



کاربرد شیمیایی نظریه گروه

ف. آلبرت کاتن

ترجمه عباس رضوی

— مرکزنشردانشگاهی، تهران —



Chemical Applications of Group Theory
 F. Albert Cotton
 Second Edition
 Wiley-Interscience, 1971

کاربرد شیمیایی نظریه گروه
 تألیف ف. آلبرت کاتن

ترجمه دکتر عباس رضوی
 ویراسته عبدالله ارگانی

مرکز نشر دانشگاهی

چاپ اول ۱۳۶۵

چاپ دوم ۱۳۸۷

تعداد ۱۰۰۰

تومان ۵۲۰۰

لیتوگرافی: خواندنیها

چاپ: حیدری

حق چاپ برای مرکز نشر دانشگاهی محفوظ است

قورس نویسی پیش از انتشار کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

سرشناسه: کاتن، فرانک آلبرت، ۱۹۲۰ - .

عنوان و نام پدیدآور: کاربرد شیمیایی نظریه گروه / ف. آلبرت کاتن، ترجمه عباس رضوی.

مشخصات نشر: تهران: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۵.

مشخصات ظاهری: شش، ۴۴۸ ص: مصور، جدول، نمودار.

فروخت: مرکز نشر دانشگاهی، ۲۲۰ شیمی و مهندسی شیمی، ۲۳.

شابک: ۶-۹۷۸-۹۶۴-۰۱-۰۲۲۰۰. ۵۲۰۰۰ ریال

وضعیت قورس نویسی: فیبا

پادداشت: عنوان اصلی: *Chemical applications of group theory*

پادداشت: چاپ دوم: ۱۳۸۷ (فیبا).

پادداشت: کتابنامه: ص. [۴۴۵] - ۴۴۸.

موضوع: نظریه مولکولی.

موضوع: نظریه گروهها.

شناسه افزوده: رضوی، عباس ، مترجم.

شناسه افزوده: مرکز نشر دانشگاهی

ردیبدی کنگره: ۱۳۶۵/۱۲۵ کد QD۴۶۱/۱

ردیبدی نیوبی: ۵۲۱/۲۲

شاره کتابشناسی ملی: ۳۸۹۵/۷۱

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحة	عنوان
۱	پیشگفتار
۲	پیشگفتار چاپ اول
۵	قسمت اول: اصول
۷	۱- مقدمه
۱۱	۲- تعاریف و قضایای نظریه گروه
۱۱	۱- خواص اساسی گروه
۱۳	۲- مثالی چند از گروهها
۱۸	۳- زیر گروهها
۲۰	۴- طبقات
۲۲	تمرینها
۲۵	۳- تقارن مولکولی و گروههای تقارن
۲۵	۱- بررسی کلی موضوع
۲۶	۲- عناصر تقارن و اعمال تقارنی
۲۷	۳- صفحه های تقارن و انعکاسها
۳۰	۴- مرکز وارونگی
۳۱	۵- محورهای چرخش متقارف و چرخشیهای متقارف

عنوان	صفحة
۳-۶ محورهای چرخش نامتعارف و چرخشهای نامتعارف	۲۶
۷-۳ حاصلضربهای اعمال تقارنی	۴۰
۸-۳ عناصر تقارن هم ارز و اتمهای هم ارز	۴۲
۹-۳ روابط کلی بین عناصر تقارن و اعمال تقارنی	۴۴
۱۰-۳ عناصر تقارن وايزمری نوری	۴۵
۱۱-۳ گروههای نقطه‌ای تقارن	۴۷
۱۲-۳ تقارن با محورهای چندگانه مرتبه بالا	۵۳
۱۳-۳ روشی برای طبقه‌بندی تقارن مولکولها	۶۰
۱۴-۳ مثالهای نمایشی	۶۲
۱۵-۳ طبقات اعمال تقارنی	۶۸
تمرینها	۷۲
 ۴- نمایش گروهها	 ۷۹
۱-۴ بعضی خصوصیات ماتریسها و بردارها	۷۹
۲-۴ نمایشی گروهها	۹۴
۳-۴ قضیه مهم تعامل و نتایج آن	۹۸
۴-۴ جدولهای ماهیت	۱۰۶
۵-۴ نمایشی گروههای حلقه‌ای	۱۰۹
تمرینها	۱۱۴
 ۵- ظریفه گروه و مکانیک گوازیم	 ۱۱۵
۱-۵ نوابع موجی، مبانی نمایشی کاوش‌ناپذیر	۱۱۵
۲-۵ حاصلضرب مستقیم	۱۲۱
۳-۵ شناسایی عناصر غیر صفر ماتریس	۱۲۵
تمرینها	۱۲۷
 ۶- ترکیبات خطی تقارن‌سازگار	 ۱۲۹
۱-۶ ملاحظات اولیه	۱۲۹
۲-۶ ابرانور تصویر	۱۳۰
۳-۶ مثالهای نمایشی	۱۳۶

عنوان

تمرینها

صفحه

۱۴۵

۱۴۷

قسمت دوم: کاربردها

۱۴۹

۷- نظریه اوربیتال مولکولی از نظرگاه تقارن

۱۴۹

۱- اصول کلی

۱۵۷

۲- نظریه بندی تقارنی معادلات سکولار

۱۶۰

۳- سیستم‌های هیدروکربن‌های حلقوی

۱۷۷

۴- موارد عمومی نحوه تشکیل LCAO-MO پیوند^{۲۲}

۱۹۰

۵- یک تمرین: نفتالین

۱۹۵

۶- تحریک‌های الکترونی نفتالین: دستورهای گریب‌ش و تبادل آرایش

۲۰۱

۷- تشکیل پیوندهای سه مرکزی

۲۰۹

۸- دستورهای گریب‌ش برای تقارن برای واکنش‌های حلتساز

۲۲۲

تمرینها

۸- اوربیتالهای هیبرید و اوربیتالهای مولکولی برای مولکولهای نوع AB_n

۲۲۷

۱- مقدمه

۲۲۸

۲- خواص تبدیلی اوربیتالهای انسی

۲۲۲

۳- شماهای هیبرید شدن اوربیتالهای^{۲۳}

۲۴۰

۴- شماهای هیبرید شدن برای تشکیل پیوند^{۲۴}

۲۴۹

۵- اوربیتالهای هیبرید به عنوان ترکیب‌های خطی اوربیتالهای انسی

۲۵۴

۶- نظریه اوربیتال مولکولی برای مولکولهای نوع AB_n

۲۵۹

۷- رابطه بین روش اوربیتال مولکولی دروش هیبرید (شنن)

۲۶۱

۸- اوربیتالهای مولکولی برای مولکولهای هشت‌وجهی و چهار‌وجهی منتظم

۲۶۲

۹- اوربیتالهای مولکولی برای ترکیبات ساندویچی فلز

۲۷۹

تمرینها

۲۸۱

۹- نظریه میدان لیکاند

۲۸۱

۱- ملاحظات مقدماتی

۲۸۲

۲- ساختارهای الکترونی اتمها و بونهای آزاد

۲۸۹

۳- شکاف سطوح و ترمها در محیط شیمیایی

عنوان

صفحه

۲۹۶	۴-۹ برباری تمودارهای سطوح انرژی
۲۱۵	۵-۹ تخفین انرژیهای اوریتالی
۲۲۴	۶-۹ دستورهای گرینش و قطبها
۲۲۳	۷-۹ گروههای دوگانه
۲۲۸	تمرينها

۱۰- ارتعاشات مولکولی

۲۴۱	۱-۱۰ ملاحظات مقدماتی
۲۴۱	۲-۱۰ تقارن ارتعاشات نرمال
۲۴۲	۳-۱۰ تعیین انواع تقارن شیوه‌های نرمال
۲۴۷	۴-۱۰ شرکت (سهم) مختصات داخلی ویژه در شیوه‌های نرمال
۲۵۵	۵-۱۰ نحوه محاسبه ثابت‌های نیرو: روش ماتریس F و G
۲۵۷	۶-۱۰ دستورهای گرینشی برای انتقالات ارتعاشی اصلی
۲۶۵	۷-۱۰ مثالهای نمایشی
۲۶۹	۸-۱۰ بعضی اثرات ویژه مهم
۲۷۹	تمرينها
۲۸۹	

قسمت سوم: پیوستها

۳۹۱

پیشگفتار

در هفت سالی که از توشن چاپ اول کاپودهای شیمیابی نظریه‌گردد، می‌گذرد، من هرساله متمناً به تدریس درسی درباره مطالب این کتاب مشغول بوده‌ام. تغیرات تدریجی تکاملی در درس سرانجام به‌وضعیتی منجر گشت که دیگر کتاب و درس آنطوری که می‌بایست در ارتباط نزدیک با یکدیگر نبودند. از این‌رو من کتاب را بازخوانی کرده سطح آن را منطبق با درس بالا آوردم.

کتاب جدید شخصیت و عطر کتاب قدیم را ازدست نداده است - حداقل من این‌طور امیدوارم. هدف کتاب آموختن نحوه استفاده از استدلالهای نقارن به‌شیمیدان تجربی است به‌نحوی که او آن را پرمعنی و مفید دریابد. ضمناً کوشش کرده‌ام از آوردن مطالب سطحی نالازم و اضافی اجتناب کنم (نتیجه اسفاراً یک تمایل اشتباه مشهود در بسیاری از کتابها و مقاله‌ها درباره نظریه برای شیمیدان با هدف کمک به‌شیمیدان درمانده در مقابل مشکلات ریاضی) که نهایتاً به‌ناتوانی و دلسردی منتهی می‌شود. یک تعلیم خیلی فشرده یا خیلی ساده برای استفاده از استدلالهای نقارن چیزی جز ازدست دادن زمانی که وقف آن گردیده به‌هرآن ت Xiao هد داشت. من فکرمی کنم که موضوع محتاج و مستحق توجه دانشجو بسرای یک درس یک‌ترمی می‌باشد. دانشجویی که به‌مطالب این کتاب مسلط باشد خواهد دانست که‌چه انجام می‌دهد، چرا آن را انجام می‌دهد و چگونه آن را انجام دهد. محدوده مطالب طوری است که به‌نظر من بخش بزرگی از شیمیدانهای آنی، معدنی و شیمی فیزیک ضمن فعالیت پژوهشی روزمره خود با آن روبه‌رو هستند.

این کتاب از سلف خود از سه جهت متمایز است. اول، افزایش محسوس مواد تعریفی و نمایشی از آنچه‌ای که تقاضا برای یک کتاب متن آموزشی در این زمینه خیلی فراز از آن رفت که من بدولاً فکرمی کردم کوشش تمودم چاپ جدید را با وسائل تعلیم و تربیتی مناسب مجهز کنم تا این احتیاج مرتفع گردد.

دوم، نحوه بررسی بعضی از موضوعات در نتیجه تجربیات کلاس درس تفسیرداده شده است - من امیدوارم که بهتر شده باشد. این بهتر شدن عرضه نه شامل بسط دادن محتوا

و نهدیقتر کردن آن می‌شود بلکه صرفاً در زمینه ارائه راههای بهتر برای مسائل پایه انجام گرفته. چنین بهتر شدنها نیز را می‌توان به ویژه در بخش‌های ۲ و ۳ جانی که فکر نظریه گروه مجرد و مقادیرترين گروهها بحث می‌شوند، یافت.

بالاخره، مطالب جدید و روشهای دقیقتر در چندین محل معرفی شده‌اند. عمدۀ موارد اینها هستند (۱) عرضه صریع اپراتور تصویر و (۲) تشریع بررسی F و G ماتریسی ارتعاشهای مولکولی. هرچند که اپراتورهای تصویر ممکن است ابتدا کمی غیرمجاز به نظر برمند، ولی قدرت و سهولت و اهمیت تقریباً عام ترکیبات خطی تقارن ساز گار(SALC)های توابع پایه‌ای که آنها تولید می‌کنند، توجیه کننده کوششی است که معرف یادگیری آنها می‌شود.

دانشجو بدین شکل خود را برای همیشه از شرجباری وی اطمینانی تغیریهای «ذهنی» وباری به رجهت رها می‌سازد. از این‌رو بخش جدیدی که شامل معرفی و بسط اپراتورهای تصویر است افزوده گردیده که الزاماً به تغییرات زیادی در قسمتهای بعد انجامیده است.

به علت علاقه روزافرون شیمیدانها بکارگیری کمی - با افلا "نیمه کمی" - طیفهای ارتعاش برای بدست آوردن اطلاعات در مورد قدرت پیوند، بسط بررسی ارتعاشهای مولکولی با توصیفی از روش مؤثر ماتریس F و G برای تحلیلهای ارتعاشی مجاز به نظر می‌رسید. این واقعیت که روش کارآئی اپراتور تصویر برای برپائی مختصات تقارن نیز معرفی گردیده است، افزودن این مطالب را بیشتر عملی و دلخواه می‌سازد.

از دیدگاه تأثیرزیادی که قواعد تقارنی در ارتباط باشیمی فضایی و اکتشاهی هماهنگ بازهشی و حلقه‌ای داشته‌اند در سالهای جدید معرفی مفصلی در باره این موضوع اضافه گردیده است.

در خاتمه وظیفه خوشايند من است که از نسل جدید دانشجویان برای همکاری فرایندشان تشکر نمایم. بسیاری از این دانشجویان کسانی بودند که سوالات و انتقاداتشان مرآده فکر کوشش درجهت یافتن راههای بهتر برای عرضه موضوع انداخت. من به خصوص از پروفسور دیویدال ویور، خانم دکترماری د. لاپراد، باری جی. دبور و جیمز اسمیت و همچنین آقایان، جی. بولیت، جی. آر. پیمال، ام. لوکهارت و جی. نورمن، جی. آر. به خاطر همکاری صمیمانه‌شان در تصحیح پیش‌نویس مشکرم. بالاخره، دو شیوه مولیلین میلان به علت سرعت و دقت زیادش در تابع کمک زیادی به سبک کردن بارتهیه جزو و جدید کرد.

ف. آلبرت کان
کمبریج، ماساچوست
۱۹۷۰

پیشگفتار چاپ اول

این کتاب یک درس یک ترمی است که سالهای چندی در انسیتوی فسون ماساچوست (MIT) به دانشجویان سالهای آخر لیسانس و فوق لیسانس آموخته می‌شد. تشریح مطالب خاص‌مانه است از این نظر که من از اینکه از نظر ریاضی پیشرفته یا گاهی دقیق و برگو نباشم در نگ نکرده‌ام به خصوص در چائی که احساس کردم این کار واقعاً کمک می‌کند تا موضوع برای دانشجوی متوسط پرمعنی‌تر و قابل فهمتر شود. مظور من، از دانشجوی متوسط دانشجویی است که علاقه‌ای به نظریه‌دان بودن ندارد بلکه می‌خواهد برای استراتژی مورد استفاده نظریه‌دانها هنگام بررسی مسائل که در آنها خصوصیات تقارن مهم می‌باشند احساس داشته باشد و دارای یک دانش‌کاری از تکنیک‌های جاافتاده و متعارف باشد. من فکر می‌کنم که قدرت زیاد و زیبایی روش‌های تقارنی، بدون ذکر اهمیت والای آن در تمام زمینه‌های شیمی و نتايجی که بدست می‌دهند، شیمیدانها را ملزم می‌سازد تا خود را به‌اصول بنیادی و کاربردهای اصلی روش‌های نظریه‌گروه مجذب سازند.

با وجود این واقعیت که به نظر می‌رسد علاوه روزافزونی در میان شیمیدانها برای بدست آوردن این دانش وجود دارد، هنوز فقط تعداد کمی، غیر از نظریه‌دانهای حرفه‌ای، اینکار را کرده‌اند. تا آنجا که من مطلع هستم در این زمینه تا کنون کتابی در دسترس نمی‌باشد که قلب کسانی را که دارای علاقه فطری به نظریه‌های ظاهر! ناآشنا می‌باشند از وحشت به لرزه نیاندازد. به نظر من رسید که ایده‌هایی از نوع ارائه شده در این کتاب سریعاً توسط بخش گسترده‌ای از شیمیدانها جذب نمی‌گردد مگر اینکه به نحوی حتی الامکان کم ادعا و متواضع از ائد شود. کوشش من بر این بوده است که این کتاب را طوری ارائه دهم که بتوان آن را قبل از خواب بدون استفاده از مداد در تخت مطالعه نمود. آن طوری که همکار من جان- و او زمانی بدخوبی کتاب من دیگری را که بدحاطر ماهیت متواضعه آن نکرده‌ام.

* این گفتار واقعاً (و عمداً) قابل انطباق با قسمتهایی از بخش ۳ نیست. در آنجا من ارافقی به خواننده‌ای که نمی‌خواهد مدل‌های فضایی را در رابطه با مطالعه متن مورد نقیش قرار دهد نکرده‌ام.

طرفداران زیادی پیدا کرده بود، توصیف نمود.
احتمالاً کتاب می‌تواند برای دانشجویانی که قصد دارند کار نظری بگشته نیز به عنوان
مقدمه اولیه مفید باشد از این نقطه نظر که به آنها ابتدا یک تصویر عمومی بدهد قبل از آنکه
قصد عمق کشند.

از کمکهایی که از خوبی از کوارترها درنوشتن این کتاب گرفتهام بسیار منتشکرم. در
طول سالها دانشجویان در درسها توصیه‌ها و انتقادهای با ارزشی کرده‌اند. هنگام بررسی
جزوه نهایی و پیش‌نوبی‌سی باهمکاری بسیار مؤثرد کتر $B-A$ بلیک و آقایان ار. سی. الدر،
تی. ای. هاز، وجی. تی. مگ، [] رو به رو شدم. البته من به تهایی مسئولیت تمام اشتباهات
با قیمانده را به عهده می‌گیرم. درخاتمه می‌خواهم از خانم نانسی بلیک برای کمکهای
سکرنتری من خصصاً اثاثان تشکر نمایم.

ف. آلبرت کان

کامپرچ، ماساچوست

زانویه ۱۹۶۳