

TFY4215 Kjemisk fysikk og kvantemekanikk: Kort orientering om undervisningsopplegget i perioden 18. april til 5. mai 2008

Plan:

Uke 16-18: 4 x 2 forelesningstimer (18., 22., 25. og 29. april kl 08-10 i R2)

Uke 17-18: 3 regneøvinger (veiledningstider på fagets hjemmeside)

Stikkord:

Kvantekjemi: $H\Psi=E\Psi$ anvendt på molekyler

Hva innebærer det å gjøre kvantemekaniske beregninger på molekyler?

Hva slags informasjon kan vi få ut av slike beregninger?

Tilstander: bølgefunksjoner, molekylorbitaler. Energier

Spektroskopi

Kjemiske reaksjoner: kinetikk og termodynamikk

Kjemiske forbindelser: litt organisk kjemi

Navnsetting (nomenklatur). Isomere

Regneøvingene:

Kvantemekaniske beregninger på PC med programmet Spartan

3 øvinger, 2 obligatoriske, gjør helst alle 3

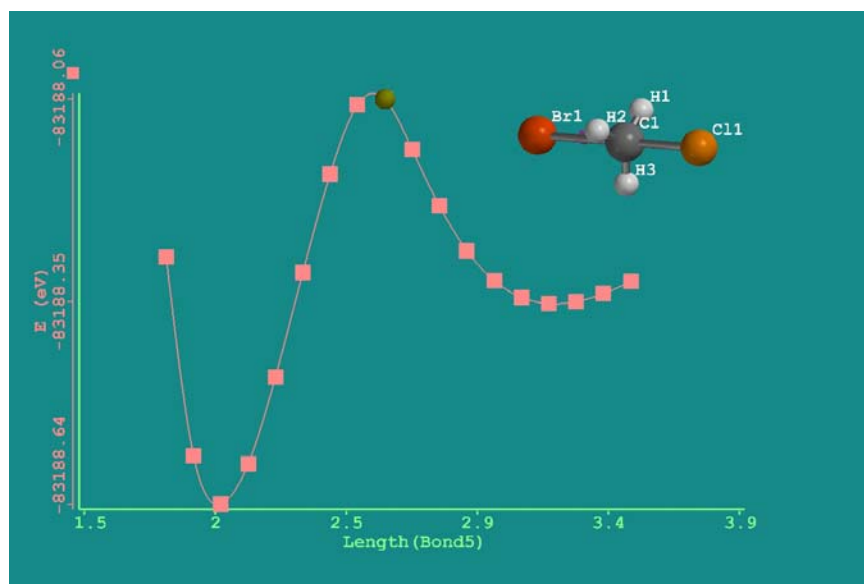
Jobb alene, eller to og to sammen

Veiledning i BU2-153 og BU2-123

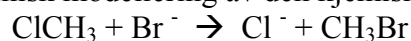
Installasjon på (f.eks egen) PC: Start – Run \\smb-pub.nt.ntnu.no\spartan\$\install.cmd
og deretter Cancel på spørsmål om Activate

Innlevering utenfor R1 (som vanlig)

Spartan:



Kvantemekanisk modellering av den kjemiske reaksjonen



(Øving 2)