



شیمی فیزیک

(مبانی شیمی کوانتومی)

www.ketab.ir

دکتر محمد حسین فکری

(عضو هیأت علمی دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی)

دکتر مریم رضوی مهر

سرشناسه: عنوان و نام پدیدآور: شیمی فیزیک (مبانی شیمی کوانتومی) / محمدحسین فکری، مریم رضوی مهر.
 مشخصات نشر: بروجرده: دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)، ۱۴۰۰.
 مشخصات ظاهری: ح، ۱۹۴ ص: مصور، جدول، نمودار.
 شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۹۸۴۰۶-۲-۷

وضعیت فهرست نویسی: فیبا

یادداشت: کتابنامه: ص. ۱۹۴-۱۹۲
 موضوع: شیمی کوانتوم -- راهنمای آموزشی (عالی)
 موضوع: Quantum chemistry -- Study and teaching (Higher)
 موضوع: شیمی فیزیک -- راهنمای آموزشی (عالی)
 موضوع: Chemistry, Physical and theoretical -- Study and teaching (Higher)
 موضوع: شیمی کوانتوم -- آزمون‌ها و تمرین‌ها (عالی)
 موضوع: Quantum chemistry -- Examinations, questions, etc. (Higher)
 موضوع: شیمی فیزیک -- آزمون‌ها و تمرین‌ها (عالی)
 موضوع: Chemistry, Physical and theoretical -- Examinations, questions, etc (Higher)
 شناسه افزوده: رضوی مهر، مریم، ۱۳۵۹-
 شناسه افزوده: دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)
 رده‌بندی کنگره: QD ۴۶۱
 رده‌بندی دیویی: ۵۴۱.۳۸
 شماره کتابشناسی ملی: ۸۴۷۸۳۴۵



نام کتاب "شیمی فیزیک (مبانی شیمی کوانتومی)"

نویسنده: دکتر محمد حسین فکری، دکتر مریم رضوی مهر
 ویراستار فنی: محمد بنی مهد کیوانی
 طراح جلد: آویژه
 تاریخ انتشار: پاییز ۱۴۰۰
 شمارگان: ۱۰۰۰
 شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۹۸۴۰۶-۲-۷
 ناشر: انتشارات دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)
 نوبت چاپ: اول
 چاپ و صحافی: آویژه
 بها: ۶۰۰,۰۰۰ ریال
 مرکز پخش: کیلومتر ۳ جاده بروجرد - خرم آباد، دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)
 تلفن: ۰۶۶-۴۲۴۶۸۳۲۰

مسئولیت صحت مطالب کتاب برعهده نویسندگان است.

حق چاپ برای ناشر محفوظ است.

علم دریایی است که کرانه‌ی آن ناپیداست و حد و مرزی بر آن متصور نیست. جستجوگر علم، یعنی غواصی که در این دریای ژرف به کاوش و پژوهش می‌پردازد، هرگز به فرجام کار خود نزدیک نخواهد شد؛ هیچ‌گاه پژوهش او پایان نخواهد گرفت، حتی اگر عمر جاودان داشته باشد.

شکر و سپاس ذات اقدس احدیت را که بر ما منت نهاد و توفیق داد تا کتاب «شیمی فیزیک (مبانی شیمی کوانتومی)» را تألیف نماییم و آن را به علاقه‌مندان به ویژه دانشجویان محترم رشته شیمی ارائه دهیم. با عنایت به اصلاح سرفصل‌های رشته شیمی از سوی وزارت محترم علوم، تحقیقات و فناوری و ابلاغ آن به دانشگاه‌های کشور این درس نیز از چنین قاعده‌ای مستثنی نبوده و مشمول تغییراتی شد؛ لذا بر آن شدیم طبق سرفصل جدید آن را تدوین نماییم.

منابع مبانی شیمی کوانتومی به همت استادانی بزرگ تألیف شده است که هر یک از این منابع برای درک بهتر مباحث پیچیده‌ی کوانتوم ارزشمند هستند. با این حال، کتابی به‌عنوان منبع درسی در این حوزه به‌ویژه برای دانشجویان مقطع کارشناسی که واجد زبان علمی ساده و فارغ از پیچیدگی زیاد یا دارای پیچیدگی حداقلی باشد، وجود نداشت. همین عامل انگیزه‌ای شد تا اینجانبان کتاب حاضر را تدوین نماییم. این کتاب در ۶ فصل فراهم آمده است. تلاش داشته‌ایم ضمن ارائه‌ی مطالب به بیان ساده، حل تمرینات متنوع را بلافاصله پس از هر مبحث ارائه دهیم. در پایان فصل نیز با طرح تعدادی سؤال، دانشجویان می‌توانند یافته‌های خود از مباحث مطروحه را در محک آزمون قرار دهند. در پایان کتاب تعداد ۱۰۰ سؤال چهار گزینه‌ای آورده‌ایم تا خوانندگان محترم با چنین سؤالاتی نیز بیشتر آشنا شوند.

امیدواریم دانشجویان عزیز از این کتاب بهره لازم را ببرند. امید است خوانندگان محترم چنانچه لغزش محتوایی یا سهو قلم را در مباحث مشاهده فرمودند، یادآوری نمایند تا در چاپ‌های بعدی اصلاح نماییم. در پایان از همه کسانی که در تألیف این کتاب یاریگر ما بودند، به ویژه معاونت محترم پژوهشی دانشگاه، معاونت محترم پژوهشی دانشکده علوم پایه و اعضای محترم شورای انتشارات دانشگاه آیت‌الله‌العظمی بروجردی (ره) و نیز همکاران محترم گروه شیمی کمال تشکر و قدردانی را داریم.

محمد حسین فکری - مریم رضوی مهر

پاییز ۱۴۰۰

فهرست مطالب

۱- پیشگفتار..... ۱

فصل اول: مباحثی از کاربرد ریاضی در شیمی

۱-۱- سیستم‌های مختصات.....	۷
۱-۱-۱- سیستم مختصات دکارتی یا قائم‌الزاویه یا کارتزین.....	۷
۱-۱-۲- سیستم مختصات قطبی یا کروی.....	۸
۱-۱-۳- سیستم مختصات استوانه‌ای.....	۹
۱-۲- بردار.....	۱۰
۱-۳- اعداد مختلط یا کمپلکس.....	۱۳
۱-۴- ماتریس.....	۱۴
۱-۵- دترمینان.....	۱۷
۱-۶- مشتق جزئی.....	۱۷
۱-۷- حل انتگرال به روش جزء به جزء.....	۱۸
۱-۸- حل معادلات دیفرانسیل خطی همگن.....	۱۸
۱-۹- حل معادلات دیفرانسیل به روش سری‌های توانی.....	۲۰
مسائل.....	۲۳

فصل دوم: مقدمه‌ای بر پیدایش مکانیک کوانتومی

۱-۲- فیزیک کلاسیک و نقاط ضعف آن.....	۲۵
۲-۲- جسم سیاه یا کاواک.....	۲۵
۳-۲- تابش جسم سیاه یا تابش کاواک.....	۲۶
۴-۲- قوانین و آزمایش‌های مربوط به تابش جسم سیاه.....	۲۷
۱-۴-۲- رابطه استفان - بولتسمن.....	۲۷
۲-۴-۲- آزمایش لومر - پرینگشایم.....	۲۸
۳-۴-۲- رابطه وین.....	۲۸
۴-۴-۲- رابطه رایلی - جینز.....	۳۰

۳۱	۲-۴-۵- رابطه پلانک برای توزیع انرژی تابشی - پیدایش مکانیک کوانتومی
۳۵	۲-۵- اثر فوتوالکتریک
۳۷	۲-۶- مطالعه طیف اتم هیدروژن
۴۰	۲-۷- اصول موضوعه و توصیف اتم هیدروژن به کمک آن
۴۲	۲-۷-۱- سرعت الکترون
۴۲	۲-۷-۲- شعاع مدار الکترون
۴۳	۲-۷-۳- انرژی الکترون
۴۵	۲-۸- نارسایی‌ها و نقائص تئوری بوهر - پیدایش کوانتوم جدید
۴۶	۲-۹- طبیعت دوگانه موجی - ذره‌ای
۴۷	۲-۱۰- اصل عدم قطعیت هایزنبرگ
۴۹	۲-۱۱- معادله شرودینگر
۵۲	۲-۱۲- عملگرها یا اپراتورها و انواع آن
۷۲	۲-۱۳- عملگر خطی
۷۲	۲-۱۴- توابع ویژه، مقادیر ویژه و معادلات مقدار ویژه
۷۳	۲-۱۵- اصول موضوعه (پذیره‌های اساسی) مکانیک کوانتوم
۷۳	۲-۱۵-۱- اصل موضوعه اول
۷۶	۲-۱۵-۲- اصل موضوعه دوم
۷۷	۲-۱۵-۳- اصل موضوعه سوم
۷۷	۲-۱۵-۴- اصل موضوعه چهارم
۷۹	۲-۱۵-۵- اصل موضوعه پنجم
۸۰	مسائل

فصل سوم: مثال‌هایی از حل معادله شرودینگر

۸۳	۳-۱- ذره در جعبه‌ی یک بعدی
۹۱	۳-۲- ذره در جعبه سه بعدی
۹۲	۳-۳- نوسانگر هماهنگ یک بعدی
۱۰۰	۳-۴- چرخنده صلب دو ذره‌ای
۱۰۳	۳-۵- اتم هیدروژن
۱۱۷	مسائل

فصل چهارم: اتم‌های چند الکترونی

۱۱۹	۴-۱- واحد اتمی
۱۲۰	۴-۲- اسپین الکترون
۱۲۴	۴-۳- اصل طرد پائولی
۱۲۵	۴-۴- اتم هلیوم
۱۲۸	مسائل

۱۲۹	۱-۵- تقریب بورن - اپنهاইمر
۱۳۱	۲-۵- روش تقریبی وردشی (روش تغییر و تحول)
۱۳۴	۳-۵- یون مولکول هیدروژن
۱۴۰	۴-۵- مولکول هیدروژن
۱۴۱	۵-۵- نظریه اوربیتال مولکولی
۱۴۹	۶-۵- نظریه اوربیتال مولکولی هوکل
۱۵۳	مسائل

فصل ششم: مقدمه‌ای بر شیمی محاسباتی

۱۵۵	۱-۶- مقدمه
۱۵۶	۲-۶- تابع موج هارتري
۱۵۷	۳-۶- روش میدان خودسازگار هارتري - فاک (HF)
۱۶۱	۴-۶- روش تابع دانسته (DFT)
۱۶۳	۵-۶- روش اختلال
۱۶۳	۶-۶- مجموعه پایه
۱۶۴	۷-۶- انواع مجموعه‌های پایه
۱۶۴	۱-۷-۶- مجموعه پایه حداقل
۱۶۴	۲-۷-۶- مجموعه‌های پایه زنای دوگانه
۱۶۵	۳-۷-۶- مجموعه‌های پایه زنای سه‌گانه
۱۶۵	۴-۷-۶- مجموعه‌های پایه ظرفیتی شکافته
۱۶۵	۵-۷-۶- مجموعه پایه دارای توابع قطبیده
۱۶۶	۶-۷-۶- مجموعه‌های پایه نفوذی
۱۶۷	۸-۶- نرم‌افزار گوسین
۱۶۷	۹-۶- Z - ماتریس
۱۶۸	۱۰-۶- مختصات کارتزینی
۱۶۹	۱۱-۶- نرم‌افزار گوس و یو
۱۷۱	۱۲-۶- برخی از کاربردهای نرم‌افزار گوسین
۱۷۱	۱-۱۲-۶- بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها
۱۷۱	۲-۱۲-۶- محاسبات پتانسیل الکترواستاتیکی مولکولی
۱۷۲	۳-۱۲-۶- توصیفگرهای مولکولی کوانتومی
۱۷۴	۴-۱۲-۶- توابع ترمودینامیکی
۱۷۵	سوالات چهار گزینه‌ای
۱۸۷	پاسخنامه
۱۸۹	پیوست ۱: ثابت‌های فیزیکی
۱۹۰	پیوست ۲: آننگرال
۱۹۱	منابع