KD2360 Kvantkemi 9,0 hp

Quantum Chemistry

Fastställande

Kursplan för KD2360 gäller från och med HT19

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemiteknik, Kemi och kemiteknik

Särskild behörighet

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.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

- 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 flerelektronsystem och med hjälp av datorer beräkna molekylers inre egenskaper samt deras reaktioner och spektroskopiska egenskaper

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

De följande böcker rekommenderas:

D. J. Griffiths: Introduction to Quantum Mechanics, 2nd ed

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.