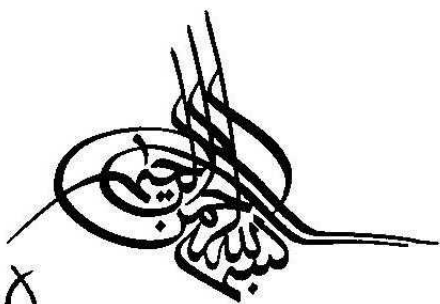




۲۰۳۵۰۷۵

شیمی کوانتومی

(جلد اول)

به انضمام پاسخ تشریحی مسائل

ایران. لوین

مترجم: سید اسماعیل هاشمی

سرشناسه : لوین، ایرا ان، ۱۹۲۷ - م.
Levine, Ira N

عنوان و نام پدیدآور : شیمی کوانتومی: به انضمام پاسخ تشریحی مسائل / ایرا ان، لوین؛ مترجم سیداسماعیل هاشمی.
مشخصات نشر: تهران : انتشارات علوم ایران، ۱۳۹۷ -

مشخصات ظاهری : ج.: مصور، جدول، نمودار.
شابک : دوره: 4-76-2750-964-978 : ج. 1-0-74-2750-964-978

وضعیت فهرست نویسی: فیبا

یادداشت: عنوان اصلی: [2014], 7th ed, Quantum chemistry

موضوع: شیمی کوانتوم -- راهنمای آموزشی (عالی)

موضوع: شیمی کوانتوم -- مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)

موضوع: شیمی کوانتوم -- مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)

شناسه افزوده: هاشمی، سیداسماعیل، ۱۳۶۵ -، مترجم

شناسه افزوده: د باتولا، خولیو. شیمی فیزیک.

رده بندی کنگره: ۱۳۹۷ ش ۹/۴۶۲ QD

رده بندی دیویی: ۵۴۱/۲۸

شماره کتابشناسی ملی: ۵۵۲۹۴۴۰



انتشارات علوم ایران

www.olomiran.net

انتشارات علوم ایران

تهران - تلفن ۰۹۱۲۵۳۶۷۶۲۱ و ۶۶۸۷۵۴۴۹

صندوق پستی: تهران ۳۵۳ - ۱۳۱۴۵

نام کتاب: شیمی کوانتومی (جلد اول) - به انضمام پاسخ تشریحی مسائل

مترجم: سید اسماعیل هاشمی

نویسنده: ایرا ان، لوین

شابک: ۰ - ۷۴ - ۲۷۵۰ - ۹۶۴ - ۹۷۸

ناشر: علوم ایران

شابک دوره: ۴ - ۷۶ - ۲۷۵۰ - ۹۶۴ - ۹۷۸

نوبت و سال چاپ: اول - ۱۳۹۸

قیمت: ۹۰۰۰۰ تومان

تیراژ: ۱۰۰ نسخه

مرکز پخش:

کتاب کوشا - میدان انقلاب، ابتدای کارگر جنوبی، کوچه رشتچی، بن بست

یکم، پلاک ۴ طبقه دوم واحد ۴ تلفن همراه: ۰۹۱۲۳۰۳۳۰۵۸

تلفن: ۶۶۹۴۱۱۶۷ و ۶۶۹۴۱۰۳۴ فکس: ۶۶۹۲۱۶۸۵

هرگونه کپی برداری و یا تکثیر و یا انتشار و یا شبیه سازی هر قسمتی از این کتاب به هر شکلی و در هر مکانی بدون اجازه ناشر، با توجه به قانون حمایت از مؤلفین و مصنفان و هنرمندان مصوب ۱۳۴۸، پیگرد قانونی دارد.

پیشگفتار نویسندگان

این کتاب برای فارغ التحصیلان و دوره‌های پیشرفته کارشناسی در شیمی کوانتومی است. این کتاب دانشجویان را با یک بررسی عمیق از شیمی کوانتومی آماده کرده و آنها را قادر به درک اصول اساسی می‌کند. پیش‌زمینه محدود بسیاری از دانشجویان شیمی مدنظر قرار گرفته و مباحث ضروری ریاضیات (همچون اعداد مختلط، معادلات دیفرانسیل، عملگرها و بردارها) مرور شده است. مشتق با تمام جزئیات به صورت مرحله به مرحله چنان ذکر شده که دانشجو در هر سطحی که باشد می‌تواند آن را به راحتی دنبال کرده و درک کند. مسائل مختلف قدرتمند (کمی و مفهومی) برای هر فصل ارائه شده است.

موارد بهبود یافته زیر در ویرایش جدید صورت گرفته است:

- به‌روز رسانی منعکس کردن آخرین تحقیقات شیمی کوانتومی و روش‌های شیمی محاسباتی شامل بسیاری از مراجع علمی جدید.
 - مسائل جدید به بیش‌تر فصول شامل مسائل محاسباتی اضافی در فصول ۱۵ و ۱۶ اضافه شده است.
 - توضیحات در نواحی که دانشجویان مشکل داشتند بازنگری شده است.
 - برنامه‌های کامپیوتری در حل المسائل و کتاب از BASIC به C++ تغییر کرده است.
 - کتاب با مراجع ذکر شده برای تحقیقات مدرن در زمینه مکانیک کوانتومی همچون فرموله کردن مجدد اصل عدم قطعیت توسط اوزاوا (Ozawa) و مشاهده اثرات تداخلی با مولکول‌های خیلی بزرگ جان دوباره گرفته است.
- مطالب جدید و گسترش یافته در ویرایش جدید شامل:
- کارهای تجربی و نظری جدید روی اصل عدم قطعیت (بخش ۱.۵)
 - روش‌های CM۵ و هیرشفلد - I برای بارهای اتمی (بخش ۷.۱۵)
 - همبستگی استاتیک و دینامیک (بخش ۱.۱۶)
 - بررسی جامع برون‌یابی برای حد مجموعه مبای کامل (CBS) (بخش‌های ۵.۱۵، ۱.۱۶ و ۴.۱۶)
 - استفاده از ماتریس چگالی کاهش یافته دو - الکترون (بخش ۲.۱۶)
 - روش DFT-D۳ (بخش ۵.۱۶)
 - تابعی همبستگی VV۱۰ برای پراکندگی (بخش ۶.۱۵)

- روش‌های $W1-F12$ و $W2-F12$ (بخش ۶.۱۶)
 - برهمکنش‌های پراکندگی (انباشته شدن) در DNA (بخش ۸.۱۶)
 - روش‌های $MP2/5$ ، $MP2/X$ ، $SCS(MI)-CCSD$ و $SCS(MI)-MP2$ (بخش ۸.۱۶)
 - یک مبحث گسترش یافته از محاسبات ثابت‌های پوششی و ثابت‌های جفت‌شدگی اسپین - اسپین شامل مقیاس خطی NMR (بخش ۹.۱۶)
 - روش‌های قطعه قطعه شدن (بخش ۱۰.۱۶)
 - روش‌های $PM6-D3H4$ و $PM7$ (بخش ۴.۱۷)
- منابع: نرم‌افزار مدل‌سازی مولکول Optional Spartan Student Edition دسترسی به یک بسته مدل‌سازی پیچیده مولکولی که ترکیبی از یک رابط گرافیکی آسان برای استفاده با یک مجموعه هدفمند از توابع محاسبات بوده را فراهم می‌کند.
- گسترش فوق‌العاده محاسبات شیمی کوانتومی در تمام زمینه‌های شیمی، آن را برای تمام دانشجویان شیمی برای درک روش‌های مدرن محاسبات ساختار الکترونی مطلوب ساخته است و این کتاب با این هدف ذهنی نوشته شده است.
- سعی کردم تا توضیحات روشن و کامل بدون حاشیه‌گویی در مورد نقاط دشوار و ظریف ارائه کنم. مشتقات با جزئیات کافی ارائه شده تا آنها به آسانی دنبال شده و هر جا که امکان‌پذیر بوده از متوسل شدن به عبارت خسته کننده «می‌توان نشان داد که» اجتناب کردم. هدف این است که دانشجویان به درک جامع از جنبه‌های فیزیکی و مفاهیم ریاضیاتی مکانیک کوانتومی و ساختار الکترونی مولکولی برسند.
- این کتاب برای دانشجویان در تمام شاخه‌های شیمی نه فقط شیمیدانان کوانتومی طراحی شده است. با این حال به گونه‌ای ارائه شده که کسانی که شیمی کوانتومی را ادامه می‌دهند پایه خوبی پیدا کرده و با تصورات غلطی مواجه نخواهند شد.
- یک مانع برای بسیاری از دانشجویان شیمی در یادگیری مکانیک کوانتومی، عدم آشنایی آنها با بسیاری از ریاضیات مورد نیاز است. در این کتاب بررسی جامع ریاضیات مورد نیاز گنجانده شده است. به جای این که تمام ریاضیات را در فصل مقدماتی و یا مجموعه‌ای از پیوست‌ها قرار دهم، ریاضیات را با شیمی و فیزیک یکپارچه کردم. کاربرد سریع ریاضیات برای حل مسئله مکانیک کوانتومی موجب خواهد شد تا ریاضیات مورد نیاز نسبت به مطالعه جداگانه آن با معنی‌تر شود. همچنین با این دیدگاه که بسیاری از دانشجویان شیمی پیش زمینه محدودی از فیزیک دارند، موضوعات در فیزیک را نیز مرور کردم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱۳	فصل ۱: معادله شرودینگر.....
۱۳	۱.۱ شیمی کوانتوم.....
۱۴	۱.۲ بنیان تاریخی مکانیک کوانتوم.....
۱۸	۱.۳ اصل عدم قطعیت.....
۱۹	۱.۴ معادله شرودینگر وابسته به زمان.....
۲۴	۱.۵ معادله شرودینگر مستقل از زمان.....
۲۶	۱.۶ احتمال.....
۲۸	۱.۷ اعداد مختلط.....
۳۰	۱.۸ واحدها.....
۳۰	۱.۹ حساب دیفرانسیل و انتگرال.....
۳۱	خلاصه.....
۳۱	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل.....
۳۹	فصل ۲: ذره در جعبه.....
۳۹	۲.۱ ذره در جعبه.....
۴۰	۲.۲ ذره در جعبه یک بعدی.....
۴۶	۲.۳ ذره آزاد در یک بعد.....
۴۷	۲.۴ ذره در چاه مستطیلی.....
۴۹	۲.۵ تونل زنی.....

۵۰	خلاصه
۵۰	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۵۹	فصل ۳: عملگرها
۵۹	۱.۳ عملگرها
۶۳	۲.۳ ویژه توابع و ویژه مقادیر
۶۵	۳.۳ عملگرها و مکانیک کوانتوم
۷۰	۴.۳ معادله شرودینگر تعداد زیاد ذره سه بعدی
۷۲	۵.۳ ذره در جعبه سه بعدی
۷۶	۶.۳ چند حالتی
۷۷	۷.۳ مقادیر متوسط
۸۰	۸.۳ الزامات برای یک تابع موج قابل قبول
۸۱	خلاصه
۸۲	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۹۷	فصل ۴: نوسانگر هماهنگ
۹۷	۱.۴ حل سری توانی معادلات دیفرانسیل
۱۰۰	۲.۴ نوسانگر هماهنگ یک بعدی
۱۰۰	عملیات مکانیک کلاسیک
۱۰۱	عملیات مکانیک کوانتوم
۱۰۶	توابع زوج و فرد
۱۰۷	توابع موج نوسانگر هماهنگ
۱۱۰	۳.۴ ارتعاش مولکول دو اتمی
۱۱۳	۴.۴ حل عددی معادله شرودینگر مستقل از زمان یک بعدی
۱۱۳	روش Numerov
۱۱۵	متغیرهای بدون بعد
۱۱۸	انتخاب $x_{r,0}$, $x_{r,max}$ و s_r
۱۱۸	برنامه کامپیوتری برای روش Numerov
۱۲۰	استفاده از نرم افزار صفحه گسترده برای حل معادله شرودینگر یک بعدی
۱۲۴	استفاده از Mathcad برای حل معادله شرودینگر یک بعدی
۱۲۴	خلاصه مراحل روش Numerov
۱۲۴	خلاصه
۱۲۵	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۱۵۱	فصل ۵: اندازه حرکت زاویه ای
۱۵۱	۱.۵ تعیین هم زمان چند خصوصیات

۱۵۵	۲.۵ بردارها.....
۱۵۹	بردارها در فضای n بعدی.....
۱۶۰	۳.۵ اندازه حرکت زاویه‌ای یک سیستم یک ذره.....
۱۶۱	مکانیک کلاسیک اندازه حرکت زاویه‌ای یک ذره.....
۱۶۲	عملگرهای اندازه حرکت زاویه‌ای اوربیتالی تک ذره.....
۱۶۷	ویژه توابع و ویژه مقادیر اندازه حرکت زاویه‌ای اوربیتالی یک ذره.....
۱۷۴	۴.۵ روش عملگر - پلکانی برای اندازه حرکت زاویه‌ای.....
۱۷۹	خلاصه.....
۱۸۰	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل.....
۱۹۳	فصل ۶: اتم هیدروژن.....
۱۹۳	۱.۶ موضوع نیروی مرکزی یک ذره.....
۱۹۶	۲.۶ ذرات بدون برهمکنش و تفکیک متغیرها.....
۱۹۷	۳.۶ ساده کردن موضوع دو ذره به دو موضوع تک ذره.....
۲۰۰	۴.۶ چرخنده صلب دو ذره.....
۲۰۴	۵.۶ اتم هیدروژن.....
۲۰۷	حل معادله شعاعی.....
۲۱۱	ترازهای انرژی.....
۲۱۱	چند حالتی.....
۲۱۲	۶.۶ توابع موج اتم هیدروژن حالت مقید.....
۲۱۲	فاکتور شعاعی.....
۲۱۳	انرژی و تابع موج حالت پایه.....
۲۱۶	توابع موج برای $n = 2$
۲۱۷	تابع توزیع شعاعی.....
۲۱۹	توابع هیدروژن مانند حقیقی.....
۲۲۲	۷.۶ اوربیتال‌های هیدروژن مانند.....
۲۲۵	۸.۶ اثر زیمان.....
۲۲۷	۹.۶ حل عددی معادله شرودینگر شعاعی.....
۲۲۹	خلاصه.....
۲۳۰	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل.....
۲۴۹	فصل ۷: قضایای مکانیک کوانتوم.....
۲۴۹	۱.۷ علامت‌گذاری.....

۲۵۰	۲.۷ عملگرهای هرمیتی.....
۲۵۰	تعریف عملگرهای هرمیتی.....
۲۵۱	مثال‌هایی از عملگرهای هرمیتی.....
۲۵۲	قضایا در مورد عملگرهای هرمیتی.....
۲۵۶	۳.۷ بسط بر حسب ویژه توابع.....
۲۵۶	بسط تابع با استفاده از توابع موج ذره در جعبه.....
۲۵۸	بسط تابع بر حسب ویژه توابع.....
۲۶۱	۴.۷ ویژه توابع عملگرهای جابه‌جاذیر.....
۲۶۵	۵.۷ پارتیه.....
۲۶۷	۶.۷ اندازه‌گیری و برهم‌نهی حالت‌ها.....
۲۷۳	۷.۷ ویژه توابع مکان.....
۲۷۶	۸.۷ اصل موضوع‌های مکانیک کوانتوم.....
۲۸۰	۹.۷ اندازه‌گیری و تفسیر مکانیک کوانتوم.....
۲۸۴	۱۰.۷ ماتریس‌ها.....
۲۸۶	ماتریس‌ها و مکانیک کوانتوم.....
۲۸۷	خلاصه.....
۲۸۸	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل.....
۳۱۵	فصل ۸: روش تغییر.....
۳۱۵	۱.۸ قضیه تغییر.....
۳۱۵	قضیه تغییر.....
۳۱۹	۲.۸ تعمیم روش تغییر.....
۳۲۰	۳.۸ دترمینان‌ها.....
۳۲۴	۴.۸ معادلات خطی هم‌زمان.....
۳۲۷	۵.۸ توابع تغییر خطی.....
۳۳۴	۶.۸ ماتریس‌ها، ویژه مقادیر، ویژه بردارها.....
۳۴۳	خلاصه.....
۳۴۳	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل.....
۳۸۹	فصل ۹: نظریه اختلال.....
۳۸۹	۱.۹ نظریه اختلال.....
۳۹۰	۲.۹ نظریه اختلال بدون چند حالتی.....
۳۹۰	نظریه اختلال بدون چند حالتی.....
۳۹۲	تصحیح انرژی مرتبه اول.....

۳۹۳	 تصحیح تابع موج مرتبه اول
۳۹۴	 تصحیح انرژی مرتبه دوم
۳۹۶	 بحث
۳۹۶	 مقایسه روش‌های تغییر و اختلال
۳۹۷	 روش تغییر - اختلال
۳۹۷	 ۳.۹ رفتار اختلال حالت پایه اتم هلیوم
۴۰۱	 ۴.۹ عملیات تغییر حالت پایه هلیوم
۴۰۴	 ۵.۹ نظریه اختلال برای تراز انرژی چند حالتی
۴۰۹	 ۶.۹ ساده کردن معادله عام
۴۱۰	 ۷.۹ عملیات اختلال اولین حالت برانگیخته هلیوم
۴۱۸	 ۸.۹ نظریه اختلال وابسته به زمان
۴۲۱	 ۹.۹ برهمکنش ماده و تابش
۴۲۳	 خلاصه
۴۲۴	 مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۴۳۹	 فصل ۱۰: اسپین الکترون و قضیه آمار - اسپینی
۴۳۹	 ۱.۱۰ اسپین الکترون
۴۴۲	 ۲.۱۰ اسپین و اتم هیدروژن
۴۴۳	 ۳.۱۰ قضیه آمار - اسپینی
۴۴۶	 ۴.۱۰ اتم هلیوم
۴۴۸	 ۵.۱۰ اصل طرد پاولی
۴۵۲	 ۶.۱۰ دترمینان‌های اسلیر
۴۵۳	 ۷.۱۰ عملیات اختلال حالت پایه لیتیم
۴۵۴	 ۸.۱۰ عملیات تغییر حالت پایه لیتیم
۴۵۵	 ۹.۱۰ ممان مغناطیسی اسپین
۴۵۶	 طیف‌سنجی NMR
۴۵۹	 ۱۰.۱۰ عملگرهای پلکانی برای اسپین الکترون
۴۶۱	 خلاصه
۴۶۱	 مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۴۷۷	 فصل ۱۱: اتم‌های چند الکترونی
۴۷۷	 ۱.۱۱ روش میدان خودسازگار هارتری - فاک
۴۷۷	 روش SCF هارتری
۴۸۰	 روش SCF هارتری - فاک

۴۸۳	۲.۱۱ اوربیتال‌ها و جدول تناوبی
۴۸۶	۳.۱۱ همبستگی الکترونی
۴۸۹	۴.۱۱ جمع کردن اندازه حرکت زاویه‌ای
۴۹۴	۵.۱۱ اندازه حرکت زاویه‌ای در اتم‌های چند الکترونی
۴۹۴	اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی و اوربیتالی الکترونی کل
۴۹۶	جمله طیفی اتمی
۴۹۷	بدست آوردن جمله‌های طیفی اتمی
۴۹۹	قاعده هوند
۵۰۱	ویژه مقادیر توابع اسپین دو الکترونی
۵۰۳	توابع موج اتمی
۵۰۴	پارته حالت‌های اتمی
۵۰۴	اندازه حرکت زاویه‌ای الکترونی کل و ترازهای اتمی
۵۰۶	جمله‌های طیفی و ترازهای هیدروژن و هلیم
۵۰۶	جدول ترازهای انرژی اتمی
۵۰۷	۶.۱۱ برهم‌کنش اسپین - مدار
۵۰۹	۷.۱۱ هامیلتونی اتمی
۵۱۲	۸.۱۱ قواعد کوندون - اسلیتر
۵۱۵	خلاصه
۵۱۶	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۵۳۳	پیوست: جداول
۵۳۳	جدول ۱- ثابت‌های فیزیکی
۵۳۴	جدول ۲- ضرایب تبدیل
۵۳۵	جدول ۳- جرم‌های نسبی ایزوتوبی
۵۳۵	جدول ۴- حروف یونانی
۵۳۶	جدول ۵- انتگرال‌ها