به نام ایزد دانا

(کاربرگ طرح درس)تاریخ به­روز رسانی:

دانشکده : شیمی نیمسال دوم سال تحصیلی 98-97

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| مقطع:کارشناسی□کارشناسی ارشد□دکتری□ | | | تعداد واحد:نظری...عملی... | | فارسی: شیمی کوانتومی | | نام درس |
| پیش­نیازها و هم­نیازها: | | | | | لاتین:Quantum Chemistry | |
| شماره تلفن اتاق: 31533194 | | | | مدرس/مدرسین: : مصطفی فضلی | | | |
| منزلگاه اینترنتی: | | | | پست الکترونیکی: [mfazli@semnan.ac.ir](mailto:mfazli@semnan.ac.ir) | | | |
| برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس: | | | | | | | |
| اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحٍ اصلی فیزیک کوانتوم و کاربرد آن در شیمی کوانتومی | | | | | | | |
| امکانات آموزشی مورد نیاز: ویدیو پروژکتور | | | | | | | |
| امتحان پایان­ترم | امتحان میان­ترم | ارزشیابی مستمر(کوئیز) | | فعالیت­های کلاسی و آموزشی | | نحوه ارزشیابی | |
| 85 |  |  | | 15 | | درصد نمره | |
| 1. I. N. Levine,"Quantum Chemistryt' | | | | | | منابع و مآخذ درس | |

**بودجه­بندی درس**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **توضیحات** | **مبحث** | **شماره هفته آموزشی** |
|  | مسئله یک ذره ای و میدان نیروی مرکزی، جداسازی متغیرها، کاهش سیستم دو متغیری به یک متغیری | **1** |
|  | چرخنده صلب، اتم هیدروژن، حالت پایه اتم هیدروژن، توابع موج هیدروژن | **2** |
|  | اربیتال های هیدروژن مانند-اثر زیمان- حل تمرین | **3** |
|  | اپراتورهای هرمیتی\_ توسعه بر اساس جملات توابع ویژه | **4** |
|  | تولبع ویژه و اپراتورهای جابجا شونده، پاریته، اندازه گیری و برهم نهشی حالتها | **5** |
|  | تئوری تغییر، توسعه روش تغییر، معادلات خطی همزمان | **6** |
|  | توابع تغییر خطی | **7** |
|  | مقادیر ویژه-توابع ویژه | **8** |
|  | مقدمات تئوری اختلال، تئوری اختلال برای سیستم های غیر دژنره | **9** |
|  | رفتار اختلالی حالت پایه اتم هلیم، رفتار تغییری حالت پایه اتم هلیم | **10** |
|  | تئری اختلال برای سطوح دژنره، ساده سازی نعادلات سکولار | **11** |
|  | تئوری اختلال اولین حالت بر انگیخته اتم هلیم | **12** |
|  | مقایسه تئوری های اختلال و تغییر | **13** |
|  | تئوری اختلال وابسته به زمان، مقدمه ای بر اندرکنش مور و ماده | **14** |
|  | اسپین الکترون، اسپین الکترون و اتم هیدروژن، اصل پاولی، اتم هلیم، اصل طرد پاولی | **15** |
|  | دترمینان های اسلیتری، برخورد اختلالی حالت پایه اتم لیتیم، برخورد تغییری حالت پایه اتم لیتیم، ممان مغناطیسی اسپین، اپراتورهای نردبانی برای اسپین الکترونی | **16** |