KD2360 Kvantkemi 9,0 hp

Quantum Chemistry

Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har 2021-10-14 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med VT2022 (diarienummer C-2021-2104).

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemiteknik, Kemi och kemiteknik

Särskild behörighet

Kandidatexamen i naturvetenskap eller teknik omfattande 75 högskolepoäng (hp) inom kemi eller kemiteknik samt 20 hp matematik och/eller programmering. Engelska B/6.

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 introducerar kvantkemin grunder och kvantkemiska metoder.

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.