



# KD1070 Molekylär struktur 6,0 hp

Molecular Structure

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

## Fastställande

Kursplan för KD1070 gäller från och med HT07

## Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

## Utbildningsnivå

Grundnivå

## Huvudområden

Teknik

## Särskild behörighet

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

## Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

- utföra kvantmekaniska beräkningar på enklare system, såsom partiklar i en- och flerdimensionella lådor, samt utifrån beräkningarna analysera mätbara egenskaper som läge, energi, och rörelsemängd.
- relatera de mätbara egenskaperna hos enklare system till motsvarande egenskaper för komplexa atomära och molekylära system, samt uppskatta hur egenskaperna beror av systemens storlek och potentiella energifunktionen.
- beräkna energin för enklare atomära och molekylära system utifrån exakta och approximativa vågfunktioner.
- analysera den elektroniska sannolikhetsfördelningen i atomära och molekylära system.
- utföra enklare molekylorbitalberäkningar på flerelektronmolekyler.
- uppskatta molekylers stabilitet och energinivåer utifrån molekylorbitalberäkningar.
- redogöra för hur materiella egenskaper som elektrisk ledning och magnetism beror av molekylernas elektroniska struktur.
- ge en översikt över moderna kvantkemiska beräkningsmetoder och deras användningsområden.
- redogöra för de olika formerna av intermolekylär växelverkan, samt beskriva de olika formernas betydelse för gaser-vätskor-vätskekristaller-fasta ämnen egenskaper, solvatisering och biologisk igenkänning.
- analysera strukturen för enklare kristallina material från kristallografiska data bestämda med röntgen- eller neutrondiffraction, samt kunna redogöra för de experimentella metodernas funktionssätt.
- uppskatta stabiliteten hos joniska kristaller från de ingående jonernas egenskaper.
- redogöra för grundläggande spektroskopiska begrepp, såsom stimulerad absorption, stimulerad emission och spontan emission, samt förklara hur dessa är relaterade till temperaturen, molekylära energinivåer och egenskaper.
- beräkna och analysera IR- och mikrovågsspektra för diatomära molekyler.
- redogöra för urvalsprinciper i IR-, mikrovåg- och Ramanspektroskopi.
- analysera IR och Ramanspektra för fleratomiga molekyler.
- redogöra för elektroniska spektroskopiformer, samt analysera elektroniska spektra utifrån Franck-Condon principen.
- beskriva laserns funktionsätt och de speciella egenskaperna hos laserstrålning samt redogöra för olika laserns användningsområden.
- ge en översikt över moderna spektroskopiformer och deras användningsområden.
- ge en molekylär beskrivning av fenomen relaterade till hållbar utveckling, såsom växthuseffekten och nedbrytningen av ozonlagret, samt kritiskt kunna granska information om kemiska ämnens miljöeffekter i relation till sådana fenomen.

## Kursinnehåll

- Elementär kvantmekanik
- Atomers elektronstruktur, atomorbitaler, periodiska systemets uppbyggnad
- Kemisk bindning, molekylorbitaler, hybridisering, singlett- och triplettillstånd, tillämpningar av bindningslära på organiska, oorganiska och biologiska molekyler
- Orientering om moderna kvantkemiska beräkningsmetoder
- Intermolekylära krafter, gaser-vätskor-vätskekristaller-fasta ämnen, supramolekylära strukturer t. ex. biomembraner
- Spektroskopiska metoder som IR, Raman, UV/VIS, NMR, MS, ESCA
- Diffraktionsmetoder
- Strukturkemi
- De flesta av de experimentella metoderna och användandet av kvantkemiska beräkningsmetoder exemplifieras med laborationer.

## Examination

- LAB1 - Laborationer, 1,5 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 4,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

## Övriga krav för slutbetyg

1. Skriftlig tentamen 4,5 hp
2. Godkänd laborationskurs 1,5 hp

## Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.