



FCB3202 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 2021-03-11 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med VT2022, diarienummer: C-2021-0506.

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter fullföljande av kursen förväntas studenten

- visa fördjupad kunskap och analytisk förmåga inom molekylär kvantmekanik motsvarande utbildningsnivån för kursen, samt kritiskt granska andras arbeten inom området
- visa god förmåga att förklara och analysera komplexa begrepp inom molekylär kvantmekanik utifrån relevant forskningslitteratur, samt på ett pedagogiskt sätt kommunicera kunskapen skriftligt och muntligt

- kunna reflektera över och beskriva hur vetenskapliga frågeställningar inom områdets forskning kan bidra till hållbar samhällsutveckling

Kursinnehåll

Kursens teoriavsnitt avhandlar ett antal aspekter inom molekylär kvantmekanik, bland annat Hamiltonoperatorer, Pauliprincipen, Born–Oppenheimer-approximationen, elektronstrukturteori, vågfunktioner, elektrontätheter, molekylorbitaler, Slaterdeterminanter, Hartree–Fock-metoden, orbitalenergi och Koopmans teorem, grupp teori och symmetri, spinn för flerlektronsystem, elektronkorrelation, potentialytor, strukturoptimering, övergångstillstånd och reaktioner, normalkoordinater och vibrationsrörelse, tidsberoende störningsteori och ljus-materiaväxelverkan.

Kursens praktiska innehåll innefattar datorövningar baserade på kursens ämnesfokus samt ett individuellt projekt relaterat till kursens teoretiska grunder. Projektet tar utgångspunkt i en forskningsfråga och är baserat på utvalda forskningsartiklar. Projektet har en tydlig målbild som kräver utveckling av en modul i programspråket Python. Den teoretiska grunden för forskningsfrågan ska inhämtas och en projektplan ska utarbetas innan design- och implementationsfasen påbörjas. Avlutande numeriska simuleringar ligger till grund för att besvara forskningsfrågan.

Särskild behörighet

Behörig till studier på forskarnivå**

Examination

- LAB1 - Laborationer, 1,5 hp, betygsskala: P, F
- PRO1 - Projekt, 6,0 hp, betygsskala: P, F

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

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Betygskriterier specificeras i kurs-PM.

Övriga krav för slutbetyg

För slutbetyg krävs 90 % närvaro på föreläsningar, skriftlig kritisk reflektion för utvalda vetenskapliga artiklar inom ämnet, godkänd skriftlig projektrapport och genomförd muntlig projektpresentation (PRO1); samt närvaro på datorlaborationer och godkända laborationsrapporter (LAB1).

Övergångsbestämmelser

Om provmomenten ändras examineras studenten enligt det provmoment som gällde när studenten antogs till kursen. Om kursen avvecklas ges studenten möjlighet att examineras på kursen under ytterligare två läsår.

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.