

מרצים : ד"ר חיים דימנט , אורנשטיין 404א, 03-6406967

URL : <http://www.tau.ac.il/chemistry/diamant> Email : hdiamant@tau.ac.il

פרופ' ערן רבני, אורנשטיין 219, 03-6407599

URL : <http://www.tau.ac.il/chemistry/rabani> Email : rabani@tau.ac.il

הרצאה : יום : ראשון שני רביעי
 שעות : 12-14 17-19 10-12
 אולם : אורנשטיין 103 אורנשטיין 103 אורנשטיין 111

מתרגל : מר עודד הוד, אורנשטיין 218, 03-6407229

URL : <http://rafiki.tau.ac.il/~odedhod> Email : odedhod@rafiki.tau.ac.il

תרגיל : יום : רביעי חמישי
 שעות : 12-13 17-18
 אולם : אורנשטיין 103 קפלון 118

אתר הקורס : <http://www.tau.ac.il/~hdiamant/teaching/2004/physchem2>

רשימת דוא"ל : CHE0351-2206-01@listserv.tau.ac.il

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 אלקטרוניים ושיטת SCF. 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.

ו) מושגי יסוד בספקרוסקופיה : ספקטרום רוטציה, ויברציה. ספקטרום אלקטרוני. עקרון פרנק-קונדון.

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.

Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy.

Levine, Molecular Spectroscopy.