KD2360 Kvantkemi 9,0 hp

Quantum Chemistry

Fastställande

Kursplan för KD2360 gäller från och med HT11

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemiteknik, Kemi och kemiteknik

Särskild behörighet

_För programstudenter vid KTH krävs:
_Minst 150 högskolepoäng från årskurs 1, 2 och 3 varav minst 110 högskolepoäng från årskurs 1 och 2 samt kandidatexamensarbete måste vara avklarade, inom ett program som innehåller:
75 högskolepoäng (hp) inom kemi eller kemiteknik, 20 hp matematik och 6 hp programmering eller motsvarande.

_För fristående studerande krävs:
_75 högskolepoäng (hp) inom kemi eller kemiteknik, 20 hp matematik och 6 hp programmering eller motsvarande, samt dokumenterade kunskaper i engelska motsvarande Engelska B.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

• redogöra, urskilja och förklara vilka koncept och på vilket sätt utgör kvantmekanikens teoretiska grund och formalism.

• identifiera, beskriva och förklara kvantmekaniska beteendet hos enkla system såsom harmoniska oscillatorn och stela rotorn.

• beskriva spinnens grundläggande egenskaper och identifiera formalismen som kan tillämpas i spinnkvantmekanik.

• identifiera, beskriva, och förklara osärskiljbarheten av kvantmekaniska objekt och konsekvensen av detta med tonvikt på Pauli principen.

• beskriva den teoretiska grunden för tidsberoende störningsräkning och förklara hur den kan användas för att betrakta interaktionen mellan elektromagnetisk strålning och atomer och molekyler.

• beskriva och förklara Born-Oppenheimer approximationen och uppkomsten av spektroskopiska urvalsregler.

• redogöra för den teoretiska bakgrunden till variationsmetoden och linjära variationsfunktioner, samt kunna använda dessa metoder på enkla atomära och molekylära system, såsom väteatomen och vätemolekyljonen.

• konstruera flerelektronvågfunktioner som Slaterdeterminanter baserade på enelektronvågfunktioner enligt orbitalapproximationen, samt förstå hur egenskaperna för dessa approximativa vågfunktioner skiljer från mer exakta vågfunktioner.

• redogöra för den teoretiska bakgrunden och approximationerna bakom Hartree-Fockmetoden, samt beskriva hur approximationerna påverkar tillförlitligheten och tillämpbarheten av Hartree-Fock metoden för beräkningar på atomära och molekylära system.

• beskriva hur Hartree-Fock metoden med hjälp av Roothans ekvationer är implementerad i moderna kvantkemiska program

• redogöra för den teoretiska bakgrunden till post-Hartree-Fock metoder och kunna föreslå lämpliga metoder för olika typer av system och tillämpningar.

• beräkna molekylära egenskaper och studera kemiska reaktioner med hjälp av moderna kvantkemiprogram.

.

Kursinnehåll

Kursen består av två delar. I den första delen behandlas den grundläggande kvantmekanik som behövs för den senare delen av kursen. Kvantmekaniska grundprinciper och användningar av dessa för enkla modellsystem diskuteras i detalj. Approximationsmetoder introduceras. Interaktionen mellan elektromagnetisk strålning och molekyler diskuteras, vilket leder till grundprinciperna för olika optiska (IR, Raman) spektroskopier.

Kursens andra del behandlar kvantkemiska beräkningsmetoder och deras tillämpningar inom kemi och biokemi. Hartree-Fockmetoden, dess teoretisk bakgrund och implementering men också post-Hartree-Fock metoder och täthetsfunktionalteori beskrivs och diskuteras. Tillämpningar av dessa metoder för beräkning av molekylära egenskaper såsom energier, molekylgeometrier, vibrationsspektra och karakteristika av kemiska reaktioner introduceras och demonstreras. I denna del ingår kvantkemiska beräkningslaboratorier där ett modernt kvantkemiskt datorprogram används för att beräkna molekylära egenskaper och kemiska reaktioner.

Kurslitteratur

A. I. M Rae: Quantum Mechanics, 5th ed., Tayor & Francis, 2007

A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover, 1995

Examination

- TEN1 - Skriftlig tentamen, 6,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- LAB1 - Laborationer, 3,0 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.

Övriga krav för slutbetyg

Tentamen (TEN1; 6 hp)
Laborationer (LAB1; 3 hp)

Slutbetyget blir samma som betyget från tentamen.

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.