

Kvantkemi och spektroskopi, påbyggnadskurs, 10 p (*Quantum Chemistry and Spectroscopy, advanced course, 10 credits*)

Kursplanen är fastställd av matematisk-naturvetenskapliga fakultetsnämnden vid Stockholms universitet 1999-06-02

1. Placering i utbildningen och förkunskapskrav

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

2. Mål

Kursen avser att ge en djupare förståelse av 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 tre moment, kvantmekanik och kvantkemi (5 p), statistisk termodynamik (2 p) samt spektroskopi (3 p).

a) *kvantmekanik och kvantkemi:*

- kvantmekanikens grunder, Schrödingerekvationen, vågfunktioner och kvantisering, Heisenbergs osäkerhetsrelation.
- kvantmekaniska modeller (t ex. partikel-i-låda och harmonisk oscillator).
- atomernas elektronstruktur: väteatomen, atomorbitaler och energinivåer, urvalsregler, spinn, Pauliprincipen, flerelektronatomer, uppbyggnadsprincipen, Hunds regler, termsymboler, approximativa metoder.
- kemisk bindning: molekylorbitalteori, LCAO-modellen tillämpad på diatomära och fleratomiga molekyler, kvantkemiska beräkningsmetoder (π -bindningsteori, semi-empiriska och *ab initio*-beräkningar).

b) *statistisk termodynamik:*

- grundläggande statistisk mekanik.
- beräkningar av termodynamiska storheter.

c) *spektroskopi:*

- elektron-spektroskopi för atomer och molekyler.
- IR och Ramanspektroskopi i gas- och vätskefas.
- Laserspektroskopi: fluorescens och fosforescens, ultrasnabba fenomen.

4. Undervisning

Undervisningen sker i form av föreläsningar, räkneövningar, laborationer och demonstrationer. Deltagande i laborationer och demonstrationer 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 godkännande krävs godkända laborationer.

Som betyg på kursen används något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd.

Studenter som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå förnyat prov.

Studenter som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg.

Studenter 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 institutionsstyrelse.

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 "NMR och kvantkemi", 10p, (KE3500).