



وثيقة توصيف مقرّر درسي

المدارات الجزيئية (Molecular Orbitals)	عنوان المقرّر
--	---------------

1.5 ECTS	عدد وحدات التعلّم
----------	-------------------

تزويد الطالب بالمعرفة اللازمة لبناء المدارات الجزيئية باستعمال طريقة التركيب الخطّي من المدارات الذريّة والمعروفة باسم LCAO linear Combination of Atomic Orbitals، وتمكينه من ربط نتائج النماذج النظرية القائمة على فرضيات واختبار صحتها من خلال قدرتها على التنبؤ بخصائص مادة.	غاية المقرّر
---	--------------

مخرجات التعلّم المستهدفة

سيكون الطالب الذي يكمل هذا المقرّر بنجاح قادراً على:

- فهم آلية بناء المدارات الجزيئية باستخدام طريقة التركيب الخطّي من المدارات الذرية LCAO.
- فهم طريقة تطبيق LCAO على الجزيئات ثنائية الذرة متجانسة النوى وغير متجانسة النوى وفي حالة الجزيئات متعددة الذرات.
- تعرّف رابطة المعدنية وكيفية تشكل قطاعات التكافؤ والنقل.
- تطبيق الطرائق الرياضية والفيزيائية وميكانيك الكم في بناء المدارات الجزيئية.

محتوى المقرّر

- مبدأ بناء المدارات الجزيئية: هدف الدراسة، طريقة التركيب الخطّي من المدارات الذرية والمعروفة باسم CLOA، المدارات الجزيئية الرابطة والمدارات الجزيئية المعاكسة للربط، الرابطة التشاركية.
- الجزيئات ثنائية الذرة ومتجانسة النوى: مبدأ التغطية الأعظمية، المدارات الجزيئية من النمط σ والمدارات الجزيئية من النمط π ، بناء مخططات المدارات الجزيئية MO لذرات من السطر الثاني من الجدول الدوري.
- الجزيئات ثنائية الذرة وغير متجانسة النوى: شرط فرق الطاقة، العزم القطبي، بناء مخططات المدارات الجزيئية لذرات من السطر الثاني من الجدول الدوري، توصيف الرابطة الكيميائية.
- الجزيئات متعددة الذرات: مبدأ تهجين المدارات الذرية، تطبيقات في حالة الروابط المتمركزة، تطبيقات في حالة الروابط المتمركزة.
- نظرية القطاعات: طبيعة الرابطة المعدنية، تفسير الناقلية الكهربائية في المعادن، العوازل وأنصاف النواقل وفق نظرية القطاعات.
- جسيم في صندوق: البولينات المترافقة، الجزيئات العطرية.