

## שם הקורס

סימטריה בכימיה

## מרצה

גיא כהן

## סמסטר

ב'

## דרישות הקורס

תרגיל בית יינתן כאחת לשבועיים (בסך הכל שבעה תרגילים). קיימת חובת הגשה לכל התרגילים.

## הרכב הציון הסופי

על פי מבחן

## מבנה הקורס

מושגי יסוד

בסימטריה

מושגי יסוד

בתורת החבורות

הגדרות בסיסיות, אלמנטי ופעולות סימטריה, מיון וזיהוי של חבורות סימטריה. יישום: זיהוי מולקולות כירליות ופולריות.

הגדרות ותכונות בסיסיות של חבורות ולוחות כפל, דוגמאות לחבורות פשוטות, חבורות ציקליות ואבליות, איזומורפיזם והומומורפיזם. שבירת סימטריה ותת-חבורות, משפט לגרנז' וסילו. איברים צמודים ומחלקות שקילות, נורמליות. יישום: שימוש בחבורות סימטריה לקביעת אופני תנודה נורמליים במולקולות.

הומומורפיזם והצגות, הצגות פריקות ובלתי פריקות, עקבות וטבלאות אופי, משפט האורתוגנליות הגדול ופירוק שיטתי של הצגות. הצגה של מכפלות ישירות.

פונקציות עצמיות כבסיסים להצגות, חבורת ההמילטוניאן, אופרטורי השלכה, חישוב אלמנטי מטריצה. יישום: זיהוי אלמנטי מטריצה הנעלמים משיקולי סימטריה, כללי ברירה. יישום: שיקולי סימטריה באורביטלים מולקולריים. יישום: קירוב היקל ושימוש בפירוק הצגות לפתרון המשוואה הסקולרית.

תורת ההצגות

מבוא למכניקת

הקוונטים ותורת

החבורות

## קריאת חובה

רשימות מפורטות יסופקו על ידי המרצה.

## קריאת רשות

1. F.A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory (Wiley, 1990).
2. M. Hamermesh, Group Theory and Its Application to Physical Problems (Dover, 1989).
3. I. Hargittai and M. Hargittai, Symmetry Through the Eyes of a Chemist (Plenum Press, 1995).
4. D. Willock, Molecular Symmetry (Wiley, 2009).

## הערות