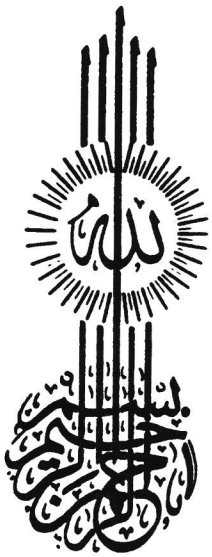
بسم الله الرحمن الرحيم

كيمياء الكم

QUANTUM CHEMISTRY

(الجزء الأول)

تأليف

د. إيرا ن. ليفين

Ira N. Levine

أستاذ الكيمياء الفيزيائية

جامعة مدينة نيويورك - قسم الكيمياء

ترجمة

أ. د. معتصم إبراهيم خليل

أستاذ الكيمياء غير العضوية

د. عبدالله بن علي القحطاني

أستاذ الكيمياء الفيزيائية المشارك

جامعة الملك سعود - قسم الكيمياء

النشر العلمي والمطابع - جامعة الملك سعود

ص.ب ٦٨٩٥٣ - الرياض ١١٥٣٧ - المملكة العربية السعودية

ⓒ **جامعة الملك سعود، ١٤٣١هـ (٢٠١٠م).**

هذه ترجمة عربية مصرح بها من مركز الترجمة بالجامعة لكتاب:

Quantum Chemistry
By: Ira N. Levine
© Pearson Education, 2000.

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

ليفين، إيرا ن.

كيمياء الكم./ إيرا ن. ليفين؛ معتصم إبراهيم خليل؛ عبدالله بن علي القحطاني. - الرياض، ١٤٣٠هـ.

٤٧٥ص، ٢مج، ٢١×٢٨سم

ردمك: ٢ - ٥٣٦ - ٥٥ - ٩٩٦٠- ٩٧٨ (مجموعة)

٩ - ٥٣٧ - ٥٥ - ٩٩٦٠- ٩٧٨ (ج ١)

١- كيمياء الكم أ. خليل، معتصم إبراهيم (مترجم) ب. القحطاني، عبدالله بن علي (مترجم) ج. العنوان

ديوي ٥٤١,٢٨ ١٤٣٠/٥٧١٣

رقم الإيداع: ١٤٣٠/٥٧١٣

ردمك: ٢ - ٥٣٦ - ٥٥ - ٩٩٦٠- ٩٧٨ (مجموعة)

٩ - ٥٣٧ - ٥٥ - ٩٩٦٠- ٩٧٨ (ج ١)

حكمت هذا الكتاب لجنة متخصصة، شكلها المجلس العلمي بالجامعة، وقد وافق المجلس العلمي على نشره - بعد اطلاعه على تقارير المحكمين - في اجتماعه التاسع عشر للعام الدراسي ١٤٢٨/١٤٢٩هـ المعقود بتاريخ ١٤٢٩/٦/١٨هـ الموافق ٢٠٠٨/٦/٩م.

النشر العلمي والمطابع ١٤٣١هـ

مقدمة المترجمين

الحمد الله ونشكره أن مكننا من ترجمة هذا السفر العلمي ونصلي على رسوله الكريم، وبعد ؛

لقد تنامت وازدادت أهمية علم ميكانيكا الكم في المجالات الكيميائية، وهو فرع من العلوم الأساسية التي يبنى ويتأسس عليها فهمنا واستيعابنا لأساسيات عديدة في الكيمياء بجميع فروعها، ويربط ويكامل بين معارفنا في الرياضيات والفيزياء والكيمياء تكاملاً يكاد يلغي تلك الخطوط الوهمية التي تفصل بينها، ويمكننا من تحديث معالجتنا للمسائل والمباحث الكيميائية.

ولما كان الطالب الجامعي هو محور اهتمامنا وتفوقه هو هدفنا حتى نفخر به خريجاً، فقد حرصنا على تقديم هذا الكتاب الذي يعد من أمهات الكتب في كيمياء الكم باللغة العربية ليكون عونا لطلاب الكيمياء أثناء دراستهم الجامعية وبعد تخرجهم إن قرروا التخصص في كيمياء الكم كطلاب دراسات عليا.

وقد حرصنا في الترجمة على اختيار المفردات الشائعة بهدف تسهيل فهم مادة الكتاب من قبل الطلاب وحاولنا جاهدين، وقد نجحنا إلى حد كبير، أن يكون إخراج الكتاب العربي مطابقا للكتاب الأصلي لكي تسهل عملية التردد ما بين الكتابين لمن أراد ذلك. وفي الوقت الذي نفتخر فيه بتقديم هذا العمل ليكون إضافة للمكتبة العربية إلا أننا نقدر أي تعليقات واقتراحات من قبل القراء والمختصين ونعدهم بأن تكون محل إهتمامنا الكبير عند صدور الطبعات القادمة من هذا الكتاب.

ولا يفوتنا أن نشكر من كان له دور في إكمال هذا العمل، فنتقدم بالشكر الجزيل لجامعة الملك سعود ممثلة في مركز الترجمة على الدعم المالي والتشجيع لكل من كان لديه رغبة في نقل المعرفة العلمية بلغتنا الأم. كما نتقدم بالشكر والامتنان لمن أسند إليهم تحكيم هذا الكتاب ولمن قاموا بالمراجعة النهائية ولمن تمت استشارتهم من الزملاء من داخل قسم الكيمياء بجامعة الملك سعود وخارجه لما كان لآرائهم ومقترحاتهم الدور الكبير في إنتاج هذا العمل.

نسأل الله العلي القدير أن يجعل أعمالنا خالصة لوجهه الكريم وأن ينفعنا بما علمنا وآخر دعوانا أن الحمد لله رب العالمين، ، ، ،

المترجمان

شكر من المؤلف

To my quantum chemistry students: Vincent Adams, Ricardo Alkins, Byongjae An, Salvatore Atzeni, Abe Auerbach, Andrew Auerbach, Joseph Barbuto, David Baron, Christie Basseth, Sene Bauman, Howard Becker, Michael Beitchman, Anna Berne, Kamal Bharucha, Susan Bienenfeld, Mark Blackman, Toby Block, Allen Bloom, Demetrios Boyce, Diza Braksmayer, Steve Braunstein, Paul Brumer, Jean Brun, Lynn Caporale, Richard Carter, Shih-ching Chang, Ching-hong Chen, Hongbin Chen, Huifen Chen, Kangmin Chen, Kangping Chen, Guang-Yu Cheng, Yu-Chi Cheng, El-hadi Cherchar, Jeonghwan Cho, Ting-Yi Chu, Kyu Suk Chung, Joseph Cincotta, Robert Curran, Joseph D'Amore, Ronald Davy, Aly Dominique, Xiao-Hong Dong, Barry DuRon, Azaria Eisenberg, Myron Elgart, Musa Elmagadam, Anna Eng, Stephen Engel, Quianping Fang, Larry Filler, Seymour Fishman, Donald Franceschetti, Mark Freilich, Michael Freshwater, Tobi Eisenstein Fried, Joel Friedman, Kenneth Friedman, Aryeh Frimer, Mark Froimowitz, Paul Gallant, Hong Gan, Mark Gold, Stephen Goldman, Neil Goodman, Roy Goodman, Isaac Gorbaty, Steven Greenberg, Michael Gross, Zhijie Gu, Judy Guiseppi-Henry, Lin Guo, Runyu Han, Sheila Handler, Warren Hirsch, Richard Hom, Kuo-zong Hong, Mohammed Hossain, Fu-juan Hsu, Bo Hu, Jong-chin Hwan, Leonard Itzkowitz, Mark Johnson, Kirby Juengst, Abraham Karkowsky, Spiros Kassomenakis, Michael Kittay, Colette Knight, Barry Kohn, Yasemin Kopkalli, David Kurnit, Athanasios Ladas, Alan Lambowitz, Bentley Lane, Yedidyah Langsam, Surin Laosooksathit, Chi-Yin Lee, Stephen Lemont, Elliot Lerner, Jiang Li, Zheng Li, Israel Liebersohn, Joel Liebman, Steven Lipp, Letian Liu, James Liubicich, John Lobo, Rachel Loftoa, Wei Luo, Dennis Lynch, Mohammad Malik, Pietro Mangiaracina, Louis Maresca, Allen Marks, Tom McDonough, Antonio Mennito, Ira Michaels, Bin Mo, Paul Mogolesko, Safrudin Mustopa, Irving Nadler, Stuart Nagourney, Kwazi Ndlovu, Harold Nelson, Wen-Hui Pan, Padmanabhan Parakat, Frank Pecci, Albert Pierre-Louis, Paloma Pimenta, Eli Pines, Jerry Polesuk, Arlene Gallanter Pollin, James Pollin, Lahanda Punyasena, Cynthia Racer, Munira Rampersaud, Caleen Ramsook, Robert Richman, Richard Rigg, Bruce Rosenberg, Martin Rosenberg, Robert Rundberg, Edward Sachs, Mahendra Sawh, David Schaeffer, Gary Schneier, Neil Schweid, Judith Rosenkranz Selwyn, Gunnar Senum, Steven Shaya, Allen Sheffron, Wu-mian Shen, Yuan Shi, Lawrence Shore, Alvin Silverstein, Barry Siskind, Jerome Solomon, De Zai Song, Henry Sperling, Joseph Springer, Charles Stimler, Helen Sussman, David Trauber, Choi Han Tsang, King-hung Tse, Michele Tujague, Irina Vasilkin, Natalya Voluschuk, SammyWainhaus, Alan Waldman, Huai Zhen Wang, Zheng Wang, Robert Washington, Janet Weaver, William Wihlborg, Peter Williamsen, Shiming Wo, Guohua Wu, Jinan Wu, Xiaowen Wu, Ming Min Xia, Wei-Guo Xia, Xiaoming Ye, Ching-Chun Yiu, Wen Young, Xue-yi Yuan, Ken Zaner, Juin-tao Zhang, Hannian Zhao, Li Li Zhou, Shan Zhou, Yun Zhou.

مقدمة المؤلف

يستهدف هذا الكتاب مقررات كيمياء الكم لطلاب السنة الأولى من الدراسات العليا وطلاب المراحل المتقدمة من طلاب الجامعة.

وتتضمن المواد الجديدة في الطبعة الخامسة ما يلي :

- طريقة نومروف للحل العددي لمعادلة شرودينجر أحادية الأبعاد (الأقسام ٤,٤ ، ٦,٩ ، و١٣,٢).
- طريقة القياسات الخطية (القسم ١٥,٥).
- الجهود الألكتروستاتيكية الجزيئية (القسم ١٥,٨).
- البحث التطابقي (القسم ١٥,١٢).
- الترددات الاهتزازية (القسم ١٥,١٣).
- الخواص الثرموديناميكية (القسم ١٥,١٤).
- برامج من البداية في كيمياء الكم (القسمان ١٥,١٥ ، و١٥,١٦).
- الطرق التركيبية (القسم ١٥,٢١).
- اثر المذيب (القسمان ١٥,٢ ، و١٦,٧).
- الطرق ONIOM ، IMOMO ، IMOMM (القسم ١٥,٢٦).

ولقد تم التوسع كثيراً في المواضيع التالية :

- النظرية الفعالة للكثافة (القسم ١٥,٢٠).
- طريقة الميكانيكية الجزيئية (القسم ١٦,٦).
- الطرق شبه العددية (القسم ١٦,٥).
- تطبيع البنية الهندسية (القسم ١٥,١١).
- مقارنة الطرق (الفصل السابع عشر).

إن الدور المتنامي لكيمياء الكم يجعلها مرغوبة جداً للطلاب في كل مجالات الكيمياء ليفهموا الطرق الحديثة لحساب البنية الإلكترونية، ولقد كتب هذا الكتاب وفي المخيلة هذا الهدف.

لقد حاولت أن أجعل التفسيرات واضحة وكاملة بدون القفز من فوق النقاط الصعبة وإعطاء تفاسير مبهمة، لقد أعطيت الاشتقاقات بتفاصيل كافية للتمكن من متابعتها بسهولة وتجنبت اللجوء إلى المقولة المستفزة، " ويمكن توضيح أنه" وذلك بقدر من الإمكان. إن الهدف هو إعطاء الطالب فهماً قوياً للمجالات الفيزيائية والرياضية لميكانيكا الكم والبنية الالكترونية، لقد صمم هذا الكتاب ليكون مفيداً للطلاب في كل فروع الكيمياء، وليس فقط لكيميائي الكم في المستقبل، ولكن فإن العرض قد تم بحيث أن أولئك الذين سيواصلون في كيمياء الكم سيكون لهم أسس جيدة ولن يعاقوا بالنواقص.

إن العائق الذي يواجهه كثير من طلاب الكيمياء في دراسة ميكانيكا الكم هو عدم تعودهم مع كثير من متطلبات الرياضيات. ولقد ضمنت في هذا الكتاب معالجات مفصلة للمؤثرات والمعادلات التفاضلية، والمعادلات الخطية المتزامنة، ومواضيع أخرى يحتاج لها. وبدلاً من وضع الرياضيات في باب مدخلي أو في شكل سلسلة ملحقات، فقد كاملت الرياضيات مع الفيزياء والكيمياء.

إن التطبيق المباشر للرياضيات لحل مسالة في ميكانيكا الكم سيجعل من الرياضيات ذات معنى أكثر للطلاب أكثر من دراسة الرياضيات منفصلة. ولقد انتبهت أيضاً لمحدودية الخلفية الفيزيائية لكثير من طلاب الكيمياء فاستعرضت مواضيع في الفيزياء.

لقد استفاد هذا الكتاب من مراجعات واقتراحات ليلاند آلن، كولن بيرد، جيمس بولتون، دونالت شيست، ملفت فينبيرج، جوردون أ. قالوب، ديفيد جولدبيرج، وارن هير، هانس جافي، نيل كستنر، هاري كنج، بيتر كولمان، إدول لوارس، جول ليبمان، فرانك ميكس، روبرت ميتزقر، ويليام بالك، قاري فيفر، رسل بتزر، كينيث ساندر، هاريسون شل، جيمس ج. ب.، ستيوارت، ريتشارد ستيرات، أريك وارشل، مايكل زينر.

أقسام من الطبعة الخامسة راجعها كل من ستيفن بيرناسك، و. ديفيد شاندس، ر. جيمس كروست، ديفيد فيرلي، نزيس هاملتون، جون هيد ن ميكولوس كيرتس، ميل ليفي، بيدرو موينى، شارون بالمر، جون س. وين، ولقد سمح لي مفرر روبرت قوقوال في الكيمياء الحاسوبية على الشبكة بمركز الحسابات الفائقة الدقة بكارولينا الشمالية بالتدرب في استخدام أجهزة الحاسوب عالي الدقة.

أرجو أن أشكر هؤلاء الناس وكثير آخرين مجهولين من المراجعين وإني لأقدر استلام أي اقتراحات لدى القراء لتحسين هذا الكتاب.

إيرا ن. ليفين

INLevine@brooklyn.cuny.edu

المحتويات

مقدمة المترجمين ..... هـ
شكر من المؤلف ..... ز
مقدمة المؤلف ..... ط

الجزء الأول

الفصل الأول: معادلة شرودينجر

(١,١) كيمياء الكم ١
(١,٢) خلفية تاريخية لميكانيكا الكم ٢
(١,٣) مبدأ الشك (أو الاستحالة) ٧
(١,٤) معادلة شرودينجر التابعة للزمن ٩
(١,٥) معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن ١٥
(١,٦) الاحتمالية ١٧
(١,٧) الأعداد المركبة ٢٠
(١,٨) الوحدات ٢٣
(١,٩) خلاصة ٢٣
مسائل ٢٤

الفصل الثاني: الجسيم في صندوق

(٢,١) المعادلات التفاضلية ٢٧
(٢,٢) الجسيم في صندوق أحادي البعد ٢٩
(٢,٣) الجسيم الحر في مسار واحد ٣٦

(٢,٤) جسيم في بئر مستطيلة الشكل..... ٣٧
(٢,٥) النفقية ٤٠
(٢,٦) خلاصة ٤١
مسائل ٤٢

الفصل الثالث: المؤثرات

(٣,١) المؤثرات..... ٤٧
(٣,٢) دوال المحافظة وقيم المحافظة ٥٢
(٣,٣) المؤثرات وميكانيكا الكم ٥٥
(٣,٤) معادلة شرودينجر متعددة الجسيمات ثلاثية الأبعاد ٦١
(٣,٥) الجسيم في صندوق ثلاثي الأبعاد ٦٥
(٣,٦) التعددية ٧٠
(٣,٧) القيم المتوسطة ٧١
(٣,٨) متطلبات الدالة الموجية المقبولة..... ٧٥
(٣,٩) خلاصة ٧٧
مسائل ٧٨

الفصل الرابع: المهتز التوافقي

(٤,١) حل المعادلات التفاضلية بطريقة المتسلسلة الأسية..... ٨٣
(٤,٢) المهتز التوافقي أحادي البعد ٨٧
(٤,٣) اهتزاز الجزيئات..... ٩٨
(٤,٤) حل عددي لمعادلة شرودينجر ذات البعد الواحد المستقلة عن الزمن..... ١٠٣
(٤,٥) خلاصة ١١٧
مسائل ١١٨

الفصل الخامس: العزم الزاوي

(٥,١) التحديد المتزامن لعدة خواص ١٢٥
(٥,٢) المتجهات..... ١٢٩
(٥,٣) العزم الزاوي لنظام أحادي الجسيم..... ١٣٦
(٥,٤) طريقة المؤثر السلمي للعزم الزاوي ١٥٤

(٥,٥) خلاصة ١٦١
مسائل ١٦٢

الفصل السادس: ذرة الهيدروجين

(٦,١) مسالة القوى المركزية لجسيم واحد ١٦٥
(٦,٢) الجسيمات غير المتداخلة وفصل المتغيرات ١٦٨
(٦,٣) اختزال مسألة الجسيمين إلى مسألة جسيم واحد ١٧٠
(٦,٤) الدوار الصلب لجسيمين ١٧٤
(٦,٥) ذرة الهيدروجين ١٧٩
(٦,٦) الدوال الموجية لذرة الهيدروجين بالحالات المقيدة ١٨٩
(٦,٧) مدارات شبية الهيدروجين ٢٠٠
(٦,٨) تأثير زيمان ٢٠٤
(٦,٩) حل عددي لمعادلة شرودينجر القطرية ٢٠٧
(٦,١٠) خلاصة ٢٠٩
مسائل ٢١٠

الفصل السابع: نظريات ميكانيكا الكم

(٧,١) مقدمة ٢١٥
(٧,٢) المؤثرات الهيرميتية ٢١٦
(٧,٣) التمديد بدلالة دوال المحافظة ٢٢٣
(٧,٤) دوال المحافظة للمؤثرات التبادلية ٢٣٠
(٧,٥) الازدواجية ٢٣٤
(٧,٦) قياس وتطابق الحالات ٢٣٨
(٧,٧) الدوال المحافظة للموقع ٢٤٤
(٧,٨) فرضيات ميكانيكا الكم ٢٤٨
(٧,٩) قياس وتفسير ميكانيكا الكم ٢٥٤
(٧,١٠) المصفوفات ٢٥٨
(٧,١١) خلاصة ٢٦٢
مسائل ٢٦٣

الفصل الثامن: طريقة التغيير

(٨,١) نظرية التغيير ٢٧١
(٨,٢) توسيع طريقة التغيير ٢٧٦
(٨,٣) المحددات ٢٧٧
(٨,٤) المعادلات الخطية المتزامنة ٢٨١
(٨,٥) دوال التغيير الخطية ٢٨٦
(٨,٦) المصفوفات وقيم المحافظة ومتجهات المحافظة ٢٩٦
(٨,٧) خلاصة ٣٠٦
مسائل ٣٠٦

الفصل التاسع: نظرية التشويش

(٩,١) مقدمة ٣١٩
(٩,٢) نظرية التشويش غير التعددية ٣٢٠
(٩,٣) المعالجة التشويشية للحالة المستقرة لذرة الهليوم ٣٢٨
(٩,٤) معالجة طريقة التغيير للمستوى المستقر للهليوم ٣٣٣
(٩,٥) نظرية التشويش لمستوى طاقة متعدد ٣٣٧
(٩,٦) تبسيط المعادلة الدنيوية ٣٤٣
(٩,٧) المعالجة التشويشية للحالات المثارة الأولى للهليوم ٣٤٥
(٩,٨) مقارنة طريقتي التشويش والتغيير ٣٥٣
(٩,٩) نظرية التشويش المعتمدة على الزمن ٣٥٤
(٩,١٠) تداخل الإشعاع والمادة ٣٥٧
(٩,١١) خلاصة ٣٦٠
مسائل ٣٦١

الفصل العاشر: غزل الإلكترون ومبدأ باولي

(١٠,١) غزل الإلكترون ٣٦٥
(١٠,٢) المغزل وذرة الهيدروجين ٣٦٩
(١٠,٣) مبدأ باولي ٣٦٩
(١٠,٤) ذرة الهيليوم ٣٧٣
(١٠,٥) مبدأ الاستبعاد لباولي ٣٧٦

(١٠,٦) محددات سلاتر ٣٨٢
(١٠,٧) المعالجة التشويشية للحالة المستقرة لليثيوم ٣٨٤
(١٠,٨) معالجات طريقة التغيير للحالة المستقرة لليثيوم ٣٨٦
(١٠,٩) العزم المغناطيسي المغزلي ٣٨٧
(١٠,١٠) المؤثرات السلمية للغزل الإلكتروني ٣٨٨
(١٠,١١) خلاصة ٣٩٠
مسائل ٣٩١

الفصل الحادي عشر: الذرات متعددة الإلكترونات

(١١,١) طريقة هارتري – فوك للمجال ذاتي التناسق (SCF) ٣٩٥
(١١,٢) المدارات والجدول الدوري ٤٠٤
(١١,٣) ارتباط الإلكترون ٤٠٨
(١١,٤) جمع العزوم الزاوية ٤١٢
(١١,٥) العزم الزاوي في الذرات عديدة الإلكترونات ٤١٩
(١١,٦) التداخلات المدارية – المغزلية ٤٣٥
(١١,٧) المؤثر الهملتوني الذري ٤٣٨
(١١,٨) قواعد سلاتر وكوندون ٤٤١
(١١,٩) خلاصة ٧٤٥
مسائل ٤٤٦

الفصل الثاني عشر: التماثل الجزيئي

(١٢,١) عناصر التماثل والعمليات ٤٥١
(١٢,٢) مجموعات التماثل النقطية ٤٦٢
(١٢,٣) خلاصة ٤٧١
مسائل ٤٧٢

الجزء الثاني

الفصل الثالث عشر: التركيب الإلكتروني للجزيئات ثنائية الذرة

(١٣,١) تقريب بورن – أوبنهايمر ٤٧٧
(١٣,٢) الحركة النووية في الجزيئات ثنائية الذرة ٤٨٢

(١٣,٣) الوحدات الذرية..... ٤٨٩
(١٣,٤) أيون جزيء الهيدروجين ٤٩٠
(١٣,٥) المعالجات التقريبية لحالة H_2^+ الإلكترونية الأرضية..... ٤٩٦
(١٣,٦) المدارات الجزيئية لحالات H_2^+ المثارة ٥٠٨
(١٣,٧) ترتيب المدارات الجزيئية للجزيئات ثنائية الذرة متشابهة النواتين ٥١٥
(١٣,٨) المصطلحات الإلكترونية للجزيئات ثنائية الذرة..... ٥٢٤
(١٣,٩) جزيء الهيدروجين ٥٣١
(١٣,١٠) معالجة رابطة التكافؤ للجزيء H_2 ..... ٥٣٥
(١٣,١١) مقارنة بين نظريتي المدارات الجزيئية ورابطة التكافؤ ٥٤٠
(١٣,١٢) الدوال الموجية للمدارات الجزيئية ورابطة التكافؤ للجزيئات ثنائية الذرة متشابهة النواتين..... ٥٤٣
(١٣,١٣) الحالات المثارة للجزيء H_2..... ٥٤٧
(١٣,١٤) كثافة احتمال الإلكترون ٥٤٨
(١٣,١٥) عزوم ثنائي القطب ٥٥١
(١٣,١٦) طريقة هارتري – فوك للجزيئات ٥٥٥
(١٣,١٧) دوال موجة المجال ذاتي التناسق للجزيئات ثنائية الذرة ٥٦٩
(١٣,١٨) معالجة نظرية المدارات الجزيئية للجزيئات ثنائية الذرة مختلفة النواتين ٥٧٤
(١٣,١٩) معالجة رابطة التكافؤ للجزيئات ثنائية الذرة مختلفة النواتين..... ٥٧٩
(١٣,٢٠) تقريب إلكترون التكافؤ ٥٨٠
(١٣,٢١) الدوال الموجية لتداخل الترتيب..... ٥٨١
(١٣,٢٢) خلاصة..... ٥٩١
مسائل ٥٩٤

الفصل الرابع عشر: نظرية فيريال ونظرية هيلمان وفينمان

(١٤,١) نظرية فيريال..... ٦٠٣
(١٤,٢) نظرية فيريال والترابط الكيميائي ٦١١
(١٤,٣) نظرية هيلمان وفينمان ٦١٦
(١٤,٤) النظرية الإلكتروستاتيكية..... ٦١٩
(١٤,٥) خلاصة..... ٦٢٦
مسائل ٦٢٧

الفصل الخامس عشر: معالجات من البداية ودالة الكثافة للجزيئات

(١٥,١) طرق من البداية ودالة الكثافة وشبه التجريبية والميكانيكية الجزيئية..... ٦٢٩
(١٥,٢) المصطلحات الإلكترونية للجزيئات متعددة الذرات ٦٣٠
(١٥,٣) معالجة المدارات الجزيئية للمجال ذاتي التناسق للجزيئات متعددة الذرات..... ٦٣٥
(١٥,٤) الدوال الأساسية..... ٦٣٧
(١٥,٥) تسريع حسابات هارتري – فوك ٦٤٩
(١٥,٦) معالجة المدارات الجزيئية للمجال ذاتي التناسق للجزيء H_2O..... ٦٥٥
(١٥,٧) تحليل التأهيل..... ٦٦٤
(١٥,٨) الجهد الإلكتروستاتيكي الجزيئي والشحنات الذرية ٦٦٩
(١٥,٩) المدارات الجزيئية المتموضعة..... ٦٧٣
(١٥,١٠) معالجة المدارات الجزيئية للمجال ذاتي التناسق للميثان والإيثان والإيثيلين ٦٨٣
(١٥,١١) الشكل الهندسي الجزيئي..... ٦٩٨
(١٥,١٢) البحث التماكبي ٧١٤
(١٥,١٣) الترددات الاهتزازية الجزيئية..... ٧٢٢
(١٥,١٤) الخواص الديناميكية الحرارية ٧٢٦
(١٥,١٥) برامج كيمياء الكم لحسابات من البداية ٧٢٩
(١٥,١٦) إجراء حسابات من البداية..... ٧٣٠
(١٥,١٧) تداخل الترتيب ٧٣٧
(١٥,١٨) نظرية التشويش لمولر وبليسيت..... ٧٤٦
(١٥,١٩) طريقة العنقود المزدوج ٧٥٤
(١٥,٢٠) نظرية دالة الكثافة الوظيفية ٧٦٠
(١٥,٢١) الطرق المركبة لحسابات الطاقة..... ٧٨٤
(١٥,٢٢) تأثيرات المذيب ٧٨٧
(١٥,٢٣) تأثيرات نسبية ٧٩٨
(١٥,٢٤) معالجة رابطة التكافؤ للجزيئات متعددة الذرات ٨٠٠
(١٥,٢٥) طريقة رابطة التكافؤ المعممة..... ٨١٠
(١٥,٢٦) التفاعلات الكيميائية..... ٨١٣
مسائل ٨١٩

الفصل السادس عشر: معالجات الطرق شبه التجريبية وطريقة الميكانيكا الجزيئية للجزيئات

(١٦,١) معالجات المدارات الجزيئية شبه التجريبية للجزيئات المتعاقبة المسطحة ٨٣١
(١٦,٢) طريقة مدارات الإلكترون الحر الجزيئية ٨٣٢
(١٦,٣) طريقة مدارات هوكل الجزيئية ٨٣٥
(١٦,٤) طريقة بارايزر وبار وبوبل ٨٦٣
(١٦,٥) طرق المدارات الجزيئية شبه التجريبية العامة ٨٦٧
(١٦,٦) طريقة الميكانيكية الجزيئية ٨٨٤
(١٦,٧) المعالجات التجريبية وشبه التجريبية لتأثيرات المذيب ٩٠٦
(١٦,٨) التفاعلات الكيميائية ٩١٢
مسائل ٩١٦

الفصل السابع عشر: مقارنة الطرق

(١٧,١) الشكل الهندسي الجزيئي ٩٢٥
(١٧,٢) تغيرات الطاقة ٩٣١
(١٧,٣) الخواص الأخرى ٩٤١
(١٧,٤) الترابط الهيدروجيني ٩٤٥
(١٧,٥) خاتمة ٩٤٨
(١٧,٦) مستقبل ميكانيكا الكم ٩٤٩
مسائل ٩٥١
الملاحق ٩٥٣
المراجع ٩٥٧
أجوبة مسائل مختارة ٩٥٩
ثبت المصطلحات ٩٧٧
أولاً: عربي - إنجليزي ٩٧٧
ثانياً: إنجليزي - عربي ١٠١٠
كشاف الموضوعات ١٠٤٣