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 HT10

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Grundnivå

Huvudområden

Teknik

Särskild behörighet

Grundläggande behörighet samt Matematik E, Fysik B och Kemi A

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 neutrondiffraktion, 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 emmission och spontan emmission, 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.

Kurslitteratur

Atkins and de Paula
Atkins' Physical Chemistry, 9th
Oxford University Press 2010
ISBN-13: 978-0-19-954337-3

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

Tentamen 4,5 hp
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.