

---

האוניברסיטה העברית בירושלים

סילבוס

מבוא לספקטרוסקופיה - 69922

תאריך עדכון אחרון 05-11-2015

נקודות זכות באוניברסיטה העברית: 4

תואר: בוגר

היחידה האקדמית שאחראית על הקורס: כימיה

השנה הראשונה בתואר בה ניתן ללמוד את הקורס: 0

סמסטר: סמסטר א'

שפת ההוראה: עברית

קמפוס: קרית א"י ספרא

מורה אחראי על הקורס (רכז): פרופ' סנדי רוכמן

דוא"ל של המורה האחראי על הקורס: [sandy@mail.huji.ac.il](mailto:sandy@mail.huji.ac.il)

שעות קבלה של רכז הקורס: בתיאום מראש

מורי הקורס:

---

פרופ דניאל סטראסר  
מר עומר חג'אג'א;

תאור כללי של הקורס:

הקורס מהווה מבוא לענף הספקטרוסקופיה ולאינטרקציות אור-חומר, ומשלב תיאורים איכותיים וכמותיים של ספקטרוסקופיות מולקולריות שונות של בליעה ופיזור.

נושאים מרכזיים בקורס:

תורת הפרעה התלויה בזמן. ספקטרום רוטטורי, האוסצילטור ההרמוני והאנהרמוני, ספקטרום ויברטורי של מולקולות דו-אטומיות, ספקטרום ויברטורי-רוטטורי. ספקטרום ראמן. ויברציות של מולקולות פוליאטומיות, פעילותם באינפרא-אדום וראמן על פי שיקולי סימטריה. הספקטרום האלקטרוני של מולקולות פשוטות, אפקטים ויברוניים, יישום שיטת היקל.

מטרות הקורס:

ראה תוצרי למידה.

תוצרי למידה

בסיומו של קורס זה, סטודנטים יהיו מסוגלים:

לתאר אינטרקציות בסיסיות של אור וחומר במולקולות.

להכיר מכשור בסיסי בו נעשה שימוש בחקר הספקטרוסקופי ואת עקרונות הפעולה שלו.

לנתח בצורה כמותית ספקטרא בליעה ופיזור של מולקולות פשוטות, ולחלץ מהם את הגדלים המולקולריים הרלוונטיים.

להשתמש בשיקולי סימטריה לניתוח וניבוי של ספקטרא מולקולריים.

לפתור שאלות מתחומי הספקטרוסקופיה השונים.

דרישות נוכחות (%):

אין

שיטת ההוראה בקורס: הרצאה ותרגול.  
דרישת הגשה של 80% מתרגילי הבית.

רשימת נושאים / תכנית הלימודים בקורס:

מבוא - מהי ספקטרוסקופיה, חזרה על אור וקרינה אלקטרומגנטית, תיאור קלאסי של שדה קרינה, אינטראקציה של אור וחומר.

יסודות הספקטרופוטומטריה והגדרת ספקטרום בליעה, חוק בר למבר.

---

מודל קלאסי לבליעה (עם ובלי שיכוך) - מודל לורנץ.

מעברים אופטיים: מבט קוונטי - מודל אינשטיין לבליעה בשתי רמות, מקדמי אינשטיין, הגדרת דיפול המעבר ומשמעותו, קשרו לחתך הפעולה לבליעה ומקדם האקסטינקציה.

קירוב בורן-אופנהיימר. דיפול המעבר ותנועת הגרעינים בדו-אטום: רוטציה ויברציה.

ספקטרום רוטציוני: מצבי אנרגיה של רוטור צפיד, כללי ברירה של רוטור צפיד, מעברים, עוצמות ומיקום בספקטרום האור, דוגמאות (CO) ושימושים אסטרוכימיים.

ספקטרום בליעה ויברציוני: מודל האוסילטור ההרמוני, כללי ברירה, מיקום בספקטרום האור.

ספקטרום בליעה ויברציוני-רוטציוני: כללי ברירה, מיקום הקווים, דוגמאות, אנהרמוניות (טיפול כמותית בשיטת Sponer-Birge), כללי ברירה לאוסצילטור אנהרמוני, צימוד ויברציה-רוטציה.

ספקטרום ראמאן (Raman): פיזור אור, תיאור מיקרוסקופי של פיזור וטנזור הפולריזביליות, ספקטרום האור המפוזר, תמונה קלאסית וקוונטית לפיזור ראמאן, עוצמות וכללי ברירה, מעברים.

ויברציות בפוליאטומים: אופני תנודה נורמאליים, דוגמאות (CCl<sub>4</sub>), ראמאן מול IR, קבוצות פונקציונאליות.

סימטריה מולקולרית: מבוא לסימטריה, שיקולי סימטריה בחיזורי כללי ברירה בפוליאטום, חבורות סימטריה, הצגת החבורות, העקבה, כללי עבודה עם חבורות סימטריה ואלגברה של וקטורי עקבות, שיקולי סימטריה בתמונה הקוונטית, בירור התרה וקיטוב מעברים באמצעות סימטריה.

ספקטרום אלקטרוני: מצבי אנרגיה של דו-אטום, מודל ה-MO, בניית טרמים מקונפיגורציות אלקטרוניות בדואטום, כללי ברירה למעבר אלקטרוני בדו-אטום, מבנה ויברציוני ועיקרון Franck-Condon, בנזן על הדגמה, פוליאטומיות למולקולות הרחבה.

ספקטרום פוטו-אלקטרוני ואנרגיות של אורביטלות: הסבר ודוגמאות.

מבוא לפוטוכימיה: דיאגרמת יבלונסקי, דוגמאות: פוטוכימיה של חמצן ואוזון, פוטוכימיה של מולקולות קטנות בחלל.

חומר חובה לקריאה:

לרוב נושאי הקורס:

M. Hollas, Modern spectroscopy (QC 451 H64)

חומר לקריאה נוספת:

לעיון מתקדם:

J. Mchale, Molecular spectroscopy

---

הערכת הקורס - הרכב הציון הסופי :  
מבחן מסכם בכתב/בחינה בעל פה 100 %  
הרצאה 0 %  
השתתפות 0 %  
הגשת עבודה 0 %  
הגשת תרגילים 0 %  
הגשת דו"חות 0 %  
פרויקט מחקר 0 %  
בחנים 0 %  
אחר 0 %

מידע נוסף / הערות:  
ידע ספציפי נדרש לקורס:  
1. תורת ההפרעות.  
2. אלגברה לינארית: כתיב מטריציוני של מערכת משוואות, ליכסון וחילוף ערכים ווקטורים עצמיים.  
3. טיפול קוונטי באוסילטור הארמוני, בחלקיק בקופסא, וברוטור צפיד.