

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۲۲۶۸۷۵۰

۱۴۰۱/۰۱/۲۷

نظریه گروه و کاربردهای آن در شیمی

www.ketab.ir

تدوین:

دکتر شکوفه آقایی

عضو هیأت علمی دانشگاه آزاد اسلامی

امیر مهدیان

زمستان ۱۴۰۰

سرشناسه	آقابیک، شکوفه، ۱۳۴۵ - ، استاد راهنما
عنوان و نام پدیدآور	نظریه گروه و کاربردهای آن در شیمی / تدوین شکوفه آقابیک، امیر مهدیان.
مشخصات نشر	تهران: دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری	۲۳۰ ص: مصور
شابک	۹۷۸-۹۶۴-۴۶۳-۸۴۸-۰۰
وضعیت فهرست‌نویسی	فیبا
یادداشت	واژه‌نامه.
یادداشت	کتابنامه.
یادداشت	نمایه.
موضوع	نظریه گروه‌ها - راهنمای آموزشی (عالی).
موضوع	Group theory - study and teaching (Higher)
موضوع	شیمی - ریاضیات - راهنمای آموزشی (عالی).
موضوع	Chemistry - Mathematics - Study and teaching (Higher)
موضوع	شیمی - راهنمای آموزشی (عالی).
موضوع	Chemistry - Study and teaching (Higher)
شناسه افزوده	مهدیان، امیر. ۱۳۶۶-
شناسه افزوده	دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران). مرکز نشر.
شناسه افزوده	Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic). Publishing Center.
رده‌بندی کنگره	QA۱۷۴/۲
رده‌بندی دیویی	۵۱۲/۳۰۷۶
شماره کتابشناسی ملی	۹۷۱۵۱۲۵

این کتاب در جلسه مورخ ۱۳۹۹/۱۲/۱۰ شورای چاپ و نشر دانشگاه صنعتی امیرکبیر به تصویب رسیده است.



انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر
(پلی تکنیک تهران)

عنوان کتاب	نظریه گروه و کاربردهای آن در شیمی
تدوین	شکوفه آقابیک، امیر مهدیان
ناشر	انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)
لیتوگرافی، چاپ و صحافی	انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)
چاپ اول	زمستان ۱۴۰۰
قیمت	۷۵۰۰۰ تومان
تیراژ	۵۰
شابک	۹۷۸-۹۶۴-۴۶۳-۸۴۸-۰۰
	ISBN : 978-964-463-848-0

آدرس مرکز پخش: خیابان ولیعصر، روبروی خیابان بزرگمهر، فروشگاه کتاب مرکز نشر

دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران) - تلفن: ۶۶۴۹۸۸۶۸

وبسایت: <http://publication.aut.ac.ir>

حق چاپ برای ناشر محفوظ است.

فهرست مطالب

فصل ۱: تقارن مولکولی.....	۱
۱-۱- مقدمه.....	۱
۱-۲- عناصر تقارن و اعمال تقارن.....	۱
۱-۳- مرکز تقارن.....	۳
۱-۴- صفحه تقارن.....	۳
۱-۵- محور چرخشی محض.....	۴
۱-۵-۱- محور اصلی و محورهای فرعی.....	۶
۱-۵-۲- انواع صفحات تقارن.....	۷
۱-۶- محورهای چرخشی مرکب.....	۷
۱-۷- قواعد نظریه گروه.....	۱۰
۱-۸- گروه نقطه‌ای.....	۱۱
۱-۸-۱- گروه‌های نقطه‌ای بلوری.....	۱۱
۱-۸-۲- گروه‌های نقطه‌ای غیر بلوری.....	۱۱
۱-۹- تعیین گروه نقطه‌ای.....	۱۱
۱-۱۰- تعیین فعالیت نوری و قطبیت مولکول.....	۱۲
۱-۱۱- اعمال تقارن و مرتبه گروه.....	۱۳
۱-۱۲- جدول ضرب گروه.....	۱۴
۱-۱۳- طبقه‌بندی عناصر یک گروه.....	۱۸
تمرینات.....	۲۰
فصل ۲: نمایش گروه و جدول کاراکتر.....	۲۱
۲-۱- مقدمه.....	۲۱
۲-۲- ماتریس‌ها.....	۲۱
۲-۲-۱- ضرب ماتریس‌ها.....	۲۲
۲-۲-۲- ماتریس‌های قابل بلوک شدن.....	۲۲
۲-۲-۳- مشخصه‌های ماتریس.....	۲۳
۲-۳- ماتریس‌های اعمال تقارن.....	۲۴

۲۶	۴-۲- نمایش گروه
۲۹	۵-۲- جدول کاراکتر
۳۰	۲-۵-۱- قضیه مهم تعامد
۳۱	۲-۵-۲- قواعد به دست آمده از قضیه مهم تعامد
۳۳	۲-۵-۳- ساخت جدول کاراکتر
۴۲	۲-۶- نمایش کاهش پذیر و کاهش آنها
۴۵	تمرینات
۴۷	فصل ۳: هیبرید شدن اوربیتال های اتمی
۴۷	۳-۱- مقدمه
۴۸	۳-۲- شمای هیبریداسیون پیوند سیگما
۴۸	۳-۲-۱- مولکول چهاروجهی
۵۲	۳-۲-۲- مولکول AB_3 مثلث مسطح
۵۳	۳-۲-۳- مولکول AB_5 هرم مربعی
۵۴	۳-۲-۴- مولکول AB_6 دو هرمی مثلثی
۵۶	۳-۵-۲- مولکول هشت وجهی
۵۸	۳-۳- شمای هیبریداسیون پیوندهای sp^3d
۵۸	۳-۳-۱- مولکول AB_3 مثلث مسطح
۶۰	۳-۳-۲- مولکول AB_6 هشت وجهی
۶۲	۳-۳-۳- مولکول AB_4 چهاروجهی
۶۳	۳-۴-۲- مولکول AB_4 مربع مسطح
۶۵	تمرینات
۶۷	فصل ۴: طیف سنجی
۶۷	۴-۱- مقدمه
۶۸	۴-۲- محاسبه کاراکترهای نمایش $3N$
۶۸	۴-۲-۱- روش بردار در تعیین مشخصه های نمایش $3N$
۷۰	۴-۲-۲- روش کلی در تعیین مشخصه های نمایش $3N$
۷۲	۴-۳- تشخیص ارتعاشات فعال در زیرقرمز
۷۴	۴-۴- تشخیص ارتعاشات فعال در رامن
۷۶	۴-۵- طیف رامن و زیرقرمز مولکول N_2F_2
۷۷	۴-۶- بررسی طیف رامن و زیرقرمز برای مولکول BF_3
۷۸	۴-۷- بررسی طیف رامن و زیرقرمز مولکول های AB_4

۷۸.....	۱-۷-۴ مولکول AB_4 چهاروجهی.....
۷۹.....	۲-۷-۴ مولکول AB_4 مربع مسطح.....
۸۰.....	۳-۷-۴ مولکول AB_4 دید-چشمی شکل.....
۸۱.....	۸-۴ مولکول AB_5 هرم مربعی.....
۸۲.....	۹-۴ مولکول هشت وجهی AB_6
۸۳.....	۱۰-۴ طیف الکترونی.....
۸۷.....	تمرینات.....
۸۹.....	فصل ۵: نظریه اوربیتال مولکولی.....
۸۹.....	۱-۵ مقدمه.....
۹۰.....	۲-۵ روش ترکیب خطی اوربیتال های اتمی LCAO.....
۹۲.....	۳-۵ روش اوبراتور تصویر و ایجاد SALC.....
۹۲.....	۱-۳-۵ SALC های اوربیتال های مولکولی π کاتیون سیکلوپروپنیل.....
۹۶.....	۲-۳-۵ SALC های اوربیتال های مولکولی π بنزن.....
۹۸.....	۴-۵ انرژی اوربیتال های مولکولی π بنزن.....
۱۰۱.....	۵-۵ محاسبه انرژی MO های π بوتادی آن.....
۱۰۵.....	۶-۵ ترکیبات ساندویچی فلزی.....
۱۰۵.....	۱-۶-۵ فروسن پوشیده.....
۱۰۸.....	۲-۶-۵ فروسن نپوشیده.....
۱۱۰.....	۳-۶-۵ دیاگرام MO متالوسن.....
۱۱۱.....	۴-۶-۵ دی بنزن کروم.....
۱۱۳.....	۷-۵ تشکیل SALC اوربیتال های ملکولی برای AB_6 هشت وجهی.....
۱۱۵.....	۸-۵ تشکیل SALC اوربیتال های مولکولی AB_4 چهاروجهی.....
۱۱۷.....	۹-۵ دیاگرام اوربیتال مولکولی H_2O
۱۱۹.....	۱۰-۵ دیاگرام اوربیتال مولکولی CO_2
۱۲۲.....	تمرینات.....
۱۲۳.....	فصل ۶: کمپلکس های فلزات واسطه.....
۱۲۳.....	۱-۶ ترم های طیفی.....
۱۲۶.....	۱-۱-۶ روش لانه کبوتری برای تعیین ترم های طیفی یون آزاد.....
۱۲۷.....	۲-۱-۶ روش فاکتورگیری از اسپین برای تعیین ترم های طیفی یون آزاد.....
۱۲۸.....	۳-۱-۶ قواعد هوند برای ترتیب پایداری ترم های طیفی.....
۱۳۱.....	۲-۶ نظریه میدان لیگاند.....

۱۳۷	۳-۶- نظریه اوربیتال مولکولی.....
۱۳۷	۱-۳-۶- کمپلکس هشت وجهی فقط دارای پیوندهای سیگما.....
۱۴۰	۲-۳-۶- کمپلکس هشت وجهی دارای پیوندهای π
۱۴۳	۳-۳-۶- کمپلکس چهاروجهی فقط دارای پیوندهای سیگما.....
۱۴۴	۴-۳-۶- کمپلکس چهاروجهی دارای پیوندهای π
۱۴۵	۴-۶- شکافتگی ترم‌های طیفی.....
۱۴۷	۵-۶- نمودار همبستگی.....
۱۵۱	۱-۵-۶- روش نزول تقارن.....
۱۵۳	۶-۶- طیف الکترونی کمپلکس فلزات واسطه.....
۱۵۴	۱-۶-۶- قواعد انتخاب.....
۱۵۶	۲-۶-۶- نمودار اورگل.....
۱۵۹	۳-۶-۶- نمودار تانابه - سوگانو.....
۱۶۰	۷-۶- انحراف یان-تلر.....
۱۶۲	تمرینات.....
۱۶۳	فصل ۷: تقارن بلور.....
۱۶۳	۱-۷- مقدمه.....
۱۶۳	۲-۷- عناصر و اعمال تقارن.....
۱۶۴	۱-۲-۷- محور چرخشی محض.....
۱۶۵	۲-۲-۷- صفحه تقارن (آینه‌ای).....
۱۶۵	۳-۲-۷- محور چرخش - وارونگی.....
۱۶۶	۳-۷- سیستم‌های بلوری.....
۱۶۷	۴-۷- سی و دو گروه نقطه‌ای بلورشناسی.....
۱۶۷	۱-۴-۷- تصاویر برجسته نما.....
۱۷۳	۵-۷- شبکه‌های براوه.....
۱۷۴	۶-۷- گروه‌های فضایی.....
۱۷۵	۱-۶-۷- محور پیچشی.....
۱۷۶	۲-۶-۷- صفحات گلاید (لغزنده).....
۱۷۸	تمرینات.....
۱۷۹	فصل ۸: قواعد وودوارد-هافمن.....
۱۷۹	۱-۸- مقدمه.....
۱۸۰	۲-۸- کاربردهای قواعد وودوارد-هافمن.....

پیشگفتار

مباحث نظریه گروه و کاربردهای آن بخشی از دروس دوره کارشناسی و کارشناسی ارشد رشته شیمی است. برخی از کتاب های شیمی معدنی بحث هایی در مورد آن دارند اما کامل نیستند. برخی از کتاب های اختصاصی نظریه گروه هم بحث های بسیار پیچیده و طولانی در این زمینه دارند. کتاب حاضر مباحث نظریه گروه را به صورت بسیار ساده بیان کرده است. بعلاوه سعی شده است، مباحث کامل تری از کاربرد نظریه گروه در کریستالوگرافی، شیمی معدنی و شیمی آلی را در برگیرد. از طرفی با خلاصه کردن مباحث نظریه گروه و پرداختن به اصل مطلب، رسیدن به نتیجه مطلوب، بهتر مهیا شده است. امید است کتاب حاضر بتواند گوشه ای از مباحث سخت و پیچیده ی شیمی را به زبان ساده بیان کرده باشد.

در آخر بر خود لازم می دانیم از داوران محترم که زحمت مطالعه کتاب را کشیده و نظرات مفید و مناسبی را ارائه دادند و همه ی دست اندرکاران کوشای انتشارات دانشگاه امیرکبیر که زحمت مراحل چاپ و انتشار این کتاب را بر عهده گرفتند کمال تشکر را داشته باشیم.

شکوفه آقابییگی

امیر مهدیان