



סילבוס מפורט

שם הקורס

כימיה קוונטית

מרצה

ד"ר ברק הירשברג

סמסטר

א' תשפ"ב

דרישות הקורס

03512202-תרמודינמיקה, 03512206-קוונטים וקשר כימי, 03511825-קינטיקה

הרכב הציון הסופי

20% - תרגילי בית, 80% - עבודה מסכמת

מבנה הקורס

תאריך /

מס' שיעור

נושא השיעור ותכני השיעור (מטלות, רשימת קריאה, משימות וכיו"ב)

Mathematical introduction – הקדמה מתמטית

Problem definition – הגדרת הבעיה

The Born-Oppenheimer approximation: definition of the electronic

Hamiltonian – קירוב בורן-אופנהיימר: הגדרת ההמילטוניאן האלקטרוני

Hartree and Hartree-Fock approximations – קירובי הרטרי והרטרי-פוק

Gaussian basis set representations – פונקציות בסיס גאוסיאניות

Roothaan equations - the algebraic form - משוואות רותאן – הגישה האלגברית

Hohenberg-Kohn density functional theory –

תאוריית פונקציונאל הצפיפות של הוהנברג וקוהן

The Kohn-Sham scheme – גישת קוהן-שם

Exchange-correlation density functional approximations – קירובים עבור פונקציונאל

הצפיפות של השחלוף-קורלציה

קריאת חובה

קריאת רשות

A. Szabo and N.S. Ostlund – Modern Quantum Chemistry, Dover publications 1996.

J. M. Anderson – Mathematics for Quantum Chemistry, Dover publications 2005.

P. Atkins and R. Friedman – Molecular Quantum Mechanics, Chapter 9, Oxford press 2005.

הערות