

محاسبات ساختار الکترونی جامدات و مولکول‌ها: نظریه و روش‌های محاسباتی

مؤلف: جورج کوهانوف

مترجمان:

■ دکتر مهناز محمدی

■ فاطمه السادات پورسید آقایی

■ دکتر بهرام خوشنویسان

سرشناسه	: کوهاناف، ژورژه ژوزه Kohanoff, Jorge José
عنوان و نام پدیدآور	: محاسبات ساختار الکترونی جامدات و مولکول‌ها: نظریه و روش‌های محاسباتی/ مؤلف جورج کوهانوف؛ مترجمان مهناز محمدی، فاطمه السادات پورسیدآقایی، بهرام خوشنویسان.
مشخصات نشر	: قم: آثار نفیس، ۱۳۹۸.
مشخصات ظاهری	: ۲۹۴ ص.: جدول، نمودار.
شابک	: 978-600-7964-50-7
وضعیت فهرست نویسی	: فیبا
یادداشت	: عنوان اصلی: Electronic structure calculations for solids and molecules : theory and computational methods , 2006.
موضوع	: توابع چگالی
موضوع	: Density functionals
موضوع	: تقریب هارتری-فوک
موضوع	: Hartree-Fock approximation
موضوع	: ماده چگال -- شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع	: Condensed matter -- Computer simulation
شناسه افزوده	: محمدی، مهناز، ۱۳۶۴-، مترجم
شناسه افزوده	: پورسیدآقایی، فاطمه السادات، ۱۳۶۲-، مترجم
شناسه افزوده	: خوشنویسان، بهرام، ۱۳۴۰-، مترجم
رده بندی کنگره	: ۱۳۹۸ کی ۹ ت ۹ / ۶ / ۴۲ / ۴ QD۴۶۲
رده بندی دیویی	: ۵۴۱/۲۸
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۶۶۸۴۱۲



نام کتاب: محاسبات ساختار الکترونی جامدات و مولکول‌ها: نظریه و روش‌های محاسباتی
مترجمان: دکتر مهناز محمدی، فاطمه السادات پورسید آقایی، دکتر بهرام خوشنویسان
چاپ اول: ۱۳۹۸

ناشر: انتشارات آثار نفیس

شابک:

ISBN- 978-600-7964-50-7

تیراژ: ۵۰۰ جلد

قیمت: ۶۰۰۰۰۰ ریال

کلیه حقوق برای مؤلف/ ناشر محفوظ می‌باشد.

▪ آدرس پستی: قم - انتشارات آثار نفیس - صندوق پستی ۳۷۱۶۵/۱۶۵

▪ انتشارات: ۰۲۵۳۲۹۴۴۰۸۱ مدیر مسئول: ۰۹۱۱۵۸۴۴۰۰۷

فروشگاه اینترنتی: www.Shopnafis114.ir - www.Shopnafis114.com

پیش گفتار مؤلف

غالباً وقتی دانشجوی تحصیلات تکمیلی، یک فعالیت تحقیقاتی را در یک زمینه‌ی جدید شروع می‌کند با توجه به زمینه‌ای که گروه در آن به فعالیت می‌پردازد، یک نمای جزئی از یک تصویر کلی را ارائه می‌کند. دانشجو، روی یک دسته از سیستم‌ها مانند مولکول‌ها، سطوح، مایعات، خطاها یا سیستم‌های مغناطیسی متمرکز می‌شود و بر روی یک شیوه‌ی نظری خاص و یک یا چند تکنیک محاسباتی خاص از میان بسیاری از روش‌های امکان‌پذیر محدود می‌شود. همه‌ی اینها کاملاً قابل درک و منطقی هستند زیرا فراگیری سریع دانش سخت است، زیرا که دانش در طول دهه‌های بسیار از پیش‌گامانی مانند هارتری، فاک، اسلیتر، توماس، فرمی، بلاچ، دیراک و وایگنر تا پیشرفت‌های اخیر در زمینه‌هایی مانند همبستگی الکترونی به دست آمده است. این دانش، حاصل سالیان متمادی تجربه‌ی شرکت‌کنندگان در دانشگاه‌ها، کنفرانس‌ها و کارگاه‌هایی است که تبادل و همکاری را بین زیربخش‌های مختلف، با بررسی مزایا و معایب شیوه‌های مختلف با همکاران در سراسر جهان، و همراستا با آخرین پیشرفت‌ها در متون جایی توسعه دادند.

اگرچه کتاب‌ها و نشریات بسیار خوب در زمینه‌هایی مانند نظریه‌ی تابعی چگالی، فیزیک حالت جامد، شیمی کوانتوم، روش‌های ساختار الکترونی و شبیه‌سازی‌های کار-پارینللو در دسترس هستند، اما اگر همه‌ی این مطالب در یک کتاب مرجع گردآوری شود پسندیده است چرا که می‌تواند توسط یک دانشجوی فارغ‌التحصیل جدید، یک فرد با درجه‌ی دکترا که در این زمینه شروع به فعالیت می‌کند یا یک محقق با تجربه که می‌خواهد در یک یا چند زیربخش، افق‌های فکری خود را گسترش دهد، مورد استفاده قرار گیرد. به همین ترتیب، محقق می‌تواند با مفاهیم پایه و معمول‌ترین شیوه‌ها و تقریب‌های نظری آشنا شود و همزمان روش‌های مختلف عملی برای حل مسئله‌ی ساختار الکترونی را یاد بگیرد. کتاب اخیر ریچارد مارتین (ساختار الکترونی: نظریه‌ی پایه و روش‌های عملی، چاپ دانشگاه کمبریج، ۲۰۰۴) مخصوصاً این فضای خالی در بخش فیزیک حالت جامد را پر می‌کند. کتاب حاضر، بسیاری از این موضوعات را نیز در بر می‌گیرد. به هر حال، این کتاب هم برای شیمیدانان و هم برای فیزیکدانان قابل استفاده است زیرا روش‌هایی را توضیح می‌دهد که توسط هر دو گروه برای مطالعه‌ی جامدات، مایعات و مولکول‌ها به کار برده می‌شوند و تلاش می‌کند تا هر زمان که ممکن باشد بین آن‌ها ارتباط برقرار کند.

این کتاب، نتیجه‌ی تجربه‌ی عملی و جمع‌آوری و مشارکت در فعالیت‌های ساختار الکترونی می‌باشد. چهار مؤسسه در این رابطه، اساسی بودند: SISSA Scuola Internazionale Superior di Study Avantazi (در Trieste)، جایی که من اولین بار تعدادی از کارورزان در این زمینه مانند مایکل پارینللو و روبرتو کار را در آنجا ملاقات کردم، مرکز بین‌المللی فیزیک نظری (ICTP) در Trieste، که من پنج سال (۱۹۹۹ - ۱۹۹۴) را برای سازمان‌دهی فعالیت‌های فیزیک محاسباتی و ساختار الکترونی در آنجا سپری کردم، مرکز CSCAM در لیون، جایی که من در کارگاه‌های متعدد شرکت کردم و دانشگاه کوئین بلفاست که به من این امکان را داد که بخشی از وقت خود را به نوشتن این کتاب اختصاص دهم. شروع این کتاب را می‌توان به دعوت از Abhijit Mookerjee برای سخنرانی در یک کالج که در مرکز S. N. Bose در کلکته (هند) در سال ۱۹۹۸ ترتیب داده شده بود، نسبت داد. در سال‌های قبل، فرصتی برای من پیش آمد که چند فعالیت را در ICTP سازمان دهم، جایی که سخنرانان بسیار با طیب خاطر، یادداشت‌ها را برای شرکت‌کنندگان آماده می‌کردند. سپس فکر کردم که ایده‌ی خوبی خواهد بود که تلاش کنم و این نوع مطالب را با یک روش اصولی جمع‌بندی کنم و تهیه‌ی مجموعه‌ای از یادداشت‌ها را از کارگاه کلکته شروع کنم. در طول سال‌ها، بازبینی و غنی‌سازی یادداشت‌های سخنرانی را ادامه دادم که این یادداشت‌ها به عنوان مطالب مرجع برای دوره‌های فوق‌لیسانس استفاده می‌شدند. یادداشت‌ها همچنین برای استفاده‌ی دانشمندان در سراسر

جهان آنلاین بودند. من تمایل داشتم و همچنین از طرف Mookerjee و همکاران دیگر، از جمله ماریانا ویس من و پابلو آردجون، که این یادداشت‌ها را خواندند، پیشنهاد شد که استفاده از این یادداشت‌ها به عنوان یک نقطه‌ی شروع یک کتاب می‌تواند ایده‌ی خوبی باشد. بالاخره، فرصت زمانی پیش آمد که مایک فینیس این یادداشت‌ها را به Eoin O'Sullivan از انتشارات دانشگاه کمبریج نشان داد و او پیشنهاد کرد که یک طرح برای این کتاب ارائه دهم.

من محاسبات ساختار الکترونی را در سال ۱۹۹۰ با راهنمایی مایکل پارینلو و Giulia Galli در IBM زوریخ شروع کردم. با گفتگو با اعضا دیگر گروه، سریعاً با تنوع موضوع آشنا شدم و دریافتم که گروه‌های مختلف می‌خواهند که یک شیوه‌ی نظری خاص را با توجه به اهداف، کاردانی و سابقه‌ی خوب انتخاب کنند. معمولاً فیزیکدانان DFT و شیمی‌دانان، روش‌های مشتق شده از هارتری - فاک را ترجیح می‌دهند اگرچه اخیراً، نقاط تلاقی متعددی از یکی به دیگری وجود دارد و وجود بسیاری از روش‌های DFT - HF پیوندی و ترکیب شیوه‌های برهم‌کنش پیکربندی با DFT ثابت می‌کند که تعامل بین این دو گروه بسیار سودمند است. با در نظر گرفتن هر دو شیوه در این کتاب، هدف من این بود که آن را برای هر دو گروه قابل استفاده سازم. اگرچه تمایل آشکار به روش‌های DFT به فیزیکدانان یک ایده‌ی کلی، از این‌که چه نوع محاسباتی باید توسط شیمی‌دانان انجام شوند، می‌دهد و برعکس. حداقل، شیوه‌های نظری در طرح‌های عملی برای برآورد ویژگی‌های الکترونی از محاسبات ابتدا به ساکن به همان اندازه مهم است. این به معنی یک چارچوب مناسب برای عملی کردن روش‌های DFT یا هارتری - فاک در یک کامپیوتر است. اینجا، جایی است که گروه‌های مختلف از یکدیگر تفکیک می‌شوند. حوزه تکنیکی تر می‌شود و تکنیک‌های عددی و ریاضی بخش مهمی را تشکیل می‌دهند. بخش دوم این کتاب تلاشی است برای این‌که تصویری جامع از روش‌های مختلف موجود ارائه دهند اما در بعضی از زمینه‌ها مثل روش موج تخت شبه‌پتانسیل و شیوه‌ی کار - پارینلو به جزئیات می‌پردازد.

قسمت اول این کتاب، فصل‌های ۱ تا ۵ مطالب نظری از تقریب‌های بسیار پایه تا آخرین پیشرفت‌ها در زمینه‌ی همبستگی الکترونی را شامل می‌شود. فصل ۱ با مقدمه‌ای درباره‌ی مسئله‌ی ساختار ماده شروع می‌شود، تقریب‌های هسته‌ی کلاسیک و بی‌دررو را بررسی می‌کند - که اغلب با هم اشتباه می‌شوند - و به بیان مسئله‌ی ساختار الکترونی منجر می‌شود. فصل ۲، مقدمه‌ی مفهومی برای مسئله‌ی کلی محاسبه‌ی ساختار الکترونی سیستم بس الکترونی است. مبدأ فیزیکی همبستگی از لحاظ کیفی بررسی می‌شود و در یک سطح ساده در مورد سیستم‌های الکترونی بسط داده می‌شود. شیوه‌هایی که از ابتدا در گروه - های شیمی نظری به کار رفتند در فصل ۳ توضیح داده می‌شوند که از تقریب هارتری - فاک شروع می‌شوند و تا روش‌های مختلف شامل همبستگی مانند برهم‌کنش پیکربندی و نظریه‌ی اختلال مولر - پلست پیش می‌روند. نظریه‌ی تابعی چگالی مطرح می‌شود و به تفصیل در فصل ۴ بحث می‌شود در حالی که فصل ۵ به تبدیلی و همبستگی در DFT اختصاص داده می‌شود. فصل ۵ با تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته و چگالی موضعی (GGA و LDA) شروع می‌شود و جدیدترین شیوه‌های DFT - HF پیوندی و GGA - meta را شامل می‌شود. سپس این فصل روی مباحثی خارج از جریان اصلی تمرکز می‌کند در حالی که جدیدترین تکنولوژی را در DFT ارائه می‌دهد. این فصل مرجعی خواهد بود که برداشت فعلی از متداول‌ترین تقریب‌ها (و تقریب‌های غیرمتداول) را خلاصه می‌کند.

بخش دوم این کتاب به روش‌های عملی اختصاص داده می‌شود. فصل ۶ با تنظیم چارچوب کلی شروع می‌شود و موضوعات تکنیکی اصلی را که در یک محاسبه‌ی واقعی به وجود می‌آید، مورد بحث قرار می‌دهد: انتخاب یک مجموعه پایه برای نمایش اوربیتال‌های الکترونی و انتخاب بین روش‌های شبه‌پتانسیلی و تمام الکترونی. سپس چند مفهوم پایه فیزیک حالت جامد مانند سلول واحد، نظریه‌ی بلاخ، منطقه‌ی بریلوئن و این‌که چگونه سیستم‌های نامتناوب می‌توانند در محاسبات سلول متناوب مورد بحث قرار گیرند را مرور می‌کند. به علت نقش عمده‌ای که روش شبه پتانسیل در دو دهه‌ی گذشته ایفاء کرده است، فصل ۷ به تعمیم تئوری شبه‌پتانسیل با جزئیات بیشتر اختصاص داده شده است و موضوعات بسیاری را بحث می‌کند که عبارتند از: انتخاب آرایش اتمی، حالت‌های تجسمی و همبستگی‌های غیرخطی هسته. در پایان این بخش، یک مجموعه از راهنمایی‌ها درباره‌ی نحوه‌ی ساخت شبه‌پتانسیل‌ها وجود دارد. فصل ۸ به مجموعه‌های پایه مربوط می‌شود. بعد از تعیین چارچوب کلی

برای سیستم‌های بلورین و مولکولی، فصل ۸ به تفصیل مجموعه‌های پایه اتم مرکز و موج تخت، به ویژه گوسین را توضیح می‌دهد. شیوه‌های دیگر نیز بیان می‌شوند و بخش‌هایی به طرح‌های افزایشی مانند مجموعه‌های پایه MTO و APW به همراه مدل خطی شده‌ی آنها اختصاص داده می‌شود. فصل ۹ با جزئیات کم و بیش، روش‌های ساختار الکترونی متفاوت را، از شیوه‌ی KKR تا روش‌های تمام الکترونی بر پایه‌ی کره‌های تقویت شده و شیوه‌ی موج سطح شبه‌پتانسیلی که به طور کلی به کار برده شده‌اند، مرور می‌کند. سپس فصل ۹ به روش‌هایی بر مبنای مجموعه‌های پایه‌ی اتم مرکز می‌پردازد، به ویژه جنبه‌های تکنیکی مربوط به استفاده از مجموعه‌های پایه‌ی گوسین را بررسی می‌کند. فصل ۱۰، مجموعه چارچوب ارائه شده در فصل‌های قبل را به کار می‌برد تا شیوه‌های ساده شده را برای مسئله‌ی الکترونی، مانند طرح‌های اتصال فشرده که معمولاً در فیزیک حالت جامد به کار برده شده‌اند، را بررسی کند. یک رابطه بین این دو فضای موازی برقرار می‌شود. شیوه‌های ساده‌تر مانند پتانسیل‌های مرتبه‌ی پیوند و میدان‌های نیروی تجربی نیز بررسی می‌شوند، روش‌های پیوندی MM - QM توضیح داده می‌شوند و یک بخش پایانی به ساده‌سازی تابع‌های چگالی اوربیتال آزاد اختصاص داده می‌شود. فصل ۱۱ به موضوعات قطری‌سازی و خودسازگاری مربوط می‌شود و فصل‌هایی به روش لاگرانژی تعمیمی کار - پارینلو برای شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی ابتدا به ساکن اختصاص داده می‌شود.

من قصد داشتم، چند موضوع دیگر، مانند روش‌های مونت کارلو، تئوری اختلال تابعی چگالی، القاء الکترونی و تأثیرات هسته‌ای کوانتومی - را در این کتاب بگنجانم تا کامل شود. متأسفانه این موضوعات در خارج از کتاب ماندند اما خواننده یقیناً هیچ مشکلی در تشخیص متون جایی مناسب نخواهد داشت.

بیشترین مطالبی که در این کتاب آورده شده است، را در طی سال‌ها از طریق خواندن و گوش کردن به عاملان اصلی یاد گرفتم. من در صفحات متعدد از همه‌ی آن‌ها نام برده‌ام اما امکان دارد که فراموش کرده باشم نام کسی را ذکر کنم. به هر حال، می‌خواهم از افرادی که به من در بخش‌هایی از دست‌نویس کمک کردند، تشکر کنم. اولین نفر، دوست چندین ساله‌ام Andres Soul است که صبورانه فصل اول دست‌نویس را خواند و به من کمک کرد. دومین فرد Sasha Lozovoi است که فصل ۶ و ۷ را بررسی کرد و برای من اطلاعات مفیدی گردآوری کرد. شخص بعدی، دوست خوب من Nikitas Gidopoulos است. ما با هم یک فصل درباره‌ی DFT را در یک کتاب راهنمایی اخیر نوشتیم که پایه‌ی فصل ۴ و ۵ را تشکیل داد. مایک فینیس منتقدانه، بخش روش‌های اتصال فشرده را خواند و تونی پاکسون این زحمت مرا متحمل شد که بیشتر اوقات تلاش می‌کرد تا به نحوه‌ی تشکیل اوربیتال‌های مافین - تین پی ببرد. همچنین از باب جونز و دیوید واندربلث تشکر می‌کنم که به طور داوطلبانه تصاویری را برای انتشارات تهیه کردند. آخر از همه، اما نه کم‌اهمیت‌ترین فرد، می‌خواهم از سه استادم Erio Tosatti، مایکل پارینلو و روث لیندن بل تشکر کنم. به دلیل راهنمایی و دوستی من مرهون این سه نفر هستم.

همچنین می‌خواهم از افرادی نام ببرم که با تبادل تجربیاتشان با من درباره‌ی موضوعات مختلف، به طور غیرمستقیم در این کتاب مشارکت کردند. بدون هیچ ترتیب خاصی، این‌ها افرادی هستند که من اولین بار در SISSA ملاقات کردم که عبارتند از: Mario Tosi, Stefano de Gironcoli, Furio Ercolessi, Guido Chiarotti, سپس Giulilia Galli, Pedro, Andrew, Jurg Hutter, Francois Gygi, Peter Blochl, Wanda Andreoni, Franco Buda, Serena, Mike, Mark Tuckerman, Dominic Marx, Urusla Rothlisberger, Michiel Sprik, Fisher, Jean - Klein و Kari Laasonen کسانی بودند که من در سال‌هایی که در IBM زوربخ بودم با آن‌ها ملاقات کردم. - Pierre Hansen, Enrico Smargiassi, Hung Xu و کارلو پارینلو چند نفر از همکارانم در لیون بودند و افراد نام‌برده‌ی زیر را در طی سال‌ها در مکان‌ها و در زمان‌های مختلف ملاقات کردم: David Ceperley, Charusita Chakravarty, Sandro, Pietro Ballone, Daniel Laria, Rob Coalson, Michael Methfessel, David Vanderbilt, Sandro, Barbara, Ezequiel Leiva, Sergio Koval, Ricardo Migoni, Ruben Weht, Dario Estrin, Scandolo, Pablo, Saverio Moroni, Carlo Cavazzoni, Stuart Murdock, Mariana Weissman, Montanari

Tchavdar, Hardy Gross, Portal - Daniel Sanchez, Emilio Artacho, Jose Solar, Ordejon Raul, Cristian Sanchez, Graeme Ackland, Mike Gillan, Detlef Hohl, Ron Cohen, Todorov, Andy Gorling, Paolo Giannozzi, Peijun Hu, Tristan Youngs, Mario Del Popolo, Cachau Jose, Gleb Gribakin, Jorge Sofo, Alfredo Caro, Richard Martin, Paul Madden, Stewart Clark, Simone Seleni, Carlos Pinilla و دانشجویان Abdallah Qteish, Renata Wentzcovitch, Luis Martins و Ivan Scivetti که مجبور شدند غیبت مرا در مراحل پایانی نگارش این کتاب تحمل کنند (یا لذت ببرند؟). تشکرات ویژه از اولین دانشجوی دکترای من، Giuseppe Colizzi که مرا وادار کرد تا تئوری شبه‌پتانسیل را به طور صحیح مطالعه کنم و تصاویری را که در فصل مربوطه نشان داده می‌شوند را در اختیار من قرار داد. بالاخره، من هرگز نمی‌توانم به اندازه‌ی کافی از کلاریسا و دخترانم آنا و إلنا برای شکیبایی و تشویق آنها سپاس‌گزار باشم. حالا زمانی است که همه‌ی این تعطیلات آخر هفته‌ی خسته‌کننده را، که خانواده‌ام مرا در حال کار کردن بر روی این کتاب تماشا می‌کردند، جبران کنم.

www.ketab.ir

فهرست مطالب

۱.....	فصل ۱: مسئله‌ی ساختار ماده
۳.....	۱,۱ تقریب بیدرو
۷.....	۱,۲ تقریب هسته کلاسیک
۱۱.....	فصل ۲: مسئله الکترونی
۱۲.....	۲,۱ استتار: تحلیل گوی - چپمن و دی - هوکل
۱۴.....	۲,۲ تابع همبستگی جفتی
۱۶.....	۲,۳ نظریه‌ی بس - ذره‌ای سیستم‌های الکترونی
۱۷.....	۲,۳,۱ بررسی مجدد تابع همبستگی جفتی
۱۹.....	۲,۳,۲ تبادلی و همبستگی
۲۳.....	فصل ۳: نظریه‌ی کوانتومی بس - ذره‌ای: روش‌های شیمیایی
۲۵.....	۳,۱ تقریب هارتزی - فوک
۳۰.....	۳,۲ روش‌های پسا هارتزی - فوک
۳۱.....	۳,۲,۱ برهمکنش پیکربندی
۳۳.....	۳,۲,۲ روش‌های چند پیکری: MCSCF و MRCI
۳۴.....	۳,۲,۳ روش‌های اختلالی
۳۴.....	ایده‌های کلی
۳۵.....	اختلال در نظریه‌ی بس - ذره‌ای کوانتومی
۳۵.....	نظریه‌ی مولر - پلست
۳۸.....	روش‌های اختلالی جمع مجدد: خوشه‌های جفت شده
۳۹.....	۳,۲,۴ روش‌های همبستگی ضمنی
۴۳.....	فصل ۴: نظریه‌ی تابعی چگالی
۴۳.....	۴,۱ نظریه‌ی توماس - فرمی
۴۵.....	۴,۱,۱ مشتق‌گیری از تابعی
۴۶.....	۴,۱,۲ معادله‌ی توماس - فرمی - دیراک
۴۷.....	۴,۲ نظریه‌ی تابعی چگالی مدرن
۴۷.....	۴,۲,۱ قضیه‌ی هوهنبرگ - کوهن
۴۸.....	۴,۲,۲ جستجوی مقید
۴۹.....	۴,۲,۳ حالت‌های پایه و برانگیخته در DFT
۴۹.....	۴,۲,۴ معادلات کوهن - شم
۵۳.....	۴,۲,۵ تعمیم به سامانه‌های اسپین - قطبیده
۵۴.....	۴,۳ همبستگی جنبشی: ارتباط بیدرو

۵۷	۴,۳,۱ حفره تبادلی - همبستگی
۵۸	۴,۴ برخی ملاحظات نظریه کوهن - شم
۶۳	فصل ۵: تبادلی و همبستگی در DFT: تقریب‌ها و عملکرد آن‌ها
۶۵	۵,۱ تقریب چگالی موضعی
۶۶	۵,۱,۱ تقریب چگالی موضعی اسپینی
۶۷	۵,۱,۲ عملکرد LDA و LSDA
۶۸	رویه‌ها در LDA- LSDA
۶۹	محدودیت‌های LDA- LSDA
۷۰	۵,۱,۳ بهبود LDA
۷۱	۵,۲ بسط‌های مبتنی بر شیب
۷۲	۵,۲,۱ تقریب شیب تعمیم یافته
۷۳	تابع Langreth-Mehl
۷۳	تابع BLYP
۷۴	تابع PBE و بازبینیها
۷۵	روند GGA
۷۶	۵,۲,۲ (meta-GGA)
۷۸	۵,۳ غیرموضعی بودن: تقریب چگالی وزن دار
۸۰	۵,۴ روش‌های ترکیبی HF-KS
۸۱	۵,۵ تبادلی دقیق: روش پتانسیل مؤثر بهینه شده
۸۴	۵,۵,۱ تقریب Krieger-Li-Iafrate
۸۵	۵,۵,۲ خواص تبادلی دقیق در رویکرد پتانسیل مؤثر بهینه
۸۶	۵,۶ توابع همبستگی وابسته به اوربیتال
۸۷	۵,۶,۱ تابع کوله - سالواتی
۸۷	۵,۶,۲ نظریه اختلال بس - ذره‌ای: مرتبه دوم و جمع‌های دوباره
۹۰	برهم‌کنش‌های واندروالس (پراکندگی)
۹۱	۵,۸ روش تابع گرین: تقریب GW
۹۳	۵,۹ همبستگی‌های قوی: LDA+U و LDA+DMFT
۹۴	۵,۱۰ خلاصه‌ای از توابع تبادلی - همبستگی
۱۰۱	فصل ۶: حل عملی مسئله الکترونی
۱۰۱	۶,۱ معادلات کوهن - شم و هارتری - فوک
۱۰۲	۶,۱,۱ برهم‌کنش الکترون - هسته
۱۰۲	روش‌های تمام - الکترونی
۱۰۳	روش‌های شبه پتانسیل
۱۰۴	۶,۱,۲ انواع مجموعه‌های پایه
۱۰۵	۶,۲ فازهای چگال: نظریه بلاخ و شرایط مرزی دوره ای
۱۰۵	نظریه بلاخ

۱۰۶	 ۶,۲,۱ منطقه بریلوتن: نوارها و گاف‌ها
۱۰۹	 ۶,۲,۲ نمونه برداری از منطقه بریلوتن
۱۱۱	 ۶,۲,۳ نمونه برداری سطح فرمی برای سیستم‌های فلزی
۱۱۳	 ۶,۲,۴ بازگشت
۱۱۴	 ۶,۲,۵ سیستم‌های غیر دوره‌ای: مولکول‌ها، سطوح و نقائص
۱۱۵	 ۶,۲,۶ سیستم‌های بی نظم: مایعات و جامدات در دمای متناهی
۱۱۹	 فصل ۷: شبه پتانسیل‌های اتمی
۱۲۰	 ۷,۱ نظریه‌ی شبه پتانسیل
۱۲۳	 ۷,۲ ساخت شبه پتانسیل‌ها
۱۲۴	 ۷,۲,۱ شبه پتانسیل‌های بار پایسته
۱۲۵	 شبه پتانسیل‌های ترولیه-مارتینز
۱۲۷	 شبه پتانسیل‌های RKKJ
۱۲۷	 ۷,۲,۲ تولید شبه پتانسیل
۱۲۸	 ۷,۲,۳ اصلاحات غیر خطی مغزه
۱۲۹	 ۷,۲,۴ اصلاحات نسبتی
۱۳۱	 ۷,۲,۵ انتخاب بیکربندی مرجع
۱۳۱	 ۷,۲,۶ شبه پتانسیل‌های بار پایسته تعمیم یافته
۱۳۳	 ۷,۲,۷ نمونه‌هایی از شبه پتانسیل‌های بار پایسته
۱۳۶	 ۷,۳ شبه پتانسیل‌های اتمی جداییدر
۱۳۸	 ۷,۳,۱ شبه پتانسیل جداییدر کلایمن - بیلاندر
۱۳۸	 ۷,۳,۲ حالت‌های گوست (شبح)
۱۳۹	 ۷,۳,۳ انواع جدایی پذیرهای تعمیم یافته
۱۴۰	 ۷,۴ شبه پتانسیل‌های فوق نرم
۱۴۴	 ۷,۵ برخی جنبه‌های کاربردی شبه پتانسیل‌ها
۱۴۹	 فصل ۸: توابع پایه
۱۵۱	 ۸,۱ سیستم‌های تناوبی
۱۵۲	 ۸,۲ امواج تخت
۱۵۳	 ۸,۲,۱ عناصر ماتریس PW
۱۵۴	 ۸,۲,۲ انرژی قطع PW
۱۵۶	 ۸,۲,۳ مزایا و معایب بسط موج تخت
۱۵۷	 ۸,۳ دیگر مجموعه‌های پایه شناور
۱۵۸	 ۸,۴ مجموعه‌های پایهی اتم - مرکز
۱۵۹	 ۸,۴,۱ اوربیتال‌های اتمی
۱۶۰	 ۸,۴,۲ مجموعه‌های پایه عددی
۱۶۰	 مجموعه پایه عام
۱۶۱	 ۸,۴,۳ توابع A و هیدروژنی
۱۶۲	 ۸,۴,۴ اوربیتال‌های نوع اسلیتر (STO)

۱۶۳	۸,۴,۵ اوربیتال‌های نوع گوسین (GTO).....
۱۶۴	۸,۴,۶ اندازه‌ی مجموعه پایه.....
۱۶۶	۸,۴,۷ گوسینهای قراردادی (CGTO).....
۱۶۷	۸,۴,۸ خطای برهم نهی مجموعه پایه (BSSE).....
۱۶۸	۸,۵ مجموعه پایه‌های مرکب.....
۱۶۸	۸,۶ مجموعه‌های پایه به‌ساخته.....
۱۷۰	۸,۶,۱ امواج تخت به‌ساخته.....
۱۷۱	۸,۶,۲ مجموعه‌های پایه اتم - مرکز به‌ساخته.....
۱۷۵	۸,۶,۳ روش‌های خطی.....
۱۸۱	فصل ۹: روش‌های ساختار الکترونی
۱۸۱	۹,۱ روشهای پراکندگی چندگانه: رویکرد KKR.....
۱۸۳	۹,۲ روش‌های تمام-الکترونی بر پایه‌ی بهبود توابع موج در کره‌های اتمی:.....
۱۸۵	۹,۲,۱ امواج تخت به‌ساخته APW, LAPW, PAW.....
۱۸۸	۹,۲,۲ اوربیتال‌های مافین-تین: LCMTO و LMTO.....
۱۹۱	۹,۳,۱ تابعی انرژی.....
۱۹۱	انرژی الکتروستاتیک موضعی.....
۱۹۴	جمع‌های والد:.....
۱۹۷	سایر جملات انرژی.....
۱۹۷	۹,۳,۲ پتانسیل کوهن - شم.....
۱۹۷	سهم الکتروستاتیک موضعی.....
۱۹۸	پتانسیل مرجع (صفر).....
۱۹۸	تبادلی - همبستگی.....
۱۹۹	شبه پتانسیل غیر موضعی.....
۲۰۰	۹,۳,۳ نیروهای تعمیم یافته در اوربیتالهای الکترونی.....
۲۰۳	۹,۳,۵ تانسور تنش.....
۲۰۴	۹,۳,۶ توابع پاسخ.....
۲۰۵	۹,۴ توابع پایه اتم - مرکز.....
۲۰۵	۹,۴,۱ انتگرال‌های همپوشانی.....
۲۰۵	۹,۴,۲ ماتریس چگالی، هامیلتونی و انرژی کل.....
۲۰۸	۹,۴,۳ انتگرال‌های تک - الکترونی.....
۲۰۹	۹,۴,۴ انتگرال‌های دو-الکترونی.....
۲۰۹	۹,۴,۵ جمله هارتری.....
۲۰۹	مجموعه پایه‌های کمکی.....
۲۱۰	بسط اتم - مرکز محور پتانسیل مؤثر.....
۲۱۰	۹,۴,۶ مقیاس گذاری و بسط چند قطبی برای جملات کولنی.....
۲۱۲	۹,۴,۷ نیروهای تعمیم یافته.....
۲۱۴	۹,۵ مجموعه پایه‌های گوسین.....

۲۱۴	۹.۵.۱ انتگرالهای همپوشانی
۲۱۵	۹.۵.۲ انتگرالهای جنبشی
۲۱۵	۹.۵.۳ برهمکنش الکترون - هسته
۲۱۶	۹.۵.۴ انتگرالهای دو الکترونی
۲۱۷	روشهای انتگرالگیری عددی
۲۱۸	۹.۵.۵ روابط بازگشتی ابرا - سیاکا
۲۱۹	۹.۵.۶ بسط چند قطبی
۲۲۳	فصل ۱۰: روشهای ساده شده برای مسئله الکترونی
۲۲۵	۱۰.۱ روشهای بستگی قوی
۲۲۵	۱۰.۱.۱ بستگی قوی تجربی
۲۲۸	۱۰.۱.۲ بستگی قوی ابتدا به ساکن
۲۲۹	عناصر ماتریس هامیلتونی
۲۳۱	تابع هریس
۲۳۲	بستگی قوی غیر خودسازگار ابتدا به ساکن
۲۳۳	۱۰.۱.۳ معرفی خودسازگاری
۲۳۵	۱۰.۲ روشهای نیمه تجربی در شیمی کوانتومی
۲۳۶	۱۰.۲.۱ حذف همپوشانی دیفرانسیلی
۲۳۸	۱۰.۲.۲ CNDO
۲۳۹	۱۰.۲.۳ INDO و MINDO
۲۴۰	۱۰.۲.۴ PM3 و MNDO, AM1
۲۴۲	۱۰.۳ ارتباط بین روشهای نیمه تجربی و بستگی قوی
۲۴۳	۱۰.۴ پتانسیلهای کلاسیکی بس-خره ای
۲۴۴	۱۰.۵ میدانهای نیروی کلاسیکی
۲۴۶	۱۰.۶ روشهای ترکیبی QM-MM
۲۴۹	۱۰.۷ رویکردهای تابعی چگالی فاقد اوربیتال
۲۵۷	فصل ۱۱: قطری سازی و خودسازگاری الکترونی
۲۵۷	۱۱.۱ قطری سازی
۲۶۱	۱۱.۲ خودسازگاری: مدل‌های مخلوط سازی
۲۶۳	۱۱.۳ کمینه سازی مستقیم تابعی انرژی الکترونی
۲۶۷	فصل ۱۲: دینامیک مولکولی ابتدا به ساکن (کار- پارینلو)
۲۶۷	۱۲.۱ دینامیک مولکولی تابعی چگالی
۲۶۹	۱۲.۲ لاگرانژی کار - پارینلو
۲۷۱	۱۲.۳ معادلات حرکت کار- پارینلو
۲۷۳	۱۲.۴ بهنجارش
۲۷۵	۱۲.۵ پیش شرطها
۲۷۵	۱۲.۶ کارآیی CPMD