

سرشناسه: لوین، آیرا ان، ۱۹۲۷ - م.
 Levine, Ira N.
 عنوان و نام پدیدآور: شیمی کوانتومی: به انضمام پاسخ تشریحی مسائل/ آیرا 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: Quantum chemistry, 7th ed, [2014].
 موضوع: شیمی کوانتوم -- راهنمای آموزشی (عالی)
 موضوع: Higher (Quantum chemistry -- Study and teaching) (Higher)
 موضوع: شیمی کوانتوم -- مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)
 موضوع: Higher (Quantum chemistry -- Problems, exercises, etc) (Higher)
 شناسه افزوده: هاشمی، سیداسماعیل، ۱۳۶۵ - مترجم
 شناسه افزوده: د پانولا، خولیو. شیمی فیزیک.
 رده بندی کنگره: ۱۳۹۷ ۹ش۹/۴۶۲/۴ QD
 رده بندی دیویی: ۵۴۱/۲۸
 شماره کتابشناسی ملی: ۵۵۳۹۲۴۰



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	نویسنده: آیرا ان، لوین
مترجم: سید اسماعیل هاشمی	ناشر: علوم ایران
شابک: ۰ - ۷۴ - ۲۷۵۰ - ۹۶۴ - ۹۷۸	نوبت و سال چاپ: دوم - ۱۴۰۱
شابک: ۰ - ۷۶ - ۲۷۸۰ - ۹۶۴ - ۹۷۸	تیراژ: ۵۰ نسخه
انتشارات علوم ایران	قیمت:
۳۷۵ هزار تومان	

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

خرید آنلاین: ketabmail.com

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.

سخن ناشر

چون نیست ز هر چه هست جز باد بدست چون هست بهر چه هست نقصان و شکست
انگار که هر چه هست در عالم نیست پندار که هر چه نیست در عالم هست

انتشارات علوم ایران در تلاش است تا کُتبی را به دست خوانندگان برساند که توسط آنها حداقل گوشه‌ای از نیازهای علمی کشور برآورده شود. لذا از اساتید و مدرسین و اعضاء هیئت علمی دانشگاه‌ها و دانشجویمان در مقاطع و رشته‌های مختلف تحصیلی و تمامی افرادی که می‌خواهند کتابی را ترجمه و یا تألیف نمایند، دعوت می‌کنیم تا جهت همکاری، با ما تماس بگیرند. برای ارتباط با انتشارات علوم ایران می‌توانید با شماره تلفن همراه ۰۹۱۲۵۳۶۷۶۲۱ تماس گرفته و یا به پست الکترونیکی olomiran@hotmail.com و یا به آدرس: تهران - صندوق پستی ۳۵۳ - ۱۳۱۴۵ پیشنهادات خود را ارسال نمایید. آدرس سایت انتشارات علوم ایران www.olomiran.net می‌باشد.

با تشکر

مهندس محمدتقی فرامرزی

مدیر انتشارات علوم ایران

سخن مترجم

تقدیم به همسر و فرزند عزیزم

شیمی کوانتومی شاخه‌ای از شیمی بوده که تمرکز اصلی آن کاربرد مکانیک کوانتومی در مدل‌های فیزیکی و آزمایشات سیستم‌های شیمیایی است، همچنین مکانیک کوانتومی مولکولی نیز نامیده می‌شود. با توجه به گسسته و کوانتیزه بودن انرژی اتم‌ها و مولکول‌ها، محاسبات نظری انجام شده توسط روش‌های کوانتومی و پیش‌بینی‌های صورت گرفته به دنبال آن نه تنها حقایق بیش‌تری در مورد جهان هستی و اجزای تشکیل دهنده آن آشکار کرده، بلکه موجب باز شدن مسیرهای جدید به روی محققین در این حوزه می‌شود. ترکیب شیمی کوانتومی و علوم زیستی موجب درک بیش‌تر از ساختار و ویژگی‌های مولکول‌های پیچیده و درشت مولکول‌های زیستی شده و به توسعه داروهای جدید برای مقابله، درمان و بهبود بیماری‌ها کمک می‌کند. نقشی که شیمی کوانتومی در درک ساختارهای مولکول‌های درشت همچون پروتئین‌ها ایفا کرده بی‌بدیل بوده و در توسعه شاخه‌های دیگر همچون بیوشیمی و توسعه داروهای مختلف غیر قابل انکار می‌باشد.

کتاب حاضر ترجمه و ویرایش جدید کتاب شیمی کوانتومی ایرا ان لواین می‌باشد که با توجه به پیشرفت روز افزون علوم کامپیوتری نسبت به ویرایش‌های قبلی از نظر کاربرد نرم‌افزارها و برنامه‌های محاسباتی کامپیوتری به روز رسانی شده است. در ترجمه این کتاب سعی شده تا از ترجمه روان و اصطلاحات آشنا استفاده گردد، هرچند این کتاب عاری از اشکال نیست. لذا از هرگونه نظر و پیشنهاد مفید با کمال تشکر و تقدیم احترام استقبال می‌گردد.

سید اسماعیل هاشمی

پیشگفتار نویسنده

این کتاب برای فارغ‌التحصیلان 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 مبنای 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 ۷۷۱۰ 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, MP2-CCSD, SCS(MI)-MP2 و SCS(MI) (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 خسته‌کننده «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.

ایران. لواین

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱۳	فصل ۱: معادله شرودینگر
۱۳	۱.۱ شیمی کوانتوم
۱۴	۲.۱ بنیان تاریخی مکانیک کوانتوم
۱۸	۳.۱ اصل عدم قطعیت
۱۹	۴.۱ معادله شرودینگر وابسته به زمان
۲۴	۵.۱ معادله شرودینگر مستقل از زمان
۲۶	۶.۱ احتمال
۲۸	۷.۱ اعداد مختلط
۳۰	۸.۱ واحدها
۳۰	۹.۱ حساب دیفرانسیل و انتگرال
۳۱	خلاصه
۳۱	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۳۹	فصل ۲: ذره در جعبه
۳۹	۱.۲ ذره در جعبه
۴۰	۲.۲ ذره در جعبه یک بعدی
۴۶	۳.۲ ذره آزاد در یک بعد
۴۷	۴.۲ ذره در چاه مستطیلی
۴۹	۵.۲ 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, \max ، x_r 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 زاویه‌ای
۱۵۱ ۱.۵ تعیین هم‌زمان 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 عملگرهای هرمیتی	۲.۷
۲۵۰ تعریف عملگرهای هرمیتی	۲.۷
۲۵۱ مثال‌هایی از عملگرهای هرمیتی	۲.۷
۲۵۲ قضایا در مورد عملگرهای هرمیتی	۲.۷
۲۵۶ بسط بر حسب ویژه توابع	۳.۷
۲۵۶ بسط تابع با استفاده از توابع موج ذره در جعبه	۳.۷
۲۵۸ بسط تابع بر حسب ویژه توابع	۳.۷
۲۶۱ ویژه توابع عملگرهای جابه‌جاپذیر	۴.۷
۲۶۵ پاریته	۵.۷
۲۶۷ اندازه‌گیری و برهم‌نهی حالت‌ها	۶.۷
۲۷۳ ویژه توابع مکان	۷.۷
۲۷۶ اصل موضوع‌های مکانیک کوانتوم	۸.۷
۲۸۰ اندازه‌گیری و تفسیر مکانیک کوانتوم	۹.۷
۲۸۴ ۱۰ ماتریس‌ها	۱۰.۷
۲۸۶ ماتریس‌ها و مکانیک کوانتوم	۱۰.۷
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 هلیم
۴۰۱ ۴.۹ عملیات تغییر حالت پایه هلیم
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 هلیم
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 هلیم
۴۴۸ ۵.۱۰ اصل طرد پاولی
۴۵۲ ۶.۱۰ دترمینان‌های اسلیتر
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

۲۱۸۳	۲.۱۱ اوربیتال‌ها و جدول تناوبی
۲۱۸۶	۳.۱۱ همبستگی الکترونی
۲۱۸۹	۴.۱۱ جمع کردن اندازه حرکت زاویه‌ای
۲۱۹۴	۵.۱۱ اندازه حرکت زاویه‌ای در اتم‌های چند الکترونی
۲۱۹۶	اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی و اوربیتالی الکترونی کل
۲۱۹۶	جمله طیفی اتمی
۲۱۹۷	بدست آوردن جمله‌های طیفی اتمی
۲۱۹۹	قاعده هوند
۲۰۱	ویژه مقادیر توابع اسپین دو الکترونی
۲۰۳	توابع موج اتمی
۲۰۴	پارته حالت‌های اتمی
۲۰۴	اندازه حرکت زاویه‌ای الکترونی کل و ترازهای اتمی
۲۰۶	جمله‌های طیفی و ترازهای هیدروژن و هلیوم
۲۰۶	جداول ترازهای انرژی اتمی
۲۰۷	۶.۱۱ برهمکنش اسپین - مدار
۲۰۹	۷.۱۱ هامیلتونی اتمی
۲۱۲	۸.۱۱ قواعد کوندون - اسلیتر
۲۱۵	خلاصه
۲۱۶	مسائل و پاسخ تشریحی مسائل
۲۱۳	پیوست: جداول
۲۱۳	جدول ۱- ثابت‌های فیزیکی
۲۱۴	جدول ۲- ضرایب تبدیل
۲۱۵	جدول ۳- جرم‌های نسبی ایزوتوبی
۲۱۵	جدول ۴- حروف یونانی
۲۱۶	جدول ۵- انتگرال‌ها