



LUNDS
UNIVERSITET

Naturvetenskapliga fakulteten

**KEMM58, Kemi: Molekylär kvantmekanik, 7,5
högskolepoäng**
Chemistry: Molecular Quantum Mechanics, 7.5 credits
Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2019-01-21 att gälla från och med 2019-01-21, höstterminen 2019.

Allmänna uppgifter

Kursen är en valbar kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig masterexamen i kemi och en obligatorisk kurs för en naturvetenskaplig masterexamen i nanokemi.

Undervisningsspråk: Engelska

Huvudområde

Nanokemi

Kemi

Fördjupning

A1F, Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav

A1F, Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav

Kursens mål

Kursen syftar till att studenten ska tillägna sig god kännedom om de grundläggande teorierna kring kemisk bindning och intermolekylär växelverkan och hur det styr beteenden hos materien. Kursen ger avancerad introduktion till modern kvantkemi.

Kunskap och förståelse

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- redogöra för de kvantmekaniska grunderna
- redogöra för kvantmekaniska principer för atomer och molekylära system
- förklara begreppet vågfunktion
- ingående beskriva den elektroniska strukturen hos atomer och kemisk bindning
- namnge molekylära vågfunktioners symmetriegenskaper
- redogöra för de viktigaste beräkningsmetoderna som används i modern kvantkemi och förklara dessas begränsningar

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- använda kvantmekaniska datorprogram för beräkning av molekylära systems egenskaper
- lösa specifika molekylära kvantmekaniska problem
- analysera molekylers symmetri
- diskutera beräkningsmetodernas begränsningar
- övergripande sammanfatta och presentera de centrala metoderna inom modern kvantkemi samt ge rekommendationer om lämplig metod
- genomföra ett kortare individuellt projekt och presentera erhållna resultat muntligt och skriftligt

Värderingsförmåga och förhållningssätt

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- utvärdera resultat av beräkningskoder och göra kvalificerade bedömningar av felkällor
- kritiskt granska och diskutera approximationer som används i kvantkemi

Kursens innehåll

Föreläsningar (6 hp): Kursen täcker två områden, kvantmekanik och kvantkemi. Den kvantmekaniska delen tar upp de grundläggande ekvationerna som styr mikroskopiska partiklars uppförande. Den kvantkemiska delen tar upp hur dessa grundläggande ekvationer styr atomers och molekylers beteenden.

Följande ämnen tas upp i kursen: grunderna för kvantmekanik, linjär rörelse, rotationsrörelse och väteatomen, vinkelmoment och spinn, gruppteori och symmetri, approximationer i kvantkemi, atomer och molekyler, beräkningskemi samt introduktion till spektroskopi.

Datorlaborationer och projektarbete (1,5 hp): Kursen innefattar datorlaborationer som omfattar följande delar: grafiska användargränssnitt för kvantkemisk mjukvara, praktiska övningar med gruppteori, användning av semiempiriska metoder samt användning av ab initio metoder.

Ett mindre projekt med fokus på kvantkemi genomförs individuellt.

Kursens genomförande

Undervisningen utgörs av föreläsningar, seminarier, datorlaborationer och projektarbete. Deltagande i datorlaborationer och projektarbete samt tillhörande moment är obligatoriskt.

Kursens examination

Examination sker skriftligt i form av tentamen vid kursens slut samt genom godkända obligatoriska moment under kursens gång.

För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfälle i nära anslutning härtill.

Om så krävs för att en student med varaktig funktionsnedsättning ska ges ett likvärdigt examinationsalternativ jämfört med en student utan funktionsnedsättning, så kan examinator efter samråd med universitetets avdelning för pedagogiskt stöd fatta beslut om alternativ examinationsform för berörd student.

Prov/moment för denna kurs finns i en bilaga i slutet av dokumentet.

Betyg

Betygsskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. För att bli godkänd på hela kursen krävs godkänd tentamen samt godkända obligatoriska moment.

Betyg på tentamen är Underkänd, Godkänd och Väl godkänd. Betyg på obligatoriska moment är Underkänd och Godkänd.

Slutbetyget avgörs genom betyg på tentamen.

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs grundläggande behörighet, engelska 6 samt 90 hp avklarade naturvetenskapliga kurser inklusive godkända kurser motsvarande:

- KEMA20 Allmän kemi 15 hp, eller KEMA10 Allmän kemi 7,5 och KEMA12 Oorganisk kemi – grundkurs 7,5 hp, KEMA01 Organisk kemi – grundkurs 7,5 hp, och KEMA03 Biokemi – grundkurs 7,5 hp
- KEMB09 Fysikalisk kemi – grundkurs 15 hp
- KEMM30 Molekylära drivkrafter och kemisk bindning 15 hp
- MATA02 Matematik för naturvetare 15 hp eller motsvarande

Tillträdeskraven är uppfyllda även för den som har grundläggande behörighet, engelska 6 samt godkända kurser motsvarande:

- 75 hp fysik inklusive: FYSC11Atom- och molekylfysik, 7,5 hp, och FYSC13 Fasta tillståndets fysik, 7,5 hp
- 30 hp matematik

Motsvarande förkunskaper, som inhämtats på annat sätt, ger också tillträde till kursen.

Övrigt

Kursen kan inte tillgodoräknas i examen tillsammans med KEMM28 Molekylär kvantmekanik 7,5 hp.

Prov/moment för kursen KEMM58, Kemi: Molekylär kvantmekanik

Gäller från H19

- 1901 Molekylär kvantmekanik, 6,0 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd, Väl godkänd
- 1902 Molekylär kvantmekanik, obligatoriska moment, 1,5 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd