

תאריך עדכון: 08.11.2021

## מכניקת הקוונטים וספקרוסקופיה 84-326

שם המרצה: פרופ' דן מאיור

סוג הקורס: שיעור, תרגיל

שנת לימודים: סמסטר: א היקף שעות: 5 ש"ש (3 ש"ש)  
הרצאה+2 ש"ש (תרגיל)  
אתר הקורס באינטרנט: מודל

### א. מטרות הקורס ותוצרי למידה (מטרות על / מטרות ספציפיות):

מטרת הקורס – לפתח שיטות קירוב במכניקת הקוונטים וליישמן לחקירת המבנה האלקטרוני של מולקולות ולספקטרוסקופיה אלקטרונית, רוטציונית וויברציונית של מולקולות.

תוצרי למידה –

- להכיר שיטות קירוב בסיסיות במכניקת הקוונטים.
- להבין את הבסיס התיאורטי למבנה אלקטרוני של אטומים ומולקולות.
- להבין את הבסיס התיאורטי לקשר כימי.
- להבין את הבסיס התיאורטי לשיטות ספקטרוסקופיות נפוצות בכימיה.
- להכיר שיטות אנליטיות לפתרון ביעות מתקדמות במכניקת הקוונטים.

### ב. תוכן הקורס:

**רציונל, נושאים:** הקורס עוסק בשיטות קירוב במכניקת הקוונטים. במהלך הקורס לומדים כיצד מיישמים את שיטות הקירוב לבעיות נפוצות בכימיה, כגון מציאת רמות אנרגטיות של אטומים ומולקולות ואורביטלים מולקולריים.

**מהלך השיעורים:** ההרצאות מועברות באופן פרונטלי בעזרת מצגות. התרגיל מהווה חלק אינטגרלי של הקורס בו הסטודנטים לומדים לפתור תרגילים אנליטיים.

**תכנית הוראה מפורטת לכל השיעורים:** רשימת נושאים / תוכנית הלימודים בקורס – רשימה מפורטת של נושאי ההרצאות בסדר כרונולוגי (רשימה או טבלה כדוגמת המצ"ב)

מס' השיעור	נושא השיעור
1	תורת ההפרעות

עקרון הוריאציה ווריאציה ליניארית	2
מבנה אלקטרוני של אטומים וטרמים אטומיים	3
קירוב בורן-אופנהיימר, מולקולת $H_2^+$	4
אורביטלים מולקולריים – LCAO-MO – מולקולות דו-אטומית	5
טרמים מולקולריים	6
תאוריית היקל ושיטת SALC	7
ספקטרוסקופיה רוטציונית	8
ספקטרוסקופיה ויברציונית	9
ספקטרוסקופיה אלקטרונית	10

### ג. דרישות קדם:

כימיה פיסיקלית א', ב', מבוא למכניקת הקוונטים, סימטריה בכימיה (חוץ מביו-פיסיקאים ומסלול כימיה-ביולוגיה)

### ד. חובות / דרישות / מטלות:

הסטודנטים מגישים תרגילי בית ונבחנים בבוחן אמצע ומבחן סופי. נוכחות חובה בהרצאות ותרגילים.

### ה. מרכיבי הציון הסופי:

תרגילי בית: 5%.

בוחן אמצע: 15%.

מבחן סופי: 80%.

### ו. ביבליוגרפיה:

- 1) N. Levine, "Quantum Chemistry"
- 2) P. W. Atkins and R. Friedman, "Molecular Quantum Mechanics"

### ז. שם הקורס באנגלית:

Quantum mechanics and spectroscopy