Ministry of Higher Education and Scientific Research

Republic of Iraq

University: University Of Basrah

College: Science

Department : Physics

Year : 2021-2022

Semester : First

SYLLABUS: < Molecular physics>

INSTRUCTOR: PROF. Mohanned Jasem Mohammed	***Phone:*** -
Hours: 2	***Office:*** **Department of Physics**
Home Page: https://faculty.uobasrah.edu.iq/faculty/en/2386/teaching	***Email:*** mohanned.mohammed@uobasrah.edu.iq

COURSE OVERVIEW

Computational of molecular rotation, vibration and electronic spectrums

GOALS AND OBJECTIVES

Computational of molecular rotation, vibration and electronic spectrums

TEXTBOOK AND READINGS

[1] Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic, Molecular and Quantum Physics by Wolfgang Demtröder

[2] ASTRONOMICAL SPECTROSCOPY; An Introduction to the Atomic and Molecular Physics of Astronomical Spectra by JONATHAN TENNYSON

[3]

COURSE ASSESSMENTS

The course grade (**100** points) will be based on the following elements:

	Points
Exams	**Final Exam(60), Monthly Exams (40)**
Reading	**1**

Checks	
Participation	**1**
Attendance	**1**
Assignments	**10**

COURSE DESCRIPTION AND ASSIGNMENT SCHEDULE

This NO.2 –credit hour course is 15 weeks long. You should invest NO.2 hours every week in this course.

WK	DATE	TOPIC	READING	ASSIGNMENT
1	21/10/2021	Rotational spectra	The molecular spin spectrum arises as a result of the movement of bonded atoms together within a molecule around a specific axis. The molecular spin spectrum lies within the microwave region.	Assignment 1
2	28/10/2021	Rotational Motion of Molecules	The model used to describe the motion of molecules is based on the idea that molecules are made up of atoms of mass that have a spherical surface of constant radius.	Assignment 1
3	4/11/2021	Rotational energy levels	From the results of solving the Schroedinger equation for the rigid rotor, the levels of rotational energy.	Assignment 2
4	11/11/2021	The molecules as spherical regard rotor	Molecules for which the three components of the moment of inertia are equal, that is, as in the CH4, SiH4 and SF6 bold	Assignment 2
5	18/11/2021	The molecules as symmetrical regard rotor	Molecules that are classified as symmetric rigid rotors have a moment of inertia different from the linear and spherical states	Assignment 3
6	25/11/2021	centrifugal force	Because of the rotational movement, the atoms of the molecule will fall under the influence of a centrifugal force, this force pulls the atoms of the molecule away from the axis of rotation, which in turn will cause a change in the moment of inertia and thus the distance between the rotational planes will be reduced	Assignment 3
7	2/12/2021	*The First Monthly Exam*		
8	9/12/2021	Molecular vibration spectra	In this chapter, we try to identify the nature of molecular vibration. Molecular vibration, which represents the change in the length of the bonds between adjacent atoms in a single molecule, as if this process occurs within a confined range between the two adjacent atoms	ASSIGNMENT 4
9	16/12/2021	Convergence of energy levels	In order to get a more accurate description in calculating vibrational energy levels we must choose a more realistic voltage. Morse potential gives a good approximation.	Assignment 4
10	23/12/2021	Vibration-rotation	Accurate analysis of the spectra of molecules shows overlapping or entangled lines between the two spectra, so it is	Assignment 4

			called a band spectra.	
11	30/12/2021	Electronic transitions	The energy required to bring about a change in the electronic distribution of molecules is within limits that are equivalent to or. Therefore, the absorbed or emitted photon must have energy within the visible region or the ultraviolet region.	Assignment 4
12	6/1/2022	*Iraqi Army Founding Day*		
13	13/1/2022	*The Second Monthly Exam*		
14	20/1/2021	Vibronic transitions	The main problem in interpreting the visible spectrum of octahedral complex is that the transitions of these complexes are not allowed. According to the Laporte selection rule, which indicates that only clear transitions accompanied by a Parity change.	Assignment 5
15	27/1/2021	Why electronic installation?	Electronic structure represents the study of the way atoms are linked to form a molecular system in a vacuum (such as dyes, proteins, polymers, carbon nanotubes, drugs, biomolecules, and ... etc.)	Assignment 5
Final Exam				

Is it possible to develop the curriculum <within the teaching authority 20%> to include vocabulary that serves sustainability	
1- Yes, it is possible (point an appropriate aspect)	**1**- Fighting poverty 2- No hunger 3- Developing life-long learning and education 4- Green chemistry 5- Sustainable development 6- Water purification 7- Water recycling for agriculture 8- Creativity and production -9- Sustainable energy (wind Sun and organic energy) -10- Environmental development- 11- pollution measurement -12- child care program-13- public health development program-14- measuring the efficiency of health institutions-15- gender equality-16- non-extremism-17- drug efficiency 18- Food efficiency for infants, children, adults and the elderly -19- Efficiency of the overall environment -20- Waste recycling-21- Heavy water disposal mechanisms-22- Literacy program-23- Mechanisms for preserving biodiversity-24- Mechanisms for spreading peace and justice in society- 25- Developing life in the seas and oceans-26- Studying the level of university education and the mechanisms for its development-27- Mechanisms for developing the local industry in Iraq-28- Mechanisms for developing infrastructure in Iraq-29-Reducing racial discrimination in all its forms-30-The basics of sustainable cities- 31- Mechanisms to reduce consumption and increase production- 32- Mechanisms to provide job opportunities for all-33- Study aspects of developing green areas-34- Study climatic phenomena in the country-35- Mechanisms for obtaining good health and well-being.
2- Suggest aspect that serves sustainability	

العام الدراسي : ٢٠٢١-٢٠٢٢ الفصل الدراسي : الأول

مفردات المنهج : < الفيزياء الجزيئية>

أسم التدريسي : ا.د. مهند جاسم محمد	رقم الموبايل :
جهة الانتساب : كلية العلوم/قسم الفيزياء	عدد وحدات الدرس : ٢
الايميل الرسمي : mohanned.mohammed@uobasrah.edu.iq	رابط الصفحة الرسمية : https://faculty.uobasrah.edu.iq/faculty/en/2386/teaching

نظرة عامة
حساب طيف الانتقال الدوراني والاهتزازي والالكتروني الجزيئي
الأهداف والغايات
حساب طيف الانتقال الدوراني والاهتزازي والالكتروني الجزيئي

المصادر
[1] Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic, Molecular and Quantum Physics by Wolfgang Demtröder
[2] ASTRONOMICAL SPECTROSCOPY; An Introduction to the Atomic and Molecular Physics of Astronomical Spectra by JONATHAN TENNYSON
[3]

التقييمات المعتمدة

تعتمد درجة المادة (100) موزعة على الجوانب التالية :

التفاصيل	الدرجة
الامتحانات	Final Exam(60), Monthly Exams (40)
درجة الاستيعاب	1

المشاركة	**1**
الحضور	**1**
الدرجة الكلية	**10**

وصف الدرس وجدول التخصيص

يتضمن الدر س (2) ساعة - عدد 2 الساعات الأسبوعية معتمدة موزعة على ١٥ أسبوعًا .

الاسبوع	التأريخ	الموضوع	القراءة في المصدر	الامتحانات والتقييمات
١	٢٠٢١/١٠/٢١	الطيف الدوراني	ينشأ الطيف ألدوراني الجزيئي كنتيجة لحركة الذرات المرتبطة سوياً ضمن الجزيئة حول محور معين. يقع الطيف ألدوراني الجزيئي ضمن ترددات منطقة المايكروويف	الواجب ١
٢	٢٠٢١/١٠/٢٨	الحركة الدورانية للجزيئات	النموذج الذي يستخدم لوصف الحركة الدورانية للجزيئات يعتمد على فكرة أن الجزيئات تتكون من ذرات ذات كتلة m لها حرية الحركة على سطح كروي نصف قطره ثابت r	الواجب ١
٣	٢٠٢١/١١/٤	مستويات الطاقة الدورانية	من نتائج حل معادلة شرويدنكر للدوار الصلد	الواجب ٢
٤	٢٠٢١/١١/١١	الجزيئات كدوار صلد كروي	الجزيئات التي يكون مركبات عزم القصور الذاتي الثلاث لها متساوية أي أن $I_c = I_b = I_a$ وكما في جريئة **CH_4** و**SiH_4** و**SF_6**، فان الطاقة الدورانية للدوار الكروي يكون.	الواجب ٢
٥	٢٠٢١/١١/١٨	الجزيئات كدوار صلد متناظر	الجزيئات لتي تصنف كدوار صلد متناظر لها عزم قصور ذاتي مختلف عن الحالة الخطية والكروية	الواجب ٣
٦	٢٠٢١/١١/٢٥	تشوه الطرد المركزي	بسبب الحركة الدورانية فان ذرات الجزيئة ستقع تحت تأثير قوة مركزية طاردة **Centrifugal force** تعمل هذه القوة على سحب ذرات الجزيئة بعيداً عن محور الدوران، والذي بدوره سيحدث تغير في عزم القصور الذاتي وبذلك فان المسافة بين المستويات الدورانية ستقل	الواجب ٣
٧	٢٠٢١/١٢/٢	الامتحان الشهري الاول		
٨	٢٠٢١/١٢/٩	طيف الاهتزاز الجزيئي	نحاول في هذا الفصل التعرف على طبيعة الاهتزاز الجزيئي. الاهتزاز الجزيئي والذي يمثل التغير في طول الأواصر بين الذرات المتجاورة في الجزيئة الواحدة، وكإن هذه العملية تحدث ضمن نطاق محصور بين الذرتين المتاصرتين	الواجب ٤
٩	٢٠٢١/١٢/١٦	تقارب مستويات الطاقة	من اجل الحصول على وصف أكثر دقة في حساب مستويات الطاقة الاهتزازية يجب أن نختار جهدا أكثر واقعية. جهد موريس يعطي تقريب جيد.	الواجب ٤
١٠	٢٠٢١/١٢/٢٣	الاهتزاز-الدوراني	التحليل الدقيق لأطياف الجزيئات يظهر خطوط متداخلة أو متشابكة بين الطيفين لذا يسمى بطيف الحزمة.	الواجب ٤
١١	٢٠٢١/١٢/٣٠	الانتقالات الالكترونية	الطاقة اللازمة لإحداث تغير في التوزيع الالكتروني **Electronic distribution** للجزيئات يكون في حدود $1eV$ والذي يكافئ $8000cm^{-1}$ أو $10kJ/mol$. لذا فان الفوتون الممتص أو المنبعث يجب أن تكون طاقة في حدود المنطقة المرئية **Visible region** او المنطقة فوق البنفسجية **Ultraviolet**.	الواجب ٤
١٢	٢٠٢١/١/٦	عيد تأسيس الجيش العراقي		
١٣	٢٠٢١/١/١٣	الامتحان الشهري الثاني		
١٤	٢٠٢١/١/٢٠	الانتقالات الفايبرونيك	المشكلة الرئيسية في تفسير الطيف المرئي لـ **Octahedral complex** أن الانتقالات $d \leftarrow d$ لهذه المعقدات تكون غير	الواجب ٥

			مسموحة **Forbidden**. حسب قواعد الاختيار للابورت **Laporte selection rule** والتي تشير إلى أن الانتقالات المسوحة فقط التي يرافقها تغير في الزوجية **Parity**.	
١٥	٢٠٢١/١/٢٧	لماذا التركيب الالكتروني؟	التركيب الالكتروني يمثل دراسة الطريقة التي ترتبط بها الذرات لتكون النظام الجزيئي في الفراغ (مثل الصبغات **Dyes** و البروتينات **Proteins** و البوليمرات **Polymers** و التراكيب النانوية **Carbon Nanotubes** والأدوية **Drugs** والجزيئات الحيوية **Biomolecules** و...الخ)	الواجب ٥
امتحان نهاية الفصل				

هل يمكن تطوير المنهج < ضمن صلاحية التدريسي ٢٠% > على ان تتضمن مفردات تخدم الاستدامة	
١- نعم يمكن ضمن المحاور	١- محاربة الفقر-٢- لا للجوع-٣- تطوير التعلم والتعليم مدى الحياة- ٤- الكيمياء الخضراء- ٥- التنمية المستدامة-٦- تنقية المياه-٧- تدوير المياه للزراعة-٨-الابداع والانتاج-٩- الطاقة المستدامة(الرياح والشمس والطاقة العضوية) -١٠- تطوير البيئة- ١١- قياس التلوث -١٢- رعاية الطفولة -١٣- تطوير الصحة العامة-١٤- قياس كفاءة المؤسسات الصحية-١٥- المساواة بين الجنسين-١٦- عدم التطرف-١٧- كفاءة الدواء-١٨- كفاءة الغذاء للرضع، الاطفال والبالغين وكبار السن-١٩-كفاءة البيئة الجامعة -٢٠- تدوير المخلفات -٢١- اليات التخلص من المياه الثقيلة-٢٢- محو الامية -٢٣- اليات حفظ التنوع الحيوي -٢٤- اليات نشر السلام و العدالة في المجتمع - ٢٥-تطوير الحياة في البحار والمحيطات-٢٦-دراسة مستوى التعليم الجامعي واليات تطويره-٢٧- اليات تطوير الصناعة المحلية في العراق-٢٨- اليات تطوير البنى التحتية في العراق-٢٩-تقليل من التفرقة العنصرية بكافة اشكالها-٣٠-اساسيات المدن المستدامة-٣١-اليات التقليل من الاستهلاك وزيادة الانتاج-٣٢-اليات توفير فرص العمل للجميع-٣٣-دراسة جوانب تطوير المساحات الخضراء -٣٤- دراسة ظواهر المناخية في البلد -٣٥- اليات الحصول على صحة جيدة و الرفاهية.
٢- أقترح موضوع يخدم الاستدامة	