

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

URL: <http://www.tau.ac.il/~hdiamant> Email: hdiamant@post.tau.ac.il

ד"ר יורם זלצר, אורנשטיין 217, 03-6407361

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

הרצאה: יום: ראשון רביעי
שעות: 12-14 17-18 10-12
אולם: אורנשטיין 103 אורנשטיין 103 אורנשטיין 103

מתרגל: מר אמיר חלבה, אורנשטיין 405, 03-6408902

Email: ehaleva@post.tau.ac.il

תרגול: יום: רביעי חמישי
שעות: 12-13 17-18
אולם: אורנשטיין 110 אורנשטיין 102

הגשת תרגילים: חובה להגיש את כל התרגילים. הגשת התרגילים היא תנאי לגישה למבחן הסיום. 70% מהתרגילים בעלי הציונים הגבוהים ביותר יהיו 10% מן הציון הסופי.

אתר הקורס: <http://www.tau.ac.il/~hdiamant/teaching/2006/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, הנחות היסוד (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.

Hanna, Quantum Mechanics in Chemistry.

Hameka, Quantum Theory of the Chemical Bond.

Levine, Molecular Spectroscopy.

Levine, Quantum Chemistry.

Atkins, Molecular Quantum Mechanics.

Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy.