



سین کوانتومی نسبیتی:
نظریه بنیادی علوم مولکولی

مترجم: دکتر آرش تبرانداز

۱۳۹۶

مؤسسه آموزشی تألیفی ارشدان

سرشناسه	:	رایر، مارکوس Reiher, Markus
عنوان و نام پدیدآور	:	شیمی کوانتومی نسبیتی: نظریه بنیادی علوم مولکولی / نویسنده [مارکوس رایر، الگزاندرو ولف]؛ مترجم آرشدان
مشخصات نشر	:	تهران: موسسه آموزشی تألیفی ارشدان، ۱۳۹۶.
مشخصات ظاهری	:	۸۴۰ص.
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۸۹۹۹-۶۴-۵
وضعیت فهرست نویسی	:	فیبا
یادداشت	:	عنوان اصلی: Relativistic quantum chemistry: the fundamental theory of molecular science, 2nd. ed, 2015.
یادداشت	:	کتابنامه.
موضوع	:	شیمی کوانتوم Quantum chemistry
موضوع	:	نظریه کوانتومی نسبیتی Relativistic quantum theory
شناسه افزوده	:	ولف، الگزاندرو، ۱۹۰۷ - م. Wolf, Alexander
شناسه افزوده	:	تیرانداز، رش، ۱۳۶۳ - ، مترجم
رده بندی کنگره	:	۲. QD۱۳۹۶ش۹/۲
رده بندی دیویی	:	۵۰۰/۲۸
شماره کتابشناسی ملی	:	۰۹۲۹۰

ارشدان

مؤسسه آموزشی تألیف ارشدان

شیمی کوانتومی نسبیتی: نظریه بنیادی علوم مولکولی

آرشدان

آموزشی تألیفی ارشدان

اول

اول ۱۳۹۶

www.irantypist.com

www.irantypist.com

۹۷۸-۶۰۰-۸۹۹۹-۶۴-۵

۱۰۰۰

www.arshadan.com

www.arshadan.net

۰۲۱۴۷۶۲۵۵

۳۰۰۰ تومان

■ نام کتاب:

■ ترجمه:

■ ناشر:

■ ویرایش:

■ نوبت چاپ:

■ حروفچینی و صفحه آرایی:

■ طراح و گرافیک:

■ شابک:

■ شمارگان:

■ مرکز خرید آنلاین:

■ مرکز پخش و توزیع:

■ قیمت:

فهرست

عنوان

صفحه

پیشگفتار ۱۷

پیشگفتار مترجم ۲۱

بخش ۱: فصول ۱-۲-۳-۴

فصل اول: مقدمه ۲۳

۱-۱ فلسفه این نوشتار ۲۳

۱-۲ راهنمایی مختصر برای خواننده ۲۷

۳-۱ قراردادهای نوشتاری ساختار ایجاد ۲۹

فصل دوم: مبناهای مکانیک کلاسیک و الکترودینامیک ۳۳

۱-۲ مقدمات مکانیک نیوتنی ۳۴

۱-۱-۲ قوانین حرکت نیوتن ۳۴

۲-۱-۲ تبدیلات گالیله ۳۸

۳-۱-۲ قوانین پایستگی بنیادی برای تک ذره در مختصات به عبارات ۴۶

۴-۱-۲ مجموعه چندذره‌ای ۴۸

۲-۲ صورت‌بندی لاگرانژی ۴۹

۱-۲-۲ مختصات عمومی و قیود آن ۴۹

۲-۲-۲ قانون هامیلتونی و معادلات اولر- لاگرانژ ۵۱

۳-۲-۲ تقارن‌ها و قوانین پایستگی ۵۶

۳-۲ مکانیک هامیلتونی ۶۰

۱-۳-۲ قانون هامیلتونی و معادلات کانونی ۶۰

۲-۳-۲ براکت‌های پواسون و قوانین پایستگی ۶۲

۶۴	 ۳-۳-۲ تبدیلات کانونی
۶۶	 ۴-۲ مقدمات الکترو دینامیک
۶۶	 ۱-۴-۲ معادلات ماکسول
۶۹	 ۲-۴-۲ انرژی و تکانه میدان الکترومغناطیس
۷۳	 ۳-۴-۲ امواج الکترومغناطیس تخت در خلا
۷۵	 ۴-۴-۲ پتانسیل ها و تقارن پیمانه ای
۸۰	 ۵-۴-۲ بررسی ایستایی الکترومغناطیسی
۸۳	 ۶-۴-۲ ذره کلاسیک تحت تاثیر میدان الکترومغناطیس
۸۶	 ۷-۴-۲ پراش دو ذره باردار متحرک

فصل سوم: مفاهیم نسبیت خاص ۸۷

۸۷	 ۱-۳ قانون نسبیت اینشتین، تبدیلات لورنتز
۸۸	 ۱-۱-۳ ضعف های مکانیک کلاسیک
۹۰	 ۲-۱-۳ قانون نسبیت اینشتین
۹۳	 ۳-۱-۳ تبدیلات لورنتز
۹۸	 ۴-۱-۳ کمیت های نرده ای، بردارها و تانسورها در فضای مینکوفسکی
۱۰۵	 ۲-۳ اثرات سینماتیکی در نسبیت خاص
۱۰۵	 ۱-۲-۳ شکل صریح تبدیلات لورنتز ویژه
۱۱۲	 ۲-۲-۳ انقباض طول و اتساع زمان و زمان به جا
۱۱۶	 ۳-۲-۳ افزایش سرعت ها
۱۱۹	 ۳-۳ دینامیک نسبیتی
۱۲۰	 ۱-۳-۳ دینامیک نسبیتی مقدماتی
۱۲۴	 ۲-۳-۳ معادلات حرکت
۱۲۹	 ۳-۳-۳ صورت بندی لاگرانژی و هامیلتونی
۱۳۴	 ۴-۳ الکترو دینامیک هموردا
۱۳۵	 ۱-۴-۳ عناصر بنیادین
۱۴۰	 ۲-۴-۳ تبدیلات میدان های الکترومغناطیس

۱۴۲	۳-۴-۳ صورتبندی لاگرانژی و معادلات حرکت
۱۴۸	۵-۳ برهمکنش دو ذره باردار متحرک
۱۴۹	۱-۵-۳ پتانسیل‌های نرده ای و برداری برای ذره در حال سکون
۱۵۱	۲-۵-۳ اثرات تاخیری ناشی از تبدیلات لورنتزی
۱۵۲	۳-۵-۳ عبارتهای عمومی برای انرژی برهمکنش
۱۵۳	۴-۵-۳ انرژی برهمکنش در هر لحظه از زمان
۱۶۱	۵-۵-۳ انرژی برهمکنش متقارن داروین
۱۶۵	فصل چهارم: مبانی مکانیک کوانتوم
۱۶۷	۱-۴ حالت کوانتوم مدنی
۱۶۷	۱-۱-۴ نمایش برکت
۱۶۸	۲-۱-۴ بسط در مجموعه پایه کارا
۱۶۹	۳-۱-۴ تفسیر بورن
۱۷۰	۴-۱-۴ بردارهای حالت در فضای هیلت
۱۷۱	۲-۴ معادله حرکت
۱۷۲	۱-۲-۴ قیدهای معادلات بنیادین مکانیک کوانتوم
۱۷۲	۲-۲-۴ تحول زمانی و ویژگی احتمالاتی
۱۷۳	۳-۲-۴ حالت‌های مانا
۱۷۴	۳-۴ مشاهده‌پذیرها
۱۷۵	۱-۳-۴ مقادیر چشمداشتی
۱۷۶	۲-۳-۴ عملگرهای هرمیتی
۱۷۷	۳-۳-۴ تبدیلات یکانی
۱۷۸	۴-۳-۴ معادلات حرکت هایزنبرگ
۱۸۱	۵-۳-۴ هامیلتونی در نظریه کوانتوم غیرنسبیتی
۱۸۴	۶-۳-۴ روابط جابه‌جاگری میان عملگرهای مکان و تکانه
۱۸۵	۷-۳-۴ عملگر سرعت شرودینگری
۱۸۶	۸-۳-۴ نظریه‌های ارنفست و هلمن-فاینمن

۱۸۸.....	۹-۳-۴ معادله پیوستگی و دانسیته جریان
۱۹۱.....	۴-۴ تکانه زاویه‌ای و چرخش
۱۹۲.....	۱-۴-۴ تکانه زاویه‌ای اوربیتالی
۲۰۰.....	۲-۴-۴ جفت شدن تکانه‌های زاویه‌ای
۲۰۱.....	۳-۴-۴ اسپین
۲۰۵.....	۴-۴-۴ جفت شدن تکانه زاویه‌ای اسپینی و اوربیتالی
۲۱۳.....	۵-۴ قانون پادتقارنی پائولی

بخش ۲: فصول ۵-۶

۲۱۵.....	فصل پنجم. نظریه نسبیتی الکترون
۲۱۵.....	۱-۵ اصل تطابق و معادله کلین-گوردون
۲۱۶.....	۱-۱-۵ عبارت کلاسیک انرژی و عبارات اولیه از اصل تطابق
۲۱۸.....	۲-۱-۵ حل معادله کلین-گوردون
۲۱۹.....	۳-۱-۵ توزیع دانسیته کلین-گوردون
۲۲۱.....	۲-۵ استخراج معادله دیراک برای الکترون متحرک
۲۲۲.....	۱-۲-۵ ارتباط با معادله کلین-گوردون
۲۲۳.....	۲-۲-۵ روابط صریح برای متغیرهای معادله دیراک
۲۲۵.....	۳-۲-۵ معادله پیوستگی و تعریف ۴-جریان
۲۲۷.....	۴-۲-۵ هموردایی لورنتزی معادله میدان-تهدی دیراک
۲۳۱.....	۳-۵ حل معادله دیراک الکترون آزاد
۲۳۱.....	۱-۳-۵ ذره در حالت سکون
۲۳۳.....	۲-۳-۵ ذره متحرک آزاد
۲۴۰.....	۳-۳-۵ عملگر سرعت دیراک
۲۴۲.....	۴-۵ معادله دیراک در حضور پتانسیل‌های الکترومغناطیس خارجی
۲۴۴.....	۱-۴-۵ تکانه سینماتیک
۲۴۵.....	۲-۴-۵ عملگر انرژی برهمکنش الکترومغناطیس
۲۴۶.....	۳-۴-۵ معادله پائولی و حد غیرنسبیتی

۵-۵ تفسیر حالت‌های با انرژی منفی: نظریه حفره دیراک ۲۴۹

فصل ۶: اتم هیدروژن دیراکی ۲۵۵

۶-۱ جدا کردن حرکت الکترونی در میدان مرکزگرای هسته‌ای ۲۵۵

۶-۲ اتم هیدروژن شرودینگری ۲۶۰

۶-۳ تکانه زاویه‌ای کل ۲۶۳

۶-۴ جدا کردن مختصات زاویه‌ای در هامیلتونی دیراک ۲۶۴

۶-۴-۱ گشتادن اسپین-اوربیت ۲۶۴

۶-۴-۲ سازنده کوانتومی آنالوگ نسبیتی ۲۶۶

۶-۴-۳ تعمیم چهاربرگی ۲۶۷

۶-۴-۴ تابع حدس برای اسپینور ۲۶۹

۶-۵ معادله دیراک شعاعی اتم‌های هیدروژن مانند ۲۷۰

۶-۵-۱ توابع شعاعی و اوربیتال‌ها ۲۷۱

۶-۵-۲ معادلات ویژه مقادیر شعاعی ۲۷۲

۶-۵-۳ حل معادلات شعاعی جفت شده دیراک ۲۷۴

۶-۵-۴ ویژه مقادیر انرژی، کوانتتش و شمارنده کوانتومی اصلی ۲۸۱

۶-۵-۵ تابع موج حالت پایه چهارمولفه‌ای ۲۸۴

۶-۶ حد غیرنسبیتی ۲۸۵

۶-۷ انتخاب مرجع انرژی و تطابق مقیاس‌های انرژی ۲۸۸

۶-۸ توابع موج و ویژه مقادیر انرژی در پتانسیل کولمبی ۲۸۹

۶-۸-۱ ویژگی‌های توابع شعاعی دیراک ۲۸۹

۶-۸-۲ طیف اتم‌های هیدروژن مانند دیراکی با پتانسیل‌های کولمبی ۲۹۲

۶-۸-۳ مقادیر چشمداشتی و دانسیته شعاعی ۲۹۵

۶-۹ تأثیرات اندازه محدود هسته ۲۹۸

۶-۹-۱ پیامدهای توزیع بار هسته‌ای ۳۰۳

۶-۹-۲ اسپینورها تحت پتانسیل‌های نرده‌ای خارجی با عمق مختلف ۳۰۵

۶-۱۰ نمایش فضای تکانه ۳۰۷

بخش ۳: فصول ۷-۸-۹-۱۰

فصل هفتم: الکترو دینامیک کوانتومی	۳۰۹
۱-۷ نوشتار و کمیت‌های بنیادی	۳۰۹
۱-۱-۷ لاگرانژی برهمکنش‌های الکترومغناطیسی	۳۱۰
۲-۱-۷ تقارن پیمانه‌ای و لورنتزی و معادلات حرکت	۳۱۱
۲-۷ توصیف هامیلتونی کلاسیک	۳۱۳
۱-۲-۷ هامیلتونی دقیق	۳۱۳
۱-۲-۷ برهمکنش الکترون-الکترون	۳۱۴
۳-۷ صورتبندی کوانتی شده مرتبه دوم نظریه میدان	۳۱۷
۴-۷ الزامات توصیف اتم و مولکول‌ها	۳۲۱
فصل هشتم: نظریه دیراک بس‌ذره‌ای کوانتیده مرتبه اول	۳۲۵
۱-۸ سیستم‌های دو الکترونی و معادله دیراک	۳۲۷
۱-۱-۸ معادله دیراک تعمیم یافته برای حالت‌های مقید دو الکترونی	۳۲۸
۲-۱-۸ عملگر گانت برای برهمکنش‌های غیر تاخیری	۳۳۱
۳-۱-۸ عملگر بریت برای برهمکنش‌های تاخیری	۳۳۵
۴-۱-۸ انرژی برهمکنش الکترومغناطیس تاخیری دقیق	۳۴۰
۵-۱-۸ برهمکنش بریت الکترو دینامیک کوانتومی	۳۴۷
۲-۸ هامیلتونی‌های بس‌ذره‌ای شبه‌نسبیتی	۳۵۳
۱-۲-۸ هامیلتونی غیرنسبیتی برای سیستم مولکولی	۳۵۳
۲-۲-۸ هامیلتونی بس‌ذره‌ای نسبیتی کوانتیده مرتبه اول	۳۵۵
۳-۲-۸ آسیب‌شناسی صورتبندی کوانتش مرتبه اول	۳۵۸
۴-۲-۸ مدل‌های پتانسیل موضعی برای همبستگی‌های QED تک‌ذره‌ای	۳۶۰
۳-۸ تقریب بورن-اپنهایمر: جدا کردن درجات آزادی الکترونی و هسته‌ای	۳۶۱
۴-۸ ساختار تانسوری هامیلتونی بس‌الکترونی و تابع موج	۳۶۶
۵-۸ تقریب‌هایی بر تابع موج چندالکترونی	۳۶۹

۳۷۰	۱-۵-۸ مدل مستقل از ذره
۳۷۱	۲-۵-۸ برهمکنش پیکربندی
۳۷۶	۳-۵-۸ توابع موج همبسته صریح
۳۷۸	۴-۵-۸ عبارت انرژی کل و قیود اورتونورمال بودن
۳۸۲	۶-۸ کوانتش مرتبه دوم برای هامیلتونی‌های چندالکترونی
۳۸۳	۱-۶-۸ عملگرهای خلق و فنا
۳۸۴	۲-۶-۸ فروکاهش عناصر دترمینان ماتریس به عناصر ماتریسی روی اسپینورها
۳۸۶	۳-۶-۸ هامیلتونی‌های چندالکترونی و انرژی
۳۸۷	۱-۶-۸ فضای فاک و بردارهای عدد اشغال
۳۸۹	۵-۶-۸ فرمیون‌ها و بوزون‌ها
۳۸۹	۷-۸ استخراج معادلات تکانه‌ای موثر
۳۹۰	۱-۷-۸ قانون بیشینه-عدا
۳۹۲	۲-۷-۸ وردش عبارت انرژی
۳۹۵	۳-۷-۸ معادلات میدان خودسازگار
۳۹۸	۴-۷-۸ معادلات هارتری-فاک-دیراک
۴۰۲	۵-۷-۸ میدان خودسازگار نسبیتی
۴۰۳	۸-۸ نظریه تابعی دانسیته نسبیتی
۴۰۵	۱-۸-۸ بارهای الکترونی و دانسیته‌های جریان برای سیستم‌های چند الکترونی
۴۰۹	۲-۸-۸ نظریه تابعی دانسیته-جریان
۴۱۰	۳-۸-۸ مدل چهارمولفه‌ای کوهن-شام
۴۱۲	۴-۸-۸ تقریب‌های هم‌خط و رویکردهای ناهم‌خط
۴۱۳	۹-۸ تکمله: بسط کلاستر جفت‌شده

فصل ۹: اتم‌های چندالکترونی ۴۱۹

۴۲۲	۱-۹ تبدیل هامیلتونی چندالکترونی به مختصات قطبی
۴۲۳	۱-۱-۹ نکاتی درباره واحدها
۴۲۴	۲-۱-۹ برهمکنش کولمبی در مختصات قطبی

- ۴۲۵..... ۳-۱-۹ برهمکنش بریت در مختصات قطبی
- ۴۲۹..... ۴-۱-۹ هامیلتونی های اتمی چندالکترونی
- ۴۳۰..... ۲-۹ تابع موج چندالکترونی اتمی و جفت شدگی jj
- ۴۳۳..... ۳-۹ انتگرال های یک و دو الکترونی در تقارن گروهی
- ۴۳۴..... ۱-۳-۹ انتگرال های تک الکترونی
- ۴۳۵..... ۲-۳-۹ برهمکنش کولمبی الکترون-الکترون
- ۴۳۹..... ۳-۳-۹ برهمکنش بریت الکترون-الکترون مستقل از فرکانس
- ۴۴۲..... ۴-۳-۹ متاسبه توابع پتانسیل
- ۴۴۶..... ۴-۹ منابع چشمداشتی کل
- ۴۴۶..... ۱-۴-۹ عبارات های عمومی برای انرژی الکترونی
- ۴۴۸..... ۲-۴-۹ مشارکت برهمکنش بریت در انرژی کل
- ۴۴۹..... ۳-۴-۹ انرژی هارتری-فاک-دیراک کل برای پوسته های بسته اتمها
- ۴۵۱..... ۵-۹ معادلات عمومی خودشانگاری و اسپینورهای اتمی
- ۴۵۳..... ۱-۵-۹ معادلات هارتری-فاک-دیراک
- ۴۵۴..... ۲-۵-۹ مقایسه نظریه های اتمی هارتری-فاک و هارتری-فاک-دیراک
- ۴۵۸..... ۳-۵-۹ دانسیته های الکترونی نسبیتی و غیرنسبیتی
- ۴۶۱..... ۶-۹ تحلیل توابع شعاعی و پتانسیلها در حدود بلند و کوتاه
- ۴۶۲..... ۱-۶-۹ رفتار برد کوتاه اسپینورهای اتمی
- ۴۶۵..... ۲-۶-۹ رفتار توابع پتانسیل در مبدا
- ۴۶۷..... ۳-۶-۹ برهمکنش کولمبی الکترون-الکترون برد کوتاه
- ۴۶۸..... ۴-۶-۹ برهمکنش تبدالی در مبدا
- ۴۷۴..... ۵-۶-۹ برهمکنش الکترون-الکترون کل در هسته ها
- ۴۷۷..... ۶-۶-۹ رفتار تقریبی پتانسیل های برهمکنش
- ۴۷۸..... ۷-۹ تشخیص عددی و تکنیک های حل
- ۴۸۰..... ۱-۷-۹ تبدیلات متغیرها
- ۴۸۱..... ۲-۷-۹ شکل صریح توابع تبدیل
- ۴۸۲..... ۳-۷-۹ معادلات تبدیل

۴۸۶	 حل عددی معادلات ماتریسی
۴۸۹	 ۵-۷-۹ گسسته سازی و حل معادلات SCF
۴۹۲	 ۶-۷-۹ گسسته سازی و حل معادلات یواسون
۴۹۵	 ۷-۷-۹ تکنیک های برون یابی و سایر تر فندهای مورد نیاز
۴۹۸	 ۸-۹ نتایج کلی برای انرژی ها و توابع شعاعی
۴۹۹	 ۱-۸-۹ آرایش الکترونی و قانون آفبا
۵۰۱	 ۲-۸-۹ توابع شعاعی
۵۰۲	 ۳-۸-۹ تأثیر بر هسکنش بریت بر اسپینورها و مقادیر انرژی
۵۰۳	 ۴-۸-۹ تأثیر توزیع بار هسته بر مقادیر انرژی کل

فصل ۱۰: مولکول ها و تحولات مولکولی ۵۰۷

۵۱۰	 ۱-۱۰ بسط مجموعه پایه اسپینورهای مولکولی
۵۱۳	 ۱-۱-۱۰ تعادل سنتیکی
۵۱۵	 ۲-۱-۱۰ انتخاب های ویژه برای تابع پایه
۵۱۹	 ۲-۱۰ نمایش مجموعه پایه انرژی الکترونی هارتری-فاک-دیراک
۵۲۶	 ۳-۱۰ انتگرال های تک و دو الکترونی مولکولی
۵۲۷	 ۴-۱۰ معادلات ماتریسی روتان-هارتری-فاک-دیراک
۵۲۷	 ۱-۴-۱۰ دو مسیر ممکن برای استخراج معادلات
۵۲۹	 ۲-۴-۱۰ در نظر گرفتن حالت های با انرژی منفی
۵۳۱	 ۳-۴-۱۰ DFT چهار مولفه ای
۵۳۱	 ۴-۴-۱۰ تقارن
۵۳۲	 ۵-۴-۱۰ تقارن برگشت زمانی کرامر
۵۳۳	 ۶-۴-۱۰ گروه های دو گانه
۵۳۴	 ۵-۱۰ تحلیل گرادیانی
۵۳۸	 ۶-۱۰ روش های پسا هارتری-فاک

بخش ۴: فصول ۱۱-۱۲-۱۳

فصل ۱۱: واجفت‌شدگی حالت‌های انرژی منفی.....	۵۴۳
۱-۱۱ ارتباط میان مولفه‌های کوچک و بزرگ در معادلات تک‌الکترونی.....	۵۴۴
۱-۱-۱۱ قیود حاکم بر عملگر انرژی پتانسیل.....	۵۴۴
۱-۱-۱۱ صورتبندی عملگر X	۵۴۵
۱-۱-۱۱ حل‌های ذره آزاد.....	۵۴۹
۱-۱-۲ شکل بسته تبدیلات یکانی هامیلتونی دیراک.....	۵۵۰
۱-۱-۳ تبدیلات، ذره آزاد فولدی-ویتوسن.....	۵۵۴
۱-۱-۴ پالستریزه کردن عمومی تبدیلات یکانی.....	۵۵۹
۱-۱-۴-۱ شکل بسته پالستریزه کردن.....	۵۶۰
۱-۱-۴-۲ سری‌های توان یکانی دقیق.....	۵۶۲
۱-۱-۴-۳ تبدیلات تقریبی انی و هینه کوتاه‌شده.....	۵۶۴
۱-۱-۵ بسط فولدی-ویتوسن بر حسب توان‌های $\frac{1}{c}$	۵۶۷
۱-۱-۵-۱ تبدیلات فولدی-ویتوسن با پایبندی مرتبه.....	۵۶۸
۱-۱-۵-۲ هامیلتونی پائولی: عملگر مرتبه دوم فولدی-ویتوسن.....	۵۷۳
۱-۱-۶ تبدیلات مرتبه بالاتر فولدی-ویتوسن و آسیناسی آن‌ها.....	۵۷۴
۱-۱-۷ طرح تک مرحله‌ای دو مولفه‌ای با مرتبه بی‌نهایت.....	۵۷۸
۱-۱-۸ در مسیر هامیلتونی‌های بلوکه قطری تحلیلی خوش‌تربیت.....	۵۸۲
فصل ۱۲: نظریه هس-کرول-داگلاس.....	۵۸۵
۱-۱۲ تبدیلات واجفت کردن یکانی متوالی.....	۵۸۵
۱-۲ شکل صریح هامیلتونی‌های هس-کرول-داگلاس.....	۵۸۸
۱-۲-۱ نخستین تبدیل یکانی.....	۵۸۸
۱-۲-۲ دومین تبدیل یکانی.....	۵۸۹
۱-۲-۳ سومین تبدیل یکانی.....	۵۹۲
۱-۲-۳ هامیلتونی‌های مرتبه بی‌نهایت DHK و روش DHK با مرتبه دلخواه.....	۵۹۵

۵۹۵	۱-۳-۱۲ همگرایی انرژی‌های DHK و پایداری وردشی
۵۹۸	۱۲-۳-۲ طرح مرتبه بی‌نهایت
۶۰۰	۱۲-۳-۳ وابستگی ضرایب
۶۰۳	۱۲-۳-۴ عبارت‌های صریح برای هامیلتونی‌های انرژی مثبت
۶۰۵	۱۲-۳-۵ ویژگی‌های دیگر نظریه هس-کرول-داگلاس
۶۰۸	۱۲-۴-۱ هامیلتونی‌های DKH چندالکترونی
۶۰۸	۱۲-۴-۱ تبدیل DKH جملات تک‌الکترونی
۶۱۰	۱۲-۴-۲ جملات DKH جملات دوالکترونی
۶۱۴	۱۲-۵-۱ بنیادهای محاسباتی نظریه DKH
۶۱۵	۱۲-۵-۱ به کارگیری تکنیک عملگر همانی
۶۱۸	۱۲-۵-۲ نتایج محاسباتی‌های DKH نسبیتی-نرده‌ای
۶۲۱	۱۲-۵-۳ تقارین مؤثر برای تبدیل جملات پیچیده
۶۲۲	۱۲-۵-۴ گرادینان‌های DKH

فصل ۱۳: تکنیک‌های حذف ۶۲۵

۶۲۶	۱۳-۱-۱ تقلیل خام: حذف پائولی
۶۳۱	۱۳-۱-۲ نظریه بریت-پائولی
۶۳۲	۱۳-۲-۱ تبدیل فولدی-ویتوسن معادله بریت
۶۳۴	۱۳-۲-۲ تبدیل برهمکنش‌های دوالکترونی
۶۴۵	۱۳-۲-۳ هامیلتونی بریت-پائولی
۶۴۹	۱۳-۳ رویکرد کوان-گریفین و وود-بورینگ

بخش ۵: فصول ۱۴-۱۵-۱۶

فصل ۱۴: تکنیک‌های محاسباتی ویژه ۶۵۱

۶۵۳	۱۴-۱-۱ معادله دیراک اصلاح‌شده
۶۵۷	۱۴-۲-۱ محاسبه مؤثر اثرات جفت شدگی اسپین-اوربیت
۶۶۰	۱۴-۳-۱ موضعییت در روش‌های چهارمولفه‌ای

۱۴-۴ پتانسیل‌های هسته‌ای موثر نسبیتی ۶۶۱

فصل ۱۵: میدان‌های الکترومغناطیس خارجی و خواص مولکولی ۶۶۷

۱۵-۱ نظریه پاسخ و اختلال چهارمoleفه‌ای ۶۷۰

۱۵-۱-۱ روش وردش ۶۷۱

۱۵-۱-۲ رویکرد اختلالی ۶۷۲

۱۵-۱-۳ تصویر شبه دیراکی تک‌الکترونی ۶۷۶

۱۵-۱-۴ گونه اصلی از خواص ۶۷۷

۱۵-۲ تقلیل به شکل دومoleفه‌ای و تغییر تصویرهای مصنوع ۶۷۹

۱۵-۲-۱ منشا خطای تصویر ۶۸۱

۱۵-۲-۲ خواص بنیادی مستقل از تغییر تصویر ۶۸۴

۱۵-۲-۳ تبدیل ذره آزاد فولی و یوسن خاصیت‌های مولکولی ۶۸۴

۱۵-۲-۴ هامیلتونی بریت-پائلی با میدان‌های الکترومغناطیس خارجی ۶۸۶

۱۵-۳ تبدیل خواص هس-کرول ۶۸۷

۱۵-۳-۱ طرح وردشی DKH برای پتانسیل‌های اختلالی ۶۸۷

۱۵-۳-۲ کلی‌ترین خاصیت الکترومغناطیس ۶۸۹

۱۵-۳-۳ رویکرد اختلالی ۶۹۲

۱۵-۳-۴ تولید خودکار عملگرهای خاصیت DKH ۷۰۰

۱۵-۳-۵ نتایج حاصل برای توزیع دانسیته الکترونی ۷۰۱

۱۵-۳-۶ نظریه اختلال DKH در حضور میدان‌های مغناطیسی ۷۰۳

۱۵-۴ میدان‌های مغناطیسی در طیف سنجی‌های رزنانسی ۷۰۳

۱۵-۴-۱ جمله مشکل‌آفرین دیامغناطیس ۷۰۴

۱۵-۴-۲ مبدا پیمانه‌ای و اوربیتال‌های لاندون ۷۰۵

۱۵-۴-۳ شکل صریح عملگرهای اختلالی ۷۰۵

۱۵-۴-۴ هامیلتونی اسپینی ۷۰۷

۱۵-۵ ممان چهارقطبی هسته‌ای و گرادیان میدان الکتریکی ۷۰۸

۱۵-۶ نقض پارите و شیمی الکتروضعیف ۷۱۲

فصل ۱۶: اثرات نسبیتی در شیمی ۷۱۵

۱-۱۶ تاثیرات نسبیتی در اتم‌ها و نتایج آن بر پیوند شیمیایی ۷۱۹

۲-۱۶ آیا اسپین اثری نسبیتی است؟ ۷۲۳

۳-۱۶ وابستگی اثرات نسبیتی به Z : نظریه اختلال ۷۲۵

۴-۱۶ سطوح انرژی پتانسیل و پارامترهای طیفسنجی ۷۲۶

۱-۴-۱۶ هیدرید تالیم ۷۲۸

۲-۴-۱۶ دیمر طلا ۷۳۰

۱-۴-۱۶ کبید و هیدرید سدیم ۷۳۳

۵-۱۶ لانتانیدها و اکتیونیدها ۷۳۵

۱-۵-۱۶ انقباض لانداید و آکتینیدی ۷۳۶

۲-۵-۱۶ طیف الکترونی ترانزیت آکتینید ۷۳۶

۶-۱۶ دانشسته الکترونی کم‌لک‌ها فلزات واسطه ۷۳۹

ضمائم ۷۴۵

A- حساب تانسوری و برداری ۷۴۵

۱-A عبارات سه‌بعدی ۷۴۵

۲-A عبارات‌های چهاربعدی ۷۵۰

B- انرژی جنبشی در مختصات تعمیم‌یافته ۷۵۲

C- اثبات‌های اساسی در نسبیت خاص ۷۵۴

۱-C ناوردایی بازه فضا-زمان ۷۵۴

۲-C یکتایی تبدیلات لورنتز ۷۵۶

۳-C روابط سودمند مثلثاتی و هذلولی برای تبدیلات لورنتز ۷۵۷

D- ماتریس‌های پائولی و دیراک ۷۵۹

E- تبدیلات فوریه ۷۶۳

۲-E تبدیل فوریه پتانسیل کولمبی ۷۶۴

F- ضمیمه: طرح‌های گسسته‌سازی و مربع‌سازی ۷۶۶

- F-1 رویکرد نیومروف بر حل معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم ۷۶۶
- F-2 رویکرد نیومروف بر معادلات دیفرانسیل مرتبه اول ۷۶۸
- F-3 مربع سازی سیمپسون ۷۷۱
- F-4 رابطه تفاوت مرکزی بایکلی ۷۷۲
- مراجع ۷۷۵

پیشگفتار

یک توصیف کوانتوم مکانیکی سازگار از حالت‌های الکترونی مقید در اتم در فیزیک اتمی نخستین بار در اواخر ۱۹۲۰ ارائه شد و از آن زمان تاکنون در حال رشد و توسعه بوده است. با این حال، این باور رایج بوده که نتایج حاصل از نظریه نسبیت خاص اینشتین تأثیرات کم و یا بی‌اهمیتی در حوزه شیمی دارند. این عقیده در دهه ۱۹۷۰ تغییر کرد. زمانی که بسیاری نظیر پیکر، پیتزار، دسلاوکس و گرانت متوجه خواصی عجیبی شدند که در شیمی عناصر سنگین و خصوصیات ایف‌های آنها ظاهر می‌شوند و جز با رجوع به مفاهیم نسبیتی قابل تشریح نیستند. برات سببی انحراف نتایج به دست آمده در چارچوب نظری مبتنی بر نسبیت خاص را با مکانیک کوانتوم شرو دینگری غیرنسبیتی نشان می‌دهند. از اواخر دهه ۱۹۸۰ تاکنون توسعه روش‌های شیمی کوانتومی برای توصیف ساختار الکترونی نسبیتی دچار تحولات شگرفی بوده است.

نظریه ساختار الکترونی کنونی امروز در غوغا و رشدیافتگی معتبری قرار دارد. به لحاظ دسترسی به دانش با جزئیات کافی بر تقریب‌های نسبیتی و عملگرهای هامیلتونی نسبیتی که موضوع فصول این کتاب هستند، در موقعیت مناسبی قرار داریم. وقتی یک هامیلتونی نسبیتی خوب انتخاب شده باشد، تابع موج الکترونی را با توجه به روش‌های شناخته شده غیرنسبیتی در شیمی کوانتومی، می‌توان ساخت و محاسبه خواص مولکولی در تشابه نزدیک با نظریه غیرنسبیتی استاندارد قابل انجام خواهد بود. به علاوه استانداردهای پیاده‌سازی موثر روش‌های شیمی کوانتومی مبتنی بر هامیلتونی‌های شبه‌نسبیتی مطالعات محاسباتی در شیمی عناصر سنگین را در دو دهه اخیر تسهیل کرده است. تأثیرات نسبیتی امروز به خوبی فهمیده شده‌اند و بسیاری مسائل در شیمی کوانتومی نسبیتی نوین در ذات، بیش از آنکه بنیادی باشند مسائل تکنیکی محسوب می‌شوند.

هدف ما ارائه همسازی از تمامی وجوه اساسی نسبیتی با استفاده از نوشتاری همگن در کل این کتاب است. چالش اساسی در این نوشته ارائه توصیفی جامع از کلیت نظریه از

مفاهیم فیزیکی بنیادی آن تا کاربردهای نهایی در موضوعات مطرح در شیمی نظیر ساختار، انرژی‌ها و خواص سیستم‌های مولکولی است. ارائه این کتاب متمرکز بر ایده‌های اصلی و همچنین نتایج تحلیلی است و از جزئیات تکنیکی ناگزیر تا حد زیادی چشمپوشی شده تا فیزیک و مفاهیم اصلی و رای محاسبات بیشتر برجسته شوند.

برای تشریح این موضوعات اساسی با جزئیات بیشتر، باید بدانیم:

۱- این ذات نظریه‌های چندالکترونی نسبیتی تقریبی است که تعداد زیادی هامیلتونی موثر می‌توانند ایجاد شوند و لذا رویکردهای شیمی کوانتومی نسبیتی بسیاری امکان‌پذیر هستند، اینکه چنین چیزی نه دلخواه و نه سودمند است چون داده‌های عددی عظیم و متنوع حاصل می‌شود که دقت همه آنها به درستی قابل ارزیابی نیست. به جای آن تعداد محدودی هامیلتونی‌های خوش تعریف برای بررسی‌های ما کافی هستند.

۲- تأثیرات نسبیتی در شیمی بسیار وسیع هستند و لازم است بدانیم که هر نظریه بنیادی در فیزیک باید بر مبنای قوانین نسبیت خاص صورتبندی شده باشد. خطاهایی که در یک توصیف تقریبی غیرنسبیتی رخ می‌دهند و در یک چارچوب نسبیتی اتفاق نمی‌افتند و علی‌الاصول در آزمایشگاه قابل اندازه‌گیری نیستند به تأثیرات نسبیتی مرتبط می‌شوند. این تعریف از تأثیرات نسبیتی برای بررسی مشاهدات بدیع در شیمی ترکیبات هم‌رده شامل عناصر سنگین، وختی، هسته‌های ترکیبات که عناصر سبکتری در آنها جایگزین شده‌اند مقایسه می‌شود، سودمند است. از مهم‌ترین این مشاهدات سیالیت جیوه در شرایط معمولی و رنگ زرد طلا هستند.

جزئیات تکنیکی پیاده‌سازی روش‌های نسبیتی و همچنین است‌های نظری حول تأثیرات نسبیتی در این کتاب پوشش داده می‌شوند چون این مباحث در محاسبات عملی و تفسیر نتایج مهم هستند. به علاوه تحلیل مسائل تکنیکی و پیاده‌سازی محاسبات برای توضیح اینکه معادلات چندذره‌ای چگونه باید حل شوند و چه هزینه‌ای برای این منظور مورد نیاز است، تأثیرگذار هستند.

به دلیل تنوع زیاد مطالب این کتاب بهتر است که با فصول مقدماتی شروع کنید تا برای ادراک صحیح‌تر و آسان‌تر از ساختار و مواردی اساسی که در این کتاب آمده، پایه مفهومی خوبی ایجاد کنید. هنگام نوشتن این کتاب درک کردیم که فضای کافی برای ارائه وجوه

مختلف نظری با عمق مفهومی کافی در اختیار نیست. با این وجود همچنان هدف ما ارائه ایده‌های اصلی و چگونگی ارتباط آنها با جزئیات کافی بوده است. چون این همواره قانون راهنمای تحقیقات اصیل است، بر مسائلی که به‌خصوص در این دو دهه اخیر حائز اهمیت بوده‌اند، تمرکز کافی داشته‌ایم. مواد لازم برای نزدیک‌تر کردن هر چه بیشتر این کتاب به یک اثر اصیل تاحد امکان فراهم شده‌اند. برای جبران کمبودهایی که به‌ناگزیر با انتخاب بخشی خاص از موضوعات مرتبط حاصل شده‌اند، مراجع زیادی از مقالات و کتب به چاپ رسیده معرفی شده‌اند. با اینکه تعداد قابل ملاحظه‌ای مرجع ذکر شده‌اند ارائه لیست کاملی از آنها به دلایل چندین هزار کار انجام شده روی موضوع امکان‌ناپذیر است. خوشبختانه پیکو تلاشی عظیم در جهت ایجاد بانک مراجع مرتبط صورت داده که در یک سری از کتب منتشر شده [۱-۳] و در دهه ۹۰ به‌طور آنلاین نیز در دسترس است [۴]. همچنین خواننده را به مقالات روزی از متخصصین در این حوزه که توسط شواردفگر [5,6] و هس [7] جمع‌آوری شده از طاعی دهه ۸۰. البته این کتاب ابزار مناسب مورد نیاز برای تفحص دقیق‌تر در مراجع موجود را در اختیارش نگذارد.

در پایان خالی از لطف نیست که ذکر کنیم بینش ما از نظریه چندالکترونی نسبیتی در خلال تقریباً یک دهه شکل گرفته که در این حین از این اقبال برخوردار بوده‌ایم که فهم خود را با تبادل ایده‌ها با همکاران مان صیقل دهیم که دانش خود را در صور مختلف با ما به اشتراک گذاشته‌اند. این افراد شامل پروفیسور الیزا آندره، فاسگ، گاکلیاردی، هس، جشک، هیمل، هاینزه، هوتز، ینسن، کالدور، کادزیرا، لیند، کیرچنر، کیچ، لاندوا، مالمکویست، مایر، مارکت، مولر، نسسه، نگبوئر، پیککو، کواک، ریک، رز، شوارز، سادوگر، شرزر، سایدنتاپ، سمیدوسکی، گانسترن، وان وولن، ویسچر و وسترهاوزن هستند.

همچنین از جی. ایکرلینگ و آر. ماستالرز و اس. شمک برای کمک در تهیه کتاب و شکل روی جلد و نمودارهای بخش ۱۶-۶ و به‌خصوص از آر. ماستالرز و اس. لاوبر برای تهیه کتاب‌های مرجع و مقالات قدیمی به کمک کتابخانه دانشگاه زوریخ تشکر می‌کنیم. همچنین مارکوس رایر از رامی اینسیگر به‌خاطر زمان زیادی که از وظایف زندگی روزمره به‌دور بوده تا نوشتن این کتاب را به سرانجام برساند، ممنون است. مارکوس همچنین از اعضای گروهش دکتر ایکرلینگ، هرمان، یاکوب، کیویچ، لوبر، مالکین، مارکی، ماستالرز، موریتز، ناگباور، پدویتز، شنک و استایبریتز برای تلاش‌های فداکارانه‌شان قدردانی می‌کند. آلکساندر

وولف از باربارا فایفر به خاطر صبر و حمایت دائمی هنگام نوشتن این کتاب تشکر ویژه دارد. قدردانی ویژه از دکتر ای. مازه و آر. مونز از انتشارات وایلی-وی.سی.اچ برای حمایت‌هایشان در جهت چاپ این کتاب داریم.

زوریخ - June - ۲۰۰۸

مارکوس رایر و آلکساندر وولف

www.ketab.ir