Fysikalisk kemi: Kvantmekanik & Spektroskopi (KZ4020)

Lärare/föreläsningar (F):
Mattias Edén

Assistenter: Labbar (L) & Räkneövningar (RÖ):
Radost Herboth
Roja Rahmani

E-mail: fornamn.efternamn@mmk.su.se

Kursliteratur: P. Atkins, J. de Paula, R. Friedman, "Physical Chemistry: Quanta, Matter and Change", Second edition, Oxford, 2014;

Språk: föreläsningar: svenska, RÖ/Labb: svenska eller engelska

Laborationer (plats):

Orbital:	Orbitaler i H-typ atom (datorsalen)
HCl:	IR-spectroskopi: HCl (på MMK)
I2:	Electron spektroscoi: I_2 in gasfas (på MMK)
NMR:	NMR (på MMK)

Reserv lab: Endast om man har varit sjuk på ordinarie lab

Föreläsningar på förmiddagar: 9.15-12.15
Föreläsningar/RÖ på eftermiddagar: kl 13.00-16.00
Laborationer: 9.00-12.00 eller 13.00-16.00 (KÖL/MMK);
Obs! Varje labb görs i delgrupper "a" & "b"
Tentamen 19/11: 9.30-14.30, KÖL
Salsangivelser på schemat: om någon skiljer sig från TimeEdit, gäller vad som står i TimeEdit

Dugga på kursinnehållet för F1-F6 (enligt lässchema)
Poängen från duggan höjer samtliga betyg mellan (F-A) för tentamen, samt för omtentamen direkt efter ordinarie tenta (maxpoäng på tenta: 100):

- Minst 3 rätt av 10 på duggan ger 3 bonuspoäng
- Minst 5 rätt av 10 på duggan ger 5 bonuspoäng
- Minst 7 rätt av 10 på duggan ger 7 bonuspoäng

V. 4

Datum	Förmiddag 9.00- 12.00	Eftermiddag 13.00-16.00
20/1	F1 - K433-K439	
21	RÖ1(Matte) - K433-K439	F2 - K433-K439
22		F3 - K433-K439
23		F4 - Magnéli
24/1	RÖ2 - K433-K439	F5 - K433-K439

V. 5

27/1	Rapportskrivning(obligatorisk)* - K433-K439	F6 - Magnéli
28	Orbital.a+b - Datorsal	
29		F7 - K433-K439
30	RÖ3 - K438	F8 - K433-K439
31/1		

V. 6

3/2		Dugga (13.00-15.00) - K438
4		F9 - K433-K439
5		F10 - K433-K439
6	HCl.b & I2.a – Labintro: C516	HCl.a & I2.b - Labintro: K433-K439
7/2	RÖ4 - K433-K439	F11 - K433-K439

V. 7

10/2		F12 - K433-K439
11	NMR.a - Labintro: K433-K439	NMR.b - Labintro: K433-K439
12	RÖ5 - K433-K439	F13(rep) - K433-K439
13	RÖ6(rep) - K433-K439	F14(rep) - K433-K439
14/2		

V. 48

17/11	Inläsning/Reservlabb	
18/11	Inläsning	
19/11	**Tentamen (8-13)**	

*Information och råd om hur labbrapporterna bör skrivas (13.15-14.30). OBS! Obligatorisk närvaro.

Läschema
Kvantmekanik och Spektroskopi

Materialet till kursen baseras på nedanstående kapitel/”topics i Atkins & co samt ”slides” som presenteras under lektionerna. Vissa (mindre) delar av läroboken ersätts av slides och annat utdelat material under kursen; dessa följer i regel bokens definitioner & ekvationer, med några få undantag → informationen & innehåll på *slides gäller i dessa fall*.
X(33-41) nedan betyder kapitel/”topic” **X(**sidor)

F1: Matte-Repetition (RÖ1)

“MB” = “Mathematical Background” i Atkins & co.
MB1(sid. 27-30): 1.1-1.2; 1.4-1.6; 1.3 & 1.5 kursivt.
MB2(sid. 69-70): läs kursivt. Det ni behöver veta täcks upp på lektionerna.
MB3(sid. 128-129): 3.1-3.3
MB4(sid. 195-197): 4.1-4.2(t.om. sid. 195); 4.3; 4.4(kursivt)
MB5(sid. 270-272): 5.1-5.2; 5.3(kursivt; egenvärdesekvationen är mycket viktig men vad ni behöver kunna därav behandlas under F1 och senare under kursen).
Kommentar: Fokus ligger på komplexa tal, vektorer och matriser. Ni behöver kunna derivera och integrera de minst komplicerade fallen av polynom, exponentialfunktioner och trigonometriska funktioner (sin & cos). Kursen kräver *inte* att ni kan hantera mer komplexa deriveringar/integreringar som Atkins behandlar (såsom exempelvis ”integration by parts” eller att lösa differentialekvationer).

F2-4: Kvantmekanikens grunder (RÖ2)

4(sid. 33-41): 4.1-4.3
5(sid. 42-46)
6(sid. 47-52): 6-1-6.2(Justification 6.1 kursivt)
7(sid. 53-57)
8(sid. 58-63): 8.1-8.2; 8.3(t.om ekv. 8.7; resten kursivt)

F4-6: Translation, Rotation & Spinn (RÖ3)

9(sid. 73-79)
10(kursivt)
11(sid. 87-91): 11.1(Justification 11.1 kursivt); 11.2
13(sid. 103-110): 13.1; 13.2(to.m sid. 108, resten kursivt)
14(sid. 111-119): 14.1(Toolkit 14.1 & Justification 14.1 kursivt); 14.2a,b(Example 14.2 kursivt).
19.2(b)

F7: Atomstruktur: Väteliknande atomer & Flerelektronatomer (RÖ4)

17(sid. 150-159): 17.1(Justification 17.1/17.2 kursivt); 17.2
18(sid. 160-168)
19(sid. 169-175)
27(sid. 238-247) 27.1; 27.2-27.4(se slides; detaljer kursivt)

F8-9: Vibrationsrörelse & Rotation/Vibration-Spektroskopi (RÖ4)

12(sid. 92-102): 12.1-12.4a (12.4b kursivt)
40(sid. 377-387): 40.1(se slides; detaljer kursivt); 40.2a; 40.2b(kursivt); 40.3-40.4; 40.5(se slides; detaljer kursivt)
41(sid. 388-395)
42(sid. 405-413): 42.1(Justification 42.1 överkurs); ej 42.2/42.3

43(sid. 405-414): 43.1(Justification 43.1 kursivt); 43.2-43.4; ej 43.5
44 (sid. 415-421): 44.1-44.2, resten kursivt.

F10: Elektronspektroskopi (RÖ5)

21(sid. 181-189)
45 (sid. 422-432): 45.1 t.o.m. sid 426 (resten kursivt, inklusive Justification 45.1)
46(sid. 433-442): huvudsakligen kursivt; ni skall förstå skillnaden mellan begreppen ”fluorescence” och ”fosforescence” och varför de uppkommer.

F11-12: NMR spektroskopi (RÖ5)

slides (Atkins kap 47-49 kursivt)

F13-14: Repetition (RÖ6)