

عنوان مقاله:

تکنیک های محاسباتی در شیمی کووانتومی

محل انتشار:

یازدهمین کنفرانس بین المللی شیمی، مهندسی شیمی و نفت (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسنده:

پری ناز کیانوش مقدم - کارشناسی ارشد شیمی معدنی، مشهد

خلاصه مقاله:

شیمی محاسباتی یا شیمی تئوری، مجموعه تکنیک هایی است که برای حل و بررسی مسائل و موضوعات شیمی با استفاده از یکسری پیش فرض ها و داده ها، بر روی رایانه مورد استفاده قرار می گیرد و همانند روش های دیگر در شیمی، ابزاری را در جهت درک واکنش ها و فرآیندهای شیمیایی فراهم می نماید. در مقالهی پیش رو، در راستای بررسی محاسبات در شیمی کووانتومی، تقریب های مختلف در حل معادله ی الکترونی شرودینگر بررسی می شود و در ادامه محاسبه ی مدرن روش تابع دانسیته DFT به عنوان تئوری ای که بر دانسیته ی الکترونی استوار است و نه تابع موج، و ماهیتی تماما کووانتومی دارد، مفصلا توضیح داده خواهد شد.

کلمات کلیدی:

شیمی محاسباتی، مکانیک کووانتومی، معادله ی الکترونی شرودینگر، تقریب های مختلف، روش تابع دانسیته

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1719015>

