



KD2040 Kvantkemi och spektroskopi 9,0 hp

Quantum Chemistry and Spectroscopy

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

Fastställande

Kursplan för KD2040 gäller från och med HT07

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Särskild behörighet

Grundkurserna i kemi och matematik för K.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Att ge den första praktiska erfarenheten och den framtida startpunkten för att lösa kemiska struktur- och dynamikproblem med hjälp av spektroskopiska mätningar och kvantkemiska beräkningar.

Kursinnehåll

Kursen består av tre ungefär lika stora delar. I den första delen behandlas den grundläggande kvantmekanik som behövs för de senare delarna. Kvantmekaniska grundprinciper och användningar av dessa för enkla modellsystem som en gång nämndes i grundutbildningen diskuteras i detalj. Approximationsmetoder, som störningsräkning och variationsmetoden, introduceras.

Kursens andra del behandlar molekylspektroskopins grunder. Olika interaktioner mellan elektromagnetisk strålning och molekyler diskuteras, vilket leder till grundprinciperna för olika optiska (IR, Raman) och magnetisk resonans (NMR, ESR) spektroskopier. Tidsupplösta spektroskopimetoder med korta excitationspulser för studier av snabb kemisk dynamik diskuteras. Den viktiga kärnmagnetiska resonansen diskuteras vidare i en annan kurs, NMR spektroskopi KD2060.

Kursens tredje del behandlar kvantkemiska beräkningsmetoder och deras tillämpningar inom kemi och biokemi:

- Hartree-Fockmetoden; teoretisk bakgrund och implementering.
- Beräkning av molekylära egenskaper: energier, molekylgeometrier, vibrationsspektra och elektrostatiska potentialer.
- Kvantkemiska studier av intermolekylära interaktioner, kemisk reaktivitet och biologisk aktivitet.

I denna del ingår två kvantkemiska beräkningslaboratorier där ett modernt kvantkemiskt datorprogram används för att beräkna molekylära egenskaper och analysera kemiska problem.

Kurslitteratur

1. A. I. M Rae: Quantum Mechanics, 3rd ed., Institute of Physics, 1993
2. A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover, 1995

Examination

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

Övriga krav för slutbetyg

1. Kombinerad muntlig/skriftlig examen. Studenterna har möjlighet att själv hålla en kort föreläsning istället för muntlig examen. (TEN1;6 hp).
2. Godkända laborationer och beräkningsuppgift (LAB1; 3 hp).

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.