

DFT در شیمی کوانتوم

www.ketab.ir

تالیف و ترجمه:

مجید منجمی

(عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران)

سرشناسه : منجمی، مجید، ۱۳۳۶ -
 عنوان و نام پدیدآور : DFT در شیمی کوانتوم / تالیف و ترجمه مجید منجمی.
 مشخصات نشر : تهران : مجید منجمی، ۱۳۹۰.
 مشخصات ظاهری : ۴۶۰ص: مصور، جدول، نمودار.
 شابک : ۱۰۰۰۰۰ ریال: ۸-۷۶۸۸-۰۴-۹۶۴-۹۷۸
 موضوع : شیمی کوانتوم -- ریاضیات
 موضوع : شیمی آلی فلزی
 موضوع : ترکیب‌های آلی -- ستر
 رده بندی کنگره : QD ۴۶۲/۶/۹ م ۸۰۳۹۰ :
 رده بندی دیویی : ۶۲۸/۵۳۲ :
 شماره کتابشناسی ملی : ۲۵۱۵۰۹۷ :

نام کتاب : DFT در شیمی کوانتوم
 تالیف و ترجمه : مجید منجمی
 نشر اول : تهران، مجید منجمی، ۱۳۹۰
 چاپ اول : پاییز ۱۳۹۰
 چاپ : دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات
 شابک : ISBN ۹۷۸-۹۶۴-۰۴-۷۶۸۸-۸
 قیمت : ۱۰۰۰۰۰ ریال
 شمارگان : ۱۰۰۰ :

پیشگفتار

بی‌گمان پنجاه سال پیش که نخستین کامپیوترها پا به عرصه علم و فن آوری گذاشتند، هیچ کس حتی تصور هم نمی‌کرد روزی فرا برسد که علوم تجربی همچون شیمی فیزیک و حتی زیست‌شناسی تا این حد وابسته به مباحث پیشرفته در زمینه روشهای تنوری باشد. در این میان علم شیمی فیزیک گوی سبقت را از سایر علوم ربوده است. نگاه گذرا به هزاران مقاله علمی که سالانه در سراسر جهان منتشر می‌شود موبد این ادعا است. اما نکته حائز اهمیت که می‌بایستی تمامی محققان به آن بیش از پیش بپردازند، نگرش به علوم بین رشته‌ای و تلفیقی است. لذا بر آن شدیم تا جهت استفاده هر چه بیشتر محققان مطالبی را در زمینه مباحث نوین از عمق مقالات ISI و معتبر علمی استخراج کنیم تا راهگشای دانش پژوهانی گردد که مصمم به چاپ مقالات در زمینه کارهای تحقیقاتی خویش می‌باشند. امید است این تلاش صادقانه مورد استقبال شما قشر دانشگاهی قرار گیرد و دعای خیر خود را ببلرغه راهی که گشوده‌ایم، نمایید.

اتشا...

فهرست

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۱	فصل اول
۱	۱-۱- معادله شرودینگر
۶	۱-۲- اصل تغییر
۱۰	۱-۳- تقریب هارتری - فاک
۱۶	۱-۴- مدل‌های هارتری - فاک محدود شده و محدود نشده
۱۸	۱-۵- همبستگی الکترونی
۲۵	فصل دوم
۲۵	۲-۱- چند نکته توصیفی
۲۷	۲-۲- بیان مکانیک کوانتومی از یک اتم
۲۹	۲-۳- تقریب هارتری - فوک
۳۴	۲-۴- بر هم کنش های باقیمانده
۳۶	۲-۵- توضیحات نموداری
۴۴	۲-۶- درگیر کردن بر هم کنش های باقیمانده
۴۶	۲-۷- تقریب فاز تصادفی همراه تبادل
۵۲	۲-۸- روش بازآرایی
۵۶	۲-۹- سیستم نرم افزاری ATOM
۶۰	۲-۱۰- اساس فیزیکی سیستم ATOM
۶۰	۲-۱۱- توابع موج اتمی حالت پایه در تقریب هارتری - فوک
۶۱	۲-۱۲- تقریب هارتری - فوک دیراک
۶۲	۲-۱۳- محاسبه توابع موج هارتری - فوک حالت برانگیخته
۶۵	۲-۱۴- ضرایب معادله
۶۶	۲-۱۵- سطح مقطع فتو یونش و قدرت های نوسانگر
۶۸	۲-۱۶- قدرت های نوسانگر تعمیم یافته اتمی در تقریب هارتری - فوک و

RPAE

- ۷۰- ۱۷-۲- سطح مقطع برانگیختگی الکترون - تماسی و یونش در تقریب هارتری - فوک و RPAE
- ۷۲- ۱۸-۲- یونش نزدیک به؟؟ آستانه ب محسوب کردن بر هم کنش فرا بر خورده
- ۷۳- ۱۹-۲- بخش خود انرژی تابع گرین تک - ذره ای
- ۷۷- ۲۰-۲- پهنای تراز اتمی در RPAE
- ۸۰- ۲۱-۲- برانگیختگی سه گانه با القای الکترون در تقریب موج انحراف یافته مرتبه اول و دوم
- ۸۱- ۲۲-۲- طیف تابش قرمزی
- ۸۲- ۲۳-۲- جذب نوری و یونش تک - الکترونی با احتساب بخش خود - انرژی فتو الکترون
- ۸۳- ۲۴-۲- تاخیر میون منفی
- ۸۴- ۲۵-۲- توصیف ریاضی ویژگی های اتمی
- ۸۹- فصل سوم
- ۸۹- ۱-۳- دیدگاه نظری
- ۹۱- ۲-۳- تکنیک های محاسبه
- ۹۷- ۱-۲-۳- محاسبه X^K, Y^K
- ۹۸- ۲-۲-۳- روش عددی برای معادله دیفرانسیل
- ۱۰۱- ۳-۲-۳- تصحیح ویژه مقدار انرژی
- ۱۰۳- ۴-۲-۳- انرژی کل اتم در تقریب هارتری - فوک
- ۱۰۳- ۵-۲-۳- تکنیک اسپین - قطیده
- ۱۰۴- ۳-۳- معادلات هارتری - فوک - دیراک خود - سازگار شعاعی
- ۱۰۵- ۱-۳-۳- دیدگاه نظری
- ۱۱۰- ۴-۳- تکنیک محاسبه

۱۱۰	۳-۴-۱- عمومی
۱۱۳	۳-۴-۲- تغییر متغیر ها
۱۱۵	۳-۴-۳- توابع $\tilde{Q}_i(\rho), \tilde{p}_i(\rho)$
۱۱۶	۳-۴-۴- روش عددی برای معادله دیفرانسیلی
۱۱۸	۳-۵- تصحیح ویژه مقدارهای انرژی
۱۱۹	۳-۶- معادله هارتری - فوک شعاعی برای هسته مستقر شده
۱۲۰	۳-۶-۱- دیدگاه نظری
۱۲۱	۳-۷- روش محاسبه
۱۲۱	۳-۷-۱- کلیات
۱۲۲	۳-۷-۲- روش عددی برای حالت های پیوسته
۱۲۳	۳-۷-۳- محاسبه تسریع همگرایی روش در جمله تبدیلی
۱۲۴	۳-۷-۴- پارامترهای غیر قطری
۱۲۸	۳-۷-۵- نرمالیزاسیون و جابجایی فاز تابع موج شعاعی در حالت پیوسته
۱۳۰	۳-۷-۶- معادله هارتری شعاعی برای یک مزون یا یک بوزیترون در میدان هسته مستقر شده
۱۳۳	۳-۸- انتخاب توابع موج
۱۳۶	۳-۹- ضرایب معادله هارتری - فوک
۱۳۷	۳-۹-۱- دیدگاه نظری
۱۴۱	۳-۱۰- روش حل
۱۴۵	فصل چهارم
۱۴۵	۴-۱- دیدگاه نظری
۱۴۷	۴-۲- روش محاسبه
۱۴۷	۴-۲-۱- عناصر ماتریس دو قطبی در تقریب هارتری - فوک
۱۵۰	۴-۲-۲- عناصر ماتریس کولنی

- ۱۵۵ ۴-۲-۳- عناصر ماتریس دو قطبی
- ۱۵۸ ۴-۲-۴- معادله RPAE کاهش یافته به مجموعه معادلات جبری
- ۱۶۰ ۴-۲-۵- حل معادله RPAE
- ۱۶۱ ۴-۲-۶- حل معادله RPAE: حالت های گسسته
- ۱۶۳ ۴-۲-۷- یونش نوری اتم های با پوسته های نیمه پر
- ۱۶۵ ۴-۳- قدرت های نوسانگر تعمیم یافته
- ۱۶۶ ۴-۳-۱- دیدگاه نظری
- ۱۶۷ ۴-۳-۲- روش محاسبه
- ۱۷۰ ۴-۴- یونش الکترون - تماسی
- ۱۷۱ ۴-۴-۱- دیدگاه نظری
- ۱۷۳ ۴-۴-۲- روش محاسبه
- ۱۷۸ ۴-۵- قدرت های نوسانگر تعمیم یافته با PCI
- ۱۷۸ ۴-۵-۱- دیدگاه نظری
- ۱۸۰ ۴-۵-۲- تکنیک محاسبه
- ۱۸۱ ۴-۶- یونش نوری پوسته - درونی با PCI
- ۱۸۲ ۴-۶-۱- دیدگاه نظری
- ۱۸۲ ۴-۷- روش محاسبه
- ۱۸۲ ۴-۷-۱- کلیات
- ۱۸۸ ۴-۷-۲- مسئله مرزی
- ۱۸۹ ۴-۷-۳- تغییر متغیر ها
- ۱۹۲ ۴-۷-۴- شرایط مرزی در $r \sim 0$
- ۱۹۲ ۴-۷-۵- انتگرال گیری سیستمی از معادلات ناحیه درونی $r \leq R_{at}$
- ۱۹۳ ۴-۷-۶- شرایط مرزی در $r \rightarrow R_{\infty}$
- ۱۹۵ ۴-۷-۷- انتگرال گیری مجموعه معادلات در ناحیه خارجی $r > R_{at}$

۱۹۸	۴-۷-۸- الحاق پاسخ ها و محاسبه توابع مطلوب
۱۹۹	۴-۷-۹- محاسبه سطح مقطع یونش نوری
۲۰۱	۴-۸- یونش نزدیک - آستانه
۲۰۱	۴-۸-۱- دیدگاه نظری
۲۰۲	۴-۸-۲- روش محاسبه
۲۰۷	فصل پنجم
۲۰۷	۵-۱- بخش خود - انرژی از تابع گرین تک - ذره ای
۲۰۷	۵-۱-۱- دیدگاه نظری
۲۱۱	۵-۱-۲- روش محاسبه
۲۱۲	۵-۲- فازهای پراکندگی و توابع موج الکترون با احتساب بخش خود - انرژی
۲۱۲	۵-۲-۱- دیدگاه نظری
۲۱۸	۵-۲-۲- روش محاسبه
۲۲۰	۵-۳- پهنای تراز های اتمی تلاشی اوژر
۲۲۱	۵-۳-۱- دیدگاه نظری
۲۲۴	۵-۳-۲- روش محاسبه
۲۲۶	۵-۴- احتمال تلاشی اوژر دو تایی
۲۲۶	۵-۴-۱- دیدگاه نظری
۲۳۲	۵-۴-۲- روش محاسبه
۲۳۳	۵-۵- تلاشی تک - فوتونی حالت های دو حفره ای
۲۳۴	۵-۵-۱- دیدگاه نظری
۲۳۶	۵-۵-۲- روش محاسبه
۲۳۸	۵-۶- برانگیختگی تراز سه تایی با القای الکترون
۲۳۸	۵-۶-۱- دیدگاه نظری
۲۴۱	۵-۶-۲- روش محاسبه

۲۴۷	فصل ششم
۲۴۷	۱-۶- تابش ترمزی پرتابه پرتاثری
۲۴۷	۱-۱-۶- دیدگاه نظری
۲۵۰	۲-۱-۶- روش محاسبه
۲۵۳	۲-۶- تابش ترمزی با انرژی متوسط
۲۵۴	۱-۲-۶- دیدگاه نظری
۲۵۷	۳-۶- روش محاسبه
۲۵۷	۱-۳-۶- عنصر ماتریس تابش ترمزی مستقیم
۲۶۱	۲-۳-۶- عنصر ماتریس تابش ترمز قطبی
۲۶۳	۳-۳-۶- دامنه های تابش ترمزی بر "سطح انرژی"
۲۶۴	۴-۶- سطح مقطع جنوب نوری
۲۶۵	۱-۴-۶- دیدگاه نظری
۲۷۱	۵-۶- روش محاسبه
۲۷۱	۱-۵-۶- کلیات
۲۷۳	۲-۵-۶- بخش خود- انرژی کاهش پذیر و عناصر ماتریس دو قطبی موثر
۲۷۶	۶-۶- دیدگاه های تسخیر میون
۲۷۶	۱-۶-۶- دیدگاه نظری
۲۷۸	۲-۶-۶- روش محاسبه
۲۸۱	فصل هفتم
۲۸۱	۱-۷- چگالی الکترون
۲۸۳	۲-۷- چگالی جفت
۲۸۹	۳-۷- حفره فرمی و کولمب
۲۹۱	۱-۳-۷- حفره فرمی
۲۹۳	۲-۳-۷- حفره کولمب
۲۹۵	۴-۷- چگالی الکترون به عنوان متغیر اصلی : تلاشهای اولیه

- ۲۹۶ ۷-۴-۱- آیا این کمیت معنی دارد؟
- ۲۹۸ ۷-۴-۲- مدل توماس-فرمی
- ۲۹۹ ۷-۴-۳- تقریب اسلیری تعویض هارتری-فاک
- ۳۰۱ ۷-۵-۵- قضایای اوهنبرگ - کان
- ۳۰۲ ۷-۵-۱- قضیه اول اوهنبرگ-کان، اثبات وجود
- ۳۰۷ ۷-۵-۲- قضیه دوم اوهنبرگ-کان: اصل تغییر
- ۳۰۹ ۷-۵-۳- روش «جستجو-مقیدسازی»
- ۳۱۱ ۷-۵-۴- آیا تابع موج حالت پایه در نظریه تابع چگالی را می‌شناسیم؟
- ۳۱۲ ۷-۵-۵- بحث
- ۳۱۴ ۷-۶- چگالی الکترون به عنوان متغیر اصلی: تلاشهای اولیه
- ۳۱۵ ۷-۶-۱- آیا این کمیت معنی دارد؟
- ۳۱۷ ۷-۶-۲- مدل توماس-فرمی
- ۳۱۸ تقریب اسلیری تعویض هارتری-فاک
- ۳۲۰ ۷-۷- قضایای اوهنبرگ - کان
- ۳۲۱ ۷-۷-۱- قضیه اول اوهنبرگ-کان، اثبات وجود
- ۳۲۵ ۷-۷-۲- قضیه دوم اوهنبرگ-کان: اصل تغییر
- ۳۲۸ ۷-۷-۳- روش «جستجو-مقیدسازی»
- ۳۳۰ ۷-۷-۴- آیا تابع موج حالت پایه در نظریه تابع چگالی را می‌شناسیم؟
- ۳۳۱ ۷-۷-۵- بحث
- ۳۳۵ فصل هشتم
- ۳۳۶ ۸-۱- اربیتالها و سیستم مرجع بدون برهمکنش
- ۳۳۹ ۸-۲- معادلات کان-شم
- ۳۴۴ ۸-۳- بحث
- ۳۴۴ ۸-۳-۱- پتانسیل کان-شم موضعی است
- ۳۴۵ ۸-۳-۲- انرژی تعویض-همبستگی در روشهای کان-شم و هارتری-

- ۳۴۸ ۳-۳-۸ - آیا اربیتالهای کان-شم مفهوم دارند؟
- ۳۵۰ ۴-۳-۸ - آیا روش کان-شم یک روش تک دترمینانی است؟
- ۳۵۳ ۵-۳-۸ - پیکربندی کان-شم محدود شده
- ۳۶۴ ۶-۳-۸ - حالات برانگیخته و مشکل مضاعف (Multiple)
- ۳۷۴ ۴-۸ - در جستجوی توابع تعویض - همبستگی تقریبی
- ۳۷۶ ۱-۴-۸ - آیا راهکار مدونی وجود دارد؟
- ۳۷۸ ۲-۴-۸ - اتصال آدیاباتیک (Adiabatic Connection)
- ۳۸۲ ۳-۴-۸ - از حوزه‌ها تا توابع
- ۳۸۳ ۴-۴-۸ - تقریبهای چگالی موضعی و چگالی - اسپین موضعی
- ۳۹۰ ۵-۴-۸ - تقریب گراذهانی تعمیم یافته (Generalized)
- ۳۹۷ ۶-۴-۸ - توابع هیبرید
- ۴۰۸ ۷-۴-۸ - خود کنش (Self-Interaction)
- ۴۱۲ ۸-۴-۸ - رفتار مجانبی (Asymptotic) پتانسیلهای تعویض - همبستگی
- ۴۱۵ ۹-۴-۸ - بحث
- ۴۱۹ فصل نهم
- ۴۲۰ ۱-۹ - معرفی یک پایه (Basis): Ansatz LCAO در معادلات کان-شم
- ۴۲۶ ۲-۹ - توابع پایه
- ۴۳۵ ۳-۹ - محاسبه جمله کولمب
- ۴۴۰ ۴-۹ - تکنیکهای مربع سازی برای تعیین پتانسیل تعویض - همبستگی
- ۴۴۸ ۵-۹ - تکنیکهای بدون شبکه (Grid-Free) برای مواجهه با پتانسیل - همبستگی
- ۴۵۴ ۶-۹ - به سوی نظریه مقیاس بندی خطی کان-شم (Linear Scaling)