



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

KED321 Tillämpad kvantkemi för master- och forskarstuderande, 15 högskolepoäng

Applied quantum chemistry for master and PhD students, 15 higher education credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2014-10-28 och senast reviderad 2016-09-01. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2016-09-01, höstterminen 2016.

Utbildningsområde: Naturvetenskapligt 100 %

Ansvarig institution: Institutionen för kemi och molekylärbiologi

Inplacering

Kursen är inplacerad på doktorandnivå och kan dessutom läsas som fristående kurs på nivån 120-150 högskolepoäng och räknas då som kurs på avancerad nivå för masterexamen.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Kemi, masterprogram (N2KEM)

Huvudområde

Kemi

Fördjupning

A1F, Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs kandidatexamen eller motsvarande inom ett naturvetenskapligt fält. Inom ramen för kursfordringarna rekommenderas godkänd kurs KEM040, fysikalisk kemi (15 hp) eller motsvarande kunskaper samt godkänd kurs MMGK11, Naturvetarmatematik A1 (15 hp) eller motsvarande kunskaper.

Mål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:

Kunskap och förståelse

- **förklara** kvantkemins roll inom kemien och dess potential att lösa kemiska problem,
- **beskriva** idén bakom oberoende-elektroner-approximationen, självkonsistent fält och Hartree-Fock-metoden,
- **förklara** elektronkorrelationen och dess inverkan på kemiska system och processer och **översiktligt beskriva** beräkningsmetoder som explicit inkluderar korrelationseffekter i vågfunktionen,
- **förklara** principen bakom täthetsfunktionalteorin (DFT) och Kohn-Sham (KS)-formalismen, **beskriva** de approximationer som används i praktiska DFT-beräkningar,
- **beskriva** metoder för att bestämma jämviktsgeometrier, deras för- och nackdelar,
- **förklara** de steg som leder från beräkningsresultat till mätbara termokemiska storheter,
- **förklara i huvuddrag** hur elektriska och magnetiska egenskaper beräknas,
- **förklara** gränserna av den icke-relativistiska kvantkemien och **översiktligt beskriva** metoder för att inkludera relativistiska effekter i kvantkemiska metoder.

Färdigheter och förmåga

- **lägga upp** en beräkning för ett givet problem och **välja** lämpliga beräkningsmetoder och bas-set samt **motivera** valet,
- **använda** kvantkemiska beräkningar för att undersöka en enklare reaktions termokemi och reaktionsmekanismer,
- **planera** och **genomföra** ett mindre projekt där ett kemiskt problem behandlas med kvantkemiska beräkningar,
- **presentera** resultaten från en beräkning i muntlig och skriftlig form.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

- **tolka** resultaten från kvantkemiska beräkningar och **sätta dem i samband** med experimentella resultat,

- **uppmärksamma** och **redovisa** potentiella problem för beräkningen på vissa typer av molekyler eller processer,
- **kritiskt bedöma** pålitligheten av de erhållna resultat.

Innehåll

Kursen behandlar kvantkemiska beräkningsmetoder med en tydlig fokus på deras användning för att lösa kemiska problem. Följande ämnen kommer att behandlas:

1. Kvantmekanik och kemi
2. Grunderna för den kvantmekaniska beskrivningen: Vågfunktion, Schrödingerekvation, Born-Oppenheimer-approximationen
3. Oberoende elektroner: Orbitaler, självkonsistenta fält (SCF) , Hartree-Fock-metoden
4. Matematisk beskrivning av orbitalerna: Basfunktioner – idé, Slater- och Gaussfunktioner, split-valence-funktioner, diffusa och polarisationsfunktioner, klassifikation av bas-set
5. Elektronkorrelation: Beskrivning och konsekvenser för molekylernas beteende
6. Avancerade beräkningsmetoder för att beskriva elektronkorrelation: Configuration interaction (CI), Coupled Cluster (CC), Møller-Plesset-störningsteori (MP), multireferens-SCF (MCSCF)
7. Dagens standardmetod inom kvantkemin: Täthetsfunktionalteori (DFT) – grundläggande idéer, Kohn-Sham (KS)-formalismen som väg till ett användbart beräkningsschema, nödvändiga approximationer för exchange/correlation (XC), olika typer av XC-funktionaler (LDA, GGA, mGGA, hybrid-GGA)
8. Att bestämma jämviktsgeometrier för molekyler och komplex: Geometrioptimering
9. Att beräkna och tolka molekylära vibrationer: IR- och Ramanspektra
10. Undersökning av reaktionsförlopp, termokemi
11. Relativistiska effekter i kvantkemin – konsekvenser av relativistiska effekter, beräkningsmetoder
12. Bortom grundtillståndet – tidsberoende täthetsfunktionalteori för att beskriva exciterade tillstånd och dynamiska processer
13. Behandling av lösningsmedelseffekter
14. Analys av orbitaler och elektrondensiteten
15. Beräkning av elektroniska egenskaper: polariserbarhet, NMR-egenskaper, susceptibilitet
16. Semiempiriska metoder
17. Aktuella trender i kvantkemin: Linjär skalning, lokalorbitalmetoder, multiskalmodellering

I kursen ingår ett projektarbete där studenten tillämpar kvantkemiska beräkningsmetoder på ett självvalt problem.

Delkurser

- 1. Teoretiska delen** (*Theory part*), 10 hp
Betygsskala: Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U)
- 2. Datalaborationer** (*Computer exercises*), 5 hp
Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

Former för undervisning

Delkurs 1: Undervisning sker i form av föreläsningar, räkneövningar och ett projektarbete.

Delkurs 2: Undervisning sker i form av datalaborationer inkluderande redovisningar.

Undervisningsspråk: svenska och engelska

Kursen ges som huvudregel på svenska men kan ges helt eller delvis på engelska om omständigheterna påkallar det.

Former för bedömning

Delkurs 1: Kunskapskontroll sker genom ett projektarbete.

Delkurs 2: Kunskapskontroll sker baserat på aktivt deltagande i laborationerna och redovisningarna.

Om student som underkänts två gånger på samma examinerande moment önskar byte av examinator inför nästa examinationstillfälle, ska sådan begäran inlämnas skriftligt till kursansvarig institution och bifallas om det inte finns särskilda skäl däremot (HF 6 kap § 22).

I det fall en kurs har upphört eller genomgått större förändringar ska studenten i normalfallet garanteras tillgång till minst tre provtillfällen (inklusive ordinarie provtillfälle) under en tid av åtminstone ett år med utgångspunkt i kursens tidigare uppläggning.

Betyg

På kursen ges något av betygen Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U).

Delkurs 1: Betyg VG, G eller U meddelas.

Delkurs 2: Betyg G eller U meddelas.

Slutbetyg: För betyg G på hela kursen krävs betyg G på delkurs 1 och G på delkurs 2.
För betyg VG på hela kursen krävs betyg VG på delkurs 1 och G på delkurs 2.

Kursvärdering

Student som deltar i eller har avslutat en kurs ska ges möjlighet att anonymt framföra erfarenheter av och synpunkter på kursen i en kursutvärdering.

Resultatet och eventuella förändringar i kursens upplägg ska förmedlas både till de studenter som genomförde värderingen och till de studenter som ska påbörja kursen.

Övrigt