



| | |
|---|----|
| دیباجه..... | ۱۵ |
| سخن مترجم | ۱۹ |
| مقدمه: تعاریف، تاریخچه و نامگذاری ها..... | ۲۱ |
| منابع | ۳۵ |
| فصل اول: پیوند در ترکیبات کئوردیناسیونی | ۳۷ |
| ۱- ۱- توابع موج اوربیتال های d..... | ۳۷ |
| ۱- ۲- اثر میدان بلور بر روی توابع موجی..... | ۳۸ |
| ۱- ۲- ۱- جنبه های کیفی..... | ۳۸ |
| ۱- ۲- ۲- جنبه های کمی..... | ۴۲ |
| ۱- ۳- ۱- تئوری اوربیتال مولکولی | ۴۷ |
| ۱- ۳- ۱- اوربیتال های مولکولی کمپلکس اکتاهدرال | ۴۹ |
| ۱- ۳- ۲- اوربیتال های مولکولی کمپلکس تتراهدرال | ۵۵ |
| ۱- ۳- ۳- اوربیتال های مولکولی کمپلکس مسطح مربعی | ۵۷ |
| ۱- ۳- ۴- لیگاندهای مختلط و هندسه های دیگر | ۶۰ |

- ۱- ۳- ۵- کشف کمپلکس‌هایی که برنده‌ی جایزه‌ی نوبل گشته‌اند..... ۶۱
- ۱- ۴- مدل همپوشانی زاویه‌ای ۶۴
- ۱- ۴- ۱- انتگرال همپوشانی..... ۶۵
- ۱- ۴- ۲- انرژی اوربیتال‌های مولکولی..... ۶۵
- ۱- ۴- ۳- قاعده‌ی جمع‌پذیری ۶۶
- ۱- ۴- ۴- جداول مربوط به محاسبات پارامترهای همپوشانی زاویه‌ای..... ۶۶
- ۱- ۴- ۵- مثال‌هایی از نحوه‌ی استفاده از جداول ذکر شده ۶۹
- منابع ۷۱
- فصل دوم: طبقه‌بندی لیگاندها و نحوه‌ی کئوردیناسیون..... ۷۳
- ۲- ۱- مقدمه ۷۳
- ۲- ۲- طبقه‌بندی لیگاندها براساس ماهیت دندانه‌ی آن‌ها..... ۷۴
- ۲- ۲- ۱- لیگاندهای تک دندانه ۷۴
- ۲- ۲- ۲- لیگاندهای چند دندانه (غیر کیسوله‌کننده)..... ۷۴
- ۲- ۲- ۳- کریبتاندها و لیگاندهای کیسوله‌کننده ۸۶
- ۲- ۳- لیگاندهای تطبیق‌پذیر ۹۴
- ۲- ۳- ۱- اسکورپیونات‌ها..... ۹۴
- ۲- ۳- ۲- کالیکس آر‌ن‌ها..... ۹۶
- ۲- ۳- ۳- فولرن‌ها..... ۱۰۰
- منابع ۱۰۳
- فصل سوم: شیمی فضایی و انحراف‌های هندسی در ترکیبات کئوردیناسیونی.... ۱۰۷
- ۳- ۱- شیمی فضایی ۱۰۷

- ۳- ۱- ۱- دافعه‌ی لیگاند - لیگاند: مدل کپرت ۱۰۷
- ۳- ۱- ۲- اعداد کئوردیناسیونی: عوامل مختلف ۱۰۷
- ۳- ۱- ۳- عدد کئوردیناسیون ۲ ۱۰۸
- ۳- ۱- ۴- عدد کئوردیناسیون ۳ ۱۰۹
- ۳- ۱- ۵- عدد کئوردیناسیون ۴ ۱۱۱
- ۳- ۱- ۶- عدد کئوردیناسیون ۵ ۱۱۶
- ۳- ۱- ۷- عدد کئوردیناسیون ۶ ۱۲۲
- ۳- ۱- ۸- عدد کئوردیناسیون ۷ ۱۲۶
- ۳- ۱- ۹- عدد کئوردیناسیون ۸ ۱۲۸
- ۳- ۱- ۱۰- عدد کئوردیناسیون ۹ ۱۳۱
- ۳- ۱- ۱۱- اعداد کئوردیناسیون ۱۰، ۱۱ و ۱۲ ۱۳۲
- ۳- ۱- ۱۲- بیش از یک نوع کئوردیناسیون در یک بلور ۱۳۳
- ۳- ۲- انحراف‌های هندسی در ترکیبات کئوردیناسیونی به واسطه‌ی عوامل الکترونی: اثر
یان - تلر ۱۳۴
- ۳- ۲- ۱- مقدمه ۱۳۴
- ۳- ۲- ۲- اثر یان - تلر مرتبه‌ی اول ۱۳۵
- ۳- ۲- ۳- اثر یان - تلر مرتبه‌ی دوم یا اثر شبه یان - تلر (PJTE) ۱۴۰
- منابع ۱۴۷
- فصل چهارم: ایزومری در ترکیبات کئوردیناسیونی ۱۵۱
- ۴- ۱- مقدمه ۱۵۱
- ۴- ۲- ایزومرهای ساختاری ۱۵۱

- ۴- ۲- ۱- ایزومری یونش ۱۵۱
- ۴- ۲- ۲- ایزومری آب پوشی (حلالپوشی) ۱۵۲
- ۴- ۲- ۳- ایزومری کئوردیناسیونی ۱۵۲
- ۴- ۲- ۴- ایزومری اتصالی ۱۵۳
- ۴- ۲- ۵- ایزومریزاسیون پلیمریزاسیون ۱۵۵
- ۴- ۲- ۶- ایزومری لیگاند ۱۵۶
- ۴- ۳- استرئوایزومرها ۱۵۷
- ۴- ۳- ۱- آتروپیزومرها: ایزومرهای کنفورماسیونی ۱۵۷
- ۴- ۳- ۲- ایزومرهای هندسی: دیاستروایزومرها ۱۵۹
- ۴- ۳- ۳- انانتیومرها ۱۶۱
- ۴- ۴- کایرالیته در ترکیبات کئوردیناسیونی: شیوه‌های نامگذاری ۱۶۲
- ۴- ۴- ۱- نمادهای R و S (سیستم CIP) ۱۶۲
- ۴- ۴- ۲- قاعده‌ی خط پیچشی ۱۶۴
- ۴- ۵- کایرالیته در ترکیبات کئوردیناسیونی: منشأ و مثال‌ها در کمپلکس‌های تک‌هسته‌ای ۱۶۶
- ۴- ۵- ۱- ماهیت مختلف لیگاندها ۱۶۶
- ۴- ۵- ۲- تغییر از هندسه‌ی آکایرال به کایرال ۱۶۷
- ۴- ۵- ۳- آرایش فضایی حلقه‌های کی‌لیت آکایرال ۱۶۷
- ۴- ۵- ۴- کئوردیناسیون لیگاندهای کایرال ۱۶۹
- ۴- ۵- ۵- کئوردیناسیون لیگاندهای پروکایرال ۱۷۱
- ۴- ۵- ۶- حضور دو لیگاند کئوردینه شونده که عناصر چرخشی نامتعارف موجود در هر لیگاند را دو به دو حذف می‌کنند ۱۷۱

- ۴- ۵- ۷ کایرالیته‌ی مسطح ۱۷۲
- ۴- ۶ کایرالیته در ترکیبات کئوردیناسیونی چند هسته‌ای: مثال‌ها ۱۷۲
- ۴- ۶- ۱ کمپلکس‌های کایرال چند هسته‌ای ۱۷۲
- ۴- ۶- ۲ چندوجهی و چندگوشه‌های کایرال ۱۷۲
- ۴- ۷- ۱ جداسازی ایزومرهای کایرال ۱۷۴
- ۴- ۷- ۱- تفکیک کمپلکس‌های راسمیک (سنتز فضاویژه) ۱۷۴
- ۴- ۷- ۲ سنتز انتخابی انانتیو ۱۷۶
- ۴- ۷- ۳ وارونگی مارپیچ پویا ۱۷۹
- ۴- ۸- تبدیل کایرال به کایرال ترکیبات کئوردیناسیون (به عنوان سنتز انانتیوگزین مولکول‌های آلی) ۱۸۰
- ۴- ۸- ۱ لیگاندهای کایرال ۱۸۱
- ۴- ۸- ۲ فرآیندهای کاتالیتیکی مهم ۱۸۲
- ۴- ۹- ۱ تاتومریزاسیون ظرفیت ۱۸۷
- ۴- ۹- ۱- شرایط و انواع ۱۸۸
- ۴- ۹- ۲ تاتومریزاسیون ظرفیت تحریک شده با نور ۱۹۰
- منابع ۱۹۰
- فصل پنجم: لیگاندهای چند هسته‌ای ساز: کمپلکس‌های دو هسته‌ای و چند هسته‌ای و نانومولکول‌ها ۱۹۷
- ۵- ۱ مقدمه ۱۹۷
- ۵- ۲ لیگاندهای چند هسته‌ای ساز ۱۹۸
- ۵- ۲- ۱ لیگاندهای تک‌اتمی پل‌ساز ۱۹۸

- ۵- ۲- ۲- لیگاندهای چند اتمی پل ساز ۱۹۸
- ۵- ۲- ۳- لیگاندهای چند بخشی ۲۰۰
- ۵- ۲- ۴- لیگاندهای چند بخشی پل ساز ۲۰۱
- ۵- ۳- روش ساختمان بلوکه‌ای یا سنتز کنترل شده: کمپلکس‌ها در نقش فلزات و کمپلکس‌ها در نقش لیگاندها (کمپلکس‌ها به عنوان واحد ساختاری) ۲۰۳
- ۵- ۳- ۱- روش کمپلکس‌ها در نقش فلزات ۲۰۳
- ۵- ۳- ۲- روش کمپلکس‌ها در نقش لیگاندها ۲۰۳
- ۵- ۳- ۳- روش کمپلکس‌ها در نقش لیگاند و در نقش فلز ۲۰۴
- ۵- ۴- کلاسترهایی با تعداد هسته‌های زیاد: کلیات ۲۰۵
- ۵- ۵- کلاسترهای با هسته‌های زیاد از نوع اکسیدو - هیدروکسیدو (به استثنای پلی‌اکسومتالات‌ها) ۲۰۵
- ۵- ۵- ۱- ترکیبات محافظت نشده ۲۰۵
- ۵- ۵- ۲- ترکیبات محافظت شده ۲۰۶
- ۵- ۶- پلی‌اکسومتالات‌ها (POMs) ۲۰۹
- ۵- ۶- ۱- نانو پلی‌اکسومتالات‌ها (NS-POMs) ۲۱۰
- ۵- ۶- ۲- مثال‌های انتخاب شده از POMs و NS-POMs ۲۱۰
- ۵- ۶- ۳- پلی‌اکسومتالات‌های به عنوان پایه برای کمپلکس‌های فلزات واسطه ... ۲۱۶
- ۵- ۷- کلاسترهای اکسیدو - کربوکسیلات (مخصوصاً کلاسترهای مشتق شده از واحدهای [کربوکسیلات] $[M_3O]$) ۲۱۸
- ۵- ۷- ۱- آهن ۲۱۹
- ۵- ۷- ۲- منگنز ۲۱۹

- ۵- ۸- چرخ‌های فلزی ۲۲۱
- ۵- ۸- ۱- چرخ‌های آهنی ۲۲۱
- ۵- ۸- ۲- چرخ‌های فلزات دیگر ۲۲۲
- ۵- ۹- سایر لیگاندهای مهم چند هسته‌ای ساز آلی ۲۲۳
- ۵- ۹- ۱- دی - ۲ - پیریدیل کتون‌ها ۲۲۳
- ۵- ۱۰- دندربمرهای فلزی ۲۲۶
- ۵- ۱۰- ۱- طبقه‌بندی ۲۲۸
- ۵- ۱۰- ۲- ویژگی‌ها ۲۳۰
- ۵- ۱۱- چشم‌انداز آینده ۲۳۳
- منابع ۲۳۴
- فصل ششم: پیوند فلز- فلز و کلاسترهای فلزی ۲۴۱
- ۶- ۱- مقدمه: تعریف و ویژگی‌های اصلی ۲۴۱
- ۶- ۲- کلاسترهای فلزات واسطه ۲۴۲
- ۶- ۳- کلاسترهای فلزی با لیگاندهای دهنده π ۲۴۲
- ۶- ۳- ۱- کلاسترهای دو هسته‌ای ۲۴۲
- ۶- ۳- ۲- کلاسترهای سه هسته‌ای ۲۴۶
- ۶- ۳- ۳- کلاسترهای چهار هسته‌ای ۲۴۷
- ۶- ۳- ۴- کلاسترهای شش هسته‌ای ۲۴۸
- ۶- ۳- ۵- کلاسترهایی با عنصر مرکزی ۲۴۹
- ۶- ۳- ۶- ساختارهایی با بیش از یک پیوند فلز - فلز ۲۵۰
- ۶- ۳- ۷- زنجیرهای گسترده‌ی فلزی (EMACs) ۲۵۰

- ۶-۴ کلاسترهایی با لیگاندهای π - اسیدی: ساختار و پیوند ۲۵۱
- ۶-۴-۱ طرح پیوندی مستقر: قاعدهی ۱۸ الکترون ظرفیت ۲۵۱
- ۶-۴-۲ تشابه‌های ایزولوبال یا هم‌لی ۲۵۳
- ۶-۴-۳ پیوند غیر مستقر: ساختار و پیوند در کلاسترهایی با تعداد هسته‌ی متوسط ۲۵۹
- ۶-۴-۴ ساختار و پیوند در کلاسترهای پرهسته ۲۶۷
- ۶-۵ کلاسترهای فلزات گروه‌های اصلی ۲۶۹
- ۶-۵-۱ کلاسترهای فلزات قلیایی و قلیایی خاکی ۲۶۹
- ۶-۵-۲ کلاسترهای فلزی گروه‌های ۱۳، ۱۴ و ۱۵ ۲۷۰
- ۶-۶ کلاسترهایی با اتم‌هایی در مرکز ۲۷۵
- ۶-۶-۱ اتم‌های نافلز در کلاسترهای بلوک d ۲۷۵
- ۶-۶-۲ اتم‌های بلوک d در کلاسترهای بلوک p ۲۷۶
- ۶-۶-۳ موارد خاص ۲۷۷
- ۶-۷ کلاسترها و نانوذرات طلا ۲۷۸
- ۶-۷-۱ کلاسترهای naked ۲۷۹
- ۶-۷-۲ کلاسترهای عامل‌دار ۲۷۹
- ۶-۷-۳ کلاسترهای دوپه‌شده‌ی طلا ۲۸۱
- ۶-۷-۴ کلاسترهای فلزات دیگر (غیر از طلا) ۲۸۱
- منابع ۲۸۲
- فصل هفتم: ترمودینامیک و فاکتورهای سینتیک واکنش‌های غیرردوکس در ترکیبات کئوردیناسیونی ۲۸۹

- ۷- ۱- پایداری ترمودینامیکی ۲۹۰
- ۷- ۱- ۱- مراحل تعادل ۲۹۰
- ۷- ۱- ۲- عوامل اثرگذار بر پایداری کمپلکس‌ها ۲۹۴
- ۷- ۱- ۳- روندهای پایداری برای برهم‌کنش‌های فلز - لیگاند ۲۹۵
- ۷- ۱- ۴- عوامل فضایی: زاویه‌ی مخروطی ۳۱۲
- ۷- ۲- مکانیزم‌های واکنش‌های غیرردوکس ۳۱۳
- ۷- ۲- ۱- مقدمه ۳۱۳
- ۷- ۲- ۲- خلاصه‌ای از سینتیک ۳۱۴
- ۷- ۲- ۳- کلیات واکنش‌های جانشینی لیگاند ۳۱۷
- ۷- ۲- ۴- جانشینی در کمپلکس‌های مسطح مربعی ۳۱۹
- ۷- ۲- ۵- مکانیزم‌های جانشینی در کمپلکس‌های اکتاهدراک ۳۲۸
- منابع ۳۳۴
- فصل هشتم: تئوری میدان بلور و جفت شدن اسپین - اوربیت: ترم‌های انرژی و چندگانگی‌ها ۳۳۷
- ۸- ۱- مقدمه: عملگر هامیلتونی اتمی / الکترونی ۳۳۷
- ۸- ۲- کاربرد عملگرهای هامیلتونی اتمی و اسپینی در توابع موج چند الکترونی: ترم‌ها، چندگانگی‌ها و حالت‌های مغناطیسی ۳۳۹
- ۸- ۲- ۱- مفاهیم پایه ۳۳۹
- ۸- ۲- ۲- روش ضرب مستقیم برای محاسبه‌ی ترم‌ها ۳۴۱
- ۸- ۲- ۳- انواع آرایش‌های الکترونی در محاسبات ضرب مستقیم ۳۴۲
- ۸- ۳- روش میدان ضعیف ۳۴۴

- ۳۴۴..... ۸- ۳- ۱- ترم‌های اتمی (طیف‌سنجی)
- ۳۴۵..... ۸- ۳- ۲- انرژی ترم‌های اتمی
- ۳۴۷..... ۸- ۳- ۳- اثر میدان بلور
- ۳۴۷..... ۸- ۳- ۴- ترم حالت پایه
- ۳۴۹..... ۸- ۳- ۵- انرژی ترم‌های میدان بلور
- ۳۵۶..... ۸- ۴- روش میدان قوی
- ۳۵۸..... ۸- ۴- ۱- ترم حالت پایه
- ۳۵۹..... ۸- ۴- ۲- انرژی ترم‌ها
- ۳۵۹..... ۸- ۵- ارتباط یک به یک (نمودارهای همبستگی) بین ترم‌های انرژی میدان‌های ضعیف و قوی: میدان‌های متوسط
- ۳۶۴..... ۸- ۶- نمودارهای تانابه - سوگانو
- ۳۶۶..... ۸- ۷- میدان لیگاند
- ۳۶۸..... ۸- ۸- جفت شدن اسپین - اوربیت
- ۳۶۸..... ۸- ۸- ۱- جفت شدن اسپین - اوربیت در ترم‌های اتمی (طیف‌سنجی)
- ۳۷۰..... ۸- ۸- ۲- جفت شدن اسپین - اوربیت در ترکیبات کئوردیناسیونی
- ۳۷۰..... ۸- ۸- ۳- جفت شدن اسپین - اوربیت مرتبه‌ی اول
- ۳۷۴..... ۸- ۸- ۴- جفت شدن اسپین - اوربیت مرتبه‌ی دوم
- ۳۷۸..... ۸- ۹- آخرین بررسی‌های جفت شدن اسپین - اوربیت و شکافتگی میدان صفر
- ۳۸۱..... منابع
- ۳۸۳..... فصل نهم: طیف‌سنجی الکترونی
- ۳۸۳..... ۹- ۱- مقدمه

- ۳۸۳..... ۹- ۲ تابش الکترومغناطیس
- ۳۸۵..... ۹- ۳ اصول طیف‌سنجی: قواعد انتخاب
- ۳۸۶..... ۹- ۳- ۱ اصول پایه‌ی طیف‌سنجی
- ۳۸۷..... ۹- ۳- ۲ ممان انتقال
- ۳۸۸..... ۹- ۳- ۳ قواعد انتخاب
- ۳۸۹..... ۹- ۴ تفسیر قواعد انتخاب
- ۳۸۹..... ۹- ۴- ۱ ترکیب اوربیتال‌های d و p هم‌تقارن
- ۳۹۰..... ۹- ۴- ۲ جفت شدن ارتعاشی
- ۳۹۲..... ۹- ۴- ۳ جفت شدن اسپین - اوربیت
- ۳۹۲..... ۹- ۵ انواع انتقالات الکترونی کمپلکس‌های فلزی
- ۳۹۳..... ۹- ۵- ۱ انتقالات $d \rightarrow d$
- ۳۹۹..... ۹- ۵- ۲ طیف‌های انتقال بار
- ۴۰۶..... ۹- ۵- ۳ باندهای انتقال بار بین ظرفیتی
- ۴۰۶..... ۹- ۶- ۱ محاسبه‌ی پارامترهای میدان بلور به کمک پیک‌های جذبی $d \rightarrow d$
- ۴۰۶..... ۹- ۶- ۱ روش کمی برای یون‌های d^2 ، d^3 ، d^7 (میدان ضعیف) و d^8
- ۴۰۸..... ۹- ۶- ۲ روش‌های نموداری برای آرایش‌های الکترونی d^n
- ۴۰۸..... منابع
- ۴۰۹..... فصل دهم: مغناطیس مولکولی
- ۴۰۹..... ۱۰- ۱ کمپلکس‌های تک هسته‌ای
- ۴۰۹..... ۱۰- ۱- ۱ مقدمه
- ۴۱۰..... ۱۰- ۱- ۲ مغناطیس از دیدگاه کوانتوم: ممان مغناطیسی و انرژی حالات

- ۱۰- ۱- ۳- هامیلتونین ۴۱۲
- ۱۰- ۱- ۴- مغناطیس از دیدگاه سیستم ماکروسکوپی: تعاریف و واحدها ۴۱۳
- ۱۰- ۱- ۵- اندازه گیری مغناطیسی: مغناطیسی شدن و تأثیرپذیری مولی ۴۱۵
- ۱۰- ۱- ۶- کاربرد هامیلتون اسپینی در ترم های A یا E ۴۲۴
- ۱۰- ۱- ۷- مغناطیس در ترم های هم تراز اوربیتالی (ترم T در O_h یا T_d) ۴۲۶
- ۱۰- ۲- ۲- کمپلکس های چند هسته ای ۴۲۸
- ۱۰- ۲- ۱- مقدمه ۴۲۸
- ۱۰- ۲- ۲- تفسیر خاصیت مغناطیسی یک کمپلکس دوهسته ای از Cu^{2+} ۴۲۹
- ۱۰- ۲- ۳- رفتار وابسته به پدیده ها ۴۳۱
- ۱۰- ۲- ۴- معادله ی تأثیرپذیری مغناطیسی برای کمپلکس های دوهسته ای جورهسته ۴۳۳
- ۱۰- ۲- ۵- منحنی های $\chi_m T$ ، χ_m و $1/\chi_m$ ۴۳۳
- ۱۰- ۲- ۶- کمپلکس های دوهسته ای ناجورهسته ۴۳۶
- ۱۰- ۲- ۷- تعمیم به سایر ترکیبات چندهسته ای ۴۳۷
- ۱۰- ۲- ۸- ارتباط بین اوربیتال های مولکولی و جفت شدن مغناطیسی ۴۳۷
- ۱۰- ۲- ۹- بررسی کیفی چند سیستم جفت شده ی آنتی فرومغناطیسی ۴۴۲
- ۱۰- ۲- ۱۰- برهمکنش های فرومغناطیسی ۴۴۶
- ۱۰- ۲- ۱۱- به سوی مغناطیس های مولکولی ۴۴۹
- ۱۰- ۲- ۱۲- مغناطیس های تک مولکولی ۴۵۲
- ۱۰- ۳- ۳- گذرهای اسپینی (SCO) ۴۵۶
- ۱۰- ۳- ۱- مفاهیم و مکانیزم ها ۴۵۶
- ۱۰- ۳- ۲- رفتار گروهی ۴۵۹

- ۱۰- ۳- ۳- اندازه‌گیری‌های مغناطیسی ۴۶۰
- ۱۰- ۳- ۴- چند مثال ۴۶۱
- ۱۰- ۳- ۵- چشم‌انداز ۴۶۲
- منابع ۴۶۲
- فصل یازدهم: رزونانس پارامغناطیسی الکترون در ترکیبات کئوردیناسیونی ۴۶۷
- ۱۱- ۱- مقدمه ۴۶۷
- ۱۱- ۲- اصول طیف‌سنجی EPR ۴۶۷
- ۱۱- ۳- سیستم‌های قابل مطالعه با EPR ۴۶۹
- ۱۱- ۴- ثبت طیف‌های EPR و اطلاعات آن‌ها ۴۶۹
- ۱۱- ۵- کمیت g ۴۷۱
- ۱۱- ۶- شکافتگی‌های فوق‌ظریف ۴۷۱
- ۱۱- ۶- ۱- ساده‌ترین مثال: اتم هیدروژن ۴۷۳
- ۱۱- ۶- ۲- جفت شدن فوق‌ظریف حاصل از هسته‌های هم‌ارز با اسپین $I = 1/2$ ۴۷۵
- ۱۱- ۶- ۳- شکافتگی فوق‌ظریف حاصل از هسته‌های غیر هم‌ارز با $I = 1/2$ ۴۷۸
- ۱۱- ۶- ۴- شکافتگی فوق‌ظریف حاصل از هسته‌هایی با اسپین $I > 1/2$ ۴۷۹
- ۱۱- ۷- سیستم‌های چندالکترونی همسانگرد ۴۸۲
- ۱۱- ۸- بررسی ناهمسانگردی در سیستم‌های تک‌الکترونی با حالت‌های پایه‌ی غیر هم‌تراز اوربیتالی ۴۸۳
- ۱۱- ۸- ۱- پارامتر g ۴۸۳
- ۱۱- ۸- ۲- شکل طیف‌های EPR یون‌های تک‌الکترونی ناهمسانگرد ۴۸۵
- ۱۱- ۸- ۳- مثال‌هایی غیر از کمپلکس‌های Cu^{2+} برای سیستم‌های $S = 1/2$ ۴۸۷

- ۹- ۱۱ شکافتگی میدان صفر: سیستم‌های چند الکترونی ناهمسانگرد ($S > 1/2$) ۴۸۸
- ۹- ۱۱- ۱ اسپین‌های صحیح ($S = 1$ مثل Ni^{2+} یا $S = 2$ مثل Mn^{3+}) ۴۸۸
- ۹- ۱۱- ۲ اسپین‌های غیر صحیح ($S = 3/2$ مثل Cr^{3+} یا $S = 5/2$ مثل Mn^{2+}) ۴۹۶
- ۱۱- ۱۰ طیف‌های EPR کمپلکس‌های فلزی چند هسته‌ای ۴۹۸
- ۱۱- ۱۰- ۱ چند مثال ۴۹۸
- ۱۱- ۱۱ طیف EPR ترم‌های هم‌تراز اوربیتالی ۵۰۰
- ۱۱- ۱۲ طیف‌سنجی EPR فرکانس بالا و میدان بالا ۵۰۱
- ۱۱- ۱۳ زمان‌های آسایش و پهنای خط در EPR ۵۰۲
- ۱۱- ۱۳- ۱ آسایش اسپین - شبکه ۵۰۲
- ۱۱- ۱۳- ۲ آسایش اسپین - اسپین ۵۰۳
- منابع ۵۰۴
- پیوست ۱: نمودارهای تانابه - سوگانو (فصل هشتم) ۵۰۷
- پیوست ۲: (فصل دهم) ۵۱۳
- پیوست ۳: (واژه‌نامه) ۵۱۵



ماجرا از آنجا آغاز شد که روزنامه را خریدم تا نتایج اسامی قبول شدگان کنکور را ببینم؛ بله از رشته‌ی شیمی محض دانشگاه تبریز (همان رشته‌ای که عاشقش بودم) قبول شده بودم. روزهای دانشجویی آغاز و راه و رسم دبیرستان تبدیل به دانشگاه شد. همه چیز فرق داشت و نو بود. شرایطی که تا به امروز تجربه نکرده بودم. اما آنچه در این دنیای نو کاملاً مشهود بود این بود که وظایف و تکالیف به مراتب سخت‌تر، حرفه‌ای‌تر و تخصصی‌تر از تجربه‌های دوران قبل از دانشگاه است. دوره‌ی چهار ساله‌ی کارشناسی دوره‌ای پر از خاطره ولی در عین حال سخت و طاقت‌فرسا بود. معرفی کتاب‌های به زبان اصلی از طرف اساتید و روبرو شدن با کتاب‌های منبع به زبان اصلی که داد بچه‌ها را درمی‌آورد. گویی زبان انگلیسی زبان بیگانه و غیر قابل تفهیمی برای بچه‌ها بود. وقتی کتاب‌های ترجمه شده را هم می‌دیدم جز سردرگمی چیزی عایدت نمی‌شد. بر آن شدم تا در حد توانم کتابی با ترجمه‌ی روان و سلیس چاپ کنم و نتیجه را در قفسه‌های کتابخانه‌ی همان دانشکده‌ای که ۱۲ سال مرا پذیرا بود، قرار دهم. دوست داشتم لذت ترجمه‌ی روان را در کتابخانه‌ی دانشکده‌ام به یادگار بگذارم. امروز همان روزی است که این خواسته به تحقق پیوست.

کتاب حاضر تمام جنبه‌های مفهومی شیمی کنوردیناسیون را در برداشته و به زبان ساده و قابل فهم در اختیار دانشجویان قرار می‌دهد؛ به نحوی که مفاهیم ریاضی و معادلات کوانتوم مکانیک تنها زمانی به کار برده شده‌اند که کاملاً نیاز به بیان آن‌ها احساس می‌شود. دانشجویان عزیز با بهره‌گیری از این کتاب به راحتی می‌توانند بر مفاهیم مهم شیمی کنوردیناسیون متمرکز شده و به خوبی امتحانات خود را بگذرانند.

بر خود واجب می‌دانم از جناب آقای دکتر سیدابوالفضل حسینی یزدی، دانشیار گروه شیمی معدنی دانشکده‌ی شیمی دانشگاه تبریز و استاد راهنمای عزیز و ارجمندم در هر دو مقطع کارشناسی ارشد و دکتری تخصصی، که زحمت ویراستاری علمی این مجموعه را کشیدند؛ تشکر و قدردانی ویژه نمایم. و در آخر با نهایت عشق این ترجمه را به خانواده‌ی عزیزم، پدر و مادر بی‌نظیر و برادر مهربانم، تقدیم می‌کنم.

پروین صمدزاده‌اقدام

دکتری شیمی معدنی از دانشگاه تبریز

بهار ۱۴۰۲

مقدمه

تعاریف، تاریخچه

و نامگذاری‌ها

ترکیبات مطالعه شده در این کتاب ترکیبات "کتوردیناسیونی" یا "کمپلکس" نامیده خواهند شد. واژه‌ی کمپلکس به اواخر قرن نوزدهم برمی‌گردد. از آن زمان بین ترکیبات مرتبه‌ی اول، تشکیل شده از اتم‌ها، و ترکیبات مرتبه‌ی بالاتر، تشکیل شده از ترکیبی از مولکول‌ها (بعضی اوقات این ترکیبات "ترکیبات مولکولی" نیز نامیده می‌شوند)، فرق حاصل شد.

نوع ویژه‌ی کمپلکس‌های مرتبه‌ی بالاتر، کمپلکس‌های آمینی کبالت و پلاتین بودند که از نظر تاریخی مهم هستند. این کمپلکس‌ها نمونه‌های اولیه‌ی تئوری کتوردیناسیون ورنر هستند. ورنر آن‌ها را ترکیبات کتوردیناسیونی نامید؛ ترکیباتی که شامل یک اتم فلز مرکزی (یا یون مرکزی) و یک تعداد معین از مولکول‌ها یا یون‌های کتوردینه می‌باشند. ورنر از قبل در زمینه‌ی ترکیباتی که مطالعه کرد، واژه‌ی کمپلکس و ترکیبات کتوردیناسیونی (دقیقاً: عدد کتوردیناسیون) را به عنوان مترادف استفاده کرد، گرچه به طور قطع و یقین، واژه‌ی "کمپلکس" واژه‌ی عمومی‌تری بود. در این ترکیبات کتوردیناسیونی که در اواخر قرن مورد مطالعه بودند، "لیگاندها" حتی در حالت تفکیک شده‌شان نیز پایدار بودند. بنابراین کمپلکس‌های ورنر به معنی اصلی واژه نیز جزء ترکیبات مرتبه‌ی بالاتر بودند. امروزه سیستم‌های لیگاند دیگری به واسطه‌ی نداشتن تعادل تفکیک در محلول دارای اهمیت می‌شوند چرا که این لیگاندها زمانی که از فلز جدا می‌شوند ناپایدار هستند. به هر حال هیچ دلیلی وجود ندارد که این ترکیبات را "کمپلکس" یا "ترکیبات کتوردیناسیونی" بنامیم!

خلاصه در شیمی کتوردیناسیون نوین واژه‌های "کمپلکس" و "ترکیبات کتوردیناسیونی" به طور وسیع به عنوان مترادف استفاده می‌شوند و برای تقریباً هر ترکیب مولکولی از فلزات واسطه (گرچه الزامی به فلز واسطه بودن نیست) که از یک اتم فلز مرکزی و مجموعه‌ای از لیگاندهای کتوردینه شده تشکیل شده، کاربرد دارد. این ترکیب مولکولی می‌تواند کاتیونی، آنیونی یا غیر یونی باشد.

پیشنهادات IUPAC (۲۰۰۵): هر ترکیب کئوردیناسیونی یک واحد کئوردیناسیونی (یا یک کمپلکس) است که شامل یک اتم مرکزی بوده که گروه‌های دیگر با آن پیوند دارند. ترکیب کئوردیناسیونی هر ترکیبی است که شامل یک واحد کئوردیناسیونی است. یک واحد کئوردیناسیونی یک یون یا مولکول خنثی است که از یک اتم مرکزی، معمولاً یک فلز، تشکیل شده که یک سری از اتم‌ها یا گروه‌های اتمی دیگر احاطه کننده، که هر کدام یک لیگاند نامیده می‌شوند، به آن متصل شده‌اند.

توسعه‌ی تاریخی شیمی کئوردیناسیون

از آنجایی که هیچ نقطه‌ی شروع مشخصی برای شیمی کئوردیناسیون وجود ندارد لذا تلاش برای بیان خلاصه‌ی تاریخچه‌ی شیمی کئوردیناسیون، کار پیچیده‌ای است. از اواسط قرن نوزدهم بود که ترکیبات کئوردیناسیونی موضوع تحقیقات شیمیایی قرار گرفتند. با کارهای آلفرد ورنردر اواخر قرن نوزدهم شیمی کئوردیناسیون به یک شاخه‌ی مجزا تبدیل شد. بنابراین با تأکید بر چند ترکیب خاص که جزو اصول پیشرفت‌های اولیه‌ی علمی بودند، تلاش می‌کنیم تاریخچه‌ی شیمی کئوردیناسیون را از زمان کارهای آلفرد ورنر شروع به ردیابی نماییم.

پیشرفت شیمی کئوردیناسیون قبل از تئوری آلفرد ورنر

شاید قدیمی‌ترین ترکیب کئوردیناسیونی شناخته شده بین تمام این ترکیبات رنگ جوهر قرمز، ترکیب کی‌لیت کلسیم آلومینیم‌هیدروکسی‌آنتراکینون، باشد. ترکیب فوق ابتدا در هندوستان استفاده شد و پیشتر از این که توسط یونانیان و رومی‌ها استفاده شود توسط پارسیان و مصریان کهن شناخته شده بود. هرودیت^۱ در سال ۴۵۰ قبل از میلاد از جوهر نام برد.

نخستین مدرک ثبت شده‌ی علمی برای تشکیل یک ترکیب کئوردیناسیونی (۱۵۹۷)، توصیف کمپلکس چهار آمونیاکی مس (II)، $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ ، است که آندراس لیباویاس^۲ فیزیکدان و کیمیاگر آن را توصیف کرد. او رنگ آبی مشاهده کرد که از اثر محلول $\text{Ca}(\text{OH})_2$ و NH_4Cl روی برنز (آلیاژ مس-قلع) به وجود آمد.

در مورد آبی پروس^۳، $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$ ، برای اولین بار یک ترکیب کمپلکس جداسازی شد و به عنوان پیگمان رنگی استفاده شد^۴. روش تهیه‌ی این ترکیب به مدت ۲۰ سال مخفی نگه داشته شد تا اینکه در سال ۱۷۲۴ توسط جان وودوارد^۵ (بر پایه‌ی دستورالعمل‌های دشباخ) چاپ شد. برای تهیه

¹ Herodoto

² Andreas Libavius

³ Prussian blue

⁴ Diesbach & Dippel 1704

⁵ John Woodward

که روش بی‌نهایت دشواری است به مخلوط پتاسیم هیدروژن تارتارات، پتاسیم نیترات، کربن فعال همچنین، آهن (II) سولفات کلسینه شده، خون خشک شده‌ی پودر شده، زاج سفید و هیدروکلریک اسید نیاز می‌باشد. طولی نکشید که بازبینی نهایی در دستورالعمل دشباخ نشان داد برعکس استفاده از نمک آهن که خیلی زود مشخص شد به عنوان ترکیب پایه در پس دادن رنگ است، استفاده از زاج سفید ضروری نیست.

سیتون تاسرت^۱ (۱۷۹۸) در زمان انقلاب فرانسه بعد از واکنش کبالت نیترات یا کلرید با مازاد آمونیاک آبی، تشکیل شدن یک محلول قهوه‌ای رنگ را گزارش کرد، هر چند قادر به توضیح این پدیده نبود. همانطور که امروز می‌دانیم این رنگ به واسطه‌ی تشکیل کمپلکس هگزآمین کبالت (III)، $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ ، بود، به همین دلیل است که تاسرت توسط برخی تاریخ‌دانان به عنوان کاشف این نوع ماده شناخته شده است.

اوایل قرن نوزدهم، مجموعه‌ای از کمپلکس‌ها سنتز شد که برای اولین بار منجر به ایجاد یک روش جهت‌دار گردید. لوئیس - نیکولاس وکولین^۲ (۱۷۶۳ - ۱۸۲۹) ترکیب $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4][\text{PdCl}_4]$ (نمک وکولین) را کشف کرد. ترکیب پلاتینی $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4][\text{PtCl}_4]$ توسط هنریچ گوستار مگنوس^۳ (۱۸۰۲ - ۱۸۷۰) کشف و به اسم نمک سبز مگنوس شناخته شد. ویلیام کریستوفر زایس^۴ در سال ۱۸۲۵ اولین ترکیب آلی فلزی، $\text{K}[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_3] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ، (نمک زایس) را کشف کرد. براساس برخی مرجع‌ها، اولین آمین فلزداری که در حالت جامد جداسازی شد، ترکیب زرد مایل به نارنجی $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3$ بود که توسط لئوپلد ملین^۵ در سال ۱۸۲۲ کشف شد. ملین چند مشتق سیانید از قبیل $[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3\text{K}$ ، $\text{M}_3[\text{Co}(\text{CN})_6]$ و $\text{M}_2[\text{Pt}(\text{CN})_4]$ را نیز کشف کرد.

دو ترکیب پلاتین‌دار بسیار مهم $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ ، سیس و ترانس، در سال ۱۸۴۴ کشف شدند. ورنر راجع به این ترکیبات در مقاله‌ی اول خود درباره‌ی تئوری کئوردیناسیون، بحث کرد و آن‌ها را به عنوان ایزومرهای هندسی با کئوردیناسیون مسطح مربعی در نظر گرفت. در نهایت توضیح مربوط توسط آ. آ. کرنیاو^۶ در اصل اثر ترانس معروف‌اش (۱۹۲۶) داده شد.

اولیور دبیلیو. گیبس^۷ در سال ۱۸۲۵ درباره‌ی موضوعی شروع به همکاری با فریدریک ای. گنت^۸ کرد که بعدها در تاریخچه‌ی شیمی کئوردیناسیون معروف شد. آن‌ها در سال ۱۸۵۶، تهیه، خصوصیات، داده‌های تجزیه‌ای و واکنش‌های برخی از ۳۵ نمک کاتیون‌های کبالت- آمونیاکی را

¹ Citoyen Tassaert

² Louis-Nicholas Vaquelin

³ Heinrich Gustav Magnus

⁴ William Christoffer Zeise

⁵ Leopold Gmelin

⁶ I. I. Chernyaev

⁷ Oliver W. Gibbs

⁸ Frederick A. Genth

گزارش کردند. چون بسیاری از این ترکیبات رنگی بودند، مرحله‌ی بعدی نامگذاری این ترکیبات براساس رنگ آن‌ها بود: $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$ (زرد)؛ $\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3$ (ارغوانی)؛ $\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$ (سبز)؛ $\text{CoCl}_3 \cdot 4\text{NH}_3$ (بنفش)؛ $\text{CoCl}_3 \cdot 5\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (قرمز). افزودن AgNO_3 به محلول تازه تهیه شده‌ی این نمک‌ها، منجر به تولید مقادیر متفاوت رسوب AgCl گردید (۳ برای کمپلکس زرد، ۲ برای کمپلکس ارغوانی و ۱ برای کمپلکس‌های سبز و بنفش). نوع دیگری از آزمایش درباره‌ی تعداد یون‌های موجود در محلول‌های این کمپلکس‌های مختلف اطلاعات مفیدی حاصل کرد. مشاهده‌ی اول حاکی از وجود گاهاً دو یا بیش از دو کمپلکس با ترکیب شیمیایی یکسان ولی خصوصیات شیمیایی و فیزیکی متفاوت بود. این ترکیبات ایزومر نامیده شدند.

تئوری‌های اولیه‌ی ترکیبات کئوردیناسیونی

برای تمام این وقایع تجربی چند فرضیه و تئوری پیشنهاد شد. توسعه‌ی تئوری ساختاری برای ترکیبات آلی به درد ترکیبات کئوردیناسیونی نیز خورد. قبل از این که ساختارهای کمپلکس‌ها شروع به بررسی شوند، مفهوم چهار ظرفیتی کربن و تشکیل زنجیرهای کربن-کربن در ترکیبات آلی به خوبی شناخته شده بود. این مفهوم روی شیمیدان‌های آن زمان تأثیر به‌سزایی داشت. بدون شک این موضوع بلاماستراند^۱ و دانشجوی وی یورگنسون^۲ را نیز تحت تأثیر قرار داد. بنابراین برای شش مولکول آمونیاک اضافی $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$ ساختار زنجیری مسئول شناخته شد.

شاید بتوان گفت سوفوس مد یورگنسون در بین شیمیدان‌هایی که در قرن نوزدهم کمپلکس‌ها را تهیه می‌کردند، جزو فعال‌ترین‌ها بوده است. وی به‌طور سیستماتیک تعداد وسیعی از کمپلکس‌ها را سنتز و لیگاند کی‌لیت اتیلندی‌آمین را به شیمی کئوردیناسیون معرفی کرد؛ همچنین پایه‌ای برای تئوری آلفرد ورنر در شیمی کئوردیناسیون خلق کرد. هر دو دانشمند به مدت طولانی درباره‌ی سؤالات مفهومی مقابل یکدیگر قرار داشتند که این عامل سرچشمه‌ای برای ایجاد مباحث علمی شد که در آخر بسیار پرثمر پایان یافت.

ورنر

ورنر نخستین شیمیدان معدنی بود که جایزه‌ی نوبل شیمی (۱۹۱۳) را در سن ۲۶ سالگی دریافت کرد. بزرگترین سهم او در شیمی کئوردیناسیون به الهام بخشی وی در سال ۱۸۹۳ برمی‌گردد. سه تا از مهمترین ادعاهای وی عبارتند از:

^۱ Blomstrand

^۲ Jorgensen

- لازم نیست تعداد گروه‌های متصل به یک اتم (چیزی که او از آن به عنوان ظرفیت ثانویه‌ی اتم یاد می‌کند) با عدد اکسایش آن اتم برابر باشد (ظرفیت اولیه). شیمی ترکیبات کبالت (III) آمونیاک می‌تواند قابل تفسیر و توجیه باشد، اگر در آن‌ها کبالت ظرفیت اولیه‌ی سه را داشته باشد، مثل CoCl_3 ، یا ظرفیت ثانویه‌ی شش را داشته باشد، مثل $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$. امروز واژه‌ی ظرفیت ثانویه با عدد کئوردیناسیون و ظرفیت اولیه با حالت اکسایش جایجا شده‌اند ولی نظریات ورنر هنوز بدون تغییر باقی مانده‌اند.
- هر عنصر تمایل به استفاده از هر دو ظرفیت اولیه و ثانویه‌ی خود را دارد. ورنر در مورد ترکیبات کبالت آمونیاک کلرید ادعا کرد کبالت عدد کئوردیناسیون ثابت ۶ را دارد ولی زمانیکه مولکول‌های آمونیاک حذف می‌گردند یون‌های کلرید جایگزین آن‌ها می‌شوند چرا که این یون‌ها بیشتر از این که به صورت یون کلرید آزاد باشند تمایل دارند به صورت پیوند کووالانسی به کبالت متصل شوند. برای توصیف شیمی پیچیده‌ی کبالت، مثل ورنر، باید نه تنها حالت اکسایش که عدد اکسایش آن را نیز مد نظر قرار داد. بنابراین ورنر این نمک‌ها را به صورت $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ ، $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$ و $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}$ فرمول‌بندی کرد. ورنر به عنوان یکی از مطالعات تجربی خود، اندازه‌گیری هدایت تعداد زیادی از ترکیبات کئوردیناسیونی را انتخاب کرد تا فرمول‌هایی به دست آورد که بیان دقیقی از تعداد یون‌های تشکیل شده در محلول ارائه نمایند.
- ظرفیت ثانویه به یک موقعیت ثابت شده معطوف است فلذا می‌توان آن را با استفاده از اصول ساختاری به دست آورد. ورنر خیلی پیشتر از اینکه هر نوع روش تجربی مستقیم برای تعیین ساختار در دسترس قرار گیرد، قادر بود برای بسیاری از ترکیبات کئوردیناسیونی با استفاده از تعداد و خصوصیات ایزومرهای حاصل، ساختارهای هندسی صحیحی گمارش کند. روش ورنر پیشتر توسط شیمیدان‌های آلی برای توضیح دادن ساختار ترکیبات آلی استفاده شد. ورنر ادعا کرد ۶ لیگاند آمونیاک در کمپلکسی مثل $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ ، در چند حالت تقارنی قرار می‌گیرند به طوری که فاصله‌ی هر گروه آمونیاک از اتم کبالت مرکزی مساوی است. سه حالت از این آرایش ممکن است: شش گوشه‌ی مسطح، منشور مثلثی و اکتاهدرال. ورنر در هر مورد تعداد ایزومرهای موجود را برابر با تعداد ایزومرهای مورد انتظار برای یک کمپلکس اکتاهدرال یافت. وی علیرغم تمام مشکلات ممکن در سنتز برخی از ایزومرها، نتیجه‌گیری خود را در رابطه با هندسه‌ی اکتاهدرال برای عدد کئوردیناسیون شش کبالت (III) صحیح یافت. نتایج او اثبات‌کننده‌ی مدارک منفی بود تا مثبت. اما او به طور قطع قادر بود ثابت کند ساختارهای مسطح و منشور مثلثی

نمی‌توانند درست باشند. مدارک حاصل نشان دادند کمپلکس‌های نوع $[M(AA)_3]$ فعال نوری هستند. وی براساس این واقعیت که از ترکیبات با فرمول $[MA_2B_2]$ دو ایزومر جداسازی شدند همچنین در گمارش‌های خود مبنی بر وجود هندسه‌ی مربع مسطح ترکیبات چهار کئوردینه‌ی کمپلکس‌های پالادیم و پلاتین، نیز به حق بود.

ذکر این نکته ارزشمند است که نخستین کنفورماسیون کریستالوگرافی از گمارش ورنر برای هندسه‌ی اکتاهدال کمپلکس‌های $Pt(IV)$ ، $(NH_4)_2[Pt^{IV}Cl_6]$ ، ۲۰ سال بعد از این که نظریات وی کامل شدند یعنی در سال ۱۹۲۱ چاپ شد. هندسه‌ی کمپلکس‌های مسطح مربعی $(NH_4)_2[Pd^{II}Cl_4]$ ، $K_2[Pd^{II}Cl_4]$ و همچنین کمپلکس تتراهدرال $K_2[Zn^{II}(CN)_4]$ در سال بعد تأیید شدند. توانایی ورنر و سایرین در گمارش صحیح ساختارها از طریق داده‌های غیر مستقیم و استدلال توسط هنری آیرینگ^۱ رئیس انجمن شیمی امریکا (ACS^۲) پیشین مورد تقدیر قرار گرفت: "نبوغ و استدلال کارامدی که شیمیدان‌ها را قادر به تعیین کردن ساختارهای مولکولی کمپلکس‌ها تنها از طریق تعداد ایزومرها، واکنشگری مولکول و اجزایش، نقطه‌ی انجماد، فرمول تجربی، وزن مولکولی و ... کرد، یکی از پیروزی‌های برجسته‌ی ذهن بشر است."

یادداشت برای خواننده‌ی علاقمند به کاوش عمیق جنبه‌ی تاریخی، کتاب "یادبود صد ساله‌ی ورنر"^۳ لازم است، این کتاب توسط انجمن شیمی ایران با شماره‌ی ۶۲ در سری کتاب‌های شیمی پیشرفته در سال ۱۹۶۷ چاپ شده است.

مراحل تاریخی پیشین

نخستین تلاش‌ها برای تفسیر نظریات ورنر درباره‌ی مفاهیم الکترونی توسط ان. وی سیجویک^۴ و تی. ام. لاری^۵ در سال ۱۹۲۳ صورت گرفت، آن‌ها با دنبال کردن تئوری عمومی پیوند کووالانسی جی. ان. لوئیس^۶ (۱۹۱۶) موفق به این تفاسیر گشتند. ملاحظه‌ی آغازین سیجویک توضیح عدد کئوردیناسیون ورنر در قالب اندازه‌های زیرگروه‌های الکترونی در اتم بوهر بود. او بعدها تلاش کرد با استفاده از مفهوم "عدد اتمی مؤثر"^۷ اعداد کئوردیناسیون را قانونمند کند. وی لیگندهایی را در نظر گرفت که براساس نظریه‌ی لوئیس به یون فلزی الکترون می‌دهند (معمولاً هر لیگاند یک جفت الکترون) و بنابراین به عنوان اسید لوئیس عمل می‌کنند. یون‌ها به این صورت تمایل به گرفتن

¹ Henry Eyring

² American Chemical Society

³ Werner Centennial

⁴ N. V. Sidgwick

⁵ T. M. Lowry

⁶ G. N. Lewis

⁷ Effective atomic number