



شیمی کوانتومی

ویرایش ششم
قسمت دوم

ساختار الکترونی مولکولی
و شیمی محاسباتی

نوشتہ
ایرا ن. لواین

ترجمہ

دکتر غلامرضا اسلامپور دکتر سیف‌الہ جلیلی

این کتاب ترجمه‌ای است از فصلهای ۱۲ تا ۱۸ کتاب:

Quantum Chemistry

Sixth Edition

IRA N. LEVINE

**Chemistry Department
Brooklyn College
City University of New York
Brooklyn, New York**

چهار

سرشناسه	لواین، ایرا ن. ۱۹۳۷ - م.
	Levine, Ira N.
عنوان و نام پدیدآور	شیمی کوانتومی / نوشته ایرا ن. لواین؛ ترجمه غلامرضا اسلامپور، سیف‌اله جلیلی؛
مشخصات نشر	تهران: انتشارات علمی و فنی، ۱۳۸۴-۱۳۸۹.
مشخصات ظاهری	۲ ج. نمودار، جدول.
شابک	(دوره): 2-38-6215-964-978؛ ج. ۱: ۷۴۰۰۰ ریال (ج. ۱: ۹-31-6215-964 چاپ سوم)؛ ۵۵۰۰۰ ریال (ج. ۱: چاپ دوم) ۱۰۵۰۰۰ ریال (ج. ۲: چاپ اول)؛
یادداشت	عنوان اصلی: Quantum chemistry, 6th, c2009
یادداشت	ج. ۱ (چاپ سوم: پاییز ۱۳۸۸).
یادداشت	ج. ۲ (چاپ اول: ۱۳۸۹) (فیا).
یادداشت	کتاب حاضر ترجمه از ویرایش ۶ کتاب اصلی است.
یادداشت	واژه‌نامه: کتابنامه.
مترجمات	ج. ۱. مبانی شیمی کوانتومی و ساختار اتمی. - ج. ۲. ساختار الکترونی مولکولی و شیمی محاسباتی.
موضوع	شیمی کوانتومی
شناسه افزوده	اسلامپور، غلامرضا. ۱۳۳۰ - مترجم
شناسه افزوده	جلیلی، سیف‌اله. ۱۳۵۰ - مترجم
رده بندی کنگره	۱۳۸۴ ۹۹/۹۸ QP۴۶۲
رده بندی دیویی	۵۴۱/۲۸
شماره کتابشناسی ملی	۱۷۲۹۶-۸۴م

شیمی کوانتومی

قسمت دوم: ساختار الکترونی مولکولی و شیمی محاسباتی

نوشته ایرا ن. لواین

ترجمه دکتر غلامرضا اسلامپور و دکتر سیف‌اله جلیلی

چاپ اول: تابستان ۱۳۸۹

۵۲۸ صفحه و زبیری در ۱۵۰۰ نسخه، چاپ پورروشن

ویرایش، مقابله، گرافیک و حروفچینی: آتلیه انتشارات علمی و فنی

سرپرست گرافیک و طراح جلد: امیرحسین مظاهری‌نیا

سرپرست تولید و ویراستار نگارشی: آرش بهرام‌پور

ویراستار علمی: دکتر غلامرضا اسلامپور

شابک (قسمت دوم): ۴-۳۴-۶۲۱۵-۹۶۴-۹۷۸

شابک دوره: ۲-۳۸-۶۲۱۵-۹۶۴-۹۷۸

تلفن: ۸۸۷۲۹۱۹۸-۸۸۵۵۴۸۴۹، فکس و پیامگیر: ۸۸۵۵۵۹۳۲

پست الکترونیکی: elmi_fanni@yahoo.com

قیمت: ۱۰۵۰۰۰ ریال

مؤسسه پژوهشی
تولید کتاب دانشگاهی



تأسیس: ۱۳۶۰

سخنی از ناشر

• در مراحل پایانی آماده‌سازی ترجمه قسمت دوم ویرایش پنجم کتاب شیمی کوانتومی پروفیسور لواین، ویرایش ششم کتاب زبان اصلی منتشر گردید. با وجود اینکه ترجمه، ویراستاری و حروفچینی ویرایش پنجم انجام شده بود و کتاب آماده چاپ، ولی براساس ضوابط پژوهشی این مؤسسه مبنی بر الزام گزینش آخرین ویرایش برای ترجمه، قسمت دوم کتاب از ویرایش ششم ترجمه گردیده و با تمام تغییرات جایگزین ترجمه ویرایش پنجم شد. انتشار قسمت اول از ویرایش ششم نیز در برنامه تولید گروه شیمی این انتشارات قرار گرفته است تا جایگزین جلد اول ویرایش پنجم شود.

• طی ۲۹ سال تولید صرفاً کتاب دانشگاهی، آوردن واژه‌نامه زبان اصلی به فارسی و واژه‌نامه فارسی به زبان اصلی در بخش پایانی کتابهای ترجمه، از ضوابط این انتشارات بوده است؛ با تأکید بر اینکه در ذهنیت ما، آوردن واژه‌نامه زبان اصلی به فارسی، بویژه آنکه واژه‌های مهم در پانویس می‌آید، زاید به نظر می‌رسید. زیرا، به خواننده در یافتن معنای واژه موردنظر خود کمک تام و گسترده‌ای نمی‌کرد و او می‌بایست برای یافتن معنای واژه، به لغتنامه زبان اصلی به فارسی مراجعه کند. لیکن، نظر به اینکه آوردن هر دو قسمت در بخش پایانی کتاب در بررسی انتخاب کتاب سال دارای امتیاز است، انتشارات علمی و فنی خود را به آوردن هر دو قسمت ملزم می‌دانسته است.

اکنون به‌اعتبار اتفاق آرای حاصله از مشورت با استادان نویسنده عضو گروههای علمی این انتشارات که آنان نیز بخش واژه‌نامه زبان اصلی به فارسی

را بی‌اثر تشخیص داده‌اند، مصمم شدیم این قسمت را از کتاب حذف نماییم. ضمناً، واژه‌نامه فارسی به زبان اصلی که آوردن آن توجیه منطقی دارد و فهرست راهنما را در هم ادغام کرده‌ایم تا خواننده بتواند هر دو مورد را در یک نگاه داشته باشد.

جمشید مظاهری‌نیا

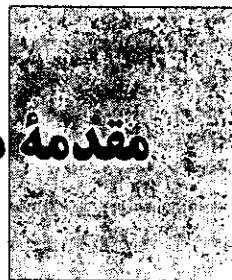
پیشگفتار مترجمان

قسمت دوم این کتاب، علی‌رغم طیف محدود مخاطبان، به لحاظ والایی موضوع در فرایند تولید قرار گرفت. بویژه، همان‌طور که در صفحه «سخنی از ناشر» آمده است، برای ادای بیشتر حق مطلب، ترجمه ویرایش ششم جانشین ترجمه انجام‌شده ویرایش پنجم گردید. و این رسالت مؤسسه پژوهشی انتشارات علمی و فنی در انتشار آخرین رویدادهای کتابهای دانشگاهی و داشتن سهمی در تأمین خلأ کتابهای علمی به‌روز، قابل تقدیر است.

دکتر سیف‌اله جلیلی
دانشگاه
خواجه نصیرالدین طوسی

دکتر غلامرضا اسلامپور
دانشگاه
تربیت معلم

مقدمه مؤلف



این کتاب به عنوان کتاب درسی سال اول دوره های تکمیلی و سال بالای دوره کارشناسی در نظر گرفته شده است.

اصلاحات زیر در ویرایش ششم صورت گرفته اند:

- تمرینهای جواب دار به اغلب مثالهای داخل فصل افزوده شده اند.
- مسائل مورد تجدیدنظر قرار گرفته و اکنون مطابق بخش، طبقه بندی شده اند.
- بخش ۹.۱ شامل فرمولهای حساب دیفرانسیل و انتگرال برای دوره کردن افزوده شده است.
- فصل ۱۳ با انتقال سه بخش آن به فصل ۱۴ کوتاهتر شده است.
- فصل ۱۵ با انتقال بحث روشهای همبستگی به فصل ۱۶ کوتاهتر شده است.
- برخی اشتقاقهای ریاضی، از متن کتاب به مسائل با راهنماییهای مرحله-به-مرحله انتقال یافته اند؛ برای مثال می توان به انتگرال $1/r_{12}$ He (بخش ۳.۹) و فرمول روش Numerov (بخش ۴.۴) اشاره کرد.
- مراجع مربوط به شبیه سازیهای online رایانه ای چندین سیستم مکانیک کوانتومی افزوده شده اند.
- بحث طیفسنجی NMR در بخش ۹.۱۰ توسعه یافته است.
- ذکر واحدهای گاوسی حذف شده است.

مطالب جدید ویرایش ششم عبارتند از:

- مرتبه های پیوند Mayer (بخش ۶.۱۵)
- تقریب (برازش-دانشیه) RI (بخشهای ۱۶.۱۵ و ۲.۱۶)
- روشهای MP2-R12 و MP2-F12 (بخش ۲.۱۶)
- برونیایی به حد مجموعه - پایه - کامل (بخشهای ۵.۱۵ و ۳.۱۶)
- روشهای SCS-MP2 و SOS-MP2 (بخش ۲.۱۶)
- تابعیهای متا - GGA (بخش ۴.۱۶)
- روشهای W4, W3, W2, W1, G4 (بخش ۵.۱۶)
- روشهای PM5, PM6, PM1, PM3, PDDG/PM3, SCC-DFTB (بخش ۴.۱۷)

نقش در حال گسترش شیمی کوانتومی، تمایل زیاد دانشجویان در تمام سطوح شیمی را برای درک روشهای مدرن محاسبه ساختار الکترونی فراهم کرده است، و این کتاب با این هدف نگارش یافته است. سعی کرده‌ام تا توضیحات، بدون حاشیه‌رفتن روی نکات مشکل یا باریک، واضح و جامع باشند. اشتقاق فرمولها با جزئیات کافی ارائه شده‌اند تا دنبال کردن آنها آسان باشد و تا سر حد امکان از آوردن عبارت مایوس‌کننده «می‌توان نشان داد که» اجتناب شده است. هدف این است که درک عمیقی از جنبه‌های فیزیکی و ریاضی مکانیک کوانتومی و ساختار الکترونی مولکولی را برای دانشجویان فراهم آورد. کتاب طوری طراحی شده است تا برای دانشجویان تمام شاخه‌های شیمی، نه تنها برای آنانی که شیمیدانان کوانتومی آینده می‌شوند، سودمند باشد. به هر حال، ارائه مطالب به قسمی است که آنانی که در شیمی کوانتومی ادامه می‌دهند، پایه خوبی خواهند داشت و دچار سوء تعبیرها نخواهند شد.

مانعی که بسیاری از دانشجویان شیمی هنگام آموختن مکانیک کوانتومی با آن روبرو می‌شوند، عدم آشنایی آنان با بسیاری از لازمه‌های ریاضی است. من این کتاب را شامل بررسیهای مبسوطی از عملگرها، معادلات دیفرانسیل، دستگاه معادلات خطی و عناوین مورد نیاز دیگر کرده‌ام. به جای قرار دادن تمام ریاضی در یک فصل مقدماتی یا یک سری از پیوستها، ریاضی را با فیزیک و شیمی تلفیق کرده‌ام. کاربرد بی‌درنگ ریاضی برای حل یک مسئله مکانیک کوانتومی، در مقایسه با مطالعه جداگانه ریاضی، باعث می‌شود تا ریاضی برای دانشجویان بامعنی تر شود. همچنین، من پایه محدود فیزیک بسیاری از دانشجویان شیمی را، با مرور عناوینی از فیزیک، در نظر داشته‌ام.

این کتاب از مرورها و پیشنهادات:

Leland Allen, N. Colin Baird, Steven Bernasek, James Bolton, W. David Chandler, Donald Chesnut, R. James Cross, David Farrelly, Melvyn Feinberg, Gordon A. Gallup, David Goldberg, Tracy Hamilton, John Head, Warren Helre, Hans Jaffé, Miklos Kertesz, Neil Kestner, Harry King, Peter Kollman, Mel Levy, Errol Lewars, Joel Liebman, Frank Meeks, Robert Metzger, Pedro Muino, William Palke, Sharon Palmer, Gary Pfeiffer, Russell Pitzer, Kenneth Sando, Harrison Shull, James J. P. Stewart, Richard Stratt, Arieh Warshel, Michael Zerner

بهره گرفته است. بخشهای ویرایش ششم توسط:

Gary DeBoer, Douglas Doren, Daniel Gerrity, Robert Griffin, Sharon Hammes-Schiffer, James Harrison, Robert Hinde, Anna Krylov, Tien-Sung Tom Lin, Ryan McLaughlin, Charles Millner, John H. Moore, Kirk Peterson, Oleg Prezhdo, Frank Rioux, Fu-Ming Tao, Ronald Terry, Alexander Van Hook, Peter Weber

بازبینی شده است. از این افراد و آنانی که نامشان ذکر نشده است، تشکر می‌کنم.

از دریافت هر پیشنهادی از سوی خوانندگان در راستای بهبود بخشیدن به این کتاب، قدردانی می‌شود.

فهرست کلی

قسمت اول: مبانی شیمی کوانتومی و ساختار الکترونی اتمی

- ۱ معادله شرودینگر
- ۲ ذره در جعبه
- ۳ عملگرها
- ۴ نوسانگر هماهنگ
- ۵ اندازه حرکت زاویه‌ای
- ۶ اتم هیدروژن
- ۷ قضیه‌های مکانیک کوانتومی
- ۸ روش تغییر
- ۹ نظریه اختلال
- ۱۰ اسپین الکترون و اصل پاولی
- ۱۱ اتمهای چند الکترونی

قسمت دوم: ساختار الکترونی مولکولی و شیمی محاسباتی

- ۱۲ تقارن مولکولی
- ۱۳ ساختار الکترونی مولکولهای دو اتمی
- ۱۴ قضیه‌های مکانیک کوانتومی مولکولی
- ۱۵ ساختار الکترونی مولکولی
- ۱۶ روشهای همبستگی - الکترونی
- ۱۷ بررسیهای نیم تجربی و مکانیک - مولکولی مولکولها
- ۱۸ مقایسه روشها

فهرست تفصیلی

فصل ۱۲ تقارن مولکولی

۱	۱.۱۲ عناصر و عملهای تقارن
۱۱	۲.۱۲ گروههای نقطه‌ای تقارن
۱۹	۳.۱۲ خلاصه
۱۹	مسائل

فصل ۱۳ ساختار الکترونی مولکولهای دواتمی

۲۳	۱.۱۳ تقریب بورن-آپنهاইمر
۲۸	۲.۱۳ حرکت هسته‌ای مولکولهای دواتمی
۳۴	۳.۱۳ واحدهای اتمی
۳۶	۴.۱۳ یون مولکول هیدروژن
۴۱	۵.۱۳ بررسیهای تقریبی حالت الکترونی پایه H_2^+
۵۳	۶.۱۳ اوربیتالهای مولکولی برای حالت‌های برانگیخته H_2^+
۵۹	۷.۱۳ آرایشهای MO مولکولهای دواتمی جور هسته
۶۷	۸.۱۳ جمله‌های طیفی الکترونی مولکولهای دواتمی
۷۴	۹.۱۳ مولکول هیدروژن
۷۸	۱۰.۱۳ بررسی پیوند والانس H_2
۸۲	۱۱.۱۳ مقایسه نظریه‌های MO و VB
۸۵	۱۲.۱۳ توابع موج MO و VB برای مولکولهای دواتمی جور هسته
۸۹	۱۳.۱۳ حالت‌های برانگیخته H_2
۹۱	۱۴.۱۳ توابع موج SCF برای مولکولهای دواتمی
۹۵	۱۵.۱۳ بررسی MO مولکولهای دواتمی ناجور هسته
۱۰۰	۱۶.۱۳ بررسی VB مولکولهای دواتمی ناجور هسته
۱۰۱	۱۷.۱۳ تقریب الکترون-والانس
۱۰۲	۱۸.۱۳ خلاصه
۱۰۳	مسائل

فصل ۱۴ قضیه‌های مکانیک کوانتومی مولکولی ۱۰۹

۱۰۹	۱.۱۴ دانسته احتمال الکترون
۱۱۲	۲.۱۴ ممانهای دوقطبی
۱۱۵	۳.۱۴ روش هارتری - فاک برای مولکولها
۱۲۸	۴.۱۴ قضیه ویرال
۱۳۶	۵.۱۴ قضیه ویرال و پیوند شیمیایی
۱۴۱	۶.۱۴ قضیه هلمان - فاینمن
۱۴۵	۷.۱۴ قضیه الکترواستاتیکی
۱۵۰	۸.۱۴ خلاصه
۱۵۱	مسائل

فصل ۱۵ ساختار الکترونی مولکولی ۱۵۵

۱۵۵	۱.۱۵ روشهای آغازین، تابعی دانسته، نیم تجربی و مکانیک مولکولی
۱۵۶	۲.۱۵ جمله‌های طیفی الکترونی مولکولهای چند اتمی
۱۶۱	۳.۱۵ بررسی مولکولهای چند اتمی به روش SCF MO
۱۶۴	۴.۱۵ توابع پایه
۱۷۵	۵.۱۵ بررسی مولکول H_2O به روش SCF MO
۱۸۵	۶.۱۵ تجزیه و تحلیل جمعیت و مرتبه‌های پیوند
۱۹۱	۷.۱۵ پتانسیل الکترواستاتیکی مولکولی، سطوح مولکولی و بارهای اتمی
۱۹۷	۸.۱۵ اوربیتالهای مولکولی مستقر
۲۰۷	۹.۱۵ بررسی متان، اتان و اتیلن به روش اوربیتال مولکولی SCF
۲۲۱	۱۰.۱۵ ساختار هندسی مولکولی
۲۳۶	۱۱.۱۵ جستجوی صورتبندی ای
۲۴۴	۱۲.۱۵ فرکانسهای ارتعاشی مولکولی
۲۴۸	۱۳.۱۵ خواص ترمودینامیکی
۲۵۱	۱۴.۱۵ برنامه‌های شیمی کوانتومی آغازین
۲۵۳	۱۵.۱۵ اجرای محاسبات آغازین
۲۶۱	۱۶.۱۵ افزایش سرعت محاسبات هارتری - فاک
۲۶۶	۱۷.۱۵ اثرات حلال
۲۷۸	مسائل

فصل ۱۶ روشهای همبستگی - الکترونی ۲۸۵

۲۸۶	۱.۱۶ برهمکنش آرایشی
۳۰۲	۲.۱۶ نظریه اختلال MØLLER-PLESSET (MP)

۳۱۲	۳.۱۶ روش خوشه - جفت شده
۳۲۰	۴.۱۶ نظریه تابعی دانسته
۳۴۹	۵.۱۶ روشهای ترکیبی برای محاسبات انرژی
۳۵۲	۶.۱۶ روش مونت کارلوی کوانتومی نفوذی
۳۵۴	۷.۱۶ اثرات نسبیتی
۳۵۶	۸.۱۶ دیدگاه پیوند - والانس برای مولکولهای چند اتمی
۳۶۷	۹.۱۶ روشهای GVB، VBSCF و BOVB
۳۷۰	۱۰.۱۶ واکنشهای شیمیایی
۳۷۶	مسائل

۳۸۱	فصل ۱۷ بررسیهای نیم تجربی و مکانیک - مولکولی مولکولها
۳۸۱	۱.۱۷ بررسی مولکولهای مزدوج مسطح با MO نیم تجربی
۳۸۲	۲.۱۷ روش MO هوکل
۴۰۹	۳.۱۷ روش Pariser - Parr - Pople
۴۱۲	۴.۱۷ روشهای اوربیتال مولکولی و تابعی دانسته نیم تجربی عمومی
۴۳۰	۵.۱۷ روش مکانیک - مولکولی
۴۵۲	۶.۱۷ بررسی اثرات حلال به روش تجربی و نیم تجربی
۴۵۸	۷.۱۷ واکنشهای شیمیایی
۴۶۲	مسائل

۴۶۹	فصل ۱۸ مقایسه روشها
۴۶۹	۱.۱۸ ساختار هندسی مولکولی
۴۷۳	۲.۱۸ تغییرات انرژی
۴۸۳	۳.۱۸ خواص دیگر
۴۸۷	۴.۱۸ پیوند هیدروژنی
۴۹۰	۵.۱۸ نتیجه گیری
۴۹۱	۶.۱۸ آینده شیمی کوانتومی
۴۹۲	مسائل

پیوست

کتابنامه

۴۹۳	جواب مسائل انتخاب شده
۴۹۶	واژه نامه فارسی به انگلیسی و فهرست راهنما
۴۹۹	
۵۰۳	