



# نگرشی بر اوربیتال مولکولی

مولفان:

حمیده سراوانی

دانشیار گروه شیمی دانشگاه سیستان و بلوچستان

مسعود معمار

دانشجوی دکترای شیمی معدنی دانشگاه سیستان و بلوچستان

سرشناسه : سراوانی ، حمیده ، ۱۳۴۸ .  
 عنوان و نام پدیدآور: نگرشی بر اوریتال مولکولی / مولفان : حمیده سراوانی، مسعود معمار  
 مشخصات نشر: زاهدان، دانشگاه سیستان و بلوچستان، ۱۳۹۸  
 مشخصات ظاهری: ۱۷۰ ص ، وزیری.  
 فروست: انتشارات دانشگاه سیستان و بلوچستان، ۱۷۳ .  
 شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۶۸۵۸-۰۲-۱  
 وضعیت فهرست نویسی: فیبا  
 یادداشت: کتابنامه  
 ویراستار: فاطمه ثواب  
 صفحه آرا و طراح جلد: ابوالفضل چاری  
 موضوع: اوریتال های مولکولی - اتمی  
 شناسه افزوده: معمار، مسعود، ۱۳۵۷.  
 شناسه افزوده: دانشگاه سیستان و بلوچستان، مرکز چاپ و نشر  
 شناسه افزوده: University of Sistan and Baluchestan  
 رده بندی کنگره: ۵۷۴۴۲۲  
 رده بندی دیویی: ۵۴۱/۲۸  
 شماره کتابشناسی ملی: ۵۸۷۴۲۲۲



ناشر: انتشارات دانشگاه سیستان و بلوچستان

## نگرشی بر اوریتال مولکولی

مولفین: دکتر حمیده سراوانی / مسعود معمار

چاپ: چاپخانه المهدی دانشگاه سیستان و بلوچستان

نوبت چاپ: اول، ۹۸، قیمت: ۱۶۰۰۰ تومان، شمارگان: ۱۰۰۰

شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۶۸۵۸-۰۲-۱

تمام حقوق چاپ و نشر این اثر طبق قرارداد محفوظ است، هرگونه چاپ و تکثیر از محتویات این کتاب بدون اجازه کتبی ممنوع است، متخلفان به موجب قانون حمایت از حقوق مولفان، مصنفان و هنرمندان تحت پیگرد قانونی قرار می گیرند.

## فهرست مطالب

|    |                                                                      |
|----|----------------------------------------------------------------------|
| ۱  | فصل اول: اوربیتال اتمی                                               |
| ۳  | ۱-۱- مقدمه                                                           |
| ۱۰ | ۱-۱-۱- اوربیتال S                                                    |
| ۱۱ | ۱-۱-۲- اوربیتال p                                                    |
| ۱۲ | ۱-۱-۳- اوربیتال d                                                    |
| ۱۲ | ۲-۱- اوربیتال‌های اتمی                                               |
| ۲۵ | منابع                                                                |
| ۲۷ | فصل دوم: توابع اوربیتال اتمی و تشکیل مولکولی (زوایا و نحوه برهم کنش) |
| ۲۹ | ۱-۲- مقدمه                                                           |
| ۲۹ | ۲-۲- انواع اوربیتال‌های مولکولی                                      |
| ۲۹ | ۱-۲-۲- اوربیتال مولکولی پیوندی (هم‌پوشانی مثبت)                      |
| ۳۰ | ۲-۲-۲- اوربیتال مولکولی ضدپیوندی (هم‌پوشانی منفی)                    |
| ۳۱ | ۳-۲-۲- اوربیتال مولکولی غیرپیوندی (هم‌پوشانی صفر)                    |
| ۳۲ | ۳-۲- ترکیبی خطی اوربیتال‌های اتمی                                    |
| ۳۷ | ۴-۲- تأثیر هم‌پوشانی حاصل از تغییرات فاصله میان دو مرکز اتمی         |
| ۳۹ | ۵-۲- انرژی برهم کنش بین دو اوربیتال اتمی                             |
| ۴۴ | منابع                                                                |
| ۴۵ | فصل سوم: کاربرد نظریه اوربیتال مولکولی در تشکیل پیوند کووالانسی      |
| ۴۷ | ۱-۳- مقدمه                                                           |
| ۴۷ | ۲-۳- ایده‌های اولیه اوربیتال مولکولی                                 |
| ۶۰ | ۳-۳- مولکول‌های $H_2$ و $H_2^+$                                      |
| ۶۵ | ۴-۳- مولکول دو اتمی عناصر ردیف دوم                                   |
| ۷۵ | فصل چهارم: اوربیتال مولکولی از دیدگاه نظریه گروه                     |

- ۷۷..... ۱-۴- مقدمه.
- ۷۷..... ۲-۴- تشکیل اوربیتال مولکولی از اوربیتال اتمی.
- ۷۹..... ۱-۲-۴- اوربیتال مولکولی حاصل از اوربیتال s.
- ۸۳..... ۲-۲-۴- اوربیتال مولکولی حاصل از اوربیتال p.
- ۸۵..... ۳-۲-۴- اوربیتال‌های مولکولی به دست آمده از اوربیتال‌های d.
- ۸۸..... ۴-۲-۴- اوربیتال‌های ضد پیوندی.
- ۸۹..... ۳-۴- اوربیتال‌های مولکولی.
- ۸۹..... ۱-۳-۴- مولکول‌های دو اتمی جوهرسته‌ای.
- ۹۲..... ۲-۳-۴- ترکیب اوربیتال‌ها.
- ۹۵..... ۳-۳-۴- مولکول‌های دو اتمی دوره‌های اول و دوم.
- ۹۶.....  $H_2: [\sigma_g^2 (1s)]$  -۱-۳-۳-۴
- ۹۷.....  $He_2: [\sigma_g^2 \sigma_u^{*2} (1s)]$  -۲-۳-۳-۴
- ۹۷.....  $Li_2: [\sigma_g^2 (2s)]$  -۳-۳-۳-۴
- ۹۷.....  $Be_2: [\sigma_g^2 \sigma_u^{*2} (2p)]$  -۴-۳-۳-۴
- ۹۷.....  $B_2: [\pi_u^1 \pi_u^1 (2p)]$  -۵-۳-۳-۴
- ۹۸.....  $C_2: [\pi_u^2 \pi_u^2 (2p)]$  -۶-۳-۳-۴
- ۹۹.....  $N_2: [\pi_u^2 \pi_u^2 \sigma_g^2 (2p)]$  -۷-۳-۳-۴
- ۱۰۰.....  $O_2: [\sigma_g^2 \pi_u^2 \pi_u^2 \pi_g^{*1} \pi_g^{*1} (2p)]$  -۸-۳-۳-۴
- ۱۰۱.....  $F_2: [\sigma_g^2 \pi_u^2 \pi_u^2 \pi_g^{*2} \pi_g^{*2} (2p)]$  -۹-۳-۳-۴
- ۱۰۱.....  $Ne_2: [\sigma_g^2 \pi_u^2 \pi_u^2 \pi_g^{*2} \pi_g^{*2} \sigma_g^{*2} (2p)]$  -۱۰-۳-۳-۴
- ۱۰۲..... ۱۱-۳-۳-۴- طول پیوند در مولکول‌های جوهرسته دو اتمی.
- ۱۰۴..... ۴-۳-۴- طیف بینی فوتوالکترون.
- ۱۱۰..... ۴-۴- مولکول‌های دو اتمی ناجوهرسته.
- ۱۱۰..... ۱-۴-۴- پیوندهای قطبی.