

عنوان درس: مکانیک کوانتومی

دوره: کارشناسی ارشد

پیش نیاز: شیمی فیزیک ۳

خلاصه درس

معرفی اصول موضوعه مکانیک کوانتومی و روش‌های تقریبی برای بررسی سطوح انرژی الکترونی اتم‌های چندالکترونی.

منبع

کتاب شیمی کوانتومی ایران. لوین

فصل‌ها

فصل‌های هفتم تا یازدهم

مختصری از کلیات مباحث تدریس شده

- ۱- ارزیابی جمع‌بندی از مباحث دوره کارشناسی و معرفی اصول موضوعه مکانیک کوانتومی و کاربرد آنها
- ۲- معرفی اپراتورهای هرمیتی
- ۳- معرفی تابع دلتای دیراک
- ۴- مقدمه ای بر جبر خطی
- ۵- روش تغییر
- ۶- دترمینان‌ها
- ۷- معادلات خطی همزمان

- ۸- ماتریس‌ها، ویژه مقدارها و ویژه تابع‌ها
- ۹- نظریه اختلال
- ۱۰- نظریه اختلال سطوح نادرته
- ۱۱- نظریه اختلال سطوح دژنه
- ۱۲- کاربرد نظریه اختلال برای حالت پایه اتم هلیوم
- ۱۳- کاربرد روش تغییر برای حالت پایه اتم هلیوم
- ۱۴- دترمینان سکولار، انتگرال‌های تغییر و کولونی
- ۱۵- اسپین الکترونی
- ۱۶- اسپین در اتم هیدروژن
- ۱۷- مقدمه‌ای بر آمار اسپینی و اپراتور جایگشت
- ۱۸- بررسی اتم هیدروژن و اتم هلیوم
- ۱۹- اصل طرد پاولی
- ۲۰- اپراتورهای بالابرنده و پایین‌برنده
- ۲۱- مقدمه‌ای بر اتم‌های چندالکترونی
- ۲۲- بنا کردن هامیلتونی اتم‌های چندالکترونی و بررسی جمله‌های ضربی