

BUKU TEKS ONLINE

Kimia Kuantum

© Iwanami Publishing Company

BUKU TEKS KIMIA KUANTUM ONLINE

Koichi Ohno,
diterjemahkan dari versi Bahasa Inggrisnya
oleh Bambang Prijamboedi

Quantum Chemistry by Koichi Ohno

© 2004 by Koichi Ohno

Reproduced by permission of Iwanami Shoten, Publishers, Tokyo

Sesuai dengan kesepakatan dengan Iwanami Shoten, buku online ini, hanya diperbolehkan digunakan dalam bentuk file elektronik, digunakan hanya untuk tujuan pendidikan, untuk guru, siswa, dosen, dan mahasiswa sarjana dan pascasarjana. Tidak boleh didistribusikan dalam bentuk tercetak.

Daftar isi

1	<i>Teori Kuantum dan Persamaan Gelombang</i>	7
1.1	Apa yang dimaksud dengan kimia kuantum?	7
1.2	Partikel bermuatan pembentuk materi dan gaya Coulomb	11
1.3	Gelombang dan osilasi	14
1.4	Teori kuantum untuk energi	18
1.5	Spektrum atom dan tingkat-tingkat energi	25
1.6	Partikel dan sifat gelombang.....	32
1.7	Persamaan gelombang	35
1.8	Fungsi gelombang dan probabilitas menemukan partikel.....	38
1.9	Keadaan stasioner dan persamaan nilai eigen	40
1.10	Sebuah partikel dalam kotak satu dimensi.....	43
1.11	Perluasan persamaan gelombang	50
1.12	Gerak pada sistem dengan dua partikel	54
1.13	Momentum sudut	64
1.14	Nilai terukur dan nilai ekpektasi.....	68
1.15	Hubungan komutasi dan prinsip ketidakpastian.....	70
2	<i>Atom</i>	75
2.1	Atom hidrogenik	75
2.2	Bentuk-bentuk orbital atomik	83
2.2.1	Klasifikasi orbital atomik.....	83
2.2.2	Fungsi-fungsi sudut untuk s, p, d	84
2.2.3	Kebergantungan sudut dan bentuk dari koordinat-koordinat polar	87
2.2.4	Kebergantungan radial dan distribusi radial.....	89
2.2.5	Garis-garis kontur	93
2.3	Atom dengan elektron banyak	94
2.3.1	Model elektron independen.....	94
2.3.2	Efek perisai dan model muatan inti efektif.....	96
2.3.3	Orbital atomik dan tingkat energi untuk atom berelektron banyak	98
2.4	Spin elektron	99
2.4.1	Lan dasan eksperimental untuk spin elektron.	99
2.4.2	Operator, fungsi eigen, dan bilangan kuantum untuk spin elektron.....	101
2.4.3	Batasan pada fungsi gelombang elektron banyak dan prinsip Pauli.....	103

2.5	Konfigurasi elektron dalam atom.....	108
2.6	Periodisitas.....	113
2.6.1	Energi ionisasi dan afinitas elektron	114
2.6.2	Muatan inti efektif dan aturan untuk menghitung konstanta perisai.....	116
2.6.3	Muatan efektif inti dan energi ionisasi.....	118
2.6.4	Muatan inti efektif dan afinitas elektron.....	120
2.7	Atom tereksitasi dan term simbol.....	121
2.7.1	Keadaan dasar sebuah atom helium.....	122
2.7.2	Keadaan tereksitasi dari sebuah atom helium.....	122
2.7.3	Momentum sudut dan simbol spektral untuk sistem elektron banyak	124
3	<i>Metoda dasar aproksimasi</i>	<i>131</i>
3.1	Teori gangguan.....	131
3.1.1	Teori gangguan.....	131
3.1.2	Teori gangguan untuk keadaan terdegenerasi.....	135
3.1.3	Perubahan keadaan oleh gangguan	136
3.2	Metoda variasi	140
3.2.1	Prinsip variasi	140
3.2.2	Metoda variasi dengan menggunakan sebuah pendekatan kombinasi linier (Metoda variasi Ritz).....	141
3.3	Metoda SCF	146
4	<i>Metoda untuk sistem atom banyak dan penerapannya</i>	<i>150</i>
4.1	Gerakan elektron dan inti atom.....	150
4.1.1	Operator Hamiltonian untuk inti atom dan elektron	150
4.1.2	Pemisahan gerakan inti dan elektron	152
4.1.3	Potensial adiabatik untuk molekul diatomik.....	155
4.2	Gaya ikat dan kerapatan elektron.....	159
4.2.1	Gaya-gaya yang bekerja pada inti dan teorema elektrostatik Feynman.....	159
4.2.2	Daerah ikatan dan daerah anti ikatan.....	161
4.2.3	Teorema virial.....	163
4.3	Metoda orbital molekul	164
4.3.1	Metoda SCF dengan menggunakan kombinasi linier	164
4.3.2	Fungsi-fungsi basis	166
4.3.3	Metoda non empiris dan metoda semi empiris	168
4.3.4	Konfigurasi elektron dan HOMO/LUMO	169
4.3.5	Energi orbital dan energi ionisasi	170
4.3.6	Metoda dengan memasukkan korelasi elektron	171
4.4	Perhitungan-perhitungan kimia kuantum.....	172
4.4.1	Struktur molekul	172
4.4.2	Vibrasi molekul	173
4.4.3	Panas reaksi.....	174
4.4.4	Distribusi elektron dan momen dipol listrik.....	174
4.4.5	Energi ionisasi	178

5	<i>Orbital Molekul dan Struktur Molekul</i>	181
5.1	Ion molekul hidrogen dan molekul hidrogen	181
5.1.1	Ion molekul hidrogen.....	181
5.1.2	Molekul hidrogen.....	187
5.2	Metoda orbital molekul Huckel	189
5.2.1	Dasar-dasar metoda Huckel.....	189
5.2.2	Metoda Huckel sederhana	191
5.2.3	Metoda Huckel yang diperluas.....	192
5.3	Tumpang tindih orbital dan interaksi orbital	194
5.3.1	Tumpang tindih orbital.....	194
5.3.2	Prinsip interaksi orbital	196
5.4	Molekul jenis AH dan AH₂	207
5.4.1	Prosedur menggunakan prinsip interaksi orbital.....	207
5.4.2	Molekul jenis AH.....	208
5.4.3	Molekul jenis AH ₂	213
5.4.4	Diagram Walsh dan sudut ikatan.....	217
5.5	Molekul jenis A₂	219
5.6	Hibridisasi orbital	225
5.6.1	Campuran orbital dalam atom yang sama	226
5.6.2	Hibridisasi sp	228
5.6.3	Hibridisasi sp ²	228
5.6.4	Hibridisasi sp ³	230
5.6.5	Hibridisasi lain.....	230
5.7	Ikatan tiga-pusat dua-elektron dan ikatan hidrogen	232
5.7.1	Interaksi orbital tiga elektron	232
5.7.2	Ikatan tiga-pusat dua elektron linear	234
5.7.3	Ikatan tiga-pusat dua-elektron bengkok	238
5.7.4	Ikatan hidrogen	239
5.8	Tingkat energi elektron dan spektra fotoelektron	240
5.8.1	Spektra fotoelektron dan tingkat energi elektron orbital molekul.....	241
5.8.2	Spektrum fotoelektron molekul hidrogen dan energi ikatan.....	243
6	<i>Orbital molekul dan reaksi kimia</i>	253
6.1	Teori orbital tentang kereaktifan	253
6.1.1	Bilangan okupasi elektron dan kereaktifan	253
6.1.2	Jumlah elektron tidak berpasangan valensi.....	257
6.1.3	Prinsip HOMO-LUMO dan teori orbital terdepan.....	259
6.2	Kestabilan kimia dan kereaktifan gas mulia	260
6.2.1	Kondisi untuk kestabilan kimia	261
6.2.2	Kereaktifan gas mulia.....	262
6.3	Reaksi penambahan siklik dan pertukaran ikatan kimia	263
6.3.1	Reaksi Diels-Alder	263
6.3.2	Interaksi HOMO-LUMO dan simetri orbital	268

6.4	Selektivitas dan efek substitusi dalam reaksi kimia.....	271
6.4.1	Efek deformasi dari HOMO dan LUMO disebabkan oleh grup fungsional.....	272
6.4.2	Reaksi regioselektivitas.....	274

