

03-6405850 422 אורנשטיין הוד, ד"ר עודד	03-6407599, 219 אורנשטיין רבני, פרופ' ערן	<u>מרצים</u>
<a href="mailto:odedhod@tau.ac.il">odedhod@tau.ac.il</a>	<a href="mailto:rabani@tau.ac.il">rabani@tau.ac.il</a>	<u>דוא"ל</u>
<a href="http://www.tau.ac.il/~odedhod">http://www.tau.ac.il/~odedhod</a>	<a href="http://www.tau.ac.il/~rabani">http://www.tau.ac.il/~rabani</a>	<u>דף בית</u>

הרצאה : יום : ראשון שלישי  
 שעות : 12-14 16-19  
 אולם : דן דוד 001 אורנשטיין 103

מתרגל : מר גיא כהן, אורנשטיין 206, 036407229  
דוא"ל : [guy.cohen@gmail.com](mailto:guy.cohen@gmail.com) דף בית : <http://rafiki.tau.ac.il/~guy>  
תרגיל : יום : ראשון רביעי  
 שעות : 8-9 10-11  
 אולם : אורנשטיין 103 אורנשטיין 111

אתר הקורס : <http://rafiki.tau.ac.il/~rabani/teaching/2009/chemicalbond.html>  
 או <http://www.tau.ac.il/~odedhod/Teaching.html>

### ראשי פרקים

- (א) מושגי יסוד בתורת הקוונטים : גלי חומר, משוואת שרדינגר, פונקצית הגל, אופרטורים ועקרון אי הוודאות, הפוסטולאטים.
- (ב) פתרון משוואת שרדינגר עבור : חלקיק בקופסא, מודל האלקטרון החופשי למולקולות פוליאניות, אוסצילטור הרמוני, רוטור צפיד, אטום המימן.
- (ג) אטומים : עקרון הוריאציה ויישומו לבעיית אטום הליום. אטומים רבי אלקטרונים. הספין האלקטרוני ועקרון האנטיסימטריה לפרמיונים.
- (ד) מולקולות דו-אטומיות : קירוב בורן-אופנהיימר. המשוואה הגרעינית והאלקטרונית. גישת MO ושיטת VB.
- (ה) מולקולות פוליאטומיות : MO-LCAO למולקולות פוליאטומיות. מודל היקל.

### ספרות מומלצת

- Alberty and Silbey, Physical Chemistry. Levine, Quantum Chemistry.  
 Hanna, Quantum Mechanics in Chemistry. Atkins, Molecular Quantum Mechanics.  
 Hameka, Quantum Theory of the Chemical Bond.