

اصول بنیادی شیمی فیزیک معدنی

نالیف:

دکتر سید جامه بزرگی

دکتر مؤده بیاقتی دیناد

انتشارات دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان

۱۳۹۵

سرشناسه	: جامه‌بزرگی، سعید، ۱۳۵۱ -
عنوان و نام پدیدآور	: اصول بنیادی شیمی فیزیک معدنی / تألیف سعید جامه‌بزرگی، مؤده لیاقتی دلشاد.
مشخصات نشر	: همدان: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد همدان، ۱۳۹۵.
مشخصات ظاهری	: ۱۶۲ ص: جدول، نمودار.
شابک	: 978-964-1040-28-6
وضعیت فهرست نویسی	: فیا
پادداشت	: کتابنامه: ص. ۱۶۱ - ۱۶۲.
موضوع	: شیمی فیزیک - راهنمای آموزشی (عالی)
موضوع	: Chemistry, Physical and theoretical -- Study and teaching (Higher)
موضوع	: شیمی فیزیک - مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)
موضوع	: Chemistry, Physical and theoretical -- Problems, exercises, etc. (Higher)
موضوع	: شیمی معدنی - راهنمای آموزشی (عالی)
موضوع	: Chemistry, Inorganic -- Study and teaching (Higher)
موضوع	: شیمی معدنی - مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)
موضوع	: chemistry, Inorganic -- Problems, exercises, etc (Higher)
شناسه افزوده	: لیاقتی دلشاد، مؤده ۱۳۶ -
شناسه افزوده	: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد همدان
رده بندی کنگره	: ۱۳۹۵ الف ۲/ج ۲/۴۵ D
رده بندی دیویی	: ۵۴۱/۳۶۰۷۶
شماره کتابشناسی ملی	: ۴۲۳۵۱۱



انتشارات دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان

اصول بنیادی شیمی فیزیک معدنی

تألیف: دکتر سعید جامه‌بزرگی، دکتر مؤده لیاقتی دلشاد

ناشر: انتشارات دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان

چاپ اول: ۱۳۹۵

تیراژ: ۱۰۰ جلد

چاپ: تندیس

ناظر چاپ: ساسان مرشدزادگان

طراحی جلد: دکتر حسین اردلانی

صفحه‌آرایی: لیلا عوافقی اکمل

قیمت: ۱۵۰۰۰۰ ریال

ISBN: 978-964-1040-28-6

حق چاپ برای دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان محفوظ است

نشانی: همدان، بلوار امام خمینی (ره)، بلوار پروفیسور موسیوند، دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان - تلفن: ۰۸۱۳-۴۴۹۴۱۵۱

فصل اول: مقدمه‌ای بر مبانی مکانیک کوانتومی

۱-۱. مفهوم اولیه نظریه کوانتومی	۱۱
۲-۱. معادله شرودینگر	۱۲
۳-۱. مدل ایزه د جعبه	۱۴
۴-۱. بلگر	۲۰

فصل دوم: نظریه اوربیتال مولکولی و بررسی انرژی عدم استقرار

سیستم‌های دارای الکترون π

۱-۲. مقدمه	۳۱
۲-۲. نظریه اوربیتال مولکولی	۳۲
۳-۲. قطعه‌بندی معادلات سکولار	۳۶
۴-۲. محاسبه انرژی عدم استقرار بوتادین به روش تئوری گروه	۳۷
۵-۲. محاسبه انرژی عدم استقرار به روش تئوری گروه	۴۳
۶-۲. محاسبه انرژی عدم استقرار نفتالن به روش تئوری گروه	۴۳
۷-۲. مسائل برای تمرین بیشتر	۵۰

فصل سوم: توابع موج اوربیتال‌ها و بررسی تأثیر میدان لیگند بر شکل اوربیتال

۱-۳. توابع موج اوربیتال‌ها	۵۱
۲-۳. نحوه یافتن اوربیتال‌ها (نمودارهای جزء زاویه‌ای توابع موج)	۵۴
۱-۲-۳. اوربیتال s ($l=0$)	۵۵
۲-۲-۳. اوربیتال‌های p ($l=1$)	۵۶
۳-۲-۳. اوربیتال‌های d ($l=2$)	۵۷
۴-۲-۳. اوربیتال‌های f ($l=3$)	۵۹
۵-۲-۳. اوربیتال‌های g ($l=4$)	۶۱
۳-۳. تأثیرات میدان لیگاند جهت محاسبه شکل اوربیتال‌ها	۶۳

۴-۳. اثبات عمود بودن توابع موجی	۶۶
۵-۳. شرط موازی و عمود بودن تابع ها با تاثیر دادن I_z	۶۷
۶-۳. مسائل برای تمرین بیشتر	۶۹

فصل چهارم: اساس میدان بلور و بررسی پتانسیل میدان کریستالی هشت وجهی

۱-۴. نظریه میدان بلور	۷۱
۲-۴. پتانسیل میدان کریستالی هشت وجهی	۷۲
۳-۴. اساس برای تمرین بیشتر	۷۸

فصل پنجم: اسپکتروسکوپی اتمی

۱-۵. مفهوم ترم و گشتاور راه راویها	۷۹
۲-۵. ترم های یون آزاد	۸۱
۳-۵. توابع موج اوربیتالی	۸۲
۴-۵. توابع موج اسپینی	۸۳
۵-۵. توابع موج ترم ها	۸۶
۱-۵-۵. بدست آوردن توابع موج تک الکترون ترم F	۸۷
۲-۵-۵. محاسبه تابع موج تک الکترون برای ترم 3P در آرایش الکترونی d^2	۹۰
۶-۵. کوپلاژ اسپین-اریتال	۹۱
۷-۵. مسائل برای تمرین بیشتر	۹۲

فصل ششم: یون آزاد در میدان بلوری ضعیف

۱-۶. مقدمه	۹۳
۲-۶. ترم S	۹۴
۳-۶. ترم P	۹۴
۴-۶. ترم F	۹۶
۵-۶. تعیین ارتباط بین جملات طیفی آرایش الکترونی d^n در نمودارهای اورگل	۱۰۰
۶-۶. فرمالیسم حفرة	۱۰۴
۷-۶. مسائل برای تمرین بیشتر	۱۰۶

فصل هفتم: بررسی یونها در میدان بلوری قوی و متوسط

- ۱-۷. بررسی نمودارهای سطوح انرژی آرایش‌های الکترونی در گروه‌های تقارنی ۱۰۷
- ۲-۷. بررسی سطوح انرژی d^1 در گروه‌های تقارنی T_d و O_h ۱۰۷
- ۳-۷. بررسی سطوح انرژی d^2 در گروه تقارنی O_h ۱۰۸
- ۱-۳-۷. چندگانگی اسپین ۱۱۱
- ۴-۷. بررسی سطوح انرژی d^2 در گروه تقارنی T_d ۱۱۴
- ۵-۷. بررسی سطوح انرژی d^3 در گروه تقارنی O_h ۱۱۹
- ۶-۷. بررسی سطوح انرژی d^3 در گروه تقارنی T_d ۱۲۴
- ۷-۷. مسائل برای تمرین بیشتر ۱۳۰

فصل هشتم: اثر قدرت میدان بر نمودارهای تانابه سوگانو

- ۱-۸. نمودارهای تانابه-سوگانو ۱۳۱
- ۲-۸. نمودارهای تانابه-سوگانو ساده شده ۱۳۴
- ۳-۸. گروه‌های دوگانه ۱۳۵
- ۴-۸. جداسازی حاصل از کوپلاژ اسپین-اربع‌ال ۱۴۲
- ۵-۸. مسائل برای تمرین بیشتر ۱۴۳
- پیوست ۱۴۵
- منابع و مآخذ ۱۶۱

مقدمه

در دوره کارشناسی دانشجویان مبحث میدان بلور و مباحث شکافتگی اوربیتال‌های d را براساس دافعه لیگاند با اوربیتال‌ها در میدان‌های متنوع مورد بررسی قرار می‌دهند، و تعداد محدودی از دانشجویان در دوره کارشناسی و کارشناسی ارشد، اصول میدان بلور و شکافتگی اوربیتال‌ها را براساس نظریه گروه و تقارن مطالعه می‌کنند.

برای اکثر دانشجویان همواره این سوال وجود داد که مفاهیم اصلی شکافتگی میدان بلور از کجا ناشی می‌شود؟ و این حقیقت مبهم وجود دارد که نظریه میدان بلور به طور ساده کاربرد نظریه اتم در مکانیک کوانتومی است، هرچند که نظریه گروه وسیله‌ای فوق العاده قوی برای ساده سازی چنین مسأله است و در آن نیازی به فهم اصول نظریه اختلال در مکانیک کوانتم ندارد ولی در مسائل که تئران گروه‌ها پایین باشد، نظریه گروه کاملاً پیچیده می‌شود، هدف اصلی در این کتاب که در هشت فصل تنظیم شده است، استفاده از مبانی ساده مکانیک کوانتومی برای درک بهتر میدان بلور می‌باشد و سعی شده است مباحث ارائه شده تا حد ممکن به زبانی ساده ذکر گردد، براین اساس در فصل اول مبانی مکانیک کوانتومی به زبانی ساده و به اختصار مورد بحث قرار گرفته است، در فصل دوم نظریه اوربیتال مولکولی و بررسی انرژی عدم استقرار سیستم‌های دارای الکترون π به روش نظریه گروه، به طور مفصل بحث شده است، در فصل سوم، توابع موج اوربیتال‌ها و بررسی تأثیر میدان لیگاند بر شکل اوربیتال به طور کامل مورد بحث و بررسی قرار گرفته است، در فصل چهارم، مفصل اساس میدان بلور و بررسی پتانسیل میدان کریستالی، هشت وجهی پرداخته شده است و در فصل پنجم، اسپکتروسکوپی اتمی مورد بحث و تحلیل قرار گرفته است، در فصل ششم و هفتم، یون آزاد در میدان‌های بلوری ضعیف، قوی و متوسط به طور کامل بررسی شده است، در فصل هشتم، اثر قدرت میدان بر نمودارهای تانابه سوگاتو به طور مفصل مورد بحث قرار گرفته است. همانند هر نوشتاری این مجموعه نیز خالی از اشکال نمی‌باشد، لذا از کلیه همکاران عزیز و دانشجویان ارجمند تقاضا داریم، چنانچه در مطالعه کتاب با هر گونه ایراد و اشتباهی مواجه شدید ما را مطلع نموده تا در تجدید چاپ بعدی از نظرات پیشنهادی استفاده شود، امید است که با این تلاش جدید توانسته باشیم گام موثری در امر آموزش شیمی فیزیک معدنی برداشته و نیاز دانشجویان گرامی رشته کارشناسی ارشد شیمی معدنی را فراهم کرده باشیم.