ثبت المصطلحات

عربي - إنجليزي

أ

الإحداثيات البيضاوية متحدة المركز	confocal elliptical coordinate
أس الفلك الذري	atomic orbital exponent
الإستقطابية	Polarizability
أعلى فلك جزيئي مليء	Highest Occupied MO
أفلاك اللاربط	nonbonding MO
أفلاك جاوسين	Guassian - Type Orbitals (GTO)
أفلاك ذريه	atomic orbitals
أفلاك فردية الإشغال	singly occupied
أفلاك مشابهة لذرة الهيدروجين	hydrogen - like orbitals
أقل فلك جزيئي غير مليء	Lowest Unoccupied MO
الإلكترونات الداخلية	Core Electrons
إلكترونات ذات مغزلية غير متوازية	antiparallel spin
داله موجيه إلكترونية	electronic wave function
الإهمال المتوسط لتفاضل التداخل	Intermediate Neglect of Differential Overlap
الاتزان الهندسي	geometrical equilibrium
افتراضي (غير مشغول)	virtual

ت

التأثير الكولومي التبادل	Coulombic Interaction
التأثير المتبادل بين الذرات غير المرتبطة	Non-bonded interaction
التأثير المتبادل بين التراكيب الإلكترونية	Molecular Configuration Interaction
التأثير المتبادل بين التشاكيل الإلكترونية	Configuration Interaction wave function
تبادل	commutation
التبادل الدائري	cyclic permutation
تجمعات جزيئيه	aggregates
التجميع الخطي للأفلاك الذرية	Linear Combination of Atomic Orbitals
تحديد القيم الملائمة	optimize
تحوير إهمال التداخل التفاضلي	Modified Neglect of Differential Overlap
تحوير الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي	Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap
التداخل التفاضلي من الدرجة صفر	Zero differential overlap
تركيب لويس النقطي	Lewis dot structures
تركيب واحد للتوزيع الإلكتروني	single configuration
تطابق ثنائي	double degeneracy
تقريب بورن - أوبنهيمر	Born - Oppenheimer Approximation
تكامل التبادل	exchange integral
تكامل التداخل	overlap integral
تكامل الرنين	resonance integral
تكامل ذو أربعة مراكز	four center integral

$\left(\left\langle ij\left\vert\frac{١}{r_{١٢}}\right\vert kl\right\rangle\right)$	
تكامل كولوم	Coulomb Integral
تكاملات التداخل التفاضلي لثنائي الذرات	Diatomic Differential Overlap
تكاملات ذات ثلاث مراكز	three - center integrals
$\left(\left\langle ij\left\vert\frac{١}{r_{١٢}}\right\vert kj\right\rangle\right)$	
تماثل فراغي	spatial symmetry
التنافر الإلكتروني	electron repulsion
تنافر من نوع بورن	Born - Type repulsion
تهجين	hybridization

ث

ثابت و مستقر	bound
ثوابت الازدواج لرنين الإلكترون المغزلي	electron spin resonance coupling constants

ج

جدول التميز	character table
جدول ضرب التماثل	symmetry multiplication table
جذر الاليل	allyl radical
جذر مزدوج	biradical
الجزء الفراغي	space par
جزيئات غير متشابهة الذرات	heteronuclear diatomics
الجهد المؤثر	effective potential
جهد نصف الموجه	half - wave potentials

ح

الحالات الموقوفة	stationary states
الحالة الإلكترونية الدنيا	ground electric state
حالة تجاذب	attractive state
حاله ثلاثية	triplet state
حاله مفرده	singlet state
الحد الأدنى لقاعدة المجموعة	minimal basis set
الحركة الإلكترونية الجزيئية	molecular electronic motion
حسابات تقريبية	semi empirical
حسابات غير تقريبيه	Ab initio
حسن السلوك	well - behaved

خ

الخواص العقدية للأفلاك	nodal properties plots

د

داله متجانسة	homogenous function
داله منتشرة	diffuse function
دراسة مقارنه	comparative study
دوال الإستقطابية	polarization functions
الدوال التوافقيه الكرويه	spherical harmonics
دوال مبنية على التماثل	Symmetry Adopted Function
الديباي (وحدة عزم ثنائي القطب)	Debye

ذ

ذرات ذات غلاف مغلق	closed - shell atoms
ذرة الغلاف المفتوح	open shell atom

ر

رابطه تساهمية	covalent bond
رقم الإشغال	occupation number
الروابط المنحنية	bent bonds

ز

زوج أيوني	ion - pair
زوجي أو متماثل	gerade

س

سطح طاقة وضع له بعدين	Two-Dimentional Potential Energy Surface
سلسلة قوه	power series

ش

الشحنة النووية المؤثرة	effective nuclear charge
شروط الحركة	boundary conditions
الشكل الهندسي الأمثل	geometry optimization
شكل رنيني	resonance structure

ص

الصفة المتجهة	directional character

ض

الضرب المباشر	direct product

ط

الطاقة الإلكترونية	electronic energy
طاقة التشتت	dispersion energy
طاقة التلازم الإلكتروني	electron correlation energy
طاقة التوتر الحلقي	strain energy
طاقة الربط لكل إلكترون	bonding energy per electron
طاقة ربط	binding energy
طاقة عدم التقيد لكل إلكترون	delocalization energy per electron
طاقة نقطة الصفر	Zero - point energy
طاقة هارتري و فوك	Hartree - Fock energy
طريقة الإهمال الكامل للتداخل التفاضلي	Complete Neglect of Differential Overlap
طريقة المجال ذاتي التناسق	Self - Consistent Field method
طريقة تصغير ميل الطاقة	minimization of the energy gradient
طريقة هارتري فوك المقيدة للأنظمة المفتوحة	Restricted Open-Shell Hartree-Fock Method, ROHF
طريقة هارتري فوك غير المقيدة	Unrestricted Hartree-Fock, UHF

ع

عدد درجات الحرية	degrees of freedom
عدم التقيد	delocalization
عزم الحركة الزاوي الفلكي	orbital angular momentum
العزم القطبي الكهربي	electric dipole moment
عزم ثنائي القطب	dipole moment
عزم ثنائي القطب الدائم	permanent dipole moment
عزم ثنائي القطب لحظي	instantaneous dipole moment
عزم ثنائي القطب مستحث	induced dipole moment
عزوم القطبية المتقلبة	fluctuating dipoles
عملية التطابق	identity
عملية التغيير	variation procedure
عملية تتابع	iteration
عملية تحويل فرديه	unitary transformation
عملية تقاطع	crossing
عملية ضرب متجهة	dot product

غ

غير متجهة	scalar
غير متماثل	antisymmetric
غير متماثل	ungerade
غير مقيدة	Non-localized

ف

فريد	unique
فلك جزيئي رابط	bonding MO
فلك جزيئي ضد الربط	antibonding MO
فلك هجين	hybrid orbital

ق

electron - affinity	القابلية الإلكترونية
Euler's theorem	قاعدة أولير
Aufbau Principle	قاعدة البناء
pairing theorem	قاعدة التزاوج
chain rule	قاعدة التسلسل
Contracted Basis Function	قاعدة الداله المنكمشة
basis set	قاعدة المجموعة
extended basis set	قاعدة المجموعة الممتد
Pauli Principle	قاعدة باولي
Brillouin's theorem	قاعدة بريليون
principle of maximum overlap	قاعدة تعظيم التداخل
one - dimensional irreducible representation	قاعدة تمثيل لا يمكن اختزالها في اتجاه واحد
antisymmetry principle	قاعدة عدم التماثل
Basis function	قاعدة مجموعة الدوال
Double Zeta basis set	قاعدة مجموعة زيتا المزدوجة
London dispersion forces	قوى لندن للتشتيت
local minima	قيم صغرى محليه

ك

electron density	الكثافة الإلكترونية

ل

frozen core	لب متجمد

م

ladder operators	مؤثرات السلم
Angular Momentum Operators	مؤثرات عزم الحركة الزاوي
commutator	متبادل
paired	متزاوج
hermition	متماثل
symmetric	متماثل
repulsive field	مجال التنافر
average potential field	مجال الجهد المتوسط
dipole field	مجال ثنائي القطب
point group	مجموعة النقطة
primitive Gausians group	مجموعة جاوسين البدائية
Split - Valence basis set	المجموعة منفصمة التكافؤ قاعدة
determinant of the coefficients	محددة المعاملات
Slater determinant	محددة سلاتر
conjugated	المركبات المقترنة
center of symmetry	مركز التماثل
center of mass	مركز الثقل
doubly occupied	مزدوج الامتلاء
Force Constant Matrix	مصفوفة ثابت القوة
spectroscopy	مطيافية
Photoelectron Spectroscopy	مطيافية الإلكترون الضوئي
secular equation	المعادلات الأزلية
cofactor	المعامل المرافق
Van der Waal coefficient	معامل فان دير فال
variation parameters	معاملات التغير
curvature	مقدار الانحناء
free-valence index	مقياس التكافؤ الحر
localized	مقيدة
fitting	ملاءمة
harmonic oscillator	المهتز التوافقي
Energy Gradient Method	ميل مماس الطاقة

ن

central field system	نظام مركزي المجال
closed shell	نظام مغلق
Molecule Orbital theory	نظرية الأفلاك الجزيئيه

hyper virial theorem	نظرية القوى الفوقية
Virial theorem	نظرية القوى الكميه
Valence Bond Theory	نظرية رابطة التكافؤ
projection operator theorem	نظرية مؤثرات الإسقاط
critical points	نقاط حرجه
valence bond model	نموذج رابطة التكافؤ

ه-

Hartree	هارتري (وحدة طاقه)
alternant hydrocarbons	هيدروكربونات متبادله

ي

span	يتمدد