

# מדדי סימטריה רציפים - אתר יחודי להוראה ומחקר בכימיה

ענבל טובי-ערד<sup>1,2</sup> דינה יוגב-עינות<sup>1</sup> ודוד אבניר<sup>3</sup>

1 המחלקה למדעי הטבע והחיים, האוניברסיטה הפתוחה

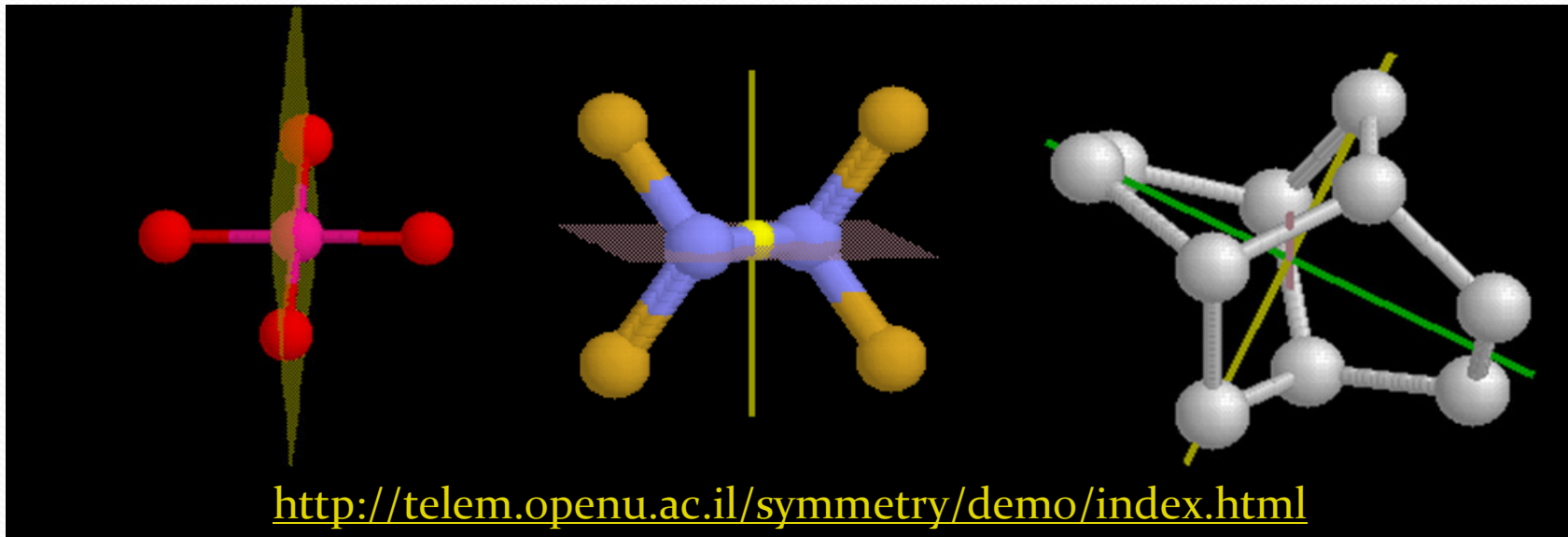
2 המרכז לשילוב טכנולוגיות בהוראה ע"ש צייס

3 המכון לכימיה, האוניברסיטה העברית

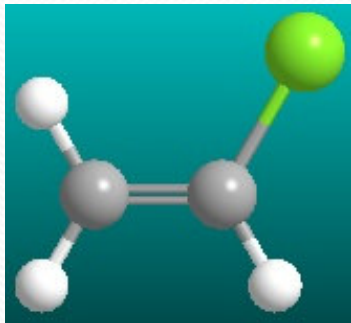
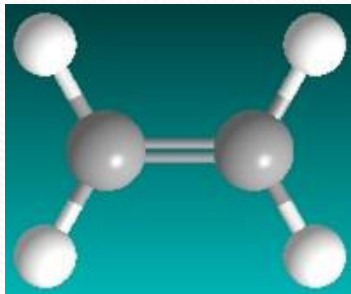
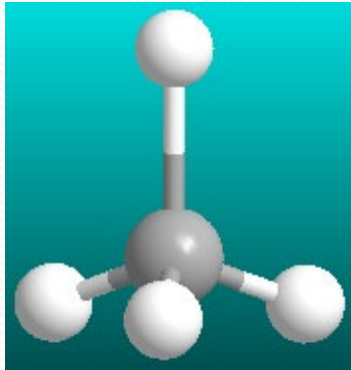
הכנס הארצי השנתי שישי של מיט"ל 2008

# סימטריה בכימיה

- פעולת סימטריה - העתקת אטומים במולקולה ממקומם באופן שיוצר סידור מרחבי חדש החופף את הסידור המקורי.
- דוגמאות: סיבוב סביב ציר, שיקוף במישור, היפוך ביחס לנקודה

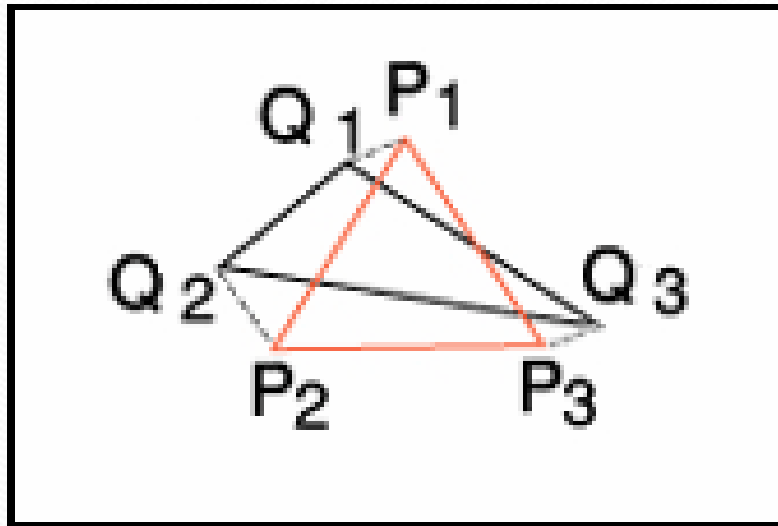


# סימטריה רציפה



- כימאים מתארים מולקולות כסימטריות או לא סימטריות
- בטבע המולקולות אינן תמיד סימטריות:
  - מולקולות הן ישויות דינמיות
  - עיוותים נגרמים בשל הסביבה הכימית/הפיסיקלית
  - התמרה של אטומים במולקולה יוצרת עיוות
- כדי להבדיל בין עיוות קטן לעיוות משמעותי יש להתייחס לסימטריה כאל גודל רציף

# מדד הסימטריה הרציף



$$S(G) = 100 \times \min \frac{\sum_{k=1}^N |Q_k - P_k|^2}{\sum_{k=1}^N |Q_k - Q_0|^2}$$

- H. Zabrodsky et al, *J. Am. Chem. Soc.* 1992, 114, 7843-7851
- M. Pinsky et al, *J. Comput. Chem.*, 2008, 29, 190-197.

- מדד הסימטריה הרציף : גודל מספרי המודד את המרחק בין מבנה נתון למבנה הקרוב אליו ביותר בעל הסימטריה הרצויה
- קיימת קורלציה בין מדד הסימטריה לתכונות כימיות ופיסיקליות שונות של חומרים

# סימטריה רציפה באו"פ

- יחידת לימוד בנושא פותחה באוניברסיטה הפתוחה בשיתוף פעולה עם האוניברסיטה העברית כחלק מקורס לתואר ראשון בכימיה.
- היחידה מאפשרת התנסות במחקר כימי עכשווי.
- אתר יחודי מאפשר לבצע חישוב של מדדי סימטריה רציפים באופן מקוון.

# דגשים פדגוגיים בפיתוח האתר

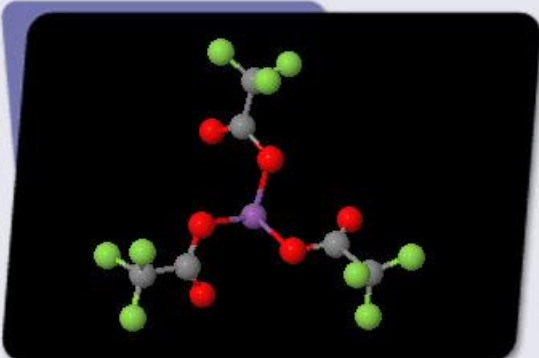
- מיקוד המשתמש בתוצאות החישוב ולא בדרך החישוב
- תצוגה תלת-ממדית - בעזרת תוכנת Jmol
- מדידת פרמטרים גאומטריים של המולקולה
- השוואה גרפית בין המבנה לפני החישוב למבנה לאחר החישוב
- כלי פתוח – המשתמש בוחר את המולקולה ואת סוג החישוב

# סימטריה רציפה באו"פ


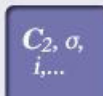

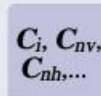
CoSyM Continuous Symmetry Measures

Select Molecule:  
D:\nbal-Docs\csm\we

File: ANTTFA.pdb



Select Calculation:

-  Chirality
-  Symmetry Elements
-  Shape
-  Point Groups

Select Symmetry Element:

- 
- 
- 

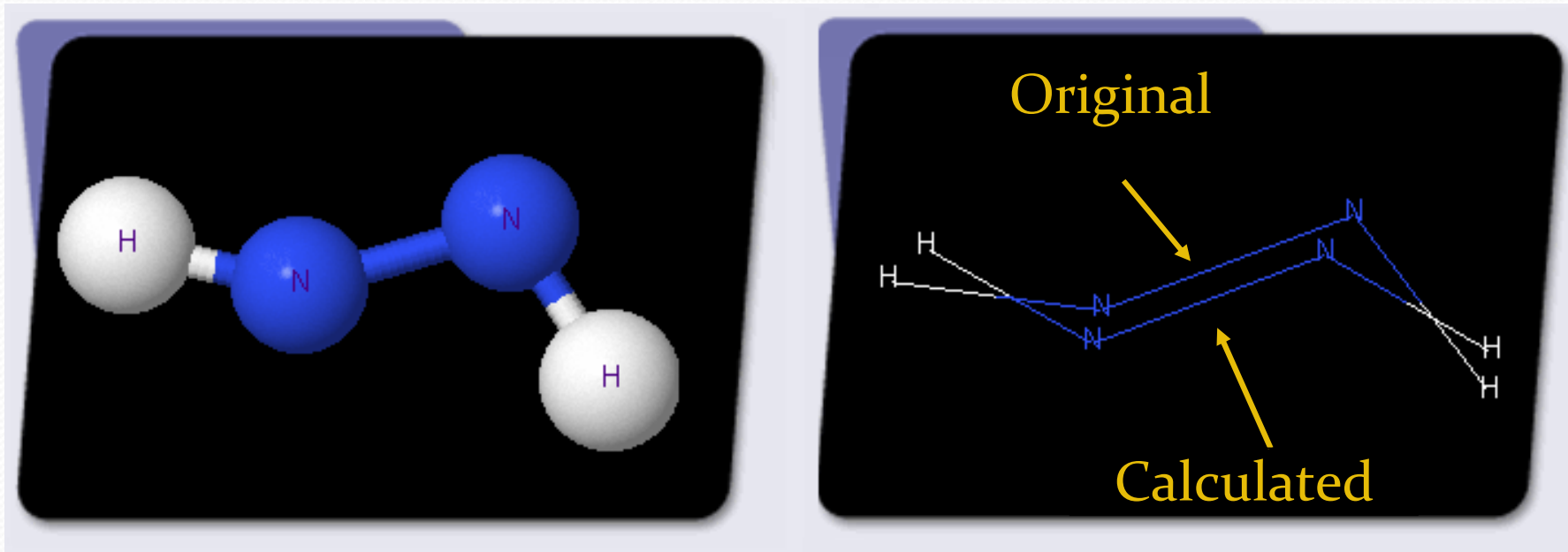
History

Selected Calculation: Basic Symmetry Element

<http://telem.openu.ac.il/csm-calc>

# דוגמת חישוב

סטיה מסימטרית סיבוב מסוג  $C_2$  עבור מולקולה מעוותת

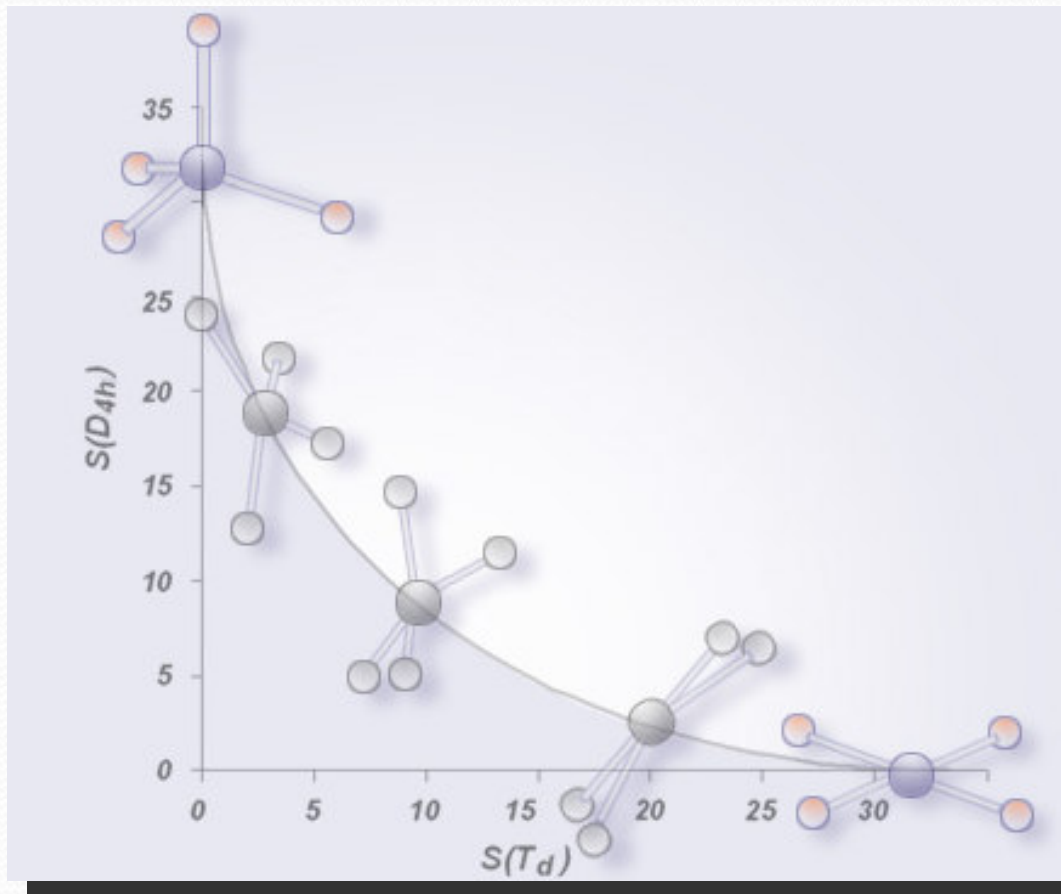


$$S(C_2) = 3.1986$$



# דוגמת חישוב

- יצירת מפת סימטריה וחישוב מסלולי עיוות של מולקולות מהצורה  $.MX_4$



# תודות

- באוניברסיטה הפתוחה :  
● מחלקת שה"ס, מחלקת הגרפיקה, יחידת המחשב

- באוניברסיטה העברית – המכון לכימיה :  
● לקבוצת המחקר של פרופסור דוד אבנר

<http://telem.openu.ac.il/symmetry>

<http://telem.openu.ac.il/symmetry/csm>