رقم المقرر الدولي العدد:16

Curriculum and Process Design Evidence
CAPDE(7-3-1.2.3.-01-01)

دليل تصاميم المناهج والمقررات

Course No: Chsc424

1 -اسم المقرر : الكيمياء الفيزيائية // ميكانيك الكم الكيميائي // Quantum mechanics of chemistry

فصلي : **نعم** سنوي: **كلا**

إلزامي **(نعم)** اختياري(كلا) رقم الإصدار **16** تاريخ الإصدار 2024/9/16

2-عدد الوحدات ثلاث وحدات دراسية عدد الساعات الإجمالية ثلاث ساعات نظرية فقط.

3-المرحلة الدراسية: المرحلة الرابعة

4-اسم ألتدريسي:- أ.د. عباس عبد علي دريع الصالحي

الشهادة واللقب العلمي:

1. بكالوريوس علوم كيمياء 1994/7/1
2. ماجستير علوم كيمياء 2001/10/17
3. دكتوراه فلسفة في علوم الكيمياء2007/5/3
4. اللقب العلمي أستاذ 2016\1\13

التخصص الدقيق:

1. ماجستير علوم كيمياء فيزيائية
2. دكتوراه علوم كيمياء فيزيائية

5-لغة المقرر : عربي كلا انكليزي نعم أخرى لاتوجد

برنامج المقرر

المقدمة

إن برنامج المقرر يؤهل الطالب لاكتساب المعرفة العلمية في ميكانيك الكم الكيميائي بوساطة فهم الأسس النظرية والتطبيقية التي تؤدي الى تفهم الظواهر الكيمياء الفيزيائية المنتجة للتفاعلات الكيميائية بالاعتماد على لغة الرياضيات. سيتم تهيئة النقاط العامة للمحاضرات وفق للمنهاج العام للمادة بشكل ملفات رقمية مطبوعة ومحمله على الموقع الرسمي لكلية العلوم جامعة بابل. الملفات المطبوعة من خلالها يتم الاطلاع على الطرق المتبعة في دراسة الاشتقاقات والبراهين الرياضية المؤدية إلى الدوال الموجية لكل نظام على حد سواء من الانظمة الكيميائية ,إضافة إلى التطرق للأمثلة المعتمدة عالميا لغرض تعميق الفهم وأساليب التطبيق العملي في مجال التقنيات المستخدمة والتطبيقات إضافة الى استخدام بعض الفديوات العلمية التعليمية لتعميق الفهم . صقل وتنمية مهارات الطلبة عن طريق النشاط الصفي للطلبة والامتحانات المفاجئة و إعداد التقارير العلمية بالاعتماد على المصادر العلمية وشبكة المعلومات الدولية.

أهداف المقرر

يهدف المقرر إلى :-

1. يتعرف الطالب على مقدمة عن ميكانيك الكم وبصورة عامة.
2. يتعرف الطالب على الأسس التجريبية لنشأة الكم القديم(التقليدي) .
3. يتعرف الطالب على الأسس التجريبية لنشأة الكم الحديث (المعاصر).
4. يتعرف الطالب على اشتقاق المعادلة العامة لحركة الموجة.
5. يتعرف الطالب على أساليب اشتقاق معادلة شرويدنكر في أبعاد مختلفة.
6. يتعرف الطالب على فهم فرضيات ميكانيك الكم وحلول الدوال التامة.
7. يتعرف الطالب على المكونات والشروط المختلفة لنظام حركة الدقيقة.
8. يتعرف الطالب على المكونات والشروط المختلفة لنظام الدوار الصلد وتطبيقاته.
9. يتعرف الطالب على المكونات والشروط المختلفة لنظام المتذبذب التوافقي واللاتوافقي .
10. يتعرف الطالب على المكونات والشروط المختلفة لنظام ذرة الهيدروجين.
11. يتعرف الطالب على طرائق التقريب المستخدمة في حل مسائل ميكانيك الكم ونظام ذرة الهليوم.
12. يتعرف الطالب على طريقة هارتري المتضمنة وغير المتضمنة في الحسابات.
13. يتعرف الطالب على نظرية الاوربيتال الجزيئي .
14. يتعرف الطالب على احتساب طاقة الاوربيتالات الجزيئية.
15. يتعرف الطالب على نظرية هيوكل للاوربيتال الجزيئي وتطبيقاتها .

مفردات المقرر الفصلي(المحتوى)

الفصل الدراسي الأول يبدآ يوم الاحد الموافق2024/9/15	مفردات المادة المقرر إنجازها	
امتحان الشهر الأول يوم الإثنين الموافق 2024/10/14	مقدمة عامة أهداف الكيمياء النظرية خلفية تاريخية	General Introduction. Aims of theoretical chemistry. Historical back ground.
	مراجعة لميكانيك الكم التقليدي الأسس التجريبية للنظرية الكمية، قاعدة ريتز، نظرية بور الأساسية لذرة الهيدروجين، أسباب فشل نظرية بور للأنظمة الذرية متعددة الإليكترون.	Review of classical quantum mechanics Eexperimental foundation of Quantum Mechanics, Ritz rule ,Bohr theory for hydrogen atom, reasons of Bohr theory failed for multi electronic system,
	الأسس التجريبية للنظرية الكمية الحديثة، تجربة حيود الاليكترونات، استطارة كومبتن, التأثر الكهروضوئي, إشعاع الجسم الأسود, مبدءا اللادقة لهايزنبرك واحتمالية القياس,تجربة دي بروغلي	Eexperimental foundation of new quantum theory, experiment of electron diffraction, Compton scattering, photoelectric effect, Black body radiation, Uncertainty principles of Heisenberg and the probability of measurement, Deprogly experiment.
	الدوال التامة والقيم التامة,التفسير الرياضي والفيزيائي لدوال الموجة,فرضيات ميكانيك الكم .	Eigen function and eigen value, mathematical and physical explanation of wave function, hypothesis of quantum mechanics
	العوامل الخطية، صفة هرميتية العوامل، انحلال وتعامد الدوال ,تبادل العوامل, تمدد دوال الموجة, تطبيقات مختلفة.	Linear operators, hermetic operators, degenerate and orthogonal function, exchange of operators, expansion of wave functions, different applications.
	إلية حركة الموجة، تفسير حركة الأمواج، الموجة المستقرة	Mechanic of wave motion, explanation of wave motions, standing waves.

The differential Schrödinger's equation for wave motion in one dimensions and three dimensions	اشتقاق معادلة شرويدنكر لحركة الموجة في ابعاد مختلفة	امتحان الشهر الثاني يوم الأثنين الموافق 2024/11/18
System of particle motion System of particle motion for one dimension, System of electronic motion for conjugated π bonds, System of particle motionin potential box, System of particle motion in absolutely freedom.	نظام حركة الجسيم(الدقيقة) نظام الجسيم في بعد واحد,نظام حركة اليكترونات اواصرπ المتعاقب, نظام الجسيم في صندوق الجهد. نظام الجسيم بحرية تامة.	امتحان الشهر الثالث يكون اختياري وحسب الموقف العام.
System of rigid rotator Relation between Cartesian dimensions and spherical polar dimensions, The differential Schrödinger's equation for Rigid rotator, rotational energy levels.	نظام الدوار الصلد العلاقة بين الإحداثيات الديكارتية والكروية القطبية, اشتقاق معادلة شرويدنكر لنظام الدوار الصلد ,مستويات الطاقة الدورانية.	
Harmonic oscillator system The differential Schrödinger's equation for Harmonic oscillator system in one dimension, The differential Schrödinger's equation for Harmonic oscillator system in three dimension, vibration energy levels	نظام المتذبذب التوافقي , اشتقاق معادلة شرويدنكر لنظام المتذبذب التوافقي في بعد واحد, اشتقاق معادلة شرويدنكر لنظام المتذبذب التوافقي في ثلاث إبعاد,مستويات الطاقة الاهتزازية.	
.System of hydrogen atom Change the Cartesian dimensions into spherical polar dimensions, The differential Schrödinger's equation for hydrogen atom , calculate the hydrogen atom function for some value , quantum numbers	نظام ذرة الهيدروجين تغير الإحداثيات الديكارتيزية إلى كروية قطبية, اشتقاق معادلة شرودنكر لنظام ذرة الهيدروجين,احتساب دوال ذرة الهيدروجين لقيم محددة,إعداد الكم.	
Approximation methods in quantum mechanics. Variation method, perturbation method (term order of zero order, first order, and second order),Hartree Fock-self consisted field ,exchange operator , Slater orbital.	طرائق التقريب في ميكانيك الكم طريقة التغيير,طريقة التشويش(حد التشويش من الرتبة صفر و حد التشويش من الرتبة الأولى و حد التشويش من الرتبة الثاني,طريقة المجال القائم بذاته لهارتري فوك, المدارات السليترية.	
System of Helium atom Molecular orbital theory (MO), Born-Oppenheimer approximation (linear combination of atomic orbital), application of Molecular orbital theory, system of positive hydrogen ion molecule.	نظام ذرة الهلييوم,نظرية المدار الجزيئي,تقريب بورن اوبنهايمر(الاتحاد الخطي للمدارات الذرية),تطبيقات نظرية المدار الجزيئي,نظام جزيئة ايون الهيدروجين الموجب.	نهاية الفصل الاول يوم 2023/12/31

*ملاحظة// في حالة ان يكون يوم الامتحان عطلة رسمية فسيتم تحديد الموعد واعتمادا على التوقيت الزمنيي للمنهاج ورئاسة القسم.

طرائق التدريس المعتمدة لتنفيذ المقرر

تعتمد عدة أساليب لإيصال المفهوم العلمي للطالب من خلال الأتي:-

1- تهيئة الأفكار العامة للموضوع وبيان الغاية العلمية في كل محاضرة.
2- استخدام وسائل الإيضاح مع عرض لبعض الأمثلة العالمية لمواقع الانترنت.
3- استخدام الموقع الرسمي لجامعة بابل لعرض المحاضرة بصورة مفصلة على الانترنت.
4- توفر المصادر الاليكترونية والأمثلة الحسابية على موقع الجامعة.

توزيع درجات المقرر

توزع درجات المقرر كما يلي:-

1- معدل درجة الطالب في الامتحانات الشهرية (40%من درجة السعي النهائي)

2- معدل درجة التقييم اليومي للطالب 10% (معدل درجات الامتحانات اليومية (10 درجات) مع معدل النشاط الصفي للطالب حول مواضيع المقرر (10 درجات).

3- السعي النهائي 50% ينتج من جمع معدل درجات الامتحانات الشهرية مع معدل التقييم اليومي للطالب .

المصادر والمراجع

تستخدم المراجع العلمية التالية:-

English Reference:-

1. Peter Atkins, Julio de Paula, and James Keeler," Physical Chemistry: Eleventh Edition. December (2017). ISBN: 9780198769866.
2. Georg Job and Regina Ruffler, "Physical chemistry from Different Angle" ISBN: 978-3-319-15665-1 (Print) 978-3-319-15666-8 (Online), spring link, USA (2016).
3. Masaru Kuno,'' Introductory Nanoscience physical and chemical concepts, Garland Science", 2012.
4. P.W. Atkins "Physical chemistry"9thed, Oxfored university press, 2009.
5. David O. Hayward; "Quantum Mechanics for chemists" .royal society of chemistry, British library, 2006.
6. I. N. Levinne,"Quantum chemistry", Pearson Education Inc, USA. 6th (2009).

المصادر العربية :-

1. علي عبد الحسين سعيد ,"أسس كيمياء الكم النظرية والتطبيق" ,دار المسيرة للنشر والتوزيع والطباعة .عمان-الاردن 2001.
2. مثنى جبار شنشل "كيمياء الكم",عالم الكتب الحديث(الاردن)اربد,الطبعة الأولى(2006).
3. المواقع العلمية لشبكة المعلومات الدولية والموسوعة الدولية لكيمياء الخاصة بكيمياء الكم .
4. الكتاب المنهجي القديم مثنى جبار شنشل "كيمياء الكم", جامعة بغداد الأولى(1979).