

תאריך עדכון: 21.7.2021

## שם ומספר הקורס: כימיה חישובית 84-328

שם המרצה: פרופ' דן מאיור

סוג הקורס: שיעור, תרגיל

היקף שעות: 4 ש"ש

מסטר: ב

שנת לימודים:

אתר הקורס באינטרנט: מודל

עיתוי הקורס: ימי א' 16:00-18:00

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

מטרת הקורס – להעניק ידע כללי על שיטות חישוב נומריות בתחום הכימיה ואסטרטגיות פרקטיות כיצד להשתמש בכלים חישוביים במחקר בכימיה. ההרצאות מתמקדות בתיאוריה העומדת מאחורי שיטות חישוב בסיסיות בכימיה חישובית, והתרגיל מתמקד בפרקטיקה- למדים כיצד לתקוף בעיות מחקר בכימיה ע"י שימוש בכלים חישוביים כגון חקר מנגנונים של תגובות כימיות, ויזואליזציה של אורביטלים מולקולריים ועוד.

תוצרי למידה –

הכרת שיטות בסיסיות בכימיה חישובית לצורך מציאת מינימום אנרגטי של מבנים תלת-ממדיים של מולקולות. חישוב מבנה אלקטרוני של מולקולות ע"י שימוש בשיטות קוונטיות מתקדמות של כימיה חישובית (כגון DFT). שימוש בתוכנות מתקדמות לצורך ויזואליזציה של מולקולות, אורביטלים מולקולריים, הסתכלות על ויברציות, מפות אלקטרוסטטיות, משטחי פוטנציאל ועוד. חישוב אנרגיה של מולקולות, חישוב תכונות ספקטרליות של מולקולות (IR, Raman, UV, NMR etc.), הסתכלות על מנגנוני תגובות כימיות, חישוב תכונות תרמודינמיות וקינטיקה של תגובות, הסתכלות על השפעת ממס על תכונות מולקולה.

### ב. תוכן הקורס:

**רציונל, נושאים:** הקורס עוסק בשיטות מתקדמות בתחום הכימיה החישובית והתאורטית ומציג מגוון נושאים בחזית התחום. בקורס מוענקת לסטודנט היכולת ליישם את השיטות הנלמדות הלכה למעשה במחקר במגוון תחומים בכימיה, מתחום כימיה ביולוגית ותרופתית עד לתחום מדע החומרים.

**מהלך השיעורים:** ההרצאות מועברות באופן פרונטלי בעזרת מצגות. התרגילים מתבצעים בכיתת מחשבים. הסטודנטים מגישים תרגילי בית ומבצעים פרויקט סופי על נושא מחקר עדכני בחזית המדע לפי בחירה.

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	הקדמה על כימיה חישובית
2	מכניקה מולקולרית ושדות כוח
3	שיטות לחישוב מבנה אלקטרוני
4	עיקרון הוריאציה
5	תאוריית היקל
6	תאוריית הרטרי-פוק
7	תאוריית ההפרעה
8	שיטות לאופטימיזציה של מולקולות
9	שיטות מתקדמות בכימיה חישובית

**ג. דרישות קדם:**

קורס מבוא למכניקת הקוונטים א' (84325).

**ד. חובות / דרישות / מטלות:**

הסטודנטים מגישים תרגילי בית ומבצעים פרויקט סופי על נושא מחקר עדכני בחזית המדע לפי בחירה.

נוכחות חובה בהרצאות ותרגילים.

תלמיד שייעדר מעל שני תרגילים ללא סיבה מוצדקת לא יורשה להגיש פרויקט סופי.

**ה. מרכיבי הציון הסופי:**

תרגילי בית: 50%.

פרויקט סופי: 50%.

**ו. ביבליוגרפיה:**

*Molecular Modeling. Principles and Applications.* Andrew R. Leach.

*Computational Chemistry.* Christopher J Cramer.

*Introduction to Computational Chemistry.* Frank Jensen.

*Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods.* James B. Foresman and Æleen Frisch.

ז. שם הקורס באנגלית:

Computational chemistry