



FCK3313 Kvantkemi 9,0 hp

Quantum Chemistry

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

Fastställande

Programansvarig vid CBH-skolan / Kemivetenskap har 2020-05-07 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med VT2020 (diarienummer C-2020-0699)

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Behörig till studier på forskarnivå.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska doktoranden ha kunskap och förmåga att

- Redogöra i detalj för kvantmekanisk formalism, relatera till, reflektera över, och sammanfatta kvantmekaniska koncept och kombinera formalism och koncept för att konstruera, beräkna, och förklara beteendet hos olika kvantmekaniska modellsystem.

- Beskriva, reflektera, förklara och använda grundläggande kvantkemisk teori för atomära och molekylära flerelektronsystem och med hjälp av datorer beräkna molekylers inre egenskaper samt deras reaktioner och spektroskopiska egenskaper

Kursinnehåll

- kvantmekanikens teoretiska grund och formalism
- kvantmekaniska beteendet hos enkla system såsom harmoniska oscillatorn och stela rotorn
- spinnets grundläggande egenskaper samt formalismen som kan tillämpas i spinnkvantmekanik
- omöjligheten att särskilja kvantmekaniska objekt och dess konsekvens med Pauli principen
- teoretisk grund för tidsberoende störningsräkning och hur den kan användas för att betrakta interaktionen mellan elektromagnetisk strålning, atomer och molekyler
- Born-Oppenheimer approximationen och uppkomsten av spektroskopiska urvalsregler
- teoretisk bakgrund till variationsmetoden och linjära variationsfunktioner samt användning av dessa metoder på enkla atomära och molekylära system, såsom väteatomen och vätemolekyljonen
- flerelektronvågfunktioner som Slaterdeterminanter baserade på enelektronvågfunktioner enligt orbitalapproximationen samt hur egenskaperna för dessa approximativa vågfunktioner skiljer från mer exakta vågfunktioner
- teoretisk bakgrund och approximationer bakom Hartree-Fockmetoden samt hur approximationer påverkar tillförlitligheten och tillämpbarheten av Hartree-Fock metoden för beräkningar på atomära och molekylära system
- hur Hartree-Fock metoden med hjälp av Roothans ekvationer är implementerad i moderna kvantkemiska program
- teoretisk bakgrund till post-Hartree-Fock metoder och lämpliga metoder för olika typer av system och tillämpningar
- beräkning av molekylära egenskaper och kemiska reaktioner med hjälp av moderna kvantkemiprogram

Examination

- LAB1 - Laborationer, 3,0 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 6,0 hp, betygsskala: P, 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.

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.