

به نام خدا

"فرم طرح درس"



دانشکده: فیزیک و شیمی	رشته: شیمی	گرایش: شیمی فیزیک	مقطع: کارشناسی ارشد
نام درس: طیف سنجی مولکولی	تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: ندارد	عنوان درس پیشنهادی: مکانیک کوانتومی
نام مدرس: منصوره زاهدی	تمام وقت <input type="checkbox"/> نیمه وقت <input type="checkbox"/> مدعو <input type="checkbox"/>	نوع واحد: اختیاری	محل برگزاری: کلاس <input type="checkbox"/> آزمایشگاه <input type="checkbox"/>

هدف کلی درس: آشنایی و تسلط بر اصول طیف سنجی مولکولی

برنامه‌ی درسی

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی/نحوه ارزیابی
اول	ارائه سرفصل دروس - معرفی مراجع - نحوه تخصیص نمره - تعیین تاریخ امتحان میان ترم - برخی نتایج مهم مکانیک کوانتومی - اصل عدم قطعیت هایزنبرگ - اتم هیدروژن - تقریب بورن اپنهایمر	
دوم	تابش الکترومغناطیس - کوانتایی بودن انرژی - شدت جهشهای طیفی - جذب القایی - نشر خودبخود - نشر القایی - دانسیته تابش طیفی - احتمال جهش - عوامل پهن شدگی خطوط طیفی	
سوم	نواحی طیف الکترومغناطیس - اجزای اصلی طیف سنجهها - تبدیل فوریه و تداخل سنجهها - معرفی طیف سنجهها در نواحی مختلف طیفی - جرم کاسته - طیف چرخشی - حل تمرین - انحراف گریزاز مرکزی - مولکولهای چرخنده متقارن	طرح سوال در مورد نواحی مختلف طیفی
چهارم	اثر استارک - چرخنده های کروی - طیف چرخشی رامان - نظریه پراکندگی چرخشی رامان - طیف چرخشی رامان دو اتمی و چند اتمی خطی	
پنجم	اوزان آماری اسپین هسته - حل تمرین - طیف بینی ارتعاشی - طیفهای IR - گشتاور جهش - تغییرات μ با r - حل تمرین	
ششم	طیفهای رامان - قطبش پذیری - تغییرات α با x - پراکندگی استوکس و آنتی استوکس ارتعاشی رامان - ناهماهنگی مکانیکی و الکتریکی - تعیین ثابتهای ناهماهنگی - حل تمرین	
هفتم	انرژی تفکیک - برونمایی بیرج اسپونر - وابستگی ایزوتوپی انرژی تفکیک - تابع پتانسیل نوسانگر ناهماهنگ - طیف بینی ارتعاشی چرخشی IR - همگرایی و واگرایی خطوط طیفی	
هشتم	طیف ارتعاشی چرخشی رامان مولکولهای دو اتمی - شیوه عادی ارتعاش - معرفی شیوه های	امتحان میان ترم

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی / نحوه ارزیابی
	ارتعاشی - نسبت واقطبش در رامان - تئوری گروه - نمایش ماتریسی اعمال تقارنی	
نهم	جدول کاراکتر - محاسبه شیوه های ارتعاشی مولکول در IR و رامان و تقارنهای مربوطه - بررسی طیف ارتعاشی دی فلوروفوروهپتان باروش تئوری گروه - جدول خصلت C_{3v}	
دهم	شیوه های ارتعاشی آمونیاک - مولکول CO_2 و جدول خصلت $C_{\infty v}$ - تقارن گشتاورهای دوقطبی - قواعدگزینش ارتعاشی IR - روش تعیین قواعدگزینش - رزنانس فرمی	
یازدهم	اصل استثنای متقابل - قواعدگزینش ارتعاشی رامان - طیف IR چرخنده های متقارن - سطوح انرژی پتانسیل - نقشه های کانتوری - مسیرمینیم انرژی	
دوازدهم	شیوه های موضعی ارتعاشی - توابع پتانسیل ارتعاشی با بیش از یک مینیمم - فرکانس تونل زنی - ارتعاشات چین خوردگی حلقه - ارتعاشات پیچشی	
سیزدهم	طیف بینی الکترونی - اصل آفا و اصل طرد پاولی - جفت شدگی تکانه زاویه ای - جفت شدگی راسل ساندرز - جفت شدگی JJ - ترمهای الکترونی - قاعده هوند	
چهاردهم	طیفهای اتمی فلزات قلیایی - نمودارگروترین - طیف اتم هیدروژن - طیف هلیوم و فلزات قلیایی خاکی - طیفهای سایر اتمهای چند الکترونی - طیف الکترونی مولکولهای دواتمی	
پانزدهم	مولکولی مولکولهای دواتمی ناجورهسته - طبقه بندی حالتی الکترونی - قواعدگزینش الکترونی - ساختاردرشت ارتعاشی - تسلسلها و رشته ها - اصل فرانک کاندون	
شانزدهم	توابع موج ارترونی - جداول دزلسندرز - انرژیهای تفکیک - حالتیهای دافع و پیوسته - طیف بینی فتوالکترون - قضیه کوپمانس - همبستگی الکترونی - اثرات نسبیته - حرکت تقدیمی لارمور - اثرعادی و غیرعادی زیمن - فاکتورلانده	

نحوه ارزشیابی فعالیت های دانشجوی در طی دوره:

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

نحوه تخصیص نمره به فعالیت های دانشجوی در طی دوره :

فعالیت کلاسی و ارائه فایل های پژوهشی ۱ نمره

امتحان میان ترم ۵ نمره

امتحان پایان ترم ۱۴ نمره

منابع مطالعاتی:

- Hollas J. M., Molecular Spectroscopy, 5nd ed., John Wiley (1999).
- Mueller M. P., Fundamentals of Quantum Chemistry: Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure, Springer (2001).
- Jensen F., Introduction to Computational Chemistry, 2nd ed. John Wiley & Sons (2007).