



CB2070 Molekylär kvantmekanik 7,5 hp

Molecular Quantum Mechanics

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har 2021-04-12 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med HT 2021, diarienummer: C-2021-0718.

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Teknisk fysik

Särskild behörighet

Avklarad kurs i kvantmekanik

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursens syftar till att ge en samling grundläggande kunskaper och introducera ett urval av verktyg som krävs för att kunna ta sig an kvantmekaniska beräkningar på molekylär nivå. Den riktar sig till studenter inom fysik och tillämpad matematik, samt matematiskt och fysikaliskt intresserade kemister. Den vänder sig i första hand till studenter med en grundläggande förståelse för kvantmekanik.

Efter fullgjord kurs skall du kunna:

- utforma och bruka vågfunktioner och operatorer för flerelektronsystem
- karakterisera symmetri hos vågfunktioner och därmed förstå spektroskopiska urvalsregler
- förklara starka kovalenta bindningar i termer av vågfunktioner
- förklara elektroners korrelerade rörelser
- utföra beräkningar av approximativa vågfunktioner med hjälp av datorer

Kursinnehåll

Hamiltonoperatorer, Pauliprincipen, Born–Oppenheimerapproximationen, potentialytor, elektronstrukturteori, vågfunktioner, elektrontätheter, molekylorbitaler, Slaterdeterminanter, Hartree–Fock, orbitalenergi och Koopmans teorem, grupp teori och symmetri, spinn för flerelektronsystem, elektronkorrelation, konfigurationsväxelverkan, Møller–Plesset störningsteori.

Examination

- LAB1 - Laborationsrapporter, 2,5 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 5,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Examinatorn tar efter konsultation med KTH Funka beslut om anpassade examination för studenter med dokumenterad funktionsnedsättning.

Vid grupparbete har alla i gruppen ett gemensamt ansvar för arbetet.

Labrapporter kan kompletteras.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.

- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.