



FCK3325 Kvantkemi med tillämpningar i fysikalisk kemi 12,0 hp

Quantum Chemistry with Applications in Physical Chemistry

Fastställande

Kursplanen gäller från och med HT 2022 enligt skolchefsbeslut: C-2022-2431. Beslutsdatum: 2022-11-17

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Behörig till studier på forskarnivå.

För att kunna tillgodogöra sig kursen bör doktoranden ha läst grundläggande kurser i fysikalisk kemi eller motsvarande.

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 och sammanfatta kvantmekaniska koncept och kombinera formalism och koncept för att konstruera, beräkna, och förklara beteendet hos olika kvantmekaniska modellsystem.
- Beskriva, förklara och använda grundläggande kvantkemisk teori för atomära och molekylära flerlektronsystem och med hjälp av datorer beräkna molekylers inre egenskaper samt deras reaktioner och spektroskopiska egenskaper
- Använda kvantkemiska beräkningar och modern kvantkemisk programvara för att analysera ett specifikt forskningsproblem inom fysikalisk kemi. Forskningsproblemet kan exempelvis vara relaterat till kemisk kinetik, katalys, spektroskopi eller intermolekylär växelverkan.

Kursinnehåll

I denna kurs förväntas deltagarna utveckla sina färdigheter i:

- Grundläggande kvantmekanik
- Kvantkemisk teori
- Tillämpa kvantkemisk teori och kvantkemiska beräkningar för att analysera forskningsproblem i fysikalisk kemi. Forskningsproblemet väljs av deltagaren i samråd med examinator.

Examination

- TEN1 - Skriftlig tentamen, 6,0 hp, betygsskala: P, F
- LAB1 - Obligatorisk närvaro och redovisning med skriftliga rapporter, 2,0 hp, betygsskala: P, F
- PRO1 - Skriftlig rapport och muntlig presentation, 4,0 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.

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras 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.

