

Modern fysikalisk kemi – materias struktur och dynamik, påbyggnadskurs, 10 poäng
(*Modern Physical Chemistry – Structure and Dynamics of Matter, advanced course, 10 credits*)

Kursplanen är fastställd av naturvetenskapliga fakultetsnämnden 2002-11-13.

1. Placering i utbildningen och förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs godkänd grundkurs kemi, 40 poäng och därav minst 5 poäng Fysikalisk kemi samt Matematik för naturvetare I, 10 poäng eller motsvarande.

2. Mål

Kursen avser att ge en djupare förståelse för atomernas och molekylernas elektronstruktur och den kemiska bindningen samt av elektron-/vibrations-/rotationsspektroskopins grunder och olika tillämpningar. Kursen syftar till att skapa förtrogenhet med kvantmekanikens och den grundläggande statistiska termodynamikens lagar och till att visa hur dessa leder till atomers och molekylers kemiska egenskaper samt till atom- och molekylspektras utseende. Studenterna får stifta bekantskap med moderna kvantkemiska datorberäkningar och avancerad laserspektroskopi.

3. Innehåll

Kursen består av två moment.

I. Teori (5 p):

Kvantmekanik och kvantkemi

- kvantmekanikens grunder
- atomernas och molekylernas elektronstruktur
- kvantkemiska beräkningsmetoder

Statistisk termodynamik

- grunder för klassisk termodynamik och reaktionskinetik
- grundläggande statistisk mekanik
- ideala system
- molekylära växelverknningar; struktur av vätskor och lösningar

II. Simuleringsmetoder (5 p):

- Monte Carlo metoden
- klassisk molekylodynamik
- kvantmekaniska simuleringar
- multiskalsimuleringar
- övriga simulerings- och beräkningsmetoder
- praktiska övningar i att bygga molekylära modeller och använda dem i simuleringar

4. Undervisning

Undervisningen sker i form av föreläsningar, räkne- och datorövningar. Deltagande i datorövningarna är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i vissa obligatoriska moment.

5. Examination

Kunskapskontroll sker genom skriftligt slutprov. För godkänd kurs krävs att samtliga delmoment inklusive datorövningarna är godkända. Som betyg på kursen används något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå förnyat prov. Studerande som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg. Studerande som underkänts på prov två gånger har rätt att begära att annan lärare utses för att bestämma betyg på kursen. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen.

6. Litteratur

Kurslitteratur fastställs av institutionsstyrelsen för fysikalisk kemi, oorganisk kemi och strukturkemi.

7. Övrigt

Kursen får ej tas med i examen tillsammans med kursen Kvantkemi och spektroskopi, 10 poäng, (KE 3800) eller Kvantkemi och spektroskopi, 5 poäng, (KE 3870).