



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

NFKE309 Molekylär kvantmekanik - en seminariserie, 7,5 högskolepoäng

Molecular quantum mechanics - a seminar series, 7.5 credits

Forskarnivå / Third-cycle level

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2023-04-06 att gälla från och med höstterminen 2024.

Ansvarig institution

Institutionen för kemi och molekylärbiologi, Naturvetenskapliga fakulteten

Förkunskapskrav

För att bli antagen till kursen ska studenten ha:

- Godkänd grundläggande behörighet för forskarutbildning i naturvetenskap med inriktning kemi, biofysik eller motsvarande.
- ha klarat 90 hp i naturvetenskapliga kurser, omfattande minst:
 - Allmän kemi 15 hp
 - Oorganisk kemi- grundkurs 7,5 hp
 - Organisk kemi - grundkurs 7,5 hp
 - Fysikalisk kemi - grundkurs 15 hp eller 7,5 hp kombinerat med 7,5 hp Grundläggande fysik
 - Matematik för naturvetare 15 hp
- eller minst 30 hp i matematik kombinerat med 75 hp i fysik inklusive:
 - Atom- och molekylfysik 7,5 hp
 - Fasta tillståndets fysik 7,5 hp
- krav på kunskaper i engelska motsvarande minst nivå B2

Lärandemål

Kunskap och förståelse

Efter avslutad kurs skall studenten

-
- visa bred kunskap och systematisk förståelse av molekylär kvantmekanik, med fokus på NFKE309 Molekylär kvantmekanik - en seminariserie, 7,5 högskolepoäng / Molecular quantum mechanics - a seminar series, 7.5 credits

Forskarnivå / Third-cycle level

- grundläggande kvantmekanik såsom vågfunktionen, operatorer, postulat och utveckling av tillstånd.
- Linjär och roterande rörelse, harmonisk oscillator och rörelsemängdsmoment
- Väteatomen och atomära spektra
- Born-Oppenheimer-approximationen och molekylär orbitalteori
- Spektroskopi baserad på rotations-, vibrations- och elektroniska övergångar.
- visa förtrogenhet med approximationsmetoder och introduktion till grupp teori.

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs skall studenten

- visa förmåga att självständigt granska och genomföra en föreläsning inom ett valt kursavsnitt.
- visa förmåga att reflektera över och kritiskt analysera kvantmekaniska begrepp och teorier, samt diskutera dessa med sina medstudenter.
- Analysera och lösa kvantmekaniska problem och övningsexempel med lämpliga metoder

Värderingsförmåga och förhållningssätt

Efter avslutad kurs skall studenten

- kritiskt reflektera över kvantmekanikens möjligheter och begränsningar, inom ramen för studentens eget forskningsprojekt såväl som i relation till dess roll i samhället
- kunna spekulera om framtida utveckling och inriktning av kvantmekanik, särskilt i kontext av utveckling av ny beräkningsteknik och hållbar utveckling.

Hållbarhetsmärkning

Kursen är hållbarhetsrelaterad, vilket innebär att minst ett av kursens lärandemål tydligt visar att kursens innehåll uppfyller minst ett av Göteborgs universitets kriterier för hållbarhetsmärkning.

Innehåll

Med hjälp av kvantmekanik kan vi förstå atomers och molekylers beteende på den mest grundläggande nivån. Därmed är kvantmekanik ett centralt verktyg för att förstå egenskaperna hos materia, allt från tekniskt avancerade material till de grundläggande processer som äger rum inom levande organismer. I denna kurs sätts de teoretiska begreppen inom kvantmekanik i fokus i form av en seminarieriserie, där doktoranderna själva tar huvudansvaret att förkovra sig ämnet.

Kursen behandlar följande ämnen

- Grunden för kvantmekanik
 - Egenskaperna hos vågfunktioner
 - Operatorer, postulat och utveckling av tillstånd
- Linjär och roterande rörelse
 - Partikel i låda, på en ring och på en sfär
 - Den harmoniska oscillatorn
 - Rörelse i laddat fält
 - Rörelsemängdsmoment

- Spektrum av väte-, helium- och många elektronsystem
- En introduktion till molekylär struktur
 - Born-Oppenheimer approximation
 - Molekylär orbitalteori
 - Bandteori för fasta ämnen
- Spektroskopiska övergångar inklusive
 - Absorption, emission och Ramanprocesser
 - Roterande, vibrations- och elektroniska övergångar.

Undervisningsformer

Kursen är uppbyggd som en seminarieriserie, där varje student ges ett specifikt kursavsnitt att förbereda inför ett specifikt seminarietillfälle. Vid seminariet håller den presenterande studenten en föreläsning om kursavsnittet, samt diskuterar och ramar in detta med hänsyn till kursens lärandemål. Förberedelse, aktivt deltagande och närvaro (> 80%) krävs av medstudenter.

I samband med varje seminarium delas en uppsättning övningar/problem ut, som lämnas in inför efterföljande seminarietillfälle. Vissa uppgifter ska lösas analytiskt, medan andra kräver databeräkningar. Teamarbete uppmuntras när man arbetar med inlämningsuppgifterna. Inlämning sker individuellt.

Undervisningsspråk

Kursen ges på engelska.

Betyg

På kursen ges något av betygen Godkänd (G) och Underkänd (U).

Former för bedömning

Bedömningen baseras på

Uppvisad kunskap och förståelse samt pedagogiskt förhållningssätt, vid genomförandet av seminariet. Betygsskala: Underkänd, Godkänd.

1. Aktivt deltagande visad genom insiktsfulla frågor och kritiskt resonemang vid medstudenters seminarier. Betygsskala: Underkänd, Godkänd.
2. Totalbetyg på inlämningsuppgifter: Underkänd (< 50%), Godkänd (>50%)
3. Närvaro på seminarier, > 80% krävs för godkänd

För att bli godkänd på kursen krävs att samtliga fyra moment är godkända.

Student som underkänts i en modul kommer att erbjudas ytterligare ett tillfälle att komplettera momentet senast tre månader efter avslutat kurstillfälle.

Kursvärdering

Studenterna kommer vid det avslutande kurstillfället ges möjlighet att ge återkoppling på kursen. Kursvärderingens format sker i form av en interaktiv utvärdering som kombinerar ett anonymt frågeformulär med en generell diskussion och reflektion över kursen.

Resultatet av utvärderingen sammanfattas och görs tillgängligt på kursens Canvas-sida.

Studenterna informeras om resultaten och eventuella beslut som fattas baserat på kursvärderingen.