

## ارائه یک مدل بر اساس نظریه گروه به منظور برقراری ارتباط بین بردارهای جابه‌جایی ارتعاشی آنها و شکل اوربیتالهای اتم مرکزی در ملکولهای $AB_n(n=2-5)$

رضا طیبی

گروه شیمی، دانشگاه تربیت معلم سبزواری

(دریافت مقاله: ۸۱/۱/۲۸ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۱/۱۱/۲۰)

### چکیده

در این مقاله روشی جدید برای پیش‌بینی نحوه انجام ارتعاشات کششی و خمشی نرمال در ملکولهای  $AB_2$ ،  $AB_3$ ،  $AB_4$  و  $AB_5$  به ترتیب با گروه‌های نقطه‌ای  $C_{2v}$ ،  $D_{2h}$ ،  $D_{3h}$  و  $D_{4h}$  معرفی شده است. این روش براساس برقراری ارتباط بین بردارهای جابه‌جایی ارتعاشی اتمهای متصل به اتم مرکزی و نمایشهای استاندارد اوربیتالهای  $d$  و  $p$ ،  $s$  اتم مرکزی، ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: گروه نقطه‌ای، حرکات ارتعاشی، جدول ماهیت

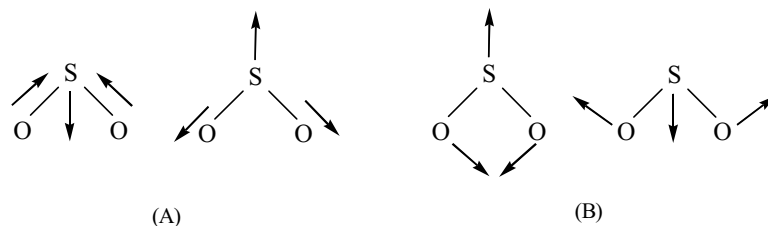
### ۱. مقدمه

اتفاق می‌افتد که الکترونهای پیوندی یا ناپیوندی ملکول در حالت پایه به اوربیتالهای ملکولی خالی با انرژی بالاتر انتقال یابند. در حالی که تغییر حالات ارتعاشی و خمشی ملکولها منوط به تغییر در جهات، فرکانسها و دامنه های حرکات اتمی در ملکول است [۴-۵]. از آنجا که بحث این مقاله پیرامون حرکات ارتعاشی و خمشی ملکولها متمرکز است، توجه شما را به دو نوع ارتعاش خاص در ملکول  $SO_2$  که در شکل ۱ نشان داده شده اند، جلب می‌کنیم.

اتمها در ملکول  $SO_2$  نسبت به مرکز جرم خود در جهتهای مشخص شده با پیکانها ارتعاش می‌کنند. در نوع (A) که اصطلاحاً ارتعاش کششی نامیده می‌شود، طول پیوند اکسیژن- گوگرد تغییر می‌کند. اما در نوع (B) حرکت عمود بر محور پیوند بوده و طول پیوند ثابت است. به این نوع حرکت ارتعاش خمشی می‌گویند.

امروزه با پیشرفت چشمگیر کامپیوتر و نرم‌افزارهای محاسباتی می‌توان در مورد خواص فیزیکی و ساختاری بسیاری از ملکولها اطلاعاتی به‌دست آورد و با استفاده از آنها واکنش‌پذیری و مکانیسم عمل این ملکولها را در واکنشهای شیمیایی مطالعه کرد. ساختمان، طول پیوند و زوایای پیوندی از عوامل مهمی هستند که بر ماهیت عمل یک واکنشگر شیمیایی تاثیر مستقیم دارند. بنابراین تعیین این پارامترها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۱-۳].

به طور کلی صور مختلف تابشهای الکترومغناطیس قادر است از طریق میدان الکتریکی با سیستم ملکولی اثر متقابل داشته باشد و با جذب تابش، منشا انجام انتقالات الکترونی، ارتعاشی، و چرخشی شود. در اسپکتروسکوپی ملکولی، جذب تابش الکترومغناطیس در قالب سه نوع انتقال ملکولی قرار می‌گیرد، که عبارتند از انتقالات الکترونی، ارتعاشی و چرخشی. تغییر حالت الکترونی یک ملکول هنگامی



شکل ۱. ارتعاشات نرمال کششی (A) و خمشی (B) در ملکول  $SO_2$ .

## ۲. نتایج و بحث

نمایشهای کاهش ناپذیر استاندارد اوربیتالهای  $s$ ،  $p$  و  $d$  و همچنین ارتعاشات کششی و خمشی نرمال ملکولها بر اساس روش مولیکن تعیین می شوند [۶-۹]. در این روش علائم  $a$  و  $b$  معرف نمایشهای تک بعدی هستند. در حالی که علائم  $e$  و  $t$  به ترتیب معرف نمایشهای دو بعدی و سه بعدی هستند. همچنین داریم:

۱- نمایشهای وابسته به علامت  $b$  تحت تأثیر عملگر تقارنی  $C_{2v}$ ، محور چرخشی درجه  $m$ ، تغییر علامت می دهند. در حالی که نمایشهای وابسته به علامت تقارنی  $a$  تحت تأثیر این عملگر بدون تغییر می مانند.

۲- برای گروههایی که شامل عنصر تقارنی  $i$  (مرکز وارونگی) هستند، اندیس  $g$  (گراد) و  $u$  (انگرا) نشان می دهد که نمایش مورد نظر تحت تأثیر این عملگر به ترتیب تغییر علامت نمی دهد یا می دهد.

۳- برای نمایشهای  $a$  و  $b$  اندیسهای ۱ و ۲ به ترتیب نشان می دهند، نمایش مورد نظر تحت تأثیر محور چرخش درجه دوم،  $C_2$ ، عمود بر محور اصلی (یا در مواردی که محور  $C_2$  عمود بر محور اصلی وجود ندارد، تحت تأثیر عملگر صفحه انعکاس عمودی  $\sigma_v$ ) تغییر علامت نمی دهد یا می دهد. اندیسهای بالای  $(//)$  و  $(\perp)$  به ترتیب نشان می دهند که نمایش مورد نظر تحت تأثیر عملگر  $\sigma_h$ ، صفحه انعکاس افقی، تغییر علامت نمی دهد یا می دهد.

برای آشنایی با کاربرد روش مولیکن، جدول ۱ نمایشهای کاهش ناپذیر وابسته به هر یک از اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p$  لایه والانس اتم  $S$  را در ملکول  $SO_2$ ، با گروه نقطه‌ای  $C_{2v}$  نشان می دهد.

اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p_z$  تحت تأثیر هیچ یک از اپراتورهای تقارنی تغییر علامت نداده اند و بنابراین متعلق به نمایش کاهش ناپذیر  $a_1$  هستند. اوربیتال  $p_x$  به ترتیب تحت تأثیر عملگرهای تقارنی  $\sigma_v$  و  $C_{2v}$  تغییر علامت داده است و به همین دلیل متعلق به نمایش کاهش ناپذیر  $b_1$  است.

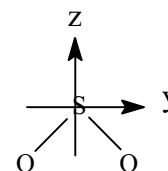
اکنون پس از آشنایی با نحوه یافتن نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای اتمی در یک ملکول با تقارن مشخص، می خواهیم نمایشهای کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی و خمشی یک ملکول را به دست آوریم.

بر اساس آنچه در مقدمه عنوان شد، شیوه های نرمال ارتعاشی بر اساس تقارن ملکول، به شیوه های ارتعاشی کششی و خمشی تقسیم می شوند. این ارتعاشات را اصطلاحاً ارتعاشات نرمال یا مدهای نرمال ارتعاشی می نامند که در آنها مرکز جرم ثابت بوده و تمام اتمها به طور هم فاز و با فرکانس یکسان ارتعاش می کنند. برای ملکولهای غیر خطی تعداد  $3N-6$  شیوه نرمال ارتعاشی وجود دارد. در این رابطه  $N$  معرف تعداد اتمها در ملکول است. در یک حالت ساده مانند ملکول  $SO_2$ ، بر اساس این فرمول سه شیوه ارتعاشی پیش بینی می شود. بر اساس محاسبات جدول ۲ می توان نمایش کاهش ناپذیر دو ارتعاش کششی  $(a_1 + b_2)$  و ارتعاش خمشی  $(a_1)$  را به دست آورد [۱۰-۱۱].

به منظور محاسبه  $\Gamma_{translation}$  برای هر عملگر کافی است مجموع کاراکترهای بردارهای  $x$ ،  $y$ ،  $z$  را در جدول ماهیت  $C_{2v}$  به دست آوریم. دیگر موارد مندرج در جدول ۲ به سادگی با

جدول ۱. نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p$  لایه والانس اتم  $S$  در ملکول  $SO_2$  با تقارن  $C_{2v}$

$C_{2v}$	E	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	نمایش کاهش ناپذیر
$s, p_z$	۱	۱	۱	۱	$a_1$
$p_x$	۱	-۱	۱	-۱	$b_1$
$p_y$	۱	-۱	-۱	۱	$b_2$



جدول ۲. کاراکترهای نمایشهای وابسته به نمایشهای کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی و خمشی در ملکول  $SO_2$  با تقارن  $C_{2v}$

نمایش کاهش ناپذیر	E	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
(I) $\Gamma^*_{translation}$	۱+۱+۱	۱-۱-۱	۱+۱-۱	۱-۱+۱
(II) تعداد اتمهای	۳	۱	۱	۳
جابه‌جا نشده پس از اعمال عملگر				
(III) $\Gamma_{total} = (I) \times (II)$	۹	-۱	۱	۳
(IV) (III) - (I)	۶	۰	۰	۲
(V) $\Gamma^*_{rotation}$	۳	-۱	-۱	-۱
(VI) $\Gamma_{vibration} = (IV) - (V)$	۳	۱	۱	۳
(VII) $\Gamma_{stretching} = (II) - ۱$	۲	۰	۰	$2 = a_1 + b_2$
(VIII) $\Gamma_{bending} = (VI) - (VII)$	۱	۱	۱	$1 = a_1$

$\Gamma_{rotation}$  و  $\Gamma_{vibration}$  به ترتیب با جمع کردن کاراکترهای بردارهای  $x, y, z$  و  $R_x, R_y, R_z$  در جدول کاراکتر حاصل شده‌اند. این اطلاعات به طور پراکنده از مراجع [۱۲-۱۴] جمع آوری شده‌اند.

در اینجا  $N_i$  تعداد یک نمایه کاهش ناپذیر،  $R$  یک اپراتور تقارنی خاص،  $h$  درجه گروه (مجموع تعداد عملگرها تقارنی یک گروه نقطه‌ای)،  $g$  تعداد عناصر یک کلاس،  $X_i(R)$  کاراکتر نمایه کاهش ناپذیر و  $X_T(R)$  کاراکتر همان عملگر خاص ( $R$ ) در نمایه کاهش پذیر است. برای توصیف این فرمول،  $\Gamma_{stretching}$  را در گروه نقطه‌ای  $C_{2v}$  به صورت زیر کاهش می‌دهیم.

$$N_{a_1} = \frac{1}{4} [g \times X_{a_1}(E) \times X_T(E) + g \times X_{a_1}(C_2) \times X_T(C_2) + g \times X_{a_1}(\sigma_{xz}) \times X_T(\sigma_{xz}) + g \times X_{a_1}(\sigma_{yz}) \times X_T(\sigma_{yz})] = \frac{1}{4} (1 \times 1 \times 2 + 1 \times 1 \times 0 + 1 \times 1 \times 0 + 1 \times 1 \times 2) = 1$$

دانستن  $\Gamma_{translation}$  و تعیین تعداد اتمهای جابه‌جا نشده پس از اعمال هر عملگر به دست می‌آید. بر این اساس نمایه کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی و خمشی به شرح زیر از جدول ۲ استخراج می‌شوند.

	E	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$\Gamma_{stretching}$	۲	۰	۰	۲
$\Gamma_{bending}$	۱	۱	۱	۱

$\Gamma_{bending}$  خود نمایه کاهش ناپذیر بوده و در واقع متعلق به نمایه کاهش ناپذیر  $a_1$  است. اما  $\Gamma_{stretching}$  نمایه کاهش پذیر بوده و بر اساس فرمول زیر کاهش می‌شود.

$$N_i = \frac{1}{h} \sum g X_i(R) X_T(R)$$

به همین صورت به دست می آید:

$$N_{b_1} = 0 \quad N_{b_2} = 1 \quad N_{a_1} = 0$$

بنابر این نمایه های کاهش ناپذیر حاصل از  $\Gamma_{stretching}$  عبارتند از  $a_1$  و  $b_2$ .

در روش ارائه شده در این مقاله فرض می شود که ارتعاشات کششی و خمشی نرمال ملکولهای ساده به خوبی با نحوه پخش چگالی احتمال اوربیتالهای هیبریدی اتم مرکزی تطابق دارد. به این معنی که با در نظر گرفتن چگالی احتمال پخش زاویه ای توابع موج اوربیتالهای اتمی در صفحه  $xz$ ،  $yz$ ، و  $xy$ ، می توان تنها با یک فرض ساده حرکات پیچیده ارتعاشی و خمشی ملکولها را تخمین زد [۱۲-۱۴].

شکل ۲ ارتعاشات کششی، را توصیف می کند. این شکل نزدیک شدن اتمهای  $B$  به اتم مرکزی را با لب مثبت (تیره) بخش زاویه ای تابع موج اوربیتالها و دور شدن آنها را از اتم مرکزی با لب منفی (روشن) بخش زاویه ای تابع موج اوربیتالها مطابقت می دهد (الگو سازی ارتعاشات کششی). به همین صورت در شکل ۳ برای توصیف ارتعاشات خمشی نیز فرض می کنیم نزدیک شدن اتمهای  $B$  در داخل یا خارج از صفحه ملکول به یکدیگر معادل لب مثبت (تیره) قسمت زاویه ای تابع موج اوربیتالی و دور شدن آنها از یکدیگر، معادل لب منفی (روشن) تابع موج است (الگو سازی ارتعاشات خمشی).

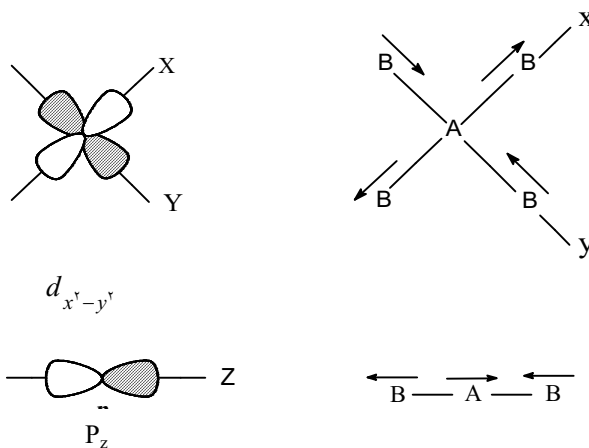
اکنون با دانستن این فرضیات سعی می کنیم با استفاده از شکل اوربیتالهای  $s$  و  $p$  اتم گوگرد در ملکول  $SO_2$ ، چگونگی انجام شیوه های ارتعاشی آن را به دست آوریم. همان گونه که از جدول ۲ محاسبه شد، ارتعاشات کششی این ملکول متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر  $a_1$  و  $b_2$  بوده و ارتعاش خمشی آن نمایه کاهش ناپذیر  $a_1$  دارد. نگاهی به جدول ۱ نشان می دهد اوربیتالهای اتمی  $s$ ،  $p_x$  و  $p_y$  اتم گوگرد نیز در گروه نقطه ای  $C_{2v}$  به ترتیب دارای نمایشهای کاهش ناپذیر  $a_1$ ،  $b_2$  و  $a_1$  هستند. اکنون با در نظر گرفتن جدول ۱ و آنچه گفته شد، اوربیتالهای  $s$ ،  $p_x$  و  $p_y$  اتم گوگرد را در سیستم مختصات معرفی شده در جدول ۱ ترسیم کرده و بر اساس آن نحوه انجام ارتعاشات را تخمین می زنیم (شکل ۴).

اکنون برای آنکه دامنه کاربرد و قابلیت این روش بهتر مشخص شود، قصد داریم شیوه های ارتعاشی یون  $CO_3^{2-}$  با تقارن  $D_{3h}$  را به دست آوریم. براساس روش توصیف شده در مورد ملکول  $SO_2$ ، محاسبات جدول ۳ نشان می دهد ارتعاشات کششی و خمشی پیوندهای  $C-O$  به ترتیب دارای نمایشهای  $e'_2$ ،  $a'_1$  و  $e'_1$  هستند. همچنین براساس جدول ۴ که از جدول ماهیت گروه نقطه ای  $D_{3h}$  راجع به نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p$  استخراج شده اند، مشخص است که اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p_x$  یا  $p_y$  در اتم کربن به ترتیب دارای تقارن  $e'_2$ ،  $a'_1$  هستند. در حالی که اوربیتال اتمی  $p_z$  دارای تقارن  $a_1$  است.

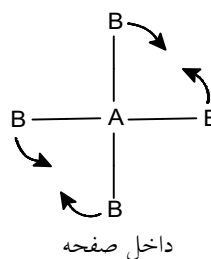
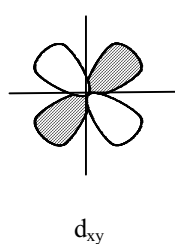
اکنون اوربیتالهای  $s$  و  $p$  لایه والانس اتم کربن را در سیستم مختصات تعریف شده رسم نموده و سپس شیوه های ارتعاشی کششی و خمشی را روی این اوربیتالها پیاده می کنیم. شکل ۵ تصویر ساده ارتعاشات کششی (۵-الف) و خمشی (۵-ب) نرمال در یون  $CO_3^{2-}$  براساس تقارن اوربیتالهای اتمی  $s$  و  $p$  را نشان می دهد.

به عنوان مثال سوم، می خواهیم شیوه انجام ارتعاشات نرمال کششی و خمشی را در ملکول  $XeF_4$  به دست آوریم. مطابق آنچه در مثالهای قبل گفته شد، ابتدا نمایشهای کاهش پذیر ارتعاشی را بر اساس محاسبات جدول ۵ به دست می آوریم. پس از کاهش نمایشهای کاهش پذیر حاصل، نمایشهای کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی  $(e_u, b_{1g}, a_{1g})$  و خمشی  $(e_u, b_{1g}, b_{2u}, a_{2u})$  حاصل می شوند.

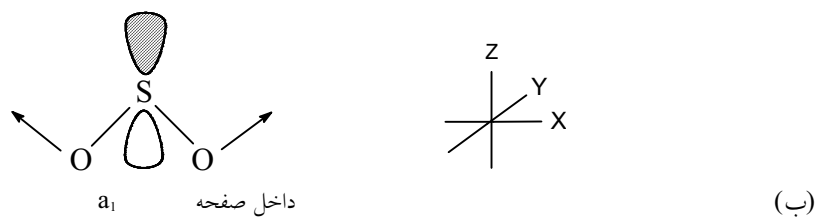
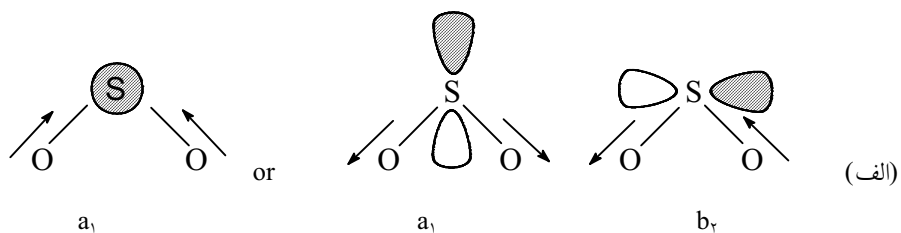
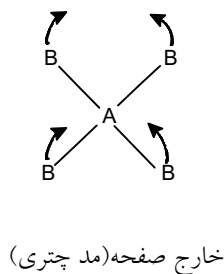
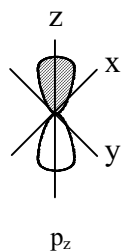
اکنون نمایشهای کاهش ناپذیر کلیه اوربیتالهای اتمی  $s$ ،  $p$  و  $d$  اتم  $Xe$  را از جدول ماهیت گروه نقطه ای  $D_{4h}$  استخراج کرده و جدول ۶ را تشکیل می دهیم. حال با در نظر گرفتن نمایشهای کاهش ناپذیر حرکات ارتعاشی و خمشی، اوربیتالهایی را که دارای نمایش کاهش ناپذیر مشابه با این ارتعاشات هستند، ترسیم می کنیم. اکنون می توان گفت اوربیتالهای اتمی  $d_{x^2-y^2}$ ،  $s$  و  $p_y$  یا  $p_x$  می توانند پایه ای برای نمایش ارتعاشات کششی (شکل ۶ الف) و اوربیتالهای  $p_z$  و  $d_{xy}$  برای نمایش ارتعاشات خمشی (شکل ۳ ب) در ملکول  $XeF_4$  به کار روند. از آنجا که هیچ یک از اوربیتالهای اتمی



شکل ۲. الگوسازی ارتعاشات کششی.



شکل ۳. الگوسازی ارتعاشات خمشی.

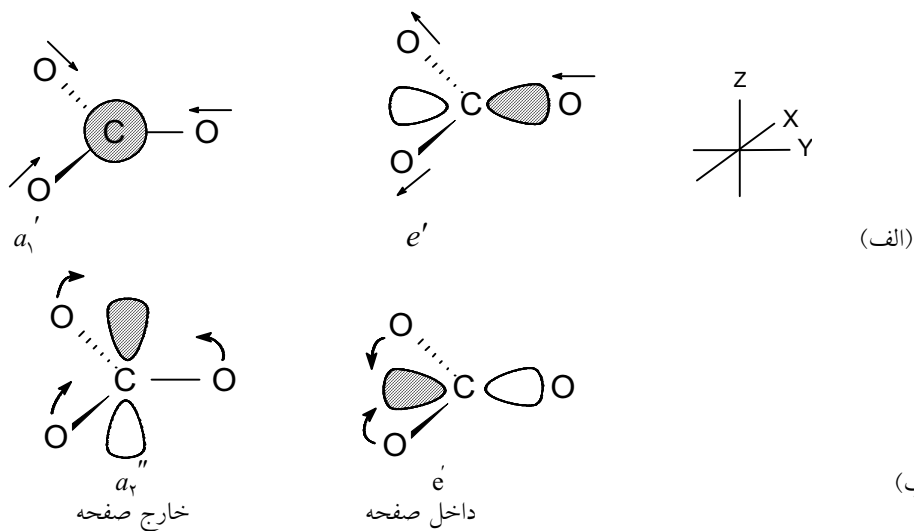


شکل ۴. ارتعاشات نرمال کششی (الف) و خمشی (ب) در ملکول  $SO_2$ .

جدول ۳. کاراکترهای وابسته به نمایشهای کاهش ناپذیر کششی و خمشی در یون  $CO_3^{-2}$

$D_{\tau h}^*$	E	$C_{\tau}$	$C_{\tau}$	$\sigma_h$	$S_{\tau}$	$\sigma_v$
(I)	۳	۰	-۱	۱	-۲	۱
(II)	۴	۱	۲	۴	۱	۲
(III)	۱۲	۰	-۲	۴	-۲	۲
(IV)	۹	۰	-۱	۳	۰	۱
(V)	۳	۰	-۱	-۱	۲	-۱
(VI)	۶	۰	۰	۴	-۲	۲
(VII)	۳	۰	۱	۳	۰	$1 = a_1' + e'$
(VIII)	۳	۰	-۱	۱	-۲	$1 = a_2'' + e'$

\* موارد (I) تا (VIII) در جدول شماره ۲ توضیح داده شده اند.



شکل ۵. ارتعاشات کششی (الف) و خمشی (ب) نرمال در یون  $CO_3^{-2}$ .

جدول ۴. نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای اتمی s و p لایه والانس در گروه نقطه‌ای  $D_{\tau h}$

$D_{\tau h}$	E	$2C_{\tau}$	$3C_{\tau}$	$\sigma_h$	$2S_{\tau}$	$3\sigma_d$	نمایش کاهش ناپذیر
s	۱	۱	۱	۱	۱	۱	$a_1'$
$p_x, p_y$	۲	-۱	۰	۲	-۱	۰	$e'$
$p_z$	۱	۱	-۱	-۱	-۱	۱	$a_2''$

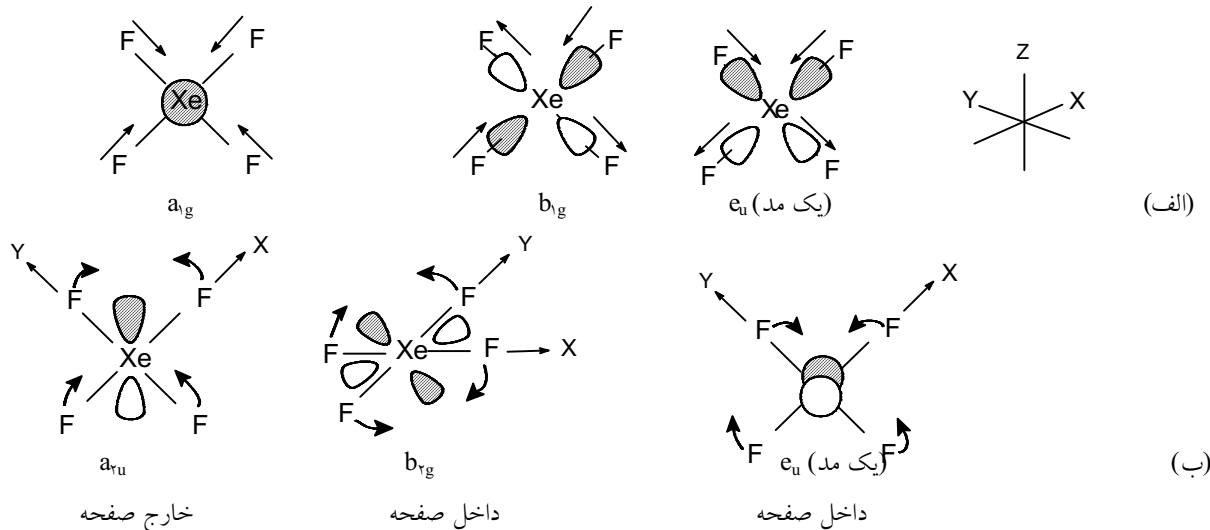
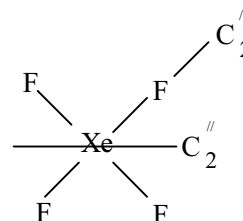
جدول ۵. کاراکترهای وابسته به نمایشهای کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی و خمشی در ملکول  $XeF_4$ .

$D_{4h}^*$	E	$C_4$	$C_2$	$C_2'$	$C_2''$	i	$S_4$	$\sigma_h$	$\sigma_v$	$\sigma_d$
(I)	۳	۱	-۱	-۱	-۱	-۳	-۱	۱	۱	۱
(II)	۵	۱	۱	۳	۱	۱	۱	۵	۳	۱
(III)	۱۵	۱	-۱	-۳	-۱	-۳	-۱	۵	۳	۱
(IV)	۱۲	۰	۰	-۲	۰	۰	۰	۴	۲	۰
(V)	۳	۱	-۱	-۱	۱	۳	۱	-۱	-۱	-۱
(VI)	۹	-۱	۱	-۱	۱	-۳	-۱	۵	۳	۱
(VII)	۴	۰	۰	۲	۰	۰	۰	۴	۲	$0 = a_{1g} + b_{1g} + e_u$
(VIII)	۵	-۱	۱	-۳	۱	-۳	-۱	۱	۱	$1 = a_{ru} + b_{ru} + b_{rg} + e_u$

\* موارد (I) تا (VIII) در جدول شماره ۲ توضیح داده شده اند.

جدول ۶. نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای لایه والانس s و p در گروه نقطه‌ای  $D_{4h}$ .

$D_{4h}$	E	$\gamma C_4$	$C_2$	$\gamma C_2'$	$\gamma C_2''$	i	$\gamma S_4$	$\sigma_h$	$\gamma \sigma_v$	$\gamma \sigma_d$	نمایش کاهش ناپذیر
s	۱	۱	۱	۱	۱	۱	۱	۱	۱	۱	$a_{1g}$
$p_x, p_y$	۲	۰	-۲	۰	۰	-۲	۰	۲	۰	۰	$e_u$
$p_z$	۱	۱	۱	-۱	-۱	-۱	-۱	-۱	۱	۱	$a_{ru}$
$d_{x^2-y^2}$	۱	-۱	۱	۱	-۱	۱	-۱	۱	۱	-۱	$b_{1g}$
$d_{xy}$	۱	-۱	۱	-۱	۱	۱	-۱	۱	-۱	۱	$b_{rg}$



شکل ۶. ارتعاشات کششی (الف) و خمشی (ب) نرمال در ملکول  $XeF_4$ .

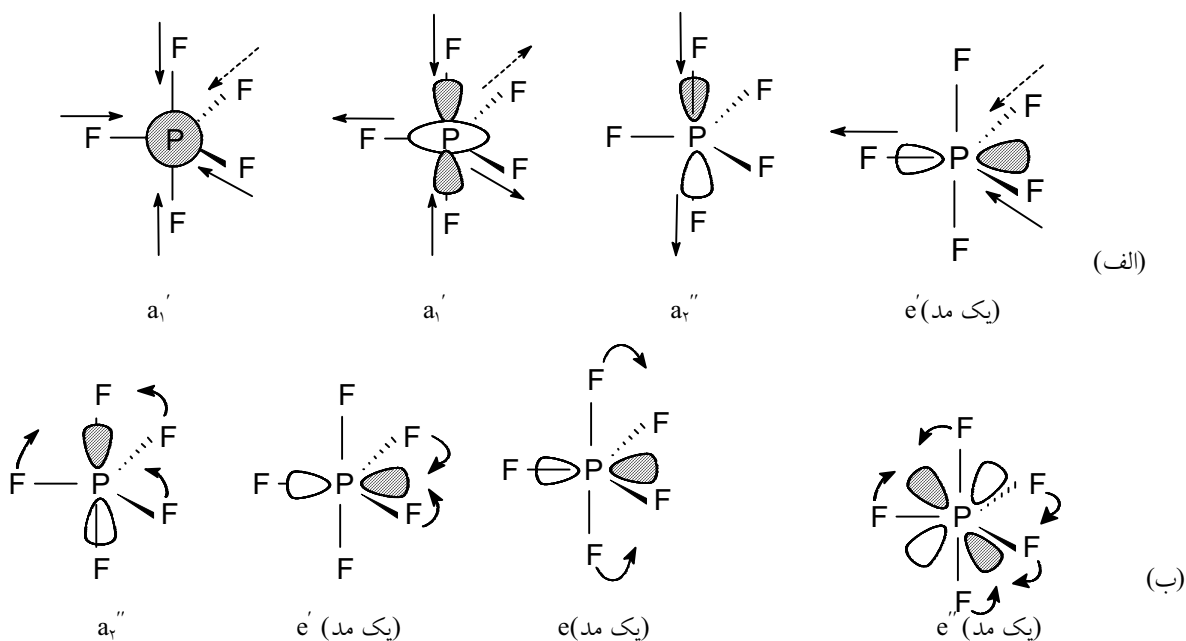
جدول ۷. کاراکترهای وابسته به نمایشهای کاهش ناپذیر ارتعاشات کششی و خمشی در ملکول  $PF_5$ .

$D_{3h}^*$	E	$C_2$	$C_2$	$\sigma_h$	$S_6$	$\sigma_v$
(I)	۳	۰	-۱	۱	-۲	۱
(II)	۶	۳	۲	۴	۱	۴
(III)	۱۸	۰	-۲	۴	-۲	۴
(IV)	۱۵	۰	-۱	۳	۰	۳
(V)	۳	۰	-۱	-۱	۲	-۱
(VI)	۱۲	۰	۰	۴	-۲	۴
(VII)	۵	۲	۱	۳	۰	$3 = 2a_1' + a_2'' + e'$
(VIII)	۷	-۲	-۱	۱	-۲	$1 = a_2'' + 2e' + e''$

\* موارد (I) تا (VIII) در جدول شماره ۲ توضیح داده شده اند.

جدول ۸. نمایشهای کاهش ناپذیر اوربیتالهای s و p لایه والانس در گروه نقطه‌ای  $D_{3h}$ .

$D_{3h}$	E	$2C_2$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_6$	$3\sigma_d$	نمایش کاهش ناپذیر
s, $d_{z^2}$	۱	۱	۱	۱	۱	۱	$a_1'$
$p_x, p_y$	۲	-۱	۰	۲	-۱	۰	$e'$
$p_z$	۱	۱	-۱	-۱	-۱	۱	$a_2''$
$d_{xz}, d_{yz}$	۲	-۱	۰	-۲	۱	۰	$e''$



شکل ۷. ارتعاشات کششی (الف) و خمشی (ب) در ملکول  $PF_5$ .



با گروه نقطه‌ای  $D_{2h}$  با استفاده از روش ارائه شده در این مقاله و براساس نتایج جداول ۷ و ۸ نشان می‌دهد.

$p$  و  $s$  و  $d$  اتم مرکزی دارای نمایش کاهش ناپذیر  $b_{1u}$  نمی‌باشند، تعیین نحوه انجام این شیوه ارتعاش خمشی با استفاده از این روش مقدور نیست. به عنوان آخرین مثال، شکل ۷ برخی از مهمترین ارتعاشات نرمال کششی (۷-الف) و خمشی (۷-ب) را در ملکول  $PF_5$

### مراجع

1. E Karel, Collect. Czech. Chem. Commun., **56** (1991) 505.
2. T R Cundari and M Russo, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **41** (2001) 281.
3. H Michio and H Chisto, *Org. Mass. Spectrom.*, **25** (1990) 329.
4. R S Drago, "Physical Methods for Chemists", Saunders College Publishing Mexico (1992).
5. E B Wilson, J C Decius and P C Cross, "Molecular Vibration," Mc Graw-Hill, New York (1955).
6. G Barrow, "Introduction to Molecular Spectroscopy", Mc Graw-Hill New York (1962).
7. B E Douglas and C A Hollingsworth, "Symmetry in Bonding and Spectra, an Introduction", Academic Press. London (1985).
8. E N Ebsworth and D W H S Rankin, "Structural Methods in Inorganic Chemistry", Blackwell Scientific Publications, London (1991).
9. G Hersberg, "Molecular Spectra and Molecular Structure, Infrared and Raman Spectra" Van Nostrand, New York (1945).
10. L A Woodward, "Introduction to the Theory of Molecular Vibrations and Vibrational Spectroscopy", Oxford University Press, New York (1972).
11. F A Cotton, "Chemical Applications of Group Theory", 3<sup>rd</sup> ed., Wiley-Interscience, New York (1990).
12. B N Figgis, "Ligand Field Theory", (1964) Chapt. 1.
13. Eyring Walter and Kimbal, "Quantum Chemistry", John Wiley (1944).
14. George Mc Clure, *Prog. Inorg. Chem.*, **1**, **381** (1959).