

## שם הקורס

קוונטים וקשר כימי

## מרצה

גיא כהן

## סמסטר

ב'

## דרישות הקורס

תרגיל יינתן כל שבוע. יש להגיש לפחות 70% מהתרגילים עם ציון 70 ומעלה (כלומר 9 מתוך 13 תרגילים).

## הרכב הציון הסופי

19% מועד אמצע, 81% מבחן סופי.

## מבנה הקורס

סקירה היסטורית: הבעיות והניסויים שהביאו להתפתחות מכניקת הקוונטים.

מושגי יסוד בתורת הקוונטים: גלי חומר, משוואות שרדינגר, פונקציית הגל, אופרטורים ועקרון אי הודאות, הפוסטולטים.

פתרונות של משוואות שרדינגר: חלקיק בקופסה, חלקיק בטבעת, אוסצילטור הרמוני, רוטור צפיד, אטום המימן. מודל האלקטרון החופשי למולקולות מצומדות.

אטומים: עקרון הווריאציה ויישומו לבעיית אטום הליום. אטומים רבי אלקטרוניים. הספין האלקטרוני ועקרון האנטיסימטריה לפרמיונים.

מולקולות דו-אטומיות: קירוב בורן-אופנהיימר. המשוואה הגרעינית והאלקטרונית. גישת molecular orbitals.

מולקולות פולי-אטומיות: קומבינציות לינאריות של אורביטלים אטומיים וקירוב היקל.

## קריאת חובה

רשימות שיעור מפורטות יסופקו באתר הקורס.

## קריאת רשות

Alberty and Silbey, Physical Chemistry.

Levine, Quantum Chemistry.

Hanna, Quantum Mechanics in Chemistry.

Atkins, Molecular Quantum Mechanics.

Hameka, Quantum Theory of the Chemical Bond.

## הערות