

به نام خدا
"فرم طرح درس"



دانشکده: فیزیک و شیمی	رشته: شیمی	گرایش: شیمی فیزیک	مقطع: ارشد
نام درس: مکانیک کوانتومی	تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: ندارد	عنوان درس پیشنهادی: ندارد
نام مدرس: منصوره زاهدی	تمام وقت ● نیمه وقت □ مدعو □	نوع واحد: الزامی	محل برگزاری: کلاس ● آزمایشگاه □

هدف کلی درس: آشنایی و تسلط بر مباحث اصلی فیزیک کوانتوم و کاربرد آن در شیمی کوانتوم

برنامه‌ی درسی

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی/نحوه ارزیابی
اول	ارائه سرفصل دروس - معرفی مراجع - نحوه تخصیص نمره - مروری بر شکل گیری تاریخی مکانیک کوانتومی - نظریه پلانک و اینشتین - مفهوم کوانتیزه بودن انرژی	
دوم	اصل عدم قطعیت هایزنبرگ - اصول موضوعه مکانیک کوانتومی - توابع خوش رفتار - اصل موضوع اول	طرح سوال در مورد ماهیت فوتون
سوم	مشاهده پذیرهای فیزیکی - معادله ویژه تابع - ویژه مقدار - حل تمرین	کوئیزانتگرال
چهارم	جبر عملگری - عملگرهای خطی - عملگرهای جابجاشونده - روابط جابجاگرها	تحویل ده تمرین از مبحث اصول موضوعه مکانیک کوانتوم
پنجم	مفهوم فیزیکی جابجاگر - عملگرهای هرمیتی - اصل موضوع دوم - مقدار قابل انتظار - اصل موضوع سوم	
ششم	اصل موضوع چهارم - معادله شرودینگر در یک بعد - تبعیت زمانی حالت‌های ایستا - حل معادله شرودینگر برای مدل های ساده پتانسیل	
هفتم	حل معادله شرودینگر برای ذره آزاد - ذره در جعبه یک بعدی - ذره در جعبه سه بعدی	
هشتم	مفهوم تبهگنی - چرخنده صلب در صفحه - تکانه زاویه ای اربیتال	امتحان میان ترم - ۵ نمره
نهم	اسپین - تکانه زاویه ای اسپینی - ماتریسهای پاولی - اتم هیدروژن - تغییرات تابع توزیع شعاعی - نقاط گره و ماکزیمم	

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی / نحوه ارزیابی
دهم	معادله ویژه مقدار برای تکانه زاویه ای - هارمونیکهای گروهی - عملگر پلکانی - جرم کاسته - طیف چرخشی - حل تمرین	
یازدهم	نوسانگر هماهنگ و ناهماهنگ - توابع ویژه نوسانگر هماهنگ - تابع پتانسیل مورس - اتم هیدروژن - تغییرات تابع توزیع شعاعی - نقاط گره و ماکزیمم - المان حجم درسیستم مختصات قطبی گروهی - روشهای تقریبی در حل معادله شرودینگر	
دوازدهم	روش وردشی - توابع وردشی خطی - حل تمرین کاربرد روش وردشی - روش پارامتری در نوسانگر هماهنگ - روش تغییر برای اتم هلیم - روش اختلال	تحویل ده تمرین از مبحث روشهای تقریبی حل معادله
سیزدهم	تصحیح مرتبه اول در تابع موج و انرژی - حل مسئله - معادله شرودینگر برای اتمهای چند الکترونی - ذرات تمیزناپذیر و اصل طرد پاولی	
چهاردهم	تقارن در توابع ویژه - توابع موج دترمینانی - دترمینان اسلیتر حالت پایه و حالت برانگیخته اتم هلیم - ترمهای الکترونی اتمها	
پانزدهم	نظریه اربیتال مولکولی و پیوند ظرفیتی - روشهای از آغاز - تقریب بورن اپنهایمر - هامیلتونی اتمی و مولکولی - تئوری میدان خودسازگار هارتری	
شانزدهم	روش هارتری فاک - اتم هیدروژن در میدانهای الکتریکی و مغناطیسی - برهمکنش اسپین مدار	

نحوه ارزشیابی فعالیت‌های دانشجو در طی دوره:

کوئیزهای کلاسی - امتحان میان ترم - پاسخگویی به سوالات مطرح شده در کلاس و حل تمرینها

نحوه تخصیص نمره به فعالیت‌های دانشجو در طی دوره (از ۲۱ نمره):

حل تمرین ۲ نمره

فعالیت کلاسی در خصوص سوالات مطرح شده و ارائه فایل‌های پژوهشی ۲ نمره

امتحان میان ترم ۵ نمره

امتحان پایان ترم ۱۲ نمره

منابع مطالعاتی:

- 1) Gasiorowicz S., *Quantum Physics*, 2nd ed., Wiley, New York (1996).
- 2) Levine I. N., *Quantum Chemistry*, 5th ed., Prentice Hall (1999).
- 3) Jensen F., *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd ed. John Wiley & Sons (2007).