



Kursplan

för kurs på avancerad nivå

Kvantkemi

Quantum Chemistry

15.0 Högskolepoäng

15.0 ECTS credits

Kurskod: FK7059
Gäller från: HT 2017
Fastställt: 2017-01-16
Institution: Fysikum

Huvudområde: Fysik
Fördjupning: A1N - Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Beslut

Denna kursplan är fastställd av Områdesnämnden för naturvetenskap vid Stockholms universitet 2017-01-16.

Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

För tillträde till kursen krävs antingen avklarade kurser (exklusive orienteringskurser) omfattande 45 hp matematik och 60 hp fysik där kurserna Kvantmekanik, 7,5 hp (FK5020) och Atom- och molekylfysik, 7,5 hp (FK5023) ska ingå, eller kandidatexamen i kemi där kursen Fysikalisk kemi, 9 hp (KZ4009) ska ingå, eller motsvarande. Dessutom krävs Engelska B/Engelska 6 eller motsvarande.

Kursens uppläggning

Provkod	Benämning	Högskolepoäng
HELA	Kvantkemi	15

Kursens innehåll

Kursen behandlar metoder för att lösa den molekylära Schrödingerekvationen inom ramen för Born-Oppenheimer-approximationen. 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, potentialtor, 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.

Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar och datorövningar.

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.

Undervisningen kan ske på engelska.

Kunskapskontroll och examination

a. Kursen examineras på följande vis: Kunskapskontroll sker genom muntligt och skriftligt prov, samt muntliga och skriftliga redovisningar av datorövningar.

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

b. Betygssättning sker enligt en sjugradig målrelaterad betygsskala:

A = Utmärkt

B = Mycket bra

C = Bra

D = Tillfredsställande

E = Tillräckligt

Fx = Underkänd, något mer arbete krävs

F = Underkänd, mycket mer arbete krävs

c. Kursens betygskriterier delas ut vid kursstart.

d. För godkänt krävs lägst betygsgraden E samt godkända datorövningar.

e. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå ytterligare prov så länge kursen ges. Antalet provtillfällen är inte begränsat. Med prov jämställs också andra obligatoriska kursdelar. Studerande som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg. En student, som utan godkänt resultat har genomgått två prov för en kurs eller en del av en kurs, har rätt att få en annan examinator utsedd, om inte särskilda skäl talar mot det. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Kursen har minst två examinationstillfällen per läsår de år då undervisning ges. Mellanliggande år ges minst ett examinationstillfälle.

f. Vid betyget Fx ges möjlighet att komplettera upp till betyget E. Examinator beslutar om vilka kompletteringsuppgifter som ska utföras och vilka kriterier som ska gälla för att bli godkänd på kompletteringen. Kompletteringen ska äga rum före nästa examinationstillfälle.

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), eller motsvarande.

Övrigt

Kursen kan ingå i masterutbildningarna vid Fysikum men kan också läsas som fristående kurs.

Kurslitteratur

Kurslitteratur beslutas av institutionsstyrelsen och publiceras på Fysikums webbplats senast två månader före kursstart.