Institutionen för material- och miljökemi

Stockholms universitet

Kursplan

för kurs på grundnivå

Fysikalisk kemi: kvantmekanik och spektroskopi **7.5 Högskolepoäng**
Physical Chemistry: Quantum Mechanics and Spectroscopy **7.5 ECTS credits**

Kurskod:	KZ4020
Gäller från:	VT 2021
Fastställd:	2020-11-09
Institution	Institutionen för material- och miljökemi
Huvudområde:	Kemi
Fördjupning:	G1F - Grundnivå, har mindre än 60 hp kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Beslut

Denna kursplan är fastställd av Områdesnämnden för naturvetenskap vid Stockholms universitet 2020-11-09.

Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

För tillträde till kursen krävs kunskaper motsvarande kurserna Grundläggande kemi I, 15 hp (KZ2012), Organisk kemi I, 7.5 hp (KO2003) och Biokemi I, 7.5 hp (KB2003).

Kursens uppläggning

Provkod	Benämning	Högskolepoäng
TEOR	Teori	5
LABB	Laborationer	2.5

Kursens innehåll

a. Kursen behandlar ett viktigt område inom fysikalisk kemi: Kvantmekanik och spektroskopi.
Teorin omfattar modern fysikalisk kemi där kvantmekanisk härledning av atomers och molekylers tillstånd och energinivåer spelar en central roll. Vidare behandlas atomstruktur, rotation, vibration och elektronspektroskopi, samt magnetisk resonans.
Inom kursen övas fysikalisk-kemisk mätmetodik, användning av mätutrustning samt beräkningsmetoder.

b. Kursen består av två delar:
Del 1, Teori (Theory), 5 hp
Del 2, Laborationer (Laboratory Excercises), 2.5 hp

Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen förväntas studenten kunna:

Del 1, Teori, 5 hp:
• förklara kvantmekanikens grundprinciper
• redogöra för atomstruktur baserad på grundläggande kvantmekaniska teorier
• genom matematiska beräkningar inom såväl kvantmekanik som spektroskopi och uppskatta relevanta kemiska storheter.
• redogöra för någon tillämpning av spektroskopi inom miljökemisk analys.

Del 2, Laborationer, 2.5 hp:
• ge förslag på lämplig spektroskopisk metod för att studera molekylära egenskaper

• bestämma molekylstruktur och dynamiska parametrar från IR- och NMR-experiment
• visa insikter i kvantkemiska beräkningsmetoder och program
• använda grafiska verktyg för att visualisera atomorbitaler och beräkna elektrontätheter.

Undervisning
Undervisningen består av föreläsningar, räkneövningar samt laborationer.

Kunskapskontroll och examination
a. Kursen examineras på följande vis:
Kunskapskontroll av del 1 sker genom skriftligt prov.
Kunskapskontroll av del 2 sker genom skriftliga rapporter.

Examinator har möjlighet att besluta om anpassad eller alternativ examination för studenter med funktionsnedsättning.

b. För godkänt slutbetyg krävs deltagande i samtliga laborationer. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i viss obligatorisk undervisning.

c. Kursens slutbetyg sätts enligt 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.

Betygssättning av del 1 sker enligt sjugradig målrelaterad skala.
Betygssättning av del 2 sker enligt tvågradig betygsskala: godkänd (G) eller underkänd (U).

Kursens slutbetyg sätts utifrån betygsättning på del 1.
För godkänt slutbetyg krävs godkänt betyg på samtliga ingående delar.

d. Kursens betygskriterier delas ut vid kursstart.

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 tre examinationstillfällen per läsår de år då undervisning ges. För de läsår som kursen inte ges erbjuds minst ett examinationstillfälle.

f. Möjlighet till komplettering av betyget Fx upp till godkänt betyg ges inte på denna kurs.

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 kursen har avvecklats. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Bestämmelsen gäller även vid revidering av kursplanen och revidering av kurslitteratur.

Begränsningar
Kursen kan ej ingå i examen tillsammans med kurserna Fysikalisk kemi (KY4001/KZ4008/KZ4009/KZ4018), Biofysikalisk kemi (KZ4003), Molekylär kemi (KY4006/KZ4005) eller motsvarande.

Övrigt
Kursen ingår i kandidatprogrammet i kemi men kan också läsas som fristående kurs.

Kurslitteratur
Kurslitteratur beslutas av institutionsstyrelsen och publiceras på www.kemi.su.se senast 2 månader före kursstart.