

اثر یان تکر در شیمی مولکولی

پرسوگر، ایساک باریسوویچ

ترجمه:

مجید منجمی

مریم مهدی زاده بارفروشی

سرشناسه	: پرسوکر، ایساک باریسوویچ
عنوان و نام پدیدآور	: اثر یان تلر در شیمی مولکولی / ترجمه مجید منجمی، مریم مهدی زاده
مشخصات نشر	: تهران: مجید منجمی، ۱۳۹۳.
مشخصات ظاهری	: چهار، ۶۵۴ ص: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰۰۰۴-۰۹۲۷-۲: ۳۵۰۰۰۰ ریال
وضعیت فهرست نویسی	: قیفا
موضوع	: اثر یان - تلر
موضوع	: شیمی - واکنش ها
موضوع	: مولکول ها
شناسه افزوده	: مهدی زاده بارفروشی، مریم
رده بندی کنگره	: ۱۳۹۳ الفم ۸/۴۶۱ QD
رده بندی دیویی	: ۲۲/۵۴۱
شماره کتابشناسی ملی	: ۳۴۶۷۲۵۴

نام کتاب: اثر یان تلر در شیمی مولکولی

ترجمه: مجید منجمی، مریم مهدی زاده بارفروشی

نشر اول: تهران، مجید منجمی، ۱۳۹۳

چاپ اول: دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات

شابک: ۹۷۸-۶۰۰۰۰۴-۰۹۲۷-۲

قیمت: ۳۵۰۰۰۰ ریال

شمارگان: ۱۰۰۰

فهرست

عنوان	صفحه
فصل اول	۱
مقدمه	۱
تاریخچه و تکامل درک اثر یان - تالر	۱
نقش و جایگاه JTE در فیزیک و شیمی مدرن	۹
اهداف اصلی این کتاب و وسایل تحقق آنها	۱۳
فصل ۲	۱۵
برهمکنش‌های ارتعاشی	۱۵
۲,۱. تخمین آدیاباتیک (عابق گرما)	۱۵
۲,۲. برهمکنش‌های ارتعاشی. مقادیر ثابت کوپل شدن ارتعاشی	۲۱
۲,۳. ثابت‌های ارتعاشی اروپیتال	۳۴
۲,۴. ثابت‌های نیروی عدم‌هارمونی و ناپایداری	۴۰
۲,۵. قضیه یان - تالر	۴۵
فصل ۳	۵۸
فرمولاسیون مسائل یان - تالر. پتانسیل‌های آدیاباتیک	۵۸
۳,۱. فرمولاسیون پایه. ساده‌ترین مسائل $E \otimes b_1$ و $E \otimes (b_1 + b_2)$	۵۸
۳,۲. مسئله $E \otimes e$	۶۸
۳,۳. مسائل $T \otimes e, T \otimes e_2, T \otimes (e + t_2), \Gamma_8 \otimes (e + t_2)$ برای جملات سه گانه و چهارگانه	۸۲
۳,۴. مسائل $H \otimes (g + h)$ و $T \otimes h, p^n \otimes h, G \otimes (g + h)$ برای سیستم‌های بیست وجهی (icosahedral)	۹۹
۳,۵. پتانسیل‌های آدیاباتیک در مسئله چند وضعیته	۱۲۲
۳,۶. سیستم‌های چند مرکزی	۱۲۸
فصل ۴	۱۴۴
شبه یان تالر، یان تالر حاصلضرب و آثار رنر تالر	۱۴۴
۴-۱. مسائل شبه یان تالر (PJT) دو ترازوی و چند ترازوی واحد بودن منشأ PJT	۱۴۴
ناپایداری آرایش و ماهیت پیوندی آن	۱۴۴

۴-۲: مسائل شبه $JT(A+E) \otimes e, (A+T) \otimes t, (T_1+T_2) \otimes e$ و مسائل ترکیبی JT و PJT	۱۶۳
۴-۳: مسائل JT محصول	۱۸۲
۴-۴: اثر رنر-تدر	۲۰۶
۴-۵: فرمول بندی دوباره نظریه JT	۲۱۳
فصل ۵	۱۸۹
راه حل های معادلات ارتعاشی: طیف انرژی و تحرک یان تدر (یان تدریویا)	۱۸۹
(۵،۱) جفت شدگی ارتعاشی ضعیف، نظریه اختلال	۱۸۹
(۵،۳) تونل زنی در سیستم های JT	۲۰۹
(۵،۴) روش های عددی و راه حل کلی	۲۳۲
(۵،۵) راه حل های مسائل چند حالت	۲۴۸
(۵،۶) فاکتورهای کاهش ارتعاشی	۲۶۷
(۵،۷) تقاطع های مخروطی و مسائل فاز توپولوژیکی	۲۹۳
فصل ۶	۳۰۱
اثر یان-تدر در طیف بینی: نظریه عمومی	۳۰۱
۶. ۱: انتقالات الکترونی	۳۰۱
۶. ۱. ۱: شکل های نوار نوری	۳۰۱
۶. ۱. ۲: ساختار ظریف ارتعاشی، خطوط فونون صفر و شکافت تونلی	۳۲۰
۶. ۱. ۳: JTE در زوال حالت برانگیخته	۳۳۳
۶. ۲: طیف رامان و مادون قرمز ارتعاشی	۳۳۶
۶. ۲. ۱: جذب مادون قرمز ارتعاشی	۳۳۶
۶. ۲. ۲: طیف رامان و شکست مضاعف	۳۵۳
۶. ۳: رزونانس مغناطیسی و طیف های مرتبط	۳۶۷
۶. ۳. ۱: JTE در طیف های رزونانس پارامغناطیسی الکترون	۳۶۷
۶. ۳. ۲: کشیدگی تصادفی و آرایش در EPR	۳۷۶
۶. ۳. ۳: رزونانس هسته های Y، جذب مایکروویو (زیر موج) و تضعیف اولتراسونیک (فراموج)	۳۹۳
فصل ۷	۴۰۱
شکل هندسی، طیف ها و واکنش پذیری سیستم های مولکولی	۴۰۱

۴۰۱	۷,۱ عمومی: آثار جفت شدن ارتعاشی JT در شکل هندسی و واکنش پذیری
۴۰۲	۷,۱,۱ شکل‌های ملکولی دینامیک سیستم‌های JT
۴۱۱	۷,۱,۲ مدل‌های انحرافات PJT و JT. اثر زوج تنها
۴۱۹	۷,۱,۳ واکنش پذیری JT القایی و فعال سازی شیمیایی
۴۲۶	۷,۱,۴ تاثیر متقابل لیگاندها
۴۳۲	۷,۲ آرایش خطی سیستم‌های ملکولی ساده:
۴۳۲	۷,۲,۱ سیستم‌های خطی سه اتمی و چهار اتمی:
۴۴۴	۷,۲,۲ ملکول‌های "شبه خطی":
۴۴۹	۷,۳ سیستم‌های ملکولی تریگونالی
۴۴۹	۷,۳,۱ سه اتمی‌های مثلثی X_3 :
۴۶۰	۷,۳,۲ سیستم‌های چهار اتمی تری گونالی AB_3
۴۶۵	۷,۳,۳ سیستم‌های دیگر با محور تقارنی سه گانه
۴۷۰	۷,۴ سیستم‌های مسطح-مربعی و چهار وجهی انحراف یافته:
۴۷۰	۷,۴,۱ سیستم‌های چهار اتمی X_4 و پنج اتمی MX_5
۴۷۷	۷,۴,۲ سیکلوتتادی ان، سیکلوتتان و رادیکال کاتیون‌های چهار وجهی
۴۸۴	۷,۵ خانواده‌های بنزن و سیکلوپنتان و برخی سیستم‌های بزرگتر
۴۸۴	۷,۵,۱ سیستم‌های آنیونی و رادیکال کاتیونی و مولکولی خانواده بنزن
۴۹۰	۷,۵,۲ رادیکال سیکلوتتادی انیل و سیکلوتتان: چرکیدگی:
۴۹۵	۷,۵,۳ سیستم‌های آلی بزرگتر:
۵۰۳	۷,۶ کلاسترها، کئوردیناسیون و سیستم‌های والانس-ترکیب شده
۵۰۳	۷,۶,۱ کلاسترهای JT و سیستم‌های کئوردیناسیون
۵۲۰	۷,۶,۲ جفت شدگی ارتعاشی در سیستم‌های والانس-ترکیب شده:
۵۳۳	فصل ۸
۵۳۳	مسائل حالت جامد: خواص محلی و پدیده‌های مشارکتی
۵۳۳	۸,۱ JTE در خواص محلی (منطقه‌ای) جامدات
۵۳۳	۸,۱,۱ مراکز ناخالصی در بلورها
۵۵۴	۸,۱,۲ JTE محلی در تشکیل ساختارهای بلوری خاص
۵۶۵	۸,۲ پدیده‌های مشارکتی
۵۶۵	۸,۲,۱ ترتیب انحرافات JT و انتقالات فاز ساختاری

- ۸,۲,۲ ساده ترین مسئله مشارکتی $\mathbf{JTE} \otimes \mathbf{b}_1$ ؛ زیرکون های خاکی کمیاب ۵۷۳
- ۸,۲,۳ ترتیب انحرافات JT سه مینیمی: ۵۸۳
- ۸,۲,۴ ساختارهای حلزونی (پیچ خورده)، فازهای نامتناسب و ترتیب های مغناطیسی ساختاری ۵۹۰
- ۸,۲,۵ نوار JTE، انحرافات پیرلز و انتقالات فازی مرتبه-اول، نگاه کلی به شکست تقارنی ۶۰۵
- ۸,۳ PJTE های مشارکتی، انتقالات فاز فروالکتریک ۶۲۰
- ۸,۴ JTE در ابر رسانای دما - بالا و مقاوم مغناطیسی (magnetoresistance) ... ۶۳۶