

Kursplan

för kurs inom utbildning på
forskarnivå

**Kvantkemiska metoder i kemisk
fysik**

**15 Högskolepoäng
15 ECTS credits**

Kurskod: FK40002
Gäller från: VT 2018
Fastställd: 2017-12-14
Institution Fysikum

Ämne: Kemisk fysik

Beslut

Denna kursplan är fastställd av Fysikums styrelse 2017-12-14.

Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

Antagen till utbildning på forskarnivå

Kursens mål

Kursen syftar till att ge en breddning inom doktorandens forskningsområde: kemisk fysik

Kursens innehåll

Kursen behandlar metoder för att lösa den molekylära Schrödingerekvationen inom ramen för Born-Oppenheimerapproximationen.

Beräkningsmetoder baserade på variationsmetoden och störningsteori introduceras. Ett fokus ligger på Hartree-Fock-metoden och grunderna i täthetsfunktionalteori men även semiempiriska metoder och mer exakta approximationer i modern kvantkemi, samt effektiva algoritmer, beskrivs.

I relation till beräkningarna behandlas grundläggande begrepp, som elektronkorrelation, elektronspinn, molekylorbitaler, potentialytor, kemiska reaktioner, övergångstillstånds(transition-state)teori, molekylmekanik och omgivningseffekter. Introduktion i användning av kvantkemiska datorprogram.

Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen förväntas studenten kunna:

beskriva de grundläggande approximationer som ligger bakom lösningen av den molekylära Schrödingerekvationen

redogöra för olika molekylära beräkningsmetoder inom kvantkemin

planera, genomföra, beskriva och utvärdera enkla kvantkemiska beräkningsprojekt.

tillgodogöra sig och i viss mån utvärdera studier med moderna beräkningsmetoder.

Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar och datorövningar.

Ett projektarbete i kemisk fysik kring en aktuell frågeställning, där olika beräkningsmetoder kan utvärderas och diskuteras. ingår. Det innefattar enkla beräkningar och en kort litteraturstudie som redovisas muntligt och skriftligt.

Deltagande i datorövningarna och därmed integrerad gruppundervisning är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i viss obligatorisk undervisning.

Kursen samläses med FK7059.

Undervisningen sker på engelska.

Kunskapskontroll och examination

a. Kursen examineras på följande vis: Kunskapskontroll sker genom inlämningsuppgifter och skriftligt prov.

Om undervisningen sker på engelska kan även examination komma att genomföras på engelska.

b. Betygssättning enligt tvågradig mbetygsskala: Godkänd eller Underkänd.

c. Kursens betygskriterier delas ut vid kursstart.

d. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå ytterligare prov så länge kursen ges.

Antalet provtillfällen är inte begränsat. Med prov jämföras också andra obligatoriska kursdelar.

Övergångsbestämmelser

Studerande kan begära att examination genomförs enligt denna kursplan även efter det att den upphört att gälla, dock högst tre gånger under en tvåårsperiod efter det att undervisning på kursen upphört. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Bestämmelsen gäller även vid revidering av kursplanen.

Begränsningar

Kursen kan ej ingå i examen tillsammans med kursen Kvantkemi, 15 hp (FK7009), (FK7059) eller motsvarande.

Övrigt

Kurslitteratur

Kurslitteratur meddelas i god tid före kursstart.

