



الجمهورية العربية السورية
المعهد العالي للعلوم التطبيقية والتكنولوجيا

وثيقة توصيف مقرّر درسي

عنوان المقرّر	الكيمياء الكمومية (Quantum Chemistry)
عدد وحدات التعلّم	4 ECTS
غاية المقرّر	تزويد الطالب بالمعارف والمهارات المتقدّمة لحساب السويات الطاقية في الذرات والجزيئات، وتحديد خواصّها عبر تطبيق ميكانيك الكمّ.

مخرجات التعلّم المستهدفة

سيكون الطالب الذي يكمل هذا المقرّر بنجاح قادراً على:

- فهم المبادئ الأساسية لميكانيك الكمّ وتطبيقاته من أجل فهم البنية الإلكترونية للذرات والجزيئات.
- فهم المطيافية الجزيئية (الإلكترونية والاهتزازية والدورانية) وتقانة الرنين المغناطيسي النووي.
- تطبيق تقنيات ميكانيك الكمّ في مسائل عملية تتضمن بنية الذرات والجزيئات ومطيافياتها.
- تطبيق بعض التقنيات الرياضياتية - من مثل الحساب التغيراتي، ونظرية الزمر - لحساب السوية الأساسية للجزيء، ولمعرفة تناظراته.

محتوى المقرّر

- أساسيات ميكانيك الكمّ: معادلة شرودينغر في مسائل ببعد واحد، فرضيات ميكانيك الكمّ، الهزاز التوافقي، الطرائق التقريبية.
- الفيزياء الذرية: الذرات الهيدروجينية، الذرات بإلكترونيين، ومفهوم السبين والتابع الموجي المتخالف، مبدأ باولي، الذرات بعدة إلكترونات وقواعد هوند، طريقة هارترى-فوك.
- البنية الجزيئية: تقريب بورن-أوبنهايمر، طريقة المدارات الجزيئية كتركيب خطّي من مدارات ذرية MO-LCAO وتوصيف المدارات، تقري الاقتصار على إلكترونات التكافؤ، الروابط الجزيئية وتصنيفها، تقريب هوكل، الحدود Term الجزيئية $2S+1L$ وشغل الإلكترونات للمدارات الجزيئية (مخطط العصي)، المدارات الهجينة.
- التناظر الجزيئي: زمر التناظر، واصطلاح Schoenflies، المدارات الجزيئية كتمثيلات لزمرة التناظر، اختزال التمثيلات وتحديد جدول السمات character table، الجداء المباشر لتمثيلين غير خزولين، دراسة انعدام تكاملات ال overlap، تحديد التركيبات الخطية الموافقة للتناظر Symmetry Adapted Linear Combinations.
- المطيافية الجزيئية: المطيافية الضوئية، وآلية التأثر مادّة-إشعاع، الطيف الاهتزازي والدوراني للنوى، مطيافية رامان، المطيافية الإلكترونية: قواعد الانتقال وبعض التقانات (ليزر)، مطيافية الرنين المغناطيسي: النووي NMR والإلكتروني-السبيني ESR.