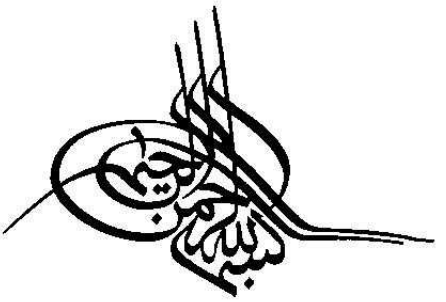
۲۰۷۰۰۲۵



شیمی کوانتومی

(جلد دوم)

به انضمام پاسخ تشریحی مسائل

ایرا ان. لویز

مترجم: سید اسماعیل هاشمی

www.ketab.ir

سرشناسه : لوین، آیرا ان.، ۱۹۳۷ - م.
Levine, Ira N.
عنوان و نام پدیدآور : شیمی کوانتومی: به انضمام پاسخ تشریحی مسائل/ ایراآن. لوین؛ مترجم سیداسماعیل هاشمی.
مشخصات نشر: تهران : انتشارات علوم ایران، ۱۳۹۷-
مشخصات ظاهری : ج.: مصور، جدول، نمودار.
شابک : دوره:978-964-2750-76-4 : ج.۱:978-964-2750-74-0 ج.۲:978-964-2750-75-7
وضعیت فهرست نویسی:فیپا
یادداشت: عنوان اصلی: .Quantum chemistry,7th ed,[2014]
موضوع: شیمی کوانتوم -- راهنمای آموزشی (عالی)
موضوع: (Quantum chemistry -- Study and teaching (Higher
موضوع: شیمی کوانتوم -- مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی)
موضوع: (Quantum chemistry -- Problems, exercies, etc (Higher
شناسه افزوده: هاشمی، سیداسماعیل، ۱۳۶۵ -، مترجم
شناسه افزوده: [illegible]نولا، [illegible]ولیو ، شیمی فیزیک.
رده بندی کنگره : ۱۳۹۷ ۹ش۹ل/QD ٤٦٢
رده بندی دیویی: ۵۴۱/[illegible]
شماره کتابشناسی ملی: ۵۵۳۹۴۴۰

انتشارات علوم ایران

تهران - تلفن ۶۶۷۰۴۶۴۹ و ۰۲۱۲۵۳۶۷۶۲۱

صندوق پستی: تهران ۳۵۳ - ۱۳۱۴۵

انتشارات علوم ایران

www.olomiran.net

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

نویسنده: ایرا ان. لوین

مترجم: سید اسماعیل هاشمی

ناشر: علوم ایران

شابک: ۷ - ۷۵ - ۲۷۵۰ - ۹۶٤ - ۹۷۸

نوبت و سال چاپ: اول - ۱۳۹۸

شابک دوره: ٤ - ۷۶ - ۲۷۵۰ - ۹۶٤ - ۹۷۸

تیراژ: ۱۰۰ نسخه

قیمت: ۸۵۰۰ تومان

مرکز پخش:

کتاب کوشا - میدان انقلاب، ابتدای کارگر جنوبی، کوچه رشتچی، بن بست یکم، پلاک ٤ طبقه دوم واحد ٤ تلفن همراه: ۰۹۱۲۳۰۳۳۰۵۸

تلفن: ٦٦٩٤١١٦٧ و ٦٦٩٤١٠٣٤ فکس: ٦٦٩٢١٦٨٥

هرگونه کپی‌برداری و یا تکثیر و یا انتشار و یا شبیه‌سازی 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.

www.ketab.ir

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 دانشجویان 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 ۰۹۱۲۵۳۶۷۴۲۱ 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

www.ketab.ir

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 هستی موجب درک بیش‌تر از ساختار و ویژگی‌های مولکول‌های پیچیده و درشت مولکول‌های زیستی شده و به توسعه داروهای جدید و 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 ویرایش جدید کتاب شیمی کوانتومی ایرا ن 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

www.ketab.ir

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 مورد توجه قرار 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 اضافه شده در فصول ۱۵ و ۱۶ اضافه شده است.
- توضیحات در نواحی که دانشجویان مشکل داشتند بازنگری شده است.
- برنامه‌های کامپیوتری در حل‌المسائل و کتاب از BASIC به C++ تغییر کرده است.
- کتاب با مراجع ذکر شده برای تحقیقات مدرن در زمینه مکانیک کوانتومی محاسباتی فرموله کردن مجدد اصل عدم قطعیت توسط اوزاوا (Ozawa) و مشاهده اثرات تداخلی با مولکول‌های خیلی بزرگ جان دیگر 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 VV۱۰ برای پراکندگی (بخش ۶.۱۵)
- روش‌های W۱ – F۱۲ و W۲ – F۱۲ (بخش ۶.۱۶)
- برهمکنش‌های پراکندگی (انباشته شدن) در DNA (بخش ۸.۱۶)

www.ketab.ir

- روش‌های MP۲/۵، MP۲/X، SCS(MI)-CCSD و SCS(MI)-MP۲ (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 PM۶-D۳H۴ و PM۷ (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 سطح‌های 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 آن به تنهایی 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.

ایرا ان. لواین

www.ketab.ir

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

سخن ناشر
سخن مترجم
پیشگفتار نویسنده
فصل ۱۲: تقارن مولکول ۱۱
۱۲. ۱ عناصر و اعمال تقارن ۱۱
عناصر و اعمال تقارن ۱۱
حاصل‌ضرب اعمال تقارن ۱۴
تقارن و ممان دو قطبی ۱۵
تقارن و فعالیت نوری ۱۶
اعمال تقارن و مکانیک کوانتومی ۱۶
ماتریس‌ها و اعمال تقارن ۱۸
۱۲. ۲ گروه‌های نقطه‌ای تقارن ۱۹
خلاصه ۲۵
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۲۵
فصل ۱۳: ساختار الکترونی مولکول‌های دو اتمی ۳۹
۱۳. ۱ تقریب بور – اپنهایمر ۳۹
۱۳. ۲ حرکت هسته‌ای در مولکول‌های دو اتمی ۴۳
۱۳. ۳ واحدهای اتمی ۴۸
۱۳. ۴ یون مولکول هیدروژن ۴۸
۱۳. ۵ رفتارهای تقریبی حالت الکترونی پایه H_2^+ ۴۹
۱۳. ۶ اوربیتال‌های مولکولی برای حالت‌های برانگیخته H_2^+ ۵۴
۱۳. ۷ آرایش‌های MO مولکول‌های دو اتمی جور هسته ۶۳
۱۳. ۸ جمله‌های الکترونی مولکول‌های دو اتمی ۶۸
۱۳. ۹ مولکول هیدروژن ۷۵
۱۳. ۱۰ رفتار پیوند – والانس H_2 ..... ۸۰
۱۳. ۱۱ مقایسه نظریه‌های MO و VB ۸۳
۱۳. ۱۲ توابع موج MO و VB برای مولکول‌های دو اتمی جور هسته ۸۶
۱۳. ۱۳ حالت‌های برانگیخته H_2 ..... ۸۸
۱۳. ۱۴ توابع موج SCF برای مولکول‌های دو اتمی ۹۰
۱۳. ۱۵ عملیات MO مولکول‌های دو اتمی ناجور هسته ۹۲
۱۳. ۱۶ عملیات VB مولکول‌های دو اتمی ناجور هسته ۹۵
۱۳. ۱۷ تقریب الکترون – والانس ۹۸
خلاصه ۹۹
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۱۰۰
فصل ۱۴: قضیه‌های مکانیک کوانتومی مولکولی ۱۰۱
۱۴. ۱ چگالی احتمال الکترون ۱۲۵
۱۴. ۲ ممان دوقطبی ۱۲۵

www.ketab.ir

۱۴. ۳ روش‌هارتری – فاک برای مولکول‌ها ۱۳۰
عناصر ماتریس فاک ۱۳۴
فرم ماتریس معادلات روتان ۱۳۸
۱۴. ۴ قضیه ویریال ۱۴۰
۱۴. ۵ قضیه ویریال و پیوند شیمیایی ۱۴۷
۱۴. ۶ قضیه هلمن – فاینمن ۱۵۱
۱۴. ۷ قضیه الکتروستاتیک ۱۵۴
خلاصه ۱۵۸
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۱۵۸
فصل ۱۵: ساختار الکترونی مولکولی ۱۷۵
۱۵. ۱ روش‌های آغازین (ابتدا به ساکن)، تابعی چگالی، شبه‌تجربی و مکانیک مولکولی ۱۷۵
۱۵. ۲ جمله‌های الکترونی مولکول‌های چند اتمی ۱۷۶
۱۵. ۳ بررسی SCF MO مولکولهای چند اتمی ۱۷۹
۱۵. ۴ توابع م ۱۸۱
۱۵. ۵ بررسی SCF MO مربوط به H_2O ۱۹۰
۱۵. ۶ آنالیز جمعیت و مرتبه پیوند ۱۹۷
مرتبه پیوند ۲۰۱
۱۵. ۷ پتانسیل الکتروستاتیک مولکول، سطوح مولکولی و بارهای اتمی ۲۰۱
پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی ۲۰۱
بارهای اتمی ۲۰۴
۱۵. ۸ MO های مستقر ۲۰۶
۱۵. ۹ بررسی SCF MO متان، اتان و اتیلن ۲۱۳
متان ۲۱۳
اتان ۲۱۸
اتیلن ۲۲۰
۱۵. ۱۰ آرایش هندسی مولکولی ۲۲۳
آرایش هندسی تعادلی ۲۲۳
سطح انرژی پتانسیل (PES) ۲۲۴
بهینه کردن آرایش هندسی ۲۲۶
علامت‌گذاری ۲۳۰
روش شبه نیوتن ۲۳۰
روش‌های تندتر شدن – نزول و مزدوج – گرادیان ۲۳۳
روش نیوتن ناقص شده ۲۳۴
۱۵. ۱۱ جستجو کردن کنفورماسیونی ۲۳۴
۱۵. ۱۲ فرکانس‌های ارتعاشی مولکولی ۲۴۰
۱۵. ۱۳ خصوصیات ترمودینامیکی ۲۴۳
۱۵. ۱۴ برنامه‌های شیمی کوانتومی آغازین ۲۴۵
۱۵. ۱۵ انجام محاسبات آغازین ۲۴۶
ورودی ۲۴۶
انواع محاسبات ۲۵۰
خروجی ۲۵۰
سازنده‌های مدل اتوماتیک ۲۵۱
۱۵. ۱۶ تسریع محاسبات هارتری – فاک ۲۵۲
ارزیابی سریع عناصر ماتریس فاک ۲۵۳
۱۵. ۱۷ اثرات حلال ۲۵۶
روش SCRF کوانتوم – اونساگر ۲۵۸
انرژی گیبس حلالپوشی ۲۵۹
روش بسط – چند قطبی ۲۶۱

www.ketab.ir

روش PCM ۲۶۱
تعادل شیمیایی در محلول ۲۶۴
خصوصیات مولکولی در محلول ۲۶۴
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۲۶۵
فصل ۱۶: روش‌های همبستگی - الکترون ۳۰۷
۱۶. ۱ انرژی همبستگی ۳۰۷
۱۶. ۲ برهمکنش آرایش ۳۱۰
۱۶. ۳ نظریه اختلال مولر - پلست (MP) ۳۲۲
۱۶. ۴ روش کلاستر جفت شده ۳۳۰
۱۶. ۵ نظریه تابعی - چگالی ۳۳۷
قضیه هوهنبرگ – کوهن ۳۳۷
قضیه تغییری هوهنبرگ – کوهن ۳۴۰
روش کوهن - شام (KS) ۳۴۱
تقریب چگالی - مکانی (LDA) ۳۴۵
تابعی‌های E_x و [illegible] ۳۴۷
روش $X\alpha$ ۳۴۸
انجام محاسبات تابعی – چگالی [illegible] – شام ۳۴۸
تقریب چگالی - اسپین – مکانی (LSDA) ۳۵۰
تابعی‌های گرادیان – تصحیح شده (GGA) ۳۵۱
تابعی متا – GGA ۳۵۲
تابعی‌های هیبرید ۳۵۳
تابعی‌های هیبرید – دو تایی ۳۵۴
تصحیح‌های پراکندگی ۳۵۵
ارزیابی تابعی‌ها ۳۵۶
مجموعه‌های مبنا ۳۵۷
حالت‌های برانگیخته ۳۵۷
گذشته و آینده DFT ۳۵۸
۱۶. ۶ روش‌های مرکب برای محاسبات انرژی ۳۶۰
۱۶. ۷ روش نفوذ کوانتومی مونت کارلو ۳۶۲
۱۶. ۸ برهمکنش‌های غیرکوالانسی ۳۶۳
۱۶. ۹ ثابت‌های پوششی NMR ۳۶۶
۱۶. ۱۰ روش‌های قطعه قطعه شدن ۳۶۹
۱۶. ۱۱ اثرات نسبیتی ۳۶۹
۱۶. ۱۲ بررسی پیوند – والانس مولکول‌های چند اتمی ۳۷۱
آب ۳۷۱
متان ۳۷۴
مولکول‌های مزدوج ۳۷۶
حالت‌های والانس اتمی ۳۷۷
وضعیت روش VB ۳۷۸
۱۶. ۱۳ روش‌های GVB، VBSCF و BOVB ۳۷۹
۱۶. ۱۴ واکنش‌های شیمیایی ۳۸۱
روش‌های IMOMO، IMOMM و ONIOM ۳۸۴
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۳۸۵
فصل ۱۷: بررسی‌های شبه تجربی و مکانیک مولکولی مولکول‌ها ۴۱۱
۱۷. ۱ بررسی‌های MO شبه تجربی مولکول‌های مزدوج مسطح ۴۱۱
۱۷. ۲ روش MO هوکل ۴۱۲
بوتادی‌ان ۴۱۴
پلی‌ان‌های مزدوج ۴۱۷

www.ketab.ir

بنزن ۴۱۸
پلی‌ان‌های مزدوج مونوسیکلی ۴۲۲
نفتالن ۴۲۵
هیدروکربن‌های آلترنانت ۴۲۶
گذارهای الکترونی ۴۲۶
انرژی غیرمستقر شدن و آروماتیسیته ۴۲۷
بارها و مرتبه‌های پیوندی π – الکترون ۴۲۹
مولکول‌های مزدوج ناجور اتمی (هتروآتم) ۴۳۲
گنجاندن همپوشانی ۴۳۲
فرموله کردن ماتریس ۴۳۳
خلاصه ۴۳۳
۱۷. ۳ روش پاریزر – پار – پوپل ۴۳۳
۱۷. ۴ روش‌های عمومی شبه تجربی MO و DFT ۴۳۵
روش هوکل تعمیم یافته ۴۳۶
روش‌ها CNDO، INDO و NDDO ۴۳۸
روش‌های MNDO، AM۱، PM۳، PM۶، PM۶ – D۳H۴، PM۷ و RM۱ ..... ۴۴۱
روش SCC-DFTB ۴۴۸
محاسبات شبه تجربی روی مولکول‌های خیلی بزرگ ۴۴۹
۱۷. ۵ روش‌های مکانیک مولکولی ۴۵۰
کشیدگی ۴۵۳
خمش ۴۵۴
پیچش ۴۵۴
خمش خارج از صفحه ۴۵۵
عبارت‌های متقاطع ۴۵۶
برهمکنش‌های الکتروستاتیک ۴۵۶
برهمکنش‌های وان‌دروالسی ۴۵۷
قطع کردن‌ها ۴۵۸
پیوند هیدروژنی ۴۵۹
پیوندهای مزدوج ۴۵۹
پارامتری کردن ۴۶۰
خصوصیات مولکولی ۴۶۱
گرماهای تشکیل ۴۶۲
عملکرد ۴۶۴
برنامه‌ها ۴۶۴
روش‌های QM/MM ۴۶۵
۱۷. ۶ بررسی‌های تجربی و شبه تجربی اثرات حلال ۴۶۶
روش‌های حلال – صریح در مقابل حلال – پیوستار ۴۶۶
روش‌های حلال – پیوستار کلاسیکی ۴۶۶
مدل‌های حلال‌پوشی پیوستار مکانیک کوانتومی ۴۶۹
۱۷. ۷ واکنش‌های شیمیایی ۴۷۱
۱۷. ۸ آینده شیمی کوانتومی ۴۷۴
مسائل و پاسخ تشریحی مسائل ۴۷۵
پیوست: جداول ۵۰۹
جدول ۱– ثابت‌های فیزیکی ۵۰۹
جدول ۲– ضرایب تبدیل ۵۱۰
جدول ۳– جرم‌های نسبی ایزوتوپی ۵۱۱
جدول ۴– حروف یونانی ۵۱۱
جدول ۵– انتگرال‌ها ۵۱۲

www.ketab.ir