



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

KEM321 Tillämpad kvantkemi, 10 högskolepoäng

Applied Quantum Chemistry, 10 credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2013-07-05 och senast reviderad 2017-10-04. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2017-10-04, höstterminen 2017.

Utbildningsområde: Naturvetenskapligt 100 %

Ansvarig institution: Institutionen för kemi och molekylärbiologi

Inplacering

Kursen är inplacerad på nivån 90-120 högskolepoäng för kandidatexamen. Den räknas som kurs på avancerad nivå för masterexamen och kan även läsas som fristående kurs. Kursen ersätter de tidigare kurserna KEM320 och KEN320 och kan inte tillgodoräknas tillsammans med någon av dessa i samma examen.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Kemi, masterprogram (N2KEM), 2) Läkemedelskemi, kandidatprogram (N1LMK) och 3) Kemi, kandidatprogram (N1KEM)

Huvudområde

Kemi

Fördjupning

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs godkända kurser inom det naturvetenskapliga fältet om 90 hp (eller godkända kurser inom farmaci/medicin om 120 hp). Dessa kurser ska inkludera kurs KEM040, Fysikalisk kemi (15 hp), alternativt kurs FYP203, Kvantfysik A (7,5 hp) eller motsvarande kunskaper. Matematikkunskaper motsvarande minst kurs MMGK11, Naturvetarmatematik A1 (15 hp) rekommenderas.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:

Kunskap och förståelse

- **förklara** kvantkemins roll inom kemin 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,
- **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.

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,
- **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, självkonsistent 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. 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)
7. Att bestämma jämviktsgeometrier för molekyler och komplex: Geometrioptimering
8. Att beräkna och tolka molekylära vibrationer: IR- och Ramanspektra
9. Undersökning av reaktionsförlopp, termokemi
10. Behandling av lösningsmedelseffekter
11. Analys av orbitaler och elektrondensiteten
12. Beräkning av elektroniska egenskaper: polariserbarhet, NMR-egenskaper, susceptibilitet
13. Semiempiriska metoder
14. Aktuella trender i kvantkemin: Linjär skalning, lokalorbitalmetoder, multiskalmodellering

Lektionerna ledsagas av datalaborationer där viktiga moment av teorin demonstreras och tränas baserat på moderna kvantkemiska programpaket.

Delkurser

1. **Teoretiska delen** (*Theory part*), 6 hp
Betygsskala: Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U)
2. **Datalaborationer** (*Computer exercises*), 4 hp
Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

Former för undervisning

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

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 en salstentamen.

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