SK2820 Molekylfysik 8,0 hp

Molecular Physics

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

Fastställande

Kursplan för SK2820 gäller från och med HT07

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Fysik

Särskild behörighet

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Denna kurs ger dig möjligheten att utveckla en “molekylär verktygslåda”, som du sedan använder genom att undersöka, diskutera och utforska fysiken bakom molekylernas egenskaper.

Efter denna kurs, kommer du att kunna:

- Diskutera de fundamentala skillnaderna mellan atomer och molekyler.
- Visa hur molekylers bindningar kan beskrivas teoretiskt och vilka fundamentala approximationer som tillämpas. Följderna av dessa approximationer ska undersökas.
- Diskutera molekylära bindningar i termer av molekylorbitaler. Walsh diagram (eller korrelations diagram) ska kunna användas för att få kunskap om ett molekylärt system.
- Bestämma elektroniska tillståndets symmetri utifrån elektron konfigurationen. Detta kräver grundläggande kunskap i grupp teori.
- Mäta molekylära egenskaper såsom geometri (bindningsavstånd och vinklar), dipolmoment, polarisabilitet och elektroniska tillstånds energier.
- Sätta upp enkla modeller mellan växelverkan mellan molekyler.
- Beskriva de fundamentala approximationerna som används i de vanligaste kemi metoderna. Du bör även kunna använda Gaussian kvant kemi programmet, för att beräkna fundamentala storheter hos en molekyl.
- Diskutera vad det är som bestämmer en polyatomisk molekyls geometri genom att använda hybrid orbitaler och Hückels molekyl orbital teori.

Kursinnehåll

Kursen består av 18 schemalagda föreläsningar om vardera 2 timmar. Kursen är indelad i 6 delmoment:

- Introduktion och kemiska koncept.
- Molekylers bindningar.
- Molekylers struktur och spektroskopi.
- Växelverkan mellan molekyler.
- Kvantkemi.
- Molekyldynamik och kemisk reaktionskinetik.

Efter varje delmoment kommer eleverna få arbeta med hemproblem. Dessa problem kommer vara av både experimentell och teoretisk natur samt dator beräkningar.

Kurslitteratur

N. H. March and J. F. Mucci, Chemical Physics of free molecules, Plenum Press (utgåvan kommer annonseras på kursens hemsida minst fyra veckor innan kursens start).

Examination

- TEN1 - Tentamen, 8,0 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

Kursen examineras med en muntlig tentamen. (TEN1, 8 hp, betyg A/B/C/D/E/Fx/F). Godkända hemtal och laborationsarbete krävs för att ta den muntliga 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.