mertebesini düşünelim ve $n_1, n_2, \dots, n_i, \chi^1, \chi^2, \dots, \chi^i$ eşit olmayan indirgenemez temsillerin dereceleri olsun. Bu durumda;

$$|G| = n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_i^2 \quad (2.39)$$

Uygulamalarda karakter tabloları Tablo (2.3) şeklinde anlatılmıştır. Tablo (2.3)'de $C_i(p_i)$ sınıf ismini ifade eder ve p_i , birim eleman olan $C_1(1)=1$ ile her elemanın mertebesini gösterir. İkinci sıra, C_i sınıfında h_i elemanlarının sayısına eşlenir. Üçüncü sıra, eşlenen sırada elemanların sayısı ile grubun derecesini bölerek elde edilmiş olan grubun indeksi ya da centerlazerın mertebesini gösterir χ^1 birim (özdeş) temsildir ve $\chi^2, \dots, \chi^r$ mutlak olarak indirgenebilir temsillerdir. χ_i^s a. temsildeki i. sınıfının elemanlarının karakteridir ve n_i indirgenebilir. Temsillerin derecesidir.

Sınıf	$C_1(1)$	$C_2(p_2)$	...	$C_i(p_i)$	...	$C_r(p_r)$
Elemanlar	h_1	h_2	...	h_i	...	h_r
Index	$ G /h_1$	$ G /h_2$	...	$ G /h_i$	...	$ G /h_r$
χ^1	n_1	1	...	1	...	1
χ^2	n_2	χ_2^2	...	χ_i^2	...	χ_r^2
...	...	...	...	...	...	...
χ^s	n_s	χ_2^s	...	χ_i^s	...	χ_r^s
...	...	...	...	...	...	...
χ^r	n_r	χ_2^r	...	χ_i^r	...	χ_r^r

Tablo 2.3 Bir G Grubunun Karakter Tablosu

İspat olmaksızın, karakter üzerindeki bağıntıları aşağıda verelim. Ortogonal bağıntılar sütunlar arasında;

$$\sum_{i=1}^r h_i (\chi_i^a) (\bar{\chi}_i^b) = \delta_{ab} g \quad (2.40)$$

ve satırlar arasında;

$$\sum_{a=1}^r (\chi_i^a) (\bar{\chi}_j^a) = \frac{g}{h_i} \delta_{ij} \quad (2.41)$$

bağıntıları ile verilen bir G grubunun indirgenebilir karakterleri ile sağlanmıştır. Her sıra için bağıntılar;

$$\frac{h_i \chi_i^a}{n_a} \frac{h_j \chi_j^a}{n_a} = \sum_k c_{ijk} \frac{h_k \chi_k^a}{n_a}, \quad (a = 1, 2, \dots, r) \quad (2.42)$$

denklemleri ile verilir. Burada c_{ijk} negatif olmayan tamsayılar n_a ve h_i sırasıyla indirgenemez a. temsili derecesine ve i. sınıftaki elemanların sayısına eşittir.

Aynı sınıfta eşlenen χ_i^a ve χ_i^b karakterleri ile bir G grubunun iki indirgenemez temsillerini düşünelim. Bu durumda G grubunun indirgenemez karakterleri arasında;

$$\chi_i^a \chi_i^b = \sum c_{abc} \chi_i^c \quad (2.43)$$

sağlaya bir bağıntı vardır. Burada c_{abc} negatif olmayan tam sayılardır. (2.39)'dan (2.43)'e bağıntılar G grubunun tüm indirgenemez temsilleri için geçerlidir. G grubunun χ indirgenebilir temsili indirgenemez temsilleri cinsinden şu şekilde yazılabilir.

$$\chi_i = \sum_a k_a \chi_i^a \quad (2.44)$$

olarak alınan temsillerin bileşimlerinin formunda yazılabilir. k_a tam sayı sabiti;

$$k_a = \frac{1}{|G|} \sum_i h_i \bar{\chi}_i \chi_i^a \quad (2.45)$$

bağıntısından elde edilir. Burada χ_i indirgenebilir temsillerin ve χ_i^a indirgenemez temsillerin karakterleridir. Karakter, bağıntılar üzerinde bu kısa özetten sonra, karakter tablolarının oluşumu aşağıdaki kısımda tartışılacaktır.

2.6.3. Karakter Tablosunun Oluşturulması

G grubunun karakter tablosunun oluşumunda eşlenik sınıfların çarpım tabloları önemli bir rol oynar. Y_i, C_i ($i=1, \dots, r$) eşlenik sınıfının elemanlarının toplamı, r G grubunun eşlenik sınıflarının sayısı olsun. Bu durumda aşağıdaki kümeyi oluşturabiliriz.

$$\begin{aligned} [Y_i]^2 - 1 &= 0 \\ [Y_i]^2 - \sum_{j=2}^r m_{ij} Y_j &= 0 \\ Y_i Y_j - \sum_{k=2}^r d_{ijk} Y_k &= 0, \quad i \neq j \end{aligned} \quad (2.46)$$

Burada m_{ij} ve d_{ijk} negatif olmayan tam sayılardır. Burada $\frac{(r-1)(r-2)+2r}{2}$ denklem yazabiliriz. Bu durumda Y_i için çözümlerinin r lineer bağımsız kümesini elde ederiz. Y_i 'nin çözümlerinin her bağımsız kümesini elde ederiz. Y_i 'nin çözümlerinin her kümesini y_i ile gösterirsek (2.40), (2.41) ve (2.42) denklemlerinden;

$$y_i = \frac{h_i}{n_a} \chi_i^a \text{ veya } \chi_i^a = \frac{n_a}{h_i} y_i \quad (2.47)$$

denklemini elde ederiz. (2.46) denkleminin çözümü zordur. Bazı bilgisayar programları bunların çözümünde kullanılmıştır. S_3 simetrik grubunun karakter tablosunu oluşturalım (2.2) tablosundan elde edilmiş olan C_1, C_2 ve C_3 sınıflarının elemanları sırası ile $\{p_0\}, \{p_3, p_4, p_5\}$ ve $\{p_1, p_2\}$ 'dir. Elemanları ve (2.46) denklemini kullanarak

$$\begin{aligned}
[Y_1]^2 - Y_1 &= 0 \\
[Y_2]^2 - 2Y_1 - Y_2 &= 0 \\
[Y_3]^2 - 3Y_1 - 3Y_2 &= 0 \\
Y_2 Y_3 - 4Y_3 &= 0
\end{aligned} \tag{2.48}$$

elde ederiz. Çözümlerin kümesi

$$y_1 = \{1,1,1\}, y_2 = \{3,-3,0\}, y_3 = \{2,2,-1\} \tag{2.49}$$

olacak şekilde (2.48) denkleminin çözümü ile elde edilebilir. $|G| = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ bağıntısını kullanarak S_3 grubunun (2.4) karakter tablosunu elde ederiz.

Sınıf	$C_1(1)$	$C_2(2)$	$C_3(3)$
Elemanlar	1	3	2
Index	6	3	2
χ^1	1	1	1
χ^2	1	1	-1
χ^3	2	-1	0

Tablo 2.4. Simetrik S_3 Grubunun Karakter Tablosu

S_3 'ün 3x3 ve 2x2 matris temsilleri sırası ile (2.21) ve (2.22) denklemleri ile kolayca verilir ve elde edilir. Her temsilin eşlenik sınıfları tablo (2.2)'de elde edilmiştir. Verilen indirgenebilir ve indirgenemez temsillerin her ikisini de tartışalım. Tablo (2.2)'nin 3x3 ve 2x2 matris temsillerinin karakterlerini içerir. (2.44-45) denklemleri ve S_3 'ün karakter tablosunun kullanılmasıyla

$$\begin{aligned}
k_1 &= \frac{1}{6}(1x3x1 + 3x1x1 + 2x0x1) = 1 \\
k_2 &= \frac{1}{6}(1x3x1 + 3x1x(-1) + 2x0x1) = 0 \\
k_3 &= \frac{1}{6}(1x3x2 + 3x1x0 + 2x0x(-1)) = 1
\end{aligned} \tag{2.50}$$

olacak şekilde 3x3 matris temsilleri için bir bağıntı buluruz. Bu durumda (2.44) denkleminde

$$\chi = \chi^1 + \chi^3 \quad (2.51)$$

yazabiliriz. Benzer olarak S_3 'ün matris temsilleri için

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{6}(1x2x1 + 3x0x1 + 2x(-1)x1) = 0 \\ k_2 &= \frac{1}{6}(1x2x1 + 3x0x(-1) + 2x1x(-1)) = 0 \\ k_3 &= \frac{1}{6}(1x2x2 + 3x0x0 + 2x(-1)x(-1)) = 1 \end{aligned} \quad (2.52)$$

denklemlerini elde ederiz bu durumda 3x3 matris temsili indirgenebilir iken S_3 'ün 2x2 matris temsilinin indirgenemez olduğu açıktır. (2.51) denklemi 1x1 ve 2x2 blok-diagonal (köşegen) formları içine S_3 'ün dönüşen tüm 3x3 matris elemanları olacak şekilde singular olmayan bir T matrisini gerektirir. Örnek olarak T matrisi

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \text{ ve } T^{-1} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

olarak verilsin. Bu durumda benzer dönüşüm

$$B(p_i) = TA(p_i)T^{-1} \quad (2.54)$$

blok-köşegen formunda üç boyutlu indirgenebilir temsile dönüştürülebilir. Bunlar;

$$\begin{aligned} A(p_0) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; A(p_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}; A(p_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}; \\ A(p_3) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}; A(p_4) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}; A(p_5) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}; \end{aligned} \quad (2.55)$$

dür. İlk blok S_3 'ün iki boyutlu indirgenemez temsiline uyan 2×2 blok matrislerine ve aşikar temsiline uyar.

2.6.4. Karakter Tablosundan Normal Alt Grubunun Bulunması

Bir G grubunun normal bir alt grubunun bulunuşu karakter tablosundan kolayca anlaşılabilir. Bütün indirgenemez temsiller için $|h_i \chi_i^a| = n_a$ ile bağıntılı ya da temsillerin mertebesine denk olmasından biri eşlenik bir sınıfın karakterleri ise bu durumda eşlenik sınıflara eşlenen elemanlar N alt grubundandır. Bu grup G grubunda normal alt gruptur.

2.7. Jeneratörler ve Jeneratör İlişkileri

G bir grup olmak üzere, G 'nin her elemanı bunun kuvvetlerinin sonlu bir çarpımı olarak ifade edilebiliyorsa G grubunun $g_1, g_2, \dots, g_m$ elemanlarının kümesine **jeneratörler** denir. Uygun olarak bu $\{g_1, g_2, \dots, g_m\}$ sembolü ile gösterilir. $m=1$ ise grubun **devirli** grup olduğu görülür. Jeneratörlerin verilen bir kümesi kısaltılmış (soyut) olarak tanımlı ise bu durumda buna G grubunun **soyut tanımı** ya da G grubunun **gösterimi** denir. Jeneratörlerin bir çarpım olarak ifade edilmiş elemanı ve bunu terslerine bir **word** denir. X 'in G için jeneratörlerin bir kümesi ve Y 'nin G için diğer bir alt kümesi olduğunu düşünelim. Bu durumda Y , X 'i kapsıyorsa ya da X 'in her elemanı Y 'nin elemanlarında bir word olarak ifade edilebiliyorsa Y 'de G 'nin jeneratörlerinin bir kümesidir.

S_3 simetri grubu için Jeneratör bağıntısı

$$X = \langle p_1, p_2 \mid p_1^3 = p_2^2 = 1, (p_1 p_2)^2 = 1 \rangle \quad (2.56)$$

Grubun bütün elemanları verilen jeneratörlerden elde edilebilir. Diğer bir deyişle grubun bütün kalan elemanları verilen jeneratörlerin terimlerinden ifade edilir. S_3 'ün elemanları

$$\{1, p_1, p_1^2, p_2, p_2^2, p_1 p_2, p_1 p_2^2\} \text{ olarak yazılır.}$$

BÖLÜM 3

ICOSAHEDRAL SİMETRİ

3.1. Giriş

Kütle Spektroskopisi, C_{60} molekülünün kimyasal kapalı şeklini belirtir. Molekölü teşkil eden 60 adet karbon atomunun uzaydaki dizilişi, birbirlerine göre konum ve yönelimleri hakkında bilgi vermez. Bunun için fiziksel ve kimyasal ilkelere başvurmak gerekir.

Özdeş karbon atomları arasında uzaysal herhangi bir tercih söz konusu olamayacağına göre ilk beklenti, karbon atomlarını en yakın komşularına birleştiren hayali çizgilerin (kimyasal bağlar) kapalı bir düzgün çokyüzlünün ayrıtlarını meydana getirmesi olacaktır. Yani, bütün yüzlerin özdeş düzgün çokgen olması yanında bütün ayrıtların eşit uzunluklu ve bütün köşelerin eşdeğer olması beklenir. Ayrıca bir atomda birleşen ardışık ayrıtlar arasındaki açılar toplamı tam açıdan küçük olmalıdır. Bu geometrik kısıtlamaların dışında kimyasal eşdeğerlikten dolayı da ayrıtların sayısında bir kısıtlama olacaktır. Ancak biz burada ilk olarak yalnızca geometrik yapıyla ilgileneceğiz.

Bir köşede buluşan ayrıtlar arasındaki açılar alabileceği değerlere geometrik ilkeleri kullanarak bulabiliriz.

Bir düzgün çokyüzlünün oluşturulabilmesi için düzgün çokgenlerden en az üç tanesi aynı düzlem üzerinde bulunmayacak şekilde aynı köşede birbirlerine kavuşmalıdır. Düzgün çokgen olarak en az sayıda kenarı bulunan üçgen prizmayı aldığımız takdirde üç ihtimal söz konusu olur;

- i) Aynı köşeyi paylaşan üç eşkenar üçgen,
- ii) Aynı köşeyi paylaşan dört eşkenar üçgen,
- iii) Aynı köşeyi paylaşan beş eşkenar üçgen.

Daha fazla sayıda eşkenar üçgen aynı köşeyi paylaşamaz. Çünkü altı eşkenar üçgen aynı köşeyi paylaştığı takdirde ardışık ayrıtlar arasındaki açılar toplamı tam açı olacağından bu üçgenler aynı düzlem üzerinde bulunacaklar ve kapalı bir cisim oluşturamayacaklardır.

Üç eşkenar üçgenin aynı köşeyi paylaştığı kapalı geometrik yapı Tetrahedrondur (düzgün dört yüzlü). Tetrahedronun sadece dört köşesi vardır. O halde geometrik yapısı düzgün dörtyüzlü olan bir molekül sadece dört atomu ihtiva edebilecek demektir (elmas yapısı). Aynı şekilde bir köşeyi paylaşan dört eşkenar üçgen ile altı köşesi olan octahedron (düzgün sekizyüzlü), beş eşkenar üçgen ile de on iki köşesi olan Icosahedron (düzgün-yirmi yüzlü).

Aynı köşede üç karenin kavuşması sekiz köşesi olan küpü meydana getirir. Aynı köşede üçü kavuşan düzgün beşgenler ile yirmi köşesi bulunan dodecahedron (düzgün on iki yüzlü) oluşturulabilir. Beşten daha çok kenarlı düzgün çokgenlerin yalnız başına kapattığı çokyüzlü bir cismin yapılması mümkün değildir. Bu tartışmadan çıkan sonuç tek tip özdeş düzgün çokgenlerden kurulu, altmış köşeli kapalı bir kafesin oluşturulamayacağıdır. Fakat, kimyacıların faydalandığı kimyasal bağ teorisinde yüzey kuvvetleri ve yüzey enerjileri değil, en yakın atomlar arasındaki çekme ve itme kuvvetleri göz önüne alınır. O halde C_{60} molekülünün simetri grubunu tayin etmek üzere kapalı kafes yapıyı kurarken, yüzlerin tek tip özdeş olması ön düşüncesini terk ederek, ayrıtların eşit olduğu kapalı kafes yapıları dikkate almamız gerekmektedir. Ancak, yüksek mertebeli nokta simetri gruplarına giren düzgün on iki yüzlü dodecahedron ve Icosahedron cisimlerinin simetri özelliklerini gözden geçirelim. Grup teori kitaplarında belirtildiği gibi bu iki cisim aynı simetri grubuna dahildir.

3.2. Icosahedron'un Simetri Grubu

3.2.1. Simetri öğeleri ve simetri işlemleri

Bir simetri öğesi bir eksen, bir düzlem veya bir nokta, gözde kolayca canlandırılabilen geometrik bir kavramdır. Bir simetri işlemi ise, simetri öğesi

referans alınmak suretiyle cisme yaptırılan veya yaptırıldığı farz edilen bir hareket olup, hareketin gerçekleşmesinden önce ve sonra cismin uzaydaki konumu ve yönelimi aynı kalır.

Molekül simetrisinin tayininde ihtiyaç duyulan simetri öğesi sayısı dört tane olup bunlardan hiçbirisi tamamen molekülün dışında kalmaz. Bu öğeler ile bunlara karşılık gelen simetri işlemleri aşağıda gösterilecektir.

Eğer bir molekül simetri düzlemi içeriyorsa, simetri düzlemi içinde olmayan atomlarının sayısı çift olmak zorundadır. Eğer molekülde, bir elemente ait tek bir atom varsa, bu atom, molekülün bütün simetri düzlemlerinin içinde, yani düzlemlerin kesişme çizgisi veya noktası üzerindedir. Simetri düzlemini σ ile göstereceğiz.

Simetri öğesi Simetri işlemi

1. Düzlem	Atomların düzleme göre ayna görüntüsünü almak.
2. Nokta	Bütün atomların merkezi bir noktaya göre görüntüsünü almak (inversiyon).
3. Asıl eksen	Cismi bu eksen etrafında eşit basamaklar halinde veya sürekli şekilde döndürmek.
4. Tali eksen	Cismi bu eksen etrafında bir basamak döndürdükten sonra bu eksene dik bir düzleme göre ayna görüntüsünü almak.

Tablo 3.1. Simetri öğeleri ve simetri işlemleri.

I simetri merkezine göre görüntü almakla atomun bütün koordinatlarının işareti değişir. Inversiyon olarak bilinen bu işlemin I ile göstereceğiz. P(x,y,z) noktası için

$$IP(x,y,z)=P(-x,-y,-z), \quad I^n = \begin{cases} E, & n \text{ çift ise} \\ I, & n \text{ tek ise} \end{cases}$$

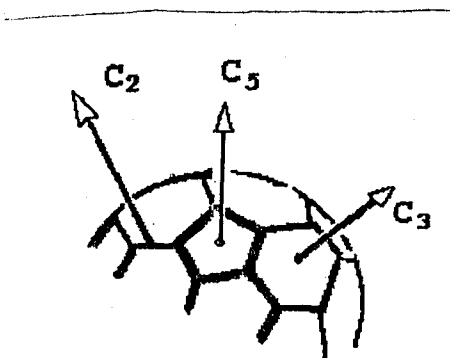
Burada E, cismi dönüşümden önceki haline getiren birim dönüşüm elemanıdır. n basamaklı asıl eksen C_n , tali eksen ise S_n ile gösteriliyor. Burada n , dönmenin mertebesidir. Bu öğeleri temel alan simetrik dönüşüm işlemlerini de aynı harflerin italigi ile gösterebiliriz.

3.2.2. Icosahedron'un Simetri Grupları: Y ve Y_h

Nokta grupları içerisinde en kapsamlı ve en karmaşık olanları Y ve Y_h gruplarıdır. Bu gruplar Icosahedron veya dodecahedron grupları olarak adlandırılır. Icosahedron cismi yirmi eşkenar üçgenden kurulu, kapalı, düzgün bir cisimdir. Dodecahedron ise on iki eşkenar beşgenden kurulu, düzgün, yine kapalı bir cisimdir. Bu iki cisim arasında simetri grubu açısından sıkı bir bağ vardır. Dodecahedron'un yüzlerinin orta noktası, Icosahedron'un köşelerine karşılık gelir. Şimdi Icosahedron ile Dodecahedron'un ortak simetri grupları olan Y ve Y_h gruplarını ayrı ayrı inceleyelim.

3.2.2.1. Y Grubu

Y grubunun öğeleri, Icosahedron veya dodecahedron cisimlerinin simetrik dönme asıl eksenlerinden ibarettir. Bu cisimlerin beş basamaklı 6, üç basamaklı 10 ve iki basamaklı 15 tane asıl simetri eksenleri vardır.



Şekil 3.1 Y grubunun simetri öğeleri

Y grubunun simetrik dönüşüm işlemleri,

$$Y: E, C_2^1(i), C_3^1(j), C_3^2(j), C_5^1(k), C_5^2(k), C_5^3(k), C_5^4(k),$$

$$(i=1,2,\dots,15; \quad j=1,2,\dots,10; \quad k=1,2,\dots,6)$$

ile verilir. Buradan görüldüğü gibi Y grubunun 60 tane simetrik dönüşüm işlem elemanı vardır.

Şimdi geometrik özelliklerden yararlanarak Y grubunun sınıflarını belirleyelim. $C_2(i)$ eksenini etrafındaki her yarım devirlik dönme, $C_3(j)$ eksenlerini ikişer ikişer karşılıklı birbirlerinin yerine ve $C_5(k)$ eksenlerini de aynı şekilde kendi aralarında ikişerli birbirlerinin yerine geçer. Benzer şekilde $C_3(j)$ eksenini etrafındaki simetrik bir dönme, hepsi karşılıklı ikişer ikişer olmak üzere, $C_2(i)$ eksenlerini birbirlerinin yerine ve $C_5(k)$ eksenlerini birbirlerinin yerine, ve yine aynı şekilde $C_5(k)$ eksenini etrafındaki simetrik bir dönme de $C_2(i)$ eksenlerini birbirlerinin yerine geçirir. Bu eksenler ardışık olarak yer değiştirirler. Bu nedenle Y simetri grubunun simetri eksenleri eşdeğerli eksenlerdir. Yani, 15 tane iki basamaklı, 10 tane üç basamaklı ve 6 tane de beş basamaklı olmak üzere, eşdeğerli üç eksen takımı vardır.

Her $C_3(j)$ eksenine dik bir $C_2(i)$ eksenini ve her $C_5(k)$ eksenine dik beş adet $C_2(i)$ eksenini vardır. C_2 eksenlerinin her biri $C_5(k)$ eksenlerinden iki tanesine diktir. Bu nedenle $C_3(j)$ ve $C_5(k)$ eksenlerinin her biri, birer iki yönlü eksendir. Böylece Y grubundaki simetri eksenlerinin her birinin hem eşdeğerli, hem de iki yönlü birer eksen oldukları görülür. Bu nedenle Y grubunun 60 simetrik dönüşüm elemanı aşağıdaki beş sınıfa ayrılır;

$$Y: E, C_3^1(i), C_3^1(j), C_3^2(j), C_5^1(k), C_5^4(k), C_5^2(k), C_5^3(k)$$

$$(i=1,2,\dots,15; \quad j=1,2,\dots,10; \quad k=1,2,\dots,6)$$

3.2.2.2. Y_h Grubu

Y_h Grubu, Icosahedron dodecohedron için ortak olan tam simetri dönüşümleri grubudur. Bu grup, Y grubuna simetri merkezi ilave edilerek elde edilir. Yani Y_h

grubu, Y grubu ile C_i : E, I inversiyon grubunun doğrudan çarpımından elde edilen gruptur:

$$Y_h: Y \otimes C_i$$

Bu grubun 120 tane simetrik dönüşüm elemanı vardır.

$$Y_h: E, C_2^1(i), C_3^1(j), C_3^2(j), C_5^1(k), C_5^2(k), C_5^3(k), C_5^4(k), I, C_2^1(i)I, \\ C_3^1(j)I, C_3^2(j)I, C_5^1(k)I, C_5^2(k)I, C_5^3(k)I, C_5^4(k)I$$

$$(i=1,2,\dots,15; \quad j=1,2,\dots,10; \quad k=1,2,\dots,6)$$

Şimdi inversiyon elemanı ile başka bir elemanın çarpımını içeren elemanların ekseninden geçen geometrik karşılıklarına bakalım. Y_h grubunda $C_2(i)$ eksenlerine dik $\sigma_d^{(i)}$ simetri düzlemleri vardır. (Düzgün yirmiyüzlü ve düzgün onikiyüzlü cisimlerin, her biri iki C_5 ekseninden geçen, 15 tane simetri düzlemi vardır.) Bu nedenle

$$I = C_2^1(i)\sigma_d^{(i)} \quad (i=1, 2, \dots, 15)$$

yazılabilir. Buradan

$$C_2^1(i)I = C_2^1(i)C_2^1(i)\sigma_d^{(i)} = \sigma_d^{(i)}$$

bulunur.

Benzer şekilde $C_3^1(j)$ ve $C_3^2(j)I$ elemanlarına bakmak için $I = C_2^1(j)\sigma_h^{(j)}$ yazalım. Burada $C_2(j)$ ekseninin $C_3(j)$ eksenini boyunca yöneldiği varsayılmıştır. Grubun elemanları arasında $C_2(j)$ yoktur. Bu durumda;

$$C_3^1(j)I = C_3^1(j)C_2^1(j)\sigma_h^{(j)} = C_6^2(j)C_6^3(j)\sigma_h^{(j)} = C_6^3(j)\sigma_h^{(j)} = S_6^3(j) \\ C_3^2(j)I = C_3^2(j)C_2^1(j)\sigma_h^{(j)} = C_6^4(j)C_6^3(j)\sigma_h^{(j)} = S_6^1(j), \quad (j=1,2,\dots,10)$$

Ayrıca,

$$C_3^1(j) = C_6^2(j) = S_6^2(j), \quad C_3^2(j) = C_6^4(j) = S_6^4(j), \quad I = C_2^1(j)\sigma_h^{(j)} = S_6^3(j)$$

olduğunu dikkate alırsak Y_h grubunun simetri dönüşüm elemanlarından altı basamaklı dönme-yansıma elemanları ile gösterebileceğiz demektir. Aynı kural ile ,

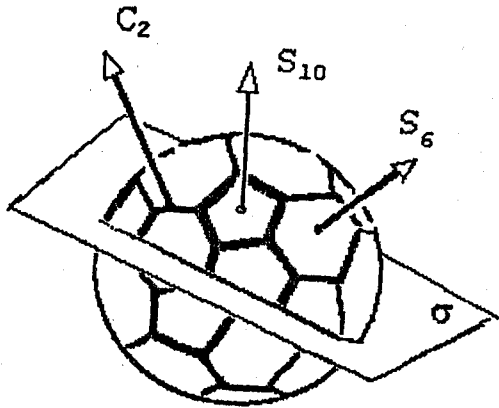
$$\begin{aligned} C_5^1(k)I &= S_{10}^7(k), & C_5^2(k)I &= S_{10}^9(k), & C_5^3(k)I &= S_{10}^1(k), & C_5^4(k)I &= S_{10}^3(k), \\ I &= S_{10}^5(k), & C_5^1(k) &= S_{10}^2(k), & C_5^2(k) &= S_{10}^4(k), & C_5^3(k) &= S_{10}^6(k), & C_5^4(k) &= S_{10}^8(k), \\ (k &= 1, 2, \dots, 6) \end{aligned}$$

bulunur. Yani Y_h grubunun elemanlarının bir kısmı da (Y grubunun elemanlarından I ile çarpılarak elde edilsin edilmesin) on basamaklı dönme-yansıma simetrik dönüşüm elemanları gösterebiliriz.

Böylece Y_h grubunun geometrik simetri öğeleri aşağıdaki gibi elde edilirler:

$$C_2(i), \sigma_d^{(j)}, S_6(j), S_{10}(k), \quad i = 1, 2, \dots, 15, \quad j = 1, 2, \dots, 10, \quad k = 1, 2, \dots, 6$$

Bu şekilde Y_h simetri grubunun on beş tane iki basamaklı simetri eksenini, bu eksenleri ihtiva eden on beş tane simetri düzlemi on tane altı basamaklı dönme yansıma eksenine sahip olduğu görülür.



Şekil 3.2 Y_h grubunun simetri öğeleri

C_{60} molekülünün nokta simetri grubu Y_h simetri grubudur. Şimdi bu nokta gruba dahil olan düzgün çok yüzlü cisimlerin simetri öğeleri ile simetrik dönüşüm elemanlarının ayrıntılarını özetlersek:

i) Her iki düzgün çok yüzlünün altı adet S_{10} tali eksen takımı vardır. Bu eksenler dodecohedronda zıt yüzlerin ortasında, Icosahedronda ise zıt köşelerden geçerler. S_{10} tali ekseninin her birine göre aşağıdaki simetrik dönüşüm işlemleri yapılabilir :

$$S_{10}^1, S_{10}^2 = C_5, S_{10}^3, S_{10}^4 = C_5^2, S_{10}^5 = I, S_{10}^6, S_{10}^7, S_{10}^8 = C_5^4, S_{10}^9, S_{10}^{10} = E$$

ii) Her iki çok yüzlünün on adet S_6 tali eksen vardır. Bu eksenler dodecohedronda zıt köşelerden, Icosahedronda ise karşılıklı yüzlerin merkezlerinden geçerler. Bu eksenlere göre aşağıdaki simetrik dönüşüm işlemleri yapılabilir :

$$S_6^1, S_6^2 = C_3^1, S_6^3 = S_2^1 = I, S_6^4 = C_3^2, S_6^5, S_6^6 = E$$

iii) S_{10} tali eksenleri ile çakışık altı adet 5 basamaklı C_5 eksen takımı vardır. Bu eksenlerden her biri ile S_{10} dönüşümleri altında tekrarlanmış olan

$$C_5^1, C_5^2, C_5^3, C_5^4, C_5^5 = E$$

simetri dönüşümleri yapılabilir.

iv) S_6 tali eksenleriyle çakışık on adet C_3 eksen takımı vardır. Bunlar da S_6 dönüşümleri altında anılmış olan $C_3^1, C_3^2, C_3^3 = E$ simetrik dönüşümlerini yapabiliriz.

v) Her iki düzgün çok yüzlüde cisim merkezine göre karşılıklı duran ayrıtların orta noktalarından geçen on beş adet C_2 eksen vardır. Bu eksenler on beş simetrik dönüşüm işlemine imkan verirler.

vi) Her biri iki adet C_2 eksen ile iki adet C_5 ekseninden geçen on beş adet simetri düzlemi bulunmaktadır. Bu düzlemlere göre de on beş simetrik dönüşüm işlemi yapılabilir.

Şimdi Y_h grubunun sınıflarını belirleyelim. Yukarıda belirtilen geometrik teoremlerden $\sigma_d^{(i)}$ düzlemlerinin eşdeğerli düzlemler ; $C_2(i)$, $S_6(j)$ ve $S_{10}(k)$ eksenlerinin ise hem eşdeğerli hem de iki-yönlü eksenler oldukları kolayca görülür. Buna göre Y_h grubunun on sınıfı aşağıdaki gibi olur.

$$Y_h: E; \underline{C_2^1(i)}; \underline{\sigma_d^{(i)}}; \underline{S_6^1(j), S_6^3(j)}; \underline{S_6^2(j), S_6^4(j)}; \underline{S_{10}^1(k), S_{10}^9(k)}; \underline{S_{10}^2(k), S_{10}^8(k)};$$

$$\underline{S_{10}^3(k), S_{10}^6(k)}; \underline{S_{10}^{41}(k), S_{10}^5(k)}; I$$

$$i = 1, 2, \dots, 15, \quad j = 1, 2, \dots, 10, \quad k = 1, 2, \dots, 6$$

Simetri dönüşümlerinin eşitlerini yerlerine koymak suretiyle bir başka şekilde yazacak olursak var olan toplam 120 simetrik dönüşüm işlemi şu şekilde sınıflanır:

$$E, 12C_3^1, 12C_3^2, 20C_2^1, 15C_2^1, I, 12S_{10}^1, 12S_{10}^3, 20S_6^1, 15\sigma_v,$$

3.3. C_{60} Molekülünün Geometrik Yapısı:

Icosahedron cisminden başlayarak C_{60} molekülünün yapısını oluşturabiliriz. Icosahedron cisminin dış küresini çizdiğimiz varsayalım. Bu kürenin, cismin beş basamaklı eksenlerinin küreyi deldiği noktalar etrafında bu noktayı merkez alan eşkenar beşgenler ve cismin yüzeylerinin merkezinden geçen üç basamaklı eksenler etrafında da beşgenler ile eşit kenar uzunluklu eşkenar altıgenler oluşacak şekilde törpülendiğini düşünersek meydana gelen kapalı cisim C_{60} molekülünün geometrik modeli olacaktır. Çünkü bu şekilde ayırt uzunlukları eşit ve eşdeğerli, 60 köşeli, kapalı, düzgün bir cisim meydana gelmiş olur. Ayırtların sayısı 90 tanedir. Bu şekilde kurulan cisimde düzgün beşgenler birbirlerinden tamamen ayrılmışlardır. 'Ayrık Beşgenler kuralı' olarak bilinen bu kriterin fulleren ailesi moleküllerinin kararlılığı açısından önemli olduğu bulunmuştur. Çünkü beşgenlerin bitişik olması halinde fazladan yerel gerilmeler ortaya çıkmaktadır. Ayrıca bu kuralın geçerli olduğu en küçük fulleren C_{60} 'dir.

Topolojik olarak cismin ayrıtları ile molekülün kimyasal σ bağlarının çalıştığını düşünürsek bu bağlar aynı düzlem üzerinde bulunamazlar, piramitleşirler. Bu sebeple σ bağları saf s-yörüngesi karakterinde, π bağları da saf p-yörüngesi karakterinde değildir. Bağlar arasındaki açılar düzgün altıgenlerle $2\pi/3$ radyan, düzgün beşgenlerde $3\pi/5$ radyandır. Standart adlandırmaya göre buradaki σ -bağı melezleşmesi sp^2 (grafit) ve sp^3 (elmas) arasında bir melezleşmedir. C atomu civarındaki yüzeyin kıvrıklığı en basit olarak piramitleşme açısı ile belirtilebilir. Atomlar bir küre yüzeyi çizilen teğet düzlem ile aynı atomdan geçen ayrıtlardan biri arasında kalan açıya piramitleşme açısı denir. C_{60} molekülü için piramitleşme açısı 11,64'dür.

Bu cismin simetri grubu, icosahedron cisminin simetri grubu ile aynı olup bu grubun bütün özelliklerini taşır. Icosahedron grubunun, molekülün spektroskopik özelliklerinin incelenmesi bakımından önemli olan indirgenemez temsillerin karakter tabloları verilecektir.

3.4. Y'nin İndirgenemez Temsilleri

Bu bölümde Y grubunun bazı özelliklerini ve matris temsillerini vereceğiz. Bu grup beş nesnenin permütasyonu ile elde edilen altmış elemanlı bir gruptur. C_{60} molekülünün keşfinden sonra fizik açısından önemli bir yere sahip olan Y grubunun karakter tablosu (3.2)'de verilmiştir.

Y	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5
	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$
A_g	1	1	1	1	1
F_{1g}	3	τ	σ	0	-1
F_{2g}	3	σ	τ	0	-1
G_g	4	-1	-1	1	0
H_g	5	0	0	-1	1

Tablo 3.2. Y'in karakter tablosu

Daha önce belirtildiği gibi tablonun ilk sütunundaki rakamlar aynı zamanda grubun indirgenemez temsillerinin mertebesini belirtmektedir. İcosahedron Y, 5x5, 4x4, 1x1 ve iki tane 3x3 olmak üzere toplam 5 tane indirgenemez matris temsiline sahiptir. Bu tabloyu kullanarak bazı sabitleri bulabiliriz.

Bir boyutsal (1x1) indirgenemez temsili birim elemandır. 3x3 indirgenemez matris temsilini bulmak için bir jeneratör düşünelim. Bu jeneratör; $G = e^{i\omega_1}$ den hesaplanır. 3x3 indirgenemez matris temsilleri Z_1 ve Z_2 ile verilsin.

$$Z_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sigma & \tau & 1 \\ -\tau & 1 & \sigma \\ -1 & \sigma & \tau \end{pmatrix}, Z_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\tau & \sigma & 1 \\ -\sigma & 1 & \tau \\ -1 & \tau & \sigma \end{pmatrix}$$

Buradaki σ ve τ arasındaki bağıntılar aşağıdaki şekildedir.

$$\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}, \sigma = \frac{1-\sqrt{5}}{2}, \tau + \sigma = 1, \tau\sigma = -1, \sigma^2 = \sigma + 1, \tau^2 = \tau + 1$$

Y'nin 4x4 jeneratör ve indirgenemez matris temsilleri aşağıdaki gibidir.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{-1}{6} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{5}}{6} & \frac{-1}{2\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{2\sqrt{3}} & \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}} & \frac{-1}{2} \\ \frac{-\sqrt{5}}{3} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{-\sqrt{5}}{\sqrt{12}} & \frac{-1}{2} \end{pmatrix}$$

Y'nin 5x5 jeneratörü ve indirgenemez matris temsili aşağıdaki şekildedir.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 3-\sqrt{5} & -\sqrt{15} & 3+\sqrt{5} & -2\sqrt{5} \\ -3+\sqrt{5} & -4 & -\sqrt{3}(1+\sqrt{5}) & 0 & 4 \\ -\sqrt{15} & \sqrt{3}(1+\sqrt{5}) & -1 & -\sqrt{3}(1-\sqrt{5}) & 2\sqrt{3} \\ 3+\sqrt{5} & 0 & -\sqrt{3}(1-\sqrt{5}) & 4 & 4 \\ 2\sqrt{5} & 4 & -2\sqrt{3} & -4 & 0 \end{pmatrix}$$

3.5. Y_h 'in indirgenemez Matris Temsilleri

Y_h 'in elemanları, Y 'nin (-1) ile çarpılıp döndürülmesinden elde edilir Y 'nin indirgenemez matris temsillerini Z_2 diye adlandırdığımız Z_2 kare matrisi ile hesaplayabiliriz. $Z_2 \times Y$ denklemi bize Y_h 'in indirgenemez matris temsillerini verir. $Z^2 = 1$ olmalıdır. Y_h 'in karakter tablosu tablo (3.3)'teki gibidir.

Y_h	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5	K_6	K_7	K_8	K_9	K_{10}
	1	$12C_3$	$12C_3^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
F_{1g}	3	τ	$-\sigma$	0	-1	3	$-\sigma$	τ	0	-1
F_{2g}	3	$-\sigma$	τ	0	-1	3	τ	$-\sigma$	0	-1
G_g	4	-1	-1	1	0	4	-1	-1	1	0
H_g	5	0	0	-1	1	5	0	0	-1	1
A_u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
F_{1u}	3	τ	$-\sigma$	0	-1	-3	σ	$-\tau$	0	1
F_{2u}	3	$-\sigma$	τ	0	-1	-3	$-\tau$	σ	0	1
G_u	4	-1	-1	1	0	-4	1	1	-1	0
H_u	5	0	0	-1	1	-5	0	0	1	-1

Tablo 3.3. Y_h 'in karakter tablosu

BÖLÜM 4

C₆₀ MOLEKÜLÜNÜN NORMAL TİTREŞİM FREKANSLARI

4.1 Giriş

Bir molekülün titreşim frekanslarını bulmak için değişik metotlar vardır. Molekül içindeki atomların titreşim frekanslarının büyüklükleri kuantum mekaniksel yaklaşımla bulunabileceği gibi, klasik olarak da bulunabilir. Titreşim frekanslarının sınıflandırılması ise tamamen grup teorik bir analiz gerektirmektedir. Bu bölümde önce titreşim frekanslarının sınıflandırılmasını inceleyecek daha sonra da değerlerini bulacağız.

4.2. Moleküllerin Titreşim Frekansları

Bir molekülün titreşim frekanslarının bulunmasında simetri önemli bir rol oynar. Konunun kolay anlaşılması için Ozon (O₃) molekülünü ele alalım. O₃ molekülünün simetrilerinin oluşturduğu grup C₃ ≈ S₃ olup daha önce ele alınmıştı. Bu molekül bir eşkenar üçgenin köşelerine yerleşmiş oksijen moleküllerinden oluşur.

Lagrange denklemleri kurup çözmeden önce her bir parçacığın iki yönde serbest titreşimlerinden titreşimlerin, mod sayısını ve çeşidini bulabiliriz. Bundan dolayı 3x2=6 mod sayısı vardır. Bunlardan iki tanesi saf çevrimler (iki bağımsız yönde) ve üçüncüsünde normal eksen civarında düzlemde saf bir dönmeye karşılık gelir. Böylece bir tane dönme, iki çevrim, üç tane de titreşim modu bulabiliriz. Şekildeki sistemin potansiyel enerjisini bulmaya çalışalım.

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\sigma_a} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}}_{C_3} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

$$\sigma_a: \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3: \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Genel potansiyel denklemimiz;

$$V = \frac{k}{2} [a_1(x_1 - x_2) + b_1(y_1 - y_2)]^2 + \frac{k}{2} [a_2(x_1 - x_3) + b_2(y_1 - y_3)]^2 + \frac{k}{2} [a_3(x_2 - x_3) + b_3(y_2 - y_3)]^2$$

Burada a_i ve b_i sabitlerini bulmalıyız. İşte bu noktada simetri bize büyük kolaylık sağlar. Çünkü $RH=H$ olmalıdır. Burada H Hamiltonian, R ise simetri operasyonudur. σ_a operatörünü V potansiyeli üzerine uygulayalım.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_a V = \frac{k}{2} [a_1(-x_1 + x_3) + b_1(y_1 - y_3)]^2 + \frac{k}{2} [a_2(-x_1 + x_2) + b_2(y_1 - y_2)]^2 + \frac{k}{2} [a_3(-x_3 + x_2) + b_3(y_3 - y_2)]^2$$

$$\sigma_a V = V \Rightarrow a_2 = -a_1, \quad b_1 = b_2, \quad a_3 = a_3, \quad b_3 = -b_3 = 0 \quad \text{olarak buluruz.}$$

Yeni potansiyel denklemimiz;

$$V = \frac{k}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=i+1}^3 [a_i(u_i - u_j)]^2$$

$$V = \frac{k}{2} [a_1(x_1 - x_2) + b_1(y_1 - y_2)]^2 + \frac{k}{2} [-a_2(x_1 - x_3) + b_2(y_1 - y_3)]^2 + \frac{k}{2} [a_3(x_2 - x_3)]^2$$

Aynı şekilde C_3 operatörünü V potansiyeline uygulayalım.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 \\ -1 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$C_3 V = \frac{k}{2} \left[\left(\frac{a_1}{2} - \frac{\sqrt{3}b_1}{2} \right) (x_1 - x_3) + \left(\frac{\sqrt{3}a_1}{2} + \frac{b_1}{2} \right) (y_1 - y_3) \right]^2 +$$

$$\frac{k}{2} \left[\left(\frac{a_2}{2} - \frac{\sqrt{3}b_2}{2} \right) (x_2 - x_3) + \left(\frac{\sqrt{3}a_2}{2} + \frac{b_2}{2} \right) (y_2 - y_3) \right]^2 + \frac{k}{2} \left[\frac{a_3}{2} (x_2 - x_1) + \frac{\sqrt{3}a_2}{2} (y_2 - y_1) \right]^2$$

$$C_3 V = V \Rightarrow b_1 = \sqrt{3}a_1, a_3 = -2a_1, a_2 = -a_1, b_2 = \sqrt{3}a_1 = b_1 \text{ olarak bulunur.}$$

$$V = \frac{k}{2} [a_1(x_1 - x_2) + \sqrt{3}a_1(y_1 - y_2)]^2 + \frac{k}{2} [-a_1(x_1 - x_3) + \sqrt{3}a_1(y_1 - y_3)]^2 + \frac{k}{2} [-2a_1(x_2 - x_3)]^2$$

Normalizasyon koşulunu kullanarak;

$$a_1^2 + (\sqrt{3}a_1)^2 = 1 \Rightarrow a_1 = \mp \frac{1}{2}$$

$a = -\frac{1}{2}$ için potansiyel denklemimiz;

$$V = \frac{k}{2} \left[\frac{1}{2} (x_2 - x_1) + \frac{\sqrt{3}}{2} (y_2 - y_1) \right]^2 + \frac{k}{2} \left[\frac{1}{2} (x_1 - x_3) + \frac{\sqrt{3}}{2} (y_3 - y_1) \right]^2 + \frac{k}{2} [(x_2 - x_3)]^2$$

$$V = \frac{k}{2} \left[\frac{1}{2} x_1^2 + \frac{3}{2} y_1^2 + \frac{5}{4} x_2^2 + \frac{3}{4} y_2^2 + \frac{5}{4} x_3^2 + \frac{3}{4} y_3^2 - \frac{1}{2} x_1 x_2 - \frac{3}{2} y_1 y_2 + \frac{\sqrt{3}}{2} x_2 y_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} y_1 x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} x_1 y_2 \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} x_1 x_3 - \frac{3}{2} y_1 y_3 - \frac{\sqrt{3}}{2} x_1 y_3 + \frac{\sqrt{3}}{2} x_3 y_3 + \frac{\sqrt{3}}{2} x_3 y_1 - 2x_2 x_3 \right]$$

$$L = T - V$$

$$T = \frac{m}{2} [\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{y}_3^2]$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_s} \right) - \frac{\partial L}{\partial r_s} = 0, \quad r_s = a_s e^{i\omega t} = a_s e^{i\sqrt{\frac{k\lambda}{m}} t}, \quad s=1,2,\dots,6, \quad r_1 = x_1, r_2 = y_1, \dots, r_6 = y_3$$

$$\begin{aligned}
\ddot{x}_1 + \frac{k}{m} \left[\frac{1}{2}x_1 - \frac{1}{4}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_2 - \frac{1}{4}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_3 \right] &= 0 & \ddot{y}_2 + \frac{k}{m} \left[\frac{\sqrt{3}}{4}x_1 - \frac{3}{4}y_1 + \frac{\sqrt{3}}{4}x_2 + \frac{3}{4}y_2 \right] &= 0 \\
\ddot{y}_1 + \frac{k}{m} \left[\frac{3}{2}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}x_2 - \frac{3}{4}y_2 - \frac{\sqrt{3}}{4}x_3 - \frac{3}{4}y_3 \right] &= 0 & \ddot{x}_3 + \frac{k}{m} \left[-\frac{1}{4}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_1 - x_2 + \frac{5}{4}x_3 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_3 \right] &= 0 \\
\ddot{x}_2 + \frac{k}{m} \left[\frac{1}{4}x_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_1 + \frac{5}{2}x_2 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_2 - x_3 \right] &= 0 & \ddot{y}_3 + \frac{k}{m} \left[\frac{\sqrt{3}}{4}x_1 - \frac{3}{4}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}x_3 + \frac{3}{4}y_3 \right] &= 0
\end{aligned}$$

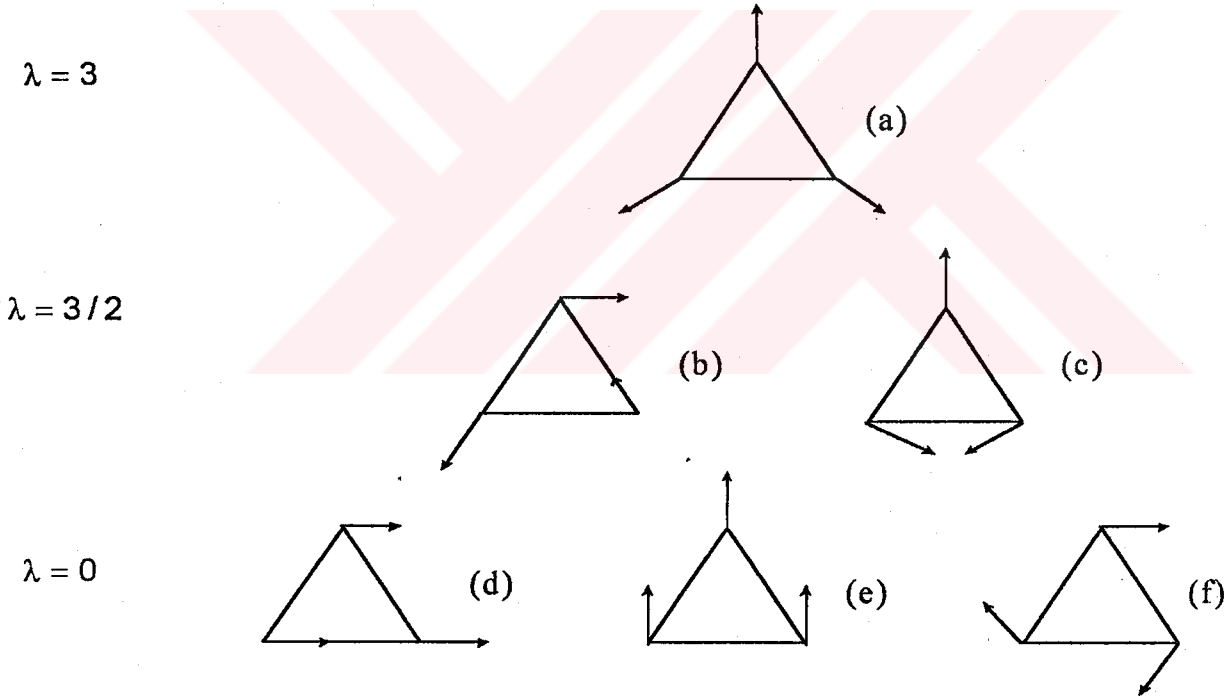
$$\lambda = \frac{m\omega^2}{k} \Rightarrow \omega^2 = \frac{k}{m}\lambda, \quad r_s = a_s e^{i\omega t}$$

$$\begin{aligned}
\ddot{x}_1 &= -a_1 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 x_1 = -\frac{k}{m} \lambda x_1 \\
\ddot{y}_1 &= -a_2 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 y_1 = -\frac{k}{m} \lambda y_1 \\
\ddot{x}_2 &= -a_3 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 x_2 = -\frac{k}{m} \lambda x_2 \\
\ddot{y}_2 &= -a_4 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 y_2 = -\frac{k}{m} \lambda y_2 \\
\ddot{x}_3 &= -a_5 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 x_3 = -\frac{k}{m} \lambda x_3 \\
\ddot{y}_3 &= -a_6 \omega^2 e^{i\omega t} = -\omega^2 y_3 = -\frac{k}{m} \lambda y_3
\end{aligned}$$

Bu sonuçları son bulduğumuz denklemlerde yerine koyarsak;

$$\begin{aligned}
\frac{k}{m} \left[\left(\frac{1}{2} - \lambda \right) x_1 - \frac{1}{4}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_2 - \frac{1}{4}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_3 \right] &= 0 \\
\frac{k}{m} \left[\left(\frac{3}{2} - \lambda \right) y_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}x_2 - \frac{3}{4}y_2 + \frac{\sqrt{3}}{4}x_3 - \frac{3}{4}y_3 \right] &= 0 \\
\frac{k}{m} \left[-\frac{1}{4}x_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_1 + \left(\frac{5}{4} - \lambda \right) x_2 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_2 - x_3 \right] &= 0 \\
\frac{k}{m} \left[-\frac{\sqrt{3}}{4}x_1 - \frac{3}{4}y_1 + \frac{\sqrt{3}}{4}x_2 + \left(\frac{3}{4} - \lambda \right) y_2 \right] &= 0 \\
\frac{k}{m} \left[-\frac{1}{4}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{4}y_1 - x_2 + \left(\frac{5}{4} - \lambda \right) x_3 - \frac{\sqrt{3}}{4}y_3 \right] &= 0 \\
\frac{k}{m} \left[\frac{\sqrt{3}}{4}x_1 - \frac{3}{4}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{4}x_3 + \left(\frac{3}{4} - \lambda \right) y_3 \right] &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{vmatrix}
 \frac{1}{2}-\lambda & 0 & -\frac{1}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\
 0 & \frac{3}{2}-\lambda & -\frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} \\
 -\frac{1}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{5}{4}-\lambda & \frac{\sqrt{3}}{4} & -1 & 0 \\
 -\frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4}-\lambda & 0 & 0 \\
 -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & -1 & 0 & \frac{5}{4}-\lambda & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\
 \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4}-\lambda
 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = 0, 0, 0, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 3 \text{ olarak bulunur.}$$

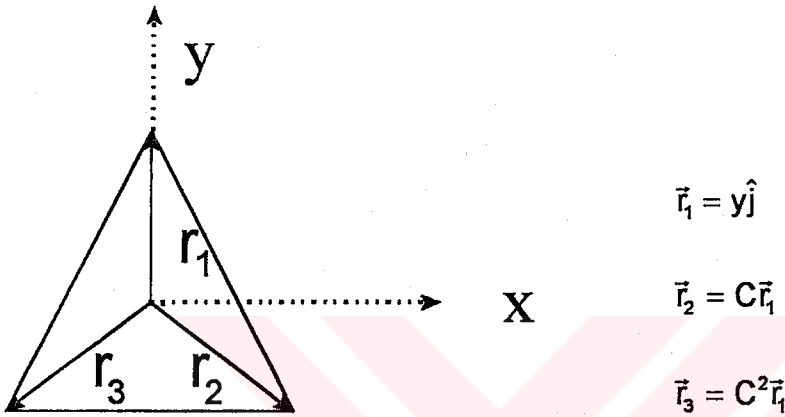


Şekil 4.1. Ozon molekülünün normal modları.

Ancak atom sayısı çok olan moleküllerde bu metot karmaşık bir metottur. Eğer potansiyeli aşağıdaki şekilde yazarsak

$$V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^{N-1} \frac{1}{2} k_{ij} \left[(\bar{U}_i - \bar{U}_j) \cdot \frac{\bar{r}_{ij}}{|\bar{r}_{ij}|} \right]^2$$

burada $\bar{U}_i, \bar{U}_j$ kartezyen bileşenler ve $\bar{r}_{ij}$ molekülün merkezinden atoma olan vektördür. Aynı hesapları bu metotla yaptığımızda potansiyel kolayca bulunur. Burada da simetri, pozisyon vektörlerinin bulunmasında önemli rol oynar.



$$V = \frac{k_{12}}{2} \left[(x_1 - x_2)\hat{i} + (y_1 - y_2)\hat{j} \right] \frac{\bar{r}_1 - \bar{r}_2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} + \frac{k_{23}}{2} \left[(x_2 - x_3)\hat{i} + (y_2 - y_3)\hat{j} \right] \frac{\bar{r}_2 - \bar{r}_3}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_3|} + \frac{k_{13}}{2} \left[(x_1 - x_3)\hat{i} + (y_1 - y_3)\hat{j} \right] \frac{\bar{r}_1 - \bar{r}_3}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_3|}$$

Potansiyel Lagrange, Newton veya Hamiltonion denklemlerinde yerine konursa aynı frekanslar elde edilebilir.

4.3. Titreşim Frekanslarının Sınıflandırılması

Daha önce C_{60} molekülünün simetri grubu olan I_h grubunun 3x3 matris temsillerini elde etmiştik. Frekansları sınıflandırmak için C_{60} molekülünün "regular" temsilini bulmamız gerekmektedir. Bunun için C_{60} molekülündeki atomların $M_1, \dots, M_{60}$ kadar numaralandırılabilir. Biraz gayretle, simetri işlemi neticesinde hangi atomun hangi atomla yer değiştirdiğini bulabiliriz. X işlemi neticesinde atomların yer değiştirmeleri Tablo (4.1)'deki gibi olacak Y işlemi neticesinde ise Tablo (4.2)'deki gibi olacaktır.

1 → 60	2 → 59	3 → 58	4 → 57	5 → 56
6 → 55	7 → 54	8 → 53	9 → 52	10 → 51
11 → 50	12 → 49	13 → 48	14 → 47	15 → 46
16 → 45	17 → 44	18 → 43	19 → 42	20 → 41
21 → 40	22 → 39	23 → 38	24 → 37	25 → 36
26 → 35	27 → 34	28 → 33	29 → 32	30 → 31
31 → 30	32 → 29	33 → 28	34 → 27	35 → 26
36 → 25	37 → 24	38 → 23	39 → 22	40 → 21
41 → 20	42 → 19	43 → 18	44 → 17	45 → 16
46 → 15	47 → 14	48 → 13	49 → 12	50 → 11
51 → 10	52 → 9	53 → 8	54 → 7	55 → 6
56 → 5	57 → 4	58 → 3	59 → 2	60 → 1

Tablo (4.1). X Operasyonu neticesinde atomların yer deęiřtirmeleri.

1 → 14	2 → 15	3 → 6	4 → 28	5 → 22
6 → 7	7 → 2	8 → 23	9 → 32	10 → 33
11 → 16	12 → 38	13 → 8	14 → 13	15 → 3
16 → 29	17 → 40	18 → 47	19 → 24	20 → 46
21 → 10	22 → 21	23 → 1	24 → 39	25 → 34
26 → 55	27 → 18	28 → 11	29 → 4	30 → 54
31 → 48	32 → 27	33 → 5	34 → 45	35 → 42
36 → 59	37 → 26	38 → 19	39 → 12	40 → 37
41 → 50	42 → 53	43 → 36	44 → 58	45 → 20
46 → 25	47 → 9	48 → 43	49 → 56	50 → 51
51 → 44	52 → 60	53 → 30	54 → 35	55 → 17
56 → 57	57 → 52	58 → 41	59 → 31	60 → 49

Tablo (4.2). Y Operasyonu neticesinde atomların yer deęiřtirmeleri.

Bu iki yer deęiřtirme bize 60 elemanlı Icosahedral grubunu verir. Bir de buna ek olarak inversiyon iřlemi neticesinde deęiřtirmeler elde edilmelidir. Bu Tablo (4.3)'de verilmiřtir.

Burada titreşim frekanslarını sınıflandırmak için 180x180 indirgenebilir temsilin indirgenemez temsiller cinsinden nasıl yazıldığını bakmak yeterli olacaktır. Daha önce bu konudan bahsedilmişti. Şimdi diklik şartından faydalanarak aşağıdaki dağılımı bulabiliriz.

$$\begin{aligned}\Gamma_{180} &= 2A_g + 3F_{1g} + 4F_{2g} + 6G_g + 8H_g + A_u + 4F_{1u} + 5F_{2u} + 6G_u + 7H_u \\ &= \Gamma_{\text{vib}} + \Gamma_{\text{dönme}} + \Gamma_{\text{öteleme}}\end{aligned}$$

Bu dağılım aynı zamanda öteleme ve dönme frekanslarını da içermektedir. Bunları yine tablo yardımıyla ayırt edebiliriz. Tablodan açıkça görülebileceği gibi x, y, z, değişmezleri ötelemelere, x^2, y^2, z^2 ise dönmelere karşılık gelmektedir. Bu işlem yapıldığında

$$\Gamma_{\text{vib}} = \Gamma_{180} - \Gamma_{\text{dönme}} - \Gamma_{\text{öteleme}}$$

bulunur. Burada 46 normal titreşim frekansı olduğu görülmektedir. Bunların 14 tanesi aktif moddur ve ölçülebilir.

4.4. Titreşim Frekanslarının Bulunması

Bu bölümde bir önceki bölümde sınıflandırdığımız titreşim frekanslarını bulacağız. Bunun için yine simetriden faydalanacağız. Burada C_{60} molekülü içindeki her bir atomu noktasal kütle olarak ele alıp bu kütlelerin birbirine yaylarla bağlandığını düşünelim. Bu sistemin potansiyel enerjisi şu şekilde yazılır.

$$V = \sum_{i=1}^{60} \sum_{j=i+1}^{59} \frac{1}{2} k_{ij} \left[\left(\vec{U}_i - \vec{U}_j \right) \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} \right]^2$$

Burada $\hat{U}_k = x_k \hat{i} + y_k \hat{j} + z_k \hat{k}$ ve $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ i atomu ile j atomu arasındaki vektörel uzaklıktır, $\vec{r}_i$ C_{60} atomunun merkezinden i. İnci atoma vektörel uzaklıktır. Sistemin geometrisinden faydalanarak $\vec{r}_i$ vektörleri hesap edildi. Bu vektörler Tablo (4.4) de verildi.

$$r_1 = -ay + bz$$

$$r_2 = \frac{b}{2}(\tau x + \sigma y - z) + \frac{a}{2}(-x - \tau y + \sigma z)$$

$$r_3 = -ay - bz$$

$$r_4 = \frac{a}{2}(-x - \tau y - \sigma z) + \frac{b}{2}(\tau x + \sigma y + z)$$

$$r_5 = -\frac{a}{2}(-x + \tau y + \sigma z) + \frac{b}{2}(-\tau x + \sigma y + z)$$

$$r_6 = \frac{a}{2}(\sigma x - y - \tau z) + \frac{b}{2}(x + \tau y - \sigma z)$$

$$r_7 = \frac{a}{2}(x - \tau y - \sigma z) + \frac{b}{2}(-\tau x + \sigma y - z)$$

$$r_8 = \frac{a}{2}(-x - \tau y + \sigma z) + \frac{b}{2}(-\tau x - \sigma y - z)$$

$$r_9 = \frac{a}{2}(-\sigma x - y + \tau z) + \frac{b}{2}(-x - \tau y + \sigma z)$$

$$r_{10} = \frac{a}{2}(-x - \tau y - \sigma z) + \frac{b}{2}(-\tau x - \sigma y - z)$$

$$r_{21} = \frac{a}{2}(\tau x + \sigma y - z) + \frac{b}{2}(-\sigma x - y + \tau z)$$

$$r_{22} = \frac{a}{2}(-\tau x + \sigma y - z) + \frac{b}{2}(-\sigma x + y - \tau z)$$

$$r_{23} = \frac{a}{2}(-\sigma x - y - \tau z) + \frac{b}{2}(x + \tau y + \sigma z)$$

$$r_{24} = -ax - by$$

$$r_{25} = \frac{a}{2}(\tau x + \sigma y + z) + \frac{b}{2}(+\sigma x + y + \tau z)$$

$$r_{26} = \frac{a}{2}(-\tau x + \sigma y + z) + \frac{b}{2}(-\sigma x + y + \tau z)$$

$$r_{27} = ax - by$$

$$r_{28} = -bx - az$$

$$r_{29} = \frac{a}{2}(\tau x + \sigma y - z) + \frac{b}{2}(\sigma x + y - \tau z)$$

$$r_{30} = -bx + az$$

$$r_{11} = \frac{a}{2}(x - \tau y - \sigma z) + \frac{b}{2}(\tau x - \sigma y - z)$$

$$r_{12} = \frac{a}{2}(\sigma x - y + \tau z) + \frac{b}{2}(x - \tau y + \sigma z)$$

$$r_{13} = \frac{a}{2}(x - \tau y + \sigma z) + \frac{b}{2}(\tau x - \sigma y + z)$$

$$r_{14} = \frac{a}{2}(\sigma x - y - \tau z) + \frac{b}{2}(-x + \tau y + \sigma z)$$

$$r_{15} = \frac{a}{2}(-\sigma x - y - \tau z) + \frac{b}{2}(-x - \tau y - \sigma z)$$

$$r_{16} = \frac{a}{2}(-\tau x + \sigma y - z) + \frac{b}{2}(\sigma x - y + \tau z)$$

$$r_{17} = \frac{a}{2}(-\sigma x - y + \tau z) + \frac{b}{2}(x + \tau y - \sigma z)$$

$$r_{18} = \frac{a}{2}(-\tau x + \sigma y + z) + \frac{b}{2}(-\sigma x + y + \tau z)$$

$$r_{19} = \frac{a}{2}(\tau x + \sigma y + z) + \frac{b}{2}(-\sigma x - y - \tau z)$$

$$r_{20} = \frac{a}{2}(\sigma x - y + \tau z) + \frac{b}{2}(-x + \tau y - \sigma z)$$

$$r_{31} = bx + az$$

$$r_{32} = \frac{a}{2}(-\tau x - \sigma y - z) + \frac{b}{2}(-\sigma x - y - \tau z)$$

$$r_{33} = bx - az$$

$$r_{34} = -ax + by$$

$$r_{35} = \frac{a}{2}(\tau x - \sigma y + z) + \frac{b}{2}(\sigma x - y + \tau z)$$

$$r_{36} = \frac{a}{2}(-\tau x - \sigma y + z) + \frac{b}{2}(-\sigma x - y + \tau z)$$

$$r_{37} = ax + by$$

$$r_{38} = \frac{a}{2}(\sigma x + y - \tau z) + \frac{b}{2}(-x - \tau y + \sigma z)$$

$$r_{39} = \frac{a}{2}(\tau x - \sigma y - z) + \frac{b}{2}(\sigma x - y + \tau z)$$

$$r_{40} = \frac{a}{2}(-\tau x - \sigma y - z) + \frac{b}{2}(\sigma x + y + \tau z)$$

$$\begin{aligned}
r_{41} &= \frac{a}{2}(-\alpha x + y + \tau z) + \frac{b}{2}(x - \tau y - \alpha z) \\
r_{42} &= \frac{a}{2}(-\tau x - \alpha y + z) + \frac{b}{2}(\alpha x + y - \tau z) \\
r_{43} &= \frac{a}{2}(\tau x - \alpha y + z) + \frac{b}{2}(-\alpha x + y - \tau z) \\
r_{44} &= \frac{a}{2}(\alpha x + y + \tau z) + \frac{b}{2}(-x - \tau y + \alpha z) \\
r_{45} &= \frac{a}{2}(\tau x - \alpha y - z) + \frac{b}{2}(-\alpha x + y + \tau z) \\
r_{46} &= \frac{a}{2}(\alpha x + y - \tau z) + \frac{b}{2}(x + \tau y - \alpha z) \\
r_{47} &= \frac{a}{2}(-\alpha x + y - \tau z) + \frac{b}{2}(x - \tau y + \alpha z) \\
r_{48} &= \frac{a}{2}(-x + \tau y + \alpha z) + \frac{b}{2}(-\tau x + \alpha y + z) \\
r_{49} &= \frac{a}{2}(-\alpha x + y + \tau z) + \frac{b}{2}(-x + \tau y + \alpha z) \\
r_{50} &= \frac{a}{2}(-x + \tau y - \alpha z) + \frac{b}{2}(-\tau x + \alpha y - z) \\
r_{51} &= \frac{a}{2}(x + \tau y - \alpha z) + \frac{b}{2}(\tau x + \alpha y - z) \\
r_{52} &= \frac{a}{2}(\alpha x + y + \tau z) + \frac{b}{2}(x + \tau y + \alpha z) \\
r_{53} &= \frac{a}{2}(x + \tau y + \alpha z) + \frac{b}{2}(\tau x + \alpha y + z) \\
r_{54} &= \frac{a}{2}(-x + \tau y + \alpha z) + \frac{b}{2}(\tau x - \alpha y - z) \\
r_{55} &= \frac{a}{2}(-\alpha x + y - \tau z) + \frac{b}{2}(-x + \tau y - \alpha z) \\
r_{56} &= \frac{a}{2}(-x + \tau y - \alpha z) + \frac{b}{2}(\tau x - \alpha y + z) \\
r_{57} &= \frac{a}{2}(x + \tau y - \alpha z) + \frac{b}{2}(-\tau x - \alpha y + z) \\
r_{58} &= ay - bz \\
r_{59} &= \frac{a}{2}(x + \tau y + \alpha z) + \frac{b}{2}(-\tau x - \alpha y - z) \\
r_{60} &= ay + bz
\end{aligned}$$

Tablo (4.4): C₆₀ molekülünün merkezinden diğer atomlara olan vektörel uzaklığı

Bu vektörler x,y,z cinsinden bulunduktan sonra en son yazdığımız potansiyel denkleminde yerine konarak toplam potansiyel bulundu. Kolayca görülebileceği gibi kuvvet sabitleri k_{ij} bilinmiyor ve bunları hesap etmek için $RV=V$ değişmezliğinden faydalanarak bu sabitlerin sadece 23 değişik sabit olduğu bulundu. Son yazılan potansiyel denklem Lagrange denkleminde yerine konulduğunda 180 "Secular" denklem elde edilir. Bunlar bir önceki konuda olduğu gibi matris formuna getirilerek çözüm aranabilir. Buradan k_{ij} sabitlerini bulmak için değişik metodlar vardır. Mesela bunlar C atomlarının elektron dağılımlarında faydalanılarak bulunabilir. Ancak burada yazılan denklemlerin basit iki H atomu için bile tam çözümü olmadığı düşünülürse yaklaşık yapılması gerektiği hemen anlaşılır.

Gelişen teknoloji ile birlikte titreşim frekansları $\pm 5 \text{ cm}^{-1}$ hata ile ölçülebilmektedir. Böyle olunca k_{ij} sabitlerini ölçümleri yapılmış frekanslara uygun şekilde seçerek (fitting) bulma bizi daha doğru bir sonuca götürecektir.

$d_{12}=2,499$	$d_{121}=4,169$	$d_{141}=5,473$
$d_{13}=1,411$	$d_{122}=4,896$	$d_{142}=5,863$
$d_{14}=1,474$	$d_{123}=4,669$	$d_{143}=5,863$
$d_{15}=1,474$	$d_{124}=4,572$	$d_{144}=5,473$
$d_{16}=3,623$	$d_{125}=4,169$	$d_{145}=6,143$
$d_{17}=2,499$	$d_{126}=4,169$	$d_{146}=6,787$
$d_{18}=2,885$	$d_{127}=4,572$	$d_{147}=6,215$
$d_{19}=2,385$	$d_{128}=5,555$	$d_{148}=6,746$
$d_{110}=2,499$	$d_{129}=4,896$	$d_{149}=6,215$
$d_{111}=2,499$	$d_{130}=4,572$	$d_{150}=6,590$
$d_{112}=2,385$	$d_{131}=4,572$	$d_{151}=6,590$
$d_{113}=2,885$	$d_{132}=5,863$	$d_{152}=6,215$
$d_{114}=4,669$	$d_{133}=5,555$	$d_{153}=6,746$
$d_{115}=3,623$	$d_{134}=5,555$	$d_{154}=7,041$
$d_{116}=4,169$	$d_{135}=5,271$	$d_{155}=6,787$
$d_{117}=3,623$	$d_{136}=5,271$	$d_{156}=6,746$
$d_{118}=3,744$	$d_{137}=5,555$	$d_{157}=6,746$
$d_{119}=3,744$	$d_{138}=6,215$	$d_{158}=7,194$
$d_{120}=3,623$	$d_{139}=5,863$	$d_{159}=7,041$
	$d_{140}=6,143$	$d_{160}=7,055$

Tablo (4.5) : 1 numaralı atomun diğer atomlara olan uzaklığı

Üzerinde biraz çalışıldığında k_{ij} sabitlerinin belli bir mesafeden sonra etkisinin çok azaldığı görülür. Bu mesafe, $5.2 \text{ \AA}$ olarak alınabilir. Eğer sadece tek ve çift bağ yapmış atomlar arasındaki etkileşme dikkate alınır ise bir çok titreşim frekansının sıfır olduğu görülür. Burada bütün frekansları elde etmek için en az dört yakın atomun etkileşmesini dikkate almalıyız. Ancak hassas sonuçlar elde etmek için bu sayıyı arttırmamız gerekmektedir.

Biz bu çalışmada daha çok A_g ve A_u modları üzerinde durduk. En son yazdığımız potansiyel denklemimizde verilen potansiyelin Lagrange denklemine konularak, simetri operasyonları da uygulandığında görülecektir ki 23 adet birbirinden farklı kuvvet sabiti mevcuttur. Bunlar belli bir uzaklıktan sonra sıfır olmaktadır. A_g ve A_u modlarını bulmak için Tablo(4.6)'da verilen baz vektörleri simetri operasyonları neticesi elde edildi.

$$t_1 = \frac{1}{\sqrt{60}} (x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + \dots + x_{58} + x_{59} + x_{60})$$

$$t_2 = \frac{1}{\sqrt{60}} (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + \dots + y_{58} + y_{59} + y_{60})$$

$$t_3 = \frac{1}{\sqrt{60}} (z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \dots + z_{58} + z_{59} + z_{60})$$

$$t_4 = \frac{\sigma}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_2 - x_4 - x_5 + x_7 - x_8 + x_{10} + x_{11} - x_{13} + x_{48} - x_{50} - x_{51} + x_{53} - x_{54} + x_{56} + x_{57} - x_{59}) + \\ & (-y_6 - y_9 + y_{12} + y_{14} + y_{15} + y_{17} - y_{20} - y_{23} + y_{38} - y_{41} - y_{44} - y_{46} - y_{47} - y_{49} + y_{52} + y_{55}) + \\ & (z_{16} + z_{18} - z_{19} - z_{21} - z_{22} + z_{25} - z_{26} + z_{29} + z_{32} - z_{35} + z_{36} - z_{39} - z_{40} - z_{42} + z_{43} + z_{45}) \end{aligned} \right\} +$$

$$\frac{\tau}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_6 - x_9 - x_{12} - x_{14} + x_{15} + x_{17} + x_{20} - x_{23} + x_{38} - x_{41} - x_{44} - x_{46} + x_{47} + x_{49} + x_{52} - x_{55}) + \\ & (-y_{16} + y_{18} - y_{19} + y_{21} + y_{22} + y_{25} - y_{28} - y_{29} + y_{32} + y_{35} - y_{36} - y_{39} - y_{40} + y_{42} - y_{43} + y_{45}) + \\ & (-z_2 - z_4 + z_5 + z_7 + z_8 + z_{10} - z_{11} - z_{13} - z_{48} - z_{50} + z_{51} + z_{53} + z_{54} + z_{56} - z_{57} - z_{59}) \end{aligned} \right\} +$$

$$\frac{1}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (2x_1 - 2x_3 + x_{16} - x_{18} - x_{19} + x_{21} - x_{22} + x_{25} + x_{26} - x_{29} + x_{32} - x_{35} - x_{36} + x_{39} - x_{40} \\ & + x_{42} + x_{43} - x_{45} + 2x_{58} - 2x_{60}) + (y_2 - y_4 + y_5 - y_7 - y_8 + y_{10} - y_{11} + y_{13} - 2y_{28} + 2y_{30} \\ & - 2y_{31} + 2y_{33} - y_{48} + y_{50} - y_{51} + y_{53} + y_{54} - y_{56} + y_{57} - y_{59}) + (-z_6 + z_9 - z_{12} + z_{14} + z_{15} \\ & - z_{17} + z_{20} - z_{23} - 2z_{24} + 2z_{27} + 2z_{34} - 2z_{37} - z_{38} + z_{41} - z_{44} + z_{46} + z_{47} - z_{49} + z_{52} - z_{55}) \end{aligned} \right\}$$

$$t_5 = \frac{\sigma}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_{16} + x_{18} - x_{19} - x_{21} - x_{22} + x_{25} - x_{26} + x_{29} - x_{32} + x_{35} - x_{36} + x_{39} + x_{40} + x_{42} - x_{43} - x_{45}) + \\ & (y_2 + y_4 + y_5 + y_7 - y_8 - y_{10} - y_{11} - y_{13} + y_{48} + y_{50} + y_{51} + y_{53} - y_{54} - y_{56} - y_{57} - y_{59}) + \\ & (-z_6 + z_9 + z_{12} + z_{14} - z_{15} - z_{17} - z_{20} + z_{23} + z_{38} - z_{41} - z_{44} - z_{46} + z_{47} + z_{49} + z_{52} - z_{55}) \end{aligned} \right\} +$$

$$\frac{\tau}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_2 + x_4 - x_5 - x_7 - x_8 - x_{10} + x_{11} + x_{13} - x_{48} - x_{50} + x_{51} + x_{53} + x_{54} + x_{56} - x_{57} - x_{59}) + \\ & (-y_6 - y_9 - y_{12} + y_{14} - y_{15} + y_{17} + y_{20} + y_{23} - y_{38} - y_{41} - y_{44} + y_{46} - y_{47} + y_{49} + y_{52} + y_{55}) + \\ & (z_{16} - z_{18} - z_{19} + z_{21} - z_{22} + z_{25} + z_{26} - z_{29} - z_{32} + z_{35} + z_{36} - z_{39} + z_{40} - z_{42} - z_{43} + z_{45}) \end{aligned} \right\} +$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_6 - x_9 + x_{12} - x_{14} - x_{15} + x_{17} - x_{20} + x_{23} - 2x_{28} - 2x_{30} + 2x_{31} + 2x_{33} - x_{38} + x_{41} - x_{44} \\ & + x_{46} + x_{47} - x_{49} + x_{52} - x_{55}) + (-y_{16} - y_{18} - y_{19} - y_{21} + y_{22} - 2y_{24} + y_{25} + y_{26} - 2y_{27} \\ & + y_{29} - y_{32} + 2y_{34} - y_{35} - y_{36} + 2y_{37} - y_{39} + y_{40} + y_{42} + y_{43} + y_{45}) + (2z_1 - z_2 - z_3 + z_4 \\ & + z_5 - z_7 + z_8 - z_{10} - z_{11} + z_{13} + z_{48} - z_{50} - z_{51} + z_{53} - z_{54} + z_{56} + z_{57} - 2z_{58} - z_{59} + 2z_{60}) \end{aligned} \right\} \\
t_6 = & \frac{\sigma}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (x_6 - x_9 + x_{12} + x_{14} - x_{15} - x_{17} + x_{20} - x_{23} + x_{38} - x_{41} + x_{44} + x_{46} - x_{47} - x_{49} + x_{52} - x_{55}) + \\ & (y_{16} + y_{18} + y_{19} + y_{21} + y_{22} + y_{25} + y_{26} + y_{29} - y_{32} - y_{35} - y_{36} - y_{39} - y_{40} - y_{42} - y_{43} - y_{45}) + \\ & (z_2 - z_4 - z_5 + z_7 + z_8 - z_{10} - z_{11} + z_{13} + z_{48} - z_{50} - z_{51} + z_{53} + z_{54} - z_{56} - z_{57} + z_{59}) \end{aligned} \right\} + \\
& \frac{\tau}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (-x_{16} - x_{18} + x_{19} + x_{21} - x_{22} + x_{25} - x_{26} + x_{29} - x_{32} + x_{35} - x_{36} + x_{39} - x_{40} - x_{42} - x_{43} + x_{45}) + \\ & (-y_2 - y_4 - y_5 - y_7 - y_8 - y_{10} - y_{11} - y_{13} + y_{48} + y_{50} + y_{51} + y_{53} + y_{54} + y_{56} + y_{57} + y_{59}) + \\ & (-z_6 + z_9 + z_{12} - z_{14} - z_{15} + z_{17} + z_{20} - z_{23} - z_{38} + z_{41} + z_{44} - z_{46} - z_{47} + z_{49} + z_{52} - z_{55}) \end{aligned} \right\} + \\
& \frac{1}{4\sqrt{15}} \left\{ \begin{aligned} & (-x_2 - x_4 + x_5 + x_7 - x_8 - x_{10} + x_{11} + x_{13} - 2x_{24} + 2x_{27} - 2x_{34} + 2x_{37} - x_{48} - x_{50} + x_{51} + x_{53} \\ & - x_{54} - x_{56} + x_{57} + x_{59}) + (-2y_1 - 2y_3 - y_6 - y_9 - y_{12} - y_{14} - y_{15} - y_{17} - y_{20} - y_{23} + y_{38} + y_{41} \\ & + y_{44} + y_{46} + y_{47} + y_{49} + y_{52} + y_{55} + 2y_{58} + 2y_{60}) + (-z_{16} + z_{18} + z_{19} - z_{21} - z_{22} + z_{25} + z_{26} \\ & - 2z_{28} - z_{29} + 2z_{30} + 2z_{31} - z_{32} - 2z_{33} + z_{35} + z_{36} - z_{39} - z_{40} + z_{42} + z_{43} - z_{45}) \end{aligned} \right\}
\end{aligned}$$

Tablo (4.6). Simetri operasyonu neticesinde elde edilen baz vektörleri.

Bunlar Lagrange denkleminde elde edilen 180x180 matrisine uygulandığında bu matrisi $3 \oplus 1 \oplus 2 \oplus 174$ şekline getirmektedir. Burada 3x3 matrisin öz değerleri sıfır olup öteleme ile ilgilidir. 1x1 matrisi küçük olan A_g modunu bize verir. Burada ilgi çekici olan A_g modunun birbirine en yakın üç atomun etkileşmesinden bağımsız olmasıdır. Dördüncü yakın atomun etkileşmesine şiddetle bağlıdır. 2x2 matrisinin öz vektörleri ise A_g ve A_u modlarını verirler.

Uygun k_{ij} sabitleri seçildiğinde modlar hemen bulunabilir. Sıradan bir k_{ij} seçimi ile aşağıda verilen frekanslar elde edilmiştir.

	Deney.	Hesap.	Feldman	Jishi	Quong		Deney.	Hesap.	Feldman	Jishi	Quong
A_g	496	493	496	492	478	A_u		883	1012	1142	850
	1470	1501	1470	1468	1499						
						F_{1u}	527	541	527	505	547
F_{1g}		558	584	501	580		577	565	578	589	570
	970*	959	879	981	788		1183	1025	1208	1208	1176
	1369*	1303	1297	1346	1252		1428	1447	1445	1450	1461
						F_{2u}	355*	335	377	367	342
F_{2g}	560*	507	573	541	547		680*	779	705	677	738
		731	888	847	610			995	1014	1025	962
	870*	785	957	931	770			1167	1274	1212	1185
	1360*	1346	1433	1351	1316			1548	1564	1575	1539
						G_u	403*	341	346	385	356
G_g		439	449	498	486		760*	669	829	789	683
		633	612	626	571			739	931	929	742
		775	840	805	759		1065*	937	994	961	957
	1065*	987	1153	1056	1087		1310*	1286	1425	1327	1298
	1360*	1173	1396	1375	1296		1440*	1378	1451	1413	1440
		1408	1534	1521	1505						
						H_u	355*	358	387	361	404
H_g	273	258	268	269	258		560*	523	521	543	539
	437	428	438	439	439			583	667	657	
	710	769	692	708	727			625	814	801	737
	774	806	782	788	767			1159	1141	1129	1205
	1099	1075	1094	1102	1093			1361	1358	1385	1320
	1250	1234	1226	1217	1244						
	1428	1372	1431	1401	1443		1555*	1541	1558	1552	1565
	1575	1579	1568	1575	1576						

Tablo (4.7). C_{60} 'ın titreşim modları için hesapladığımız deneysel ve diğer teoriksel değerler.

Burada (*) sembolü deneysel verileri gösterir. Bu deneysel veriler yüksek çözümlü elektron enerji kaybı spektroskopisi ve elastik olmayan nötron saçılmasıyla ölçüldü.

4.5. RAMAN SPEKTRA

Bir örnek, güçlü bir ışın kaynağı (civa lambası veya lazer ışınları) ile ışınlanırsa, ışınanın bir kısmı saçılacaktır. Saçılan ışınmada ışın kaynağına ait ve soğurma ve yeniden yayımlama ile oluşan temel frekans gözlenir(Rayleigh çizgisi). Buna ek olarak gözlenen çizgiler, Rayleigh çizgisinin üstündeki ve altındaki frekanslarda simetrik olarak görünürler (Raman çizgileri). Rayleigh çizgisinin

frekansı ile daha zayıf Raman çizgilerinin frekansları arasındaki farklar, örnek molekülüne ait titreşme frekanslarına karşılık gelir. Bu frekans farkları ölçülerek, örneğin yapısı için olanaklı titreşme frekansları bulunur. Bütün Raman frekans kaynaklarının şiddetlerine karşı grafiğe alınması ile bir Raman spektrumu elde edilir ve kırmızı ötesi spektrumuna çok benzer.

Raman spektroskopisinde laser ışınları bulunana kadar ışıma kaynağı olarak civa lambası kullanılmaktaydı. Lazer ışınları daha şiddetli ve düzgün olduğu gibi daha uzun dalga boylarında kullanılarak örneğin bozulmasının önüne geçilmiş olur.

Bir titreşme uyarmasının kırmızı ötesi soğurmaya yol açması için titreşme sırasında dipol momentini değişikliğinin olması gerekir. Raman etkisi ise bir soğurma değildir ve titreşen grubun polarizasyonuna ve frekansına titreşme frekansı ile uyuşmayan bir ışıma ile etkileşip eşleşme eğilimine bağlıdır. Bir molekülde bir titreşme türü, dipol momentinde bir değişme yapabilir (kırmızı ötesi etkin bir titreşme) fakat, polarizasyonun da bir değişme (Raman etkin bir titreşme) yapmayabilir, bunun terside doğrudur. Kırmızı ötesinde görünmeyen titreşmeler Raman spektrumunda güçlü soğurma pikleri verirler. Dolayısıyla kırmızı ötesi ve Raman spektrumları tamamlayıcıdır. Bununla beraber pek çok fonksiyonlu grup için bir simetri merkezi

olmadığından kırmızı ötesi spektrumu daha çok bilgi verir ve daha kolay elde edilir.

Çalışılan madde spektrografide gözlenen-saçılmış ışık ve görünür ultraviyole bölgesinde monokromatik ışık ile aydınlatılırsa bir spektrum elde edilir. Bu spektrum aynı frekanstaki kuvvetli çizgilerden oluşur. Çünkü gelen aydınlanma daha zayıf yaklaşık bir kaç dalgadan 3500 dalga numarasına kadar bir frekans aralığı ile kuvvetli çizgilerden değişmiş her iki taraftaki daha zayıf çizgiler ile beraber olduğundan dolaydır. Şiddetleri göz önünde bulundurmaksızın çizgi örnekleri uyarılma çizgisi etrafında simetrikler. Yüksek frekanslı çizgiler göze çarpacak kadar diğerlerinden daha zayıftır. Gerçekte bu çizgiler frekans olarak gözlenebilmesi için zayıftır. Uyarılma çizgilerinden farklı frekanslardaki bu çizgiler (Raman çizgileri) ışık quantası ile ışığı saçan maddenin molekülleri arasındaki bir enerji değişimindeki başlangıçlarına (orjinlerine) sahiptir. Uyarılma çizgileri yakınında görülen bu çizgiler titreşimsel enerji seviyelerinde değişiklik yapmaksızın moleküllerin dönmesel enerji hallerindeki değişikliklerle ilgilidir. Dönme, yalnız Raman spektrumunu

oluştururlar. Uyarılma çizgisinden uzak olan çizgiler gerçekte kararsız çizgilerin band aralığıdır. Dönmesel ve titreşimsel enerji durumlarındaki eş zamanlı değişikliklerle birleştirildi.

Frekans kaymaları, yani, uyarılma çizgisi Raman çizgilerinin frekansları arasındaki farklılıklar, uyarılma çizgisinin frekansından bağımsızdır. Bir civa lambası genellikle aydınlanma için kullanılır ve Raman spektrumunu uyarmak için kullanılan çok sayıda kuvvetli civa çizgileri vardır.

Infrared emmede bulunmuş verilen bir molekül için frekanslar Raman olayında bulunmuş olan frekans kaymaları ile uygunluk gösterirler. Fakat bu her zaman doğru değildir. Çok iyi anlaşılmış olan bir yolla molekülün simetrisine bağlıdır.

Gelen ışığın polarize edilmesi ile veya diğer yollarla Raman spektrumundaki her bir frekans kaymasının depolarizasyon derecesini bulmak mümkündür. Bu deneysel sonuçların yorumunda önemli bir nicelik olacaktır. Bu nicelik saçılmış bir ışık için bir orandır. Işığın polarize olmuş bileşenleri, sırasıyla gelen aydınlanmanın polarizasyon yönüne dik ve paraleldir.

Raman spektroskopisinin yararı, duyarlılığı, örnek hazırlamanın kolaylığı ve suyun iyi bir çözücü olmasıdır.

4.6. INFRARED SPECTRA (KIRMIZI ÖTESİ SPECTRA)

Kırmızı ötesi ışıması, elektromagnetik spektrumda görünür bölge ve mikrodalgalar arasında bulunur ve dalga boyu $0,8-500\mu m$ (dalga sayısı $12500-20cm^{-1}$) olan ışımadır. $0,8-2,5\mu m$ ($12500-4000cm^{-1}$) bölgesine yakın kırmızı ötesi, $2,5-25\mu m$ ($4000-400cm^{-1}$) bölgesine kırmızı ötesi ve $25-500\mu m$ ($400-20cm^{-1}$) bölgesine uzak kırmızı ötesi denir.

Bir molekülün titreşimli ve dönmesel hareketlerinden soğurma spektrumunun yükselmesi elektronik bir bölgede çoktur. Bir kuantum titreşim enerjisi yayan ve soğuran moleküller yaklaşık 200 ile 3500 cm^{-1} lik bir bölgedeki bandları gösterirler. Birkaç titreşimsel kuantum atmalarından kaynaklanan bandlar birkaç yüzden binlerce

dalga sayılarına kadar bir yolla tamamıyla dedekte edilirken bazen spektrumun görünür kısmında ($13000 - 26000\text{cm}^{-1}$) gözlenebilir.

Infrared spektrumu hem yutma hem de soğurmada gözlenebilir. Soğurma deneylerinde uygun kaynaklardan çıkan ışık, çalışılacak olan gazı içeren bir tüpten geçer ve böylece spektrografi elde edilir. Eğer spektrografi düşük çözme gücünde ise geniş bandların bir serisi gözlenir. Bunla da titreşimsel geçişlere karşılık gelir fakat bu bandlar dönme enerji seviyeleri ile ilgili olabilen çizgilere ayrılabilir. Pratikte sadece birkaç hafif molekülün deneysel yapısını belirlemek için yeterli yükseklikte ayırt edici gücü ile infrared bölgesinde gözlenmiştir. Aynı zamanda sıvılar ve katılarda da çalışılmış ve onlarla ilginç sonuçlar vermiştir.

Kırmızı ötesi spektrumları iki türlü bilgi verir.

i) Organik bileşiklerin yapısındaki fonksiyonlu gruplar bulunur. Yani bilinmeyen maddenin kırmızı ötesi spektrumu değerlendirmek ve güvenilirliği fazla olan soğurma bandlarında yapıdaki fonksiyonlu grupların varlığına karar vermek gerekir.

ii) İki organik bileşiğin aynı olup olmadığı anlaşılır. Yani bilinmeyen maddenin, bilinen bir madde ile aynı olup olmadığına karar vermek amacıyla her ikisinin kırmızı ötesi spektrumlarının tamamen üst üste çakışabilir olup olmadığını denemek gerekir.

Kırmızı ötesi bölgesinde soğurma, moleküllerin titreşme ve dönme düzeylerini uyarır. Kırmızı ötesi ışımalarının enerjisi, moleküldeki bağları bozmaya yetmez, elektronik uyarma da yapamaz; fakat atomların kütlelerine, bağların gücüne ve molekül geometrisine bağlı olarak bağların titreşme genliklerini artırır. Kırmızı ötesi soğurma bandları olarak görülen titreşmeler, molekülden bağların ve atom gruplarının dipol momentlerinde değişme yapabilen titreşmelerdir.

Molekül titreşmesini açıklamak için iki atomlu basit bir sistemi göz önüne alalım. Titreşme hareketi iki türdür.

i) Gerilme titreşmesi,

ii) Eğilme titreşmesi.

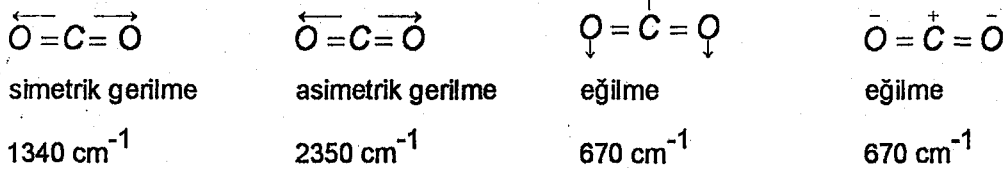
Gerilme titreşmesi ile bağ eksenini doğrultusunda ritmik hareket anlaşılır. İkincisi aynı bir atoma doğru olan bağlar arasındaki açının değişmesi ve atom grubunun molekül içindeki hareketidir. Kırmızı ötesi soğurmaları için en önemli seçim kuralına göre, titreşme sırasında dipol momentinin değişimi varsa titreşme uyarması kırmızı ötesi soğurmasına yol açar.

Bir molekülde simetri merkezi varsa bu merkeze göre simetrik bağlara ait gerilme titreşmeleri kırmızı ötesi spektrumunda gözlenmez (izinsiz geçişler). Sebebi ise bağın titreşmesine ait dipol moment değişimi sıfırdır. Örneğin; $H_2C=CH_2$ bileşiğinde $C=C$ gerilmesi gözlenmez.

Sistemde dipol moment değişimi ne kadar fazla ise, yani sistem ne kadar polar ise kırmızı ötesi soğurma bandı o kadar şiddetlidir.

Bir molekülün simetri özellikleri, katı halde olduğu zaman, diğer hallerdekinden farklıdır. Bu nedenle katı halde alınmış kırmızı ötesi spektrumunda, gaz veya çözelti halinde alınmış spektrumda görünmeyen yeni soğurma bandları ortaya çıkabilir.

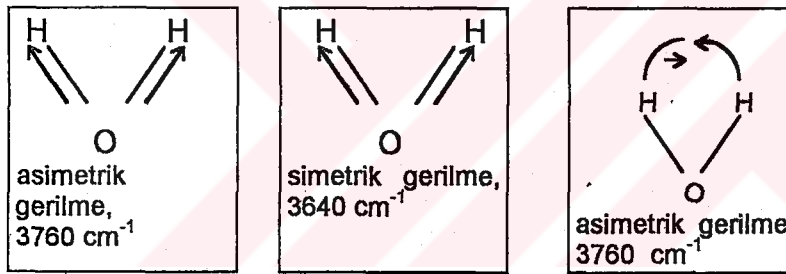
Çok atomlu bir molekül için (temel) soğurma bandlarını veya piklerinin sayısı molekülün serbestlik derecesinden hesaplanabilir. N atomlu molekül için serbestlik derecesi her atom için üç eksen kullanacağımızdan $3N$ 'dir. Fakat çizgisel olmayan bir molekülde serbestlik derecelerinin üç tanesi molekülün ötelenme ve üç tanesi de dönme hareketi için kullanıldığından titreşme soğurması sonucu oluşacak band sayısı $3N-6$ ile bellidir. Çizgisel bir molekülde ise molekülün dönmesi için ancak iki eksen kullanılabileceğinden band sayısı $3N-5$ olur. CO_2 molekülü, üç atomlu ve çizgisel olduğundan titreşme soğurması sonucu $(3 \times 3) - 5 = 4$ band görülmesi beklenir; ikisi molekül eksenini boyunca gerilme diğerleri eğilmedir.



Şekil 4.2 CO_2 için titreşme soğurma (kırmızı ötesi) bandları (+ ve -) titreşmenin kağıt düzlemine dik ve farklı yöne eğilme şeklinde olduğunu gösterir.

Fakat sadece iki band gözlenir. Eğilme titreşmesi tek bant verir. Gerilme titreşmelerinde ise simetrik titreşme soğurmaya yol açar. Çünkü, asimetrik titreşme molekülün dipol momentinde bir değişikliğe neden olmaz.

H_2O molekülü, üç atomlu ve Çizgisel olmadığından titreşme soğurması sonucu $(3 \times 3) - 6 = 3$ band görülmesi beklenir ve gerçekten de üç band gözlenir, fakat asimetrik ve simetrik bantları oldukça yakındır.



Şekil 4.3 H_2O için titreşme soğurması (kırmızı ötesi) bandları

BÖLÜM 5

SONUÇLAR

Icosahedral grup, C_{60} 'ın simetrisinde önemli bir rol oynar. Y ve Y_h 'in indirgenemez matris temsilleri permütasyon grupları ve quaternion grupları kullanılarak oluşturuldu. Y , 60 elemana ve beş tane indirgenemez matris temsiline sahiptir. Bu matris temsilleri 1×1 , 3×3 , 3×3 , 4×4 , 5×5 'dir. Bu temsillerin kareleri toplamı Y 'nin eleman sayısını verir. Yani ; $1^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 = 60$.

Y_h , 120 elemanlıdır. Bunun indirgenemez matris temsilleri 1×1 , 1×1 , 3×3 , 3×3 , 3×3 , 3×3 , 4×4 , 4×4 , 5×5 , 5×5 'dir. Benzer şekilde $1^2 + 1^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2 + 4^2 + 5^2 + 5^2 = 120$. Aynı zamanda C_{60} 'ın simetri yapısına karşılık gelen Y_h 'in indirgenemez matris temsilleri hesaplandı.

Kuvvet sabitleri Raman aktif modları ile uyuşarak elde edilmesine rağmen Raman, Infrared'dan elde edilen değerler ile uyuşan C_{60} 'da hesaplanan titreşim frekansları için bir kuvvet-sabit modeli sunduk. Modlara bağlı indirgenemez temsiller ile beraber hesaplanmış 46 farklı titreşim frekansı Tablo (4.7)'de verilmiştir. Hesapladığımız frekansların daha önceki hesaplanan değerler ile benzeştiği görülür.

Bu çalışmamızda daha çok A_u ve A_g modları üzerinde durduk. 23 tane birbirinden farklı kuvvet sabiti bulduk. Bunlar belli bir uzaklıktan sonra sıfır olmaktadır. Tablo (4.6)'da Lagrange denkleminde elde edilen 180×180 matrise uygulandığında bu matris $3 \oplus 1 \oplus 7 \oplus 174$ şekline gelir. Burada 3×3 matrisinin öz değerleri sıfır olup öteleme ile ilgili. 3×3 küçük olan A_g modunu bize verir. Burada ilginç olan, A_g modunun birbirine en yakın üç atomun etkileşmesinden bağımsız olmasıdır. 2×2 matrisinin öz vektörleri ise A_g ve A_u modlarını verirler.

SUMMARY

The irreducible matrix representation at Y and Y_h are calculated. Vibrational frequencies of C_{60} is also calculated. The Mathematica and the GAP computer programs are used for these purpose. It is shown that sum of the squares of number of irreducible matrix representations gives the elements of Y and Y_h . And also it gives the symmetry structure of the group which contains 120 elements.

46 different vibrational frequencies depend on modes are calculated by using representations which depend on the mode.

Table 4.6. contains these frequencies. In this study, we mainly concentrated on A_u and A_g modes. We found 23 different force-constant. We showed that they are being zero after a certain distance.

ÖZET

Y ve Y_h 'in indirgenemez matris temsilleri hesaplandı. Bunun yanında C_{60} 'ın titreşim frekansları hesaplandı. Bu hesaplamalarda Matematica ve Gap programları kullanıldı. İndirgenemez matris temsillerinin kareleri toplamı Y ve Y_h 'in eleman sayılarını verdi.

Benzer şekilde Y_h 'in indirgenemez matris temsillerinin kareleri toplamı 120 eleman içeren grubun simetri yapısını verdi.

Modlara bağlı indirgenemez matris temsiller ile beraber hesaplanmış 46 farklı titreşim frekansı Tablo (4.6)'da verildi. Bu çalışmamızda daha çok A_u ve A_g modları üzerinde durduk. 23 tane birbirinden farklı kuvvet sabiti bulduk bunlar belli bir uzaklıktan sonra sıfır olmaktadır.



KAYNAKLAR

- [1] ADAMS G.B.,PAGE J. B.,SANKEYO. F., SINHA K., MENENDEZ J. and HUFFMAN D.R., (1991), **First-Principles Quantum Molecular Dynamics Study of the Vibrations of Icosahedral C₆₀**, Phys. Rev. B 44, 4052-4055.
- [2] BRIEHERET E., HARE P. J.,DENNIS P. J., KROTO H., TAYLOR R., WALTON R. M. D., (1992), **Electronic Spectra and Transition of the Fullerene C₆₀**, Chem. Phys. 160, 451-456.
- [3] CURL F. R. and SMALLEY E. R., (1991), **Fullerenes**, Scientific American, 32-41.
- [4] DAUDEL R., LEFEBVRE R. MOSER C., (1990), **Quantum Chemistry Methods and Applications**.
- [5] DRESSELHAUS G., DRESSELHAUS M. S., EKLUND P. C., (1992), **Symmetry for Lattice Modes in C₆₀ and Alkali-metal-doped C₆₀**, Phys. Rev. B. 45, 6923-6930.
- [6] DRESSELHAUS M. S., DRESSELHAUS G., SAITO R., (1993), **Group Theoretical Concepts for C₆₀ and other Fullerenes**, Materials Science and Engineering.
- [7] FELDMAN J. L., BROUGHTON J. Q., REICH D. E., and KLUGE M. D., (1992), **Intramolecular-force-constant Model for C₆₀**, Phys. Rev. B 46, 12731-12736.
- [8] GRAJA A. and SWIETLIK R., (1995), **Temperature Study of IR Spectra of some C₆₀ Compounds** , Synthetic Metals 70 , 1417-1418.

[9] GROUP THEORY (Bazı Kaynakların Listesi)

ARMSTRONG M. A., (1988), **Group and Symmetry**, Springer-Verlang, NEWYORK-BERLIN

BRIAN G. W., (1974), **Classical Groups for Physicist**, John Wiley & Sons, Inc.

COXETER H. S. M. and MOSER W. O. J., (1965), **Generators and Relations for Discrete Groups**, Springer-Verlag, BERLIN, NEWYORK.

HAMERMESH M. (1962), **Group Theory and its applications to Physical Probles** (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts)

JANSEN L. and BOON M., (1967), **Theory of Finite Groups, Application in Physics**, North-Holland Publishing Company-AMSTERDAM.

LEDERMANN W., (1987), **Introduction to Group Characters**, Cambridge University Press, Cambridge, NEWYORK.

MARSHALL H. Jr. (1990) **The Theory of Finite Groups**, Academic Press, NEWYORK and LONDON.

MARTIN B. (1965) **Representation Theory of Finite Groups**, Academic Press, NEWYORK and LONDON.

[10] HAYMET A. D. J., (1985), C_{120} and C_{60} : Archimedean Solids Constructed from sp^2 Hybridized Carbon Atoms, Chem. Phys. Lett. 122, 421-424.

[11] HAYMET A. D. J., (1985), Footballene: A Theoretical Prediction for the Stable Truncated Icosahedral Molecule C_{60} , Journal Am. Chem. Soc. 108, 319-321.

[12] HUFFMAN R. D., (1991), Solid C_{60} , Physics Today, 22-29

[13] JIANG Q., XIA. H., ZHAG Z. and TIAN D., (1992), Vibrational Spectrum of C_{60} , Chem Phys. Letts. 192, 93-96.

[14] JISHI R. A., DRESSELHAUS M.S., (1992), Mode Softening and Mode Stiffening in C_{60} -doped with Alkali Metals, Phys. Rev. B. 45, 6914-6919.

- [15] JISHI R. A., MIRIE R. M., DRESSELHAUS M.S., (1992), **Force Constant Model for the Vibrational Modes in C₆₀**, Phys. Rev. B. 45, 13685-13689.
- [16] KOÇ R., (1995), **Automorphism Groups of Pure Integral Octonions and Applications in Physics**, Ph. D. Thesis, Çukurova University.
- [17] KRÄTSCHMER W., (1995), **Fullerenes, and Fullerites: New Forms of Carbon**, Synthetic Metals 70, 1309-1312.
- [18] KRÄTSCHMER W., (1990), Chem. Phys. Letts 170, 160-170.
- [19] KRITO H. W., (1992), Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 31, 111-246.
- [20] KRITO H. W., (1985), Nature 318, 162-163.
- [21] LEACH S. VERVLOED M. DESPIRES A. BREHERET E. HARE J. P. DENNIS T. J., KRITO H. W., TAYLOR R. and WALTON D. R. M. (1991), **Electronic Spectra and Transitions of the Fullerene C₆₀**, Chem. Phys. Letts. 160, 451-466.
- [22] NAKAMURA Y. O., YOKOYA Y., MATSUDA N., SHIINA Y. (1993), **Important Role of Intermolecular Vibrational Modes in the Super-conductivity in Alkali Metal-doped Fullerenes**, Solid State Communications 86, 627-632.
- [23] NEGRI F., ORLANDI G. (1988), **Quantum-Chemical Investigation of Frank-Condon and Jahn-Teller Activity in the Electronic Spectra of Buckminster fullerene**, Chem. Phys. Lett. 144, 31-37.
- [24] PEDERSON M. R. and QUONG A. A., (1992), **Polarizabilities, Charge States and Vibrational Modes of Isolated Fullerene Molecules**, Phys. Rev. B. 46, 13584-13591.

[25] QUONG A. A., PEDERSON M. R. and FELTMAN J. L., (1993), **First Principles Determination of the Interatomic Force-constant Tensor of the Fullerene Molecule**, Solid State Communications 87, 535-539.

[26] SUSUNU S., OSHIYANNA A., (1991), **Cohesive Mechanism Molecule Energy Bonds of Solid C₆₀**, Phys. Rev. Lett. 66, 2637-2640.

[27] YAHANA K. and BERTSCH G. H., (1993), **Electronic Structure of C₆₀ in A Spherical Bond**, Physica Scripta 48, 633-637.



TEŞEKKÜR

Bu tezin oluşumunda teorik bilgilerinden ve tavsiyelerinden faydalandığım danışman hocam **Prof. Dr. Mehmet KOCA**'ya, tezimdaki hesaplamalarda, tashihinde ve tezimin en uygun forma getirilmesinde yardımlarını ve değerli zamanını esirgemeyen **Yrd. Doç. Dr. Ramazan KOÇ**'a teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Ayrıca çalışmalarım esnasında sağladığı kolaylıklardan dolayı **Yrd. Doç. Dr. İbrahim Halil MUTLU**'ya ve değerli arkadaşlarım **Ahmet ATAÇ**'a, **Seyfullah YILMAZ**'a ve **Süleyman Hilmi GÜZEL**'e teşekkürlerimi sunarım.

Bu tezi dünyadaki en değerli varlığım, **BİRİCİK ANNEME** armağan ediyorum.



ÖZGEÇMİŞ

1970 yılında Tarsus'ta doğdum. İlk, orta ve lise öğrenimimi Tarsus'ta tamamladım. Haziran 1993 yılında Çukurova Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden mezun oldum. Mayıs 1994 yılından itibaren Harran Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktayım.

